**UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE FÍSICA DE SÃO CARLOS**

Mário Henrique Figlioli Donato

**Excitações topológicas em condensados de Bose-Einstein
espinoriais**

São Carlos

2021

Mário Henrique Figlioli Donato

**Excitações topológicas em condensados de Bose-Einstein
espinoriais**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física do Instituto de Física de São Carlos da Universidade de São Paulo, para obtenção do título de Mestre em Ciências.

Área de concentração: Física Básica

Orientador: Prof. Dr. Sérgio Ricardo Muniz

Versão corrigida
(Versão original disponível na Unidade que aloja o Programa)

São Carlos
2021

AUTORIZO A REPRODUÇÃO E DIVULGAÇÃO TOTAL OU PARCIAL DESTE TRABALHO, POR QUALQUER MEIO CONVENCIONAL OU ELETRÔNICO PARA FINS DE ESTUDO E PESQUISA, DESDE QUE CITADA A FONTE.

Donato, Mário Henrique Figlioli

Excitações topológicas em condensados de Bose-Einstein espinoriais / Mário Henrique Figlioli Donato; orientador Sérgio Ricardo Muniz - versão corrigida -- São Carlos, 2021.

174 p.

Dissertação (Mestrado - Programa de Pós-Graduação em Física Básica) -- Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, 2021.

1. Condensados de Bose-Einstein espinoriais. 2. Propriedades simétricas e topológicas da matéria. I. Muniz, Sérgio Ricardo, orient. II. Título.

AGRADECIMENTOS

De todas as dificuldades que nós, estudantes/pesquisadores, devemos passar em nossa jornada eterna de frustração e, eventualmente, felicidade por conquistar o que tanto almejamos, a gratidão pelo que já temos deve ser o sentimento que mais nos aproxima em momentos como os que atualmente vivemos. Por isso, tenho uma lista que gostaria de compartilhar com todos os caros leitores desta dissertação:

A Deus, que abençoa e traz um pouco mais de sanidade nesses tempos tão difíceis.

A meus pais, Antônio Mário e Izilda, que sempre acreditaram em mim e apostaram fundo nos meus sonhos.

Ao professor Sérgio, que me orientou e me ajudou tanto para que eu conseguisse encontrar o meu caminho na área de estudo que eu hoje me dedico.

A minha irmã, Lívia, que sempre foi o melhor exemplo de irmã mais velha que um irmão mais novo poderia ter.

Ao meu cunhado, Vitor, que se mostra a cada dia uma das melhores pessoas que eu já conheci.

Ao restante dos meus familiares que, felizmente, nunca acharam que eu fazia faculdade de *educação* física.

E, especialmente, a minha namorada, Katia, que, com o amor que eu sempre sonhei, me acompanhou por caminhos e me deu força onde eu já não acreditava mais que eu fosse capaz.

O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior – Brasil (CAPES) – Código de Financiamento 001.

“Ode à Loucura

Loucura desvairada! O amor às coisas que não fazem o menor sentido. A beleza do que faz a razão dobrar-se em si mesma em confusão de reflexos repetitivos originais. O portal a se contorcer e a dar passagem ao mesmo ponto de entrada. Uma parede paradoxal em tonalidades hipnotizantes de roxo, rosa, violeta e azul em uma calmaria de loucura e alucinação. Simples e irrelevante ao louco que deseja mais. Mais! Mais! Veja por si mesmo: uma porta ilógica não é suficiente! É necessário que porcos voem e humanos cortem suas asas falsas. A mente de um porco é incrível. A lama faz todo seu desejo por surpresa e imaginação satisfazer! Os humanos não... Não eu... As asas falsas me fazem voar num mundo encantado de simples lógica. Mas não. Tudo perde sentido em algum momento. Como observar esses momentos traz satisfação e descansa minha razão por instantes incontáveis. É o cérebro que se dobra, contorce em liberdade, espreguiça em meio às questões fundamentais. Isso me parece violeta, mas será suficiente? Será que a ilógica se dobra em lógica melhorada para um cérebro desgastado? Que se dobre em mais loucura e razão entrelaçadas. Que bela sensação! Que sensível razão!”

Mário do ano de 2016

RESUMO

DONATO, M. H. F. **Excitações topológicas em condensados de Bose-Einstein espinoriais**. 2021. 174p. Dissertação (Mestrado em Ciências) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2021.

O estudo dos condensados de Bose-Einstein (CBE) já se faz relevante na história por quase 100 anos. Evidentemente, muito se avançou no tratamento desse tipo de sistema desde os primeiros trabalhos de Bose e Einstein (1–3) — seja na teoria ou nos experimentos. Em particular, foi nas últimas duas décadas que seu tratamento teórico evoluiu consideravelmente e a teoria dos Condensados dilutos com spin não nulo se desenvolveu. Os chamados condensados de Bose-Einstein espinoriais (4) ganharam certo destaque na comunidade ao apresentarem características simétricas e topológicas únicas, de modo que eles são capazes de englobar, em um sistema de átomos ultrafrios, propriedades (e quasi-partículas) que são geralmente abordadas em sistemas e estruturas provenientes de outras áreas da física (como vórtices, monopolos, Skyrmions, nós etc.) nas excitações topológicas do seu parâmetro de ordem. Nesta dissertação, revisamos em detalhes o desenvolvimento da teoria dos CBEs espinoriais, destacando suas relevantes propriedades simétricas e topológicas e suas diferenças perante um condensado sem spin. Além disso, apresentamos uma teoria original em que analisamos as características dos estados excitados quânticos (i.e., estados que não formam a fase condensada) de espinores com propriedades topológicas não triviais, indo além do que é abordado na teoria de Bogoliubov (4,5) para condensados uniformes, e mostramos que, efetivamente, a estrutura desses estados é a de espinor (i.e., vetorial), a qual carrega informações acerca das características topológicas da fase condensada.

Palavras-chave: Condensados de Bose-Einstein. Espinores. Simetria. Topologia.

ABSTRACT

DONATO, M. H. F. **Topological excitations in spinor Bose-Einstein condensates**. 2021. 174p. Dissertação (Mestrado em Ciências) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2021.

The study of the Bose-Einstein condensates (BEC) has been relevant in history for almost 100 years. Evidently, much progress has been made in the treatment of this type of system since the first works of Bose and Einstein (1–3) — in theory and in experiments. In particular, in the last two decades its theoretical treatment evolved considerably and the theory of the dilute condensates with non-zero spin has developed since then. The so-called spinor Bose-Einstein condensates (4) have gained some prominence in the scientific community by presenting unique symmetrical and topological characteristics, in the sense they are able to encompass, in a system of ultra-cold atoms, properties (and quasi-particles) that are generally discussed in systems and structures from other areas of physics (such as vortices, monopoles, Skyrmions, knots, etc.) in the topological excitations of their own order parameter. In this master thesis, we review in detail the development of the theory of spinor BECs, highlighting their relevant symmetrical and topological properties and their differences before a condensate without spin. In addition, we present an original theory in which we analyze the characteristics of the quantum excited states (i.e., states that do not form the condensate phase) of spinors with non-trivial topological properties, going beyond what is covered in Bogoliubov theory for uniform condensates (4,5), and we show that, effectively, these states have a spinor structure (i.e., vector structure), which carries information about the topological characteristics of the condensate phase.

Keywords: Bose-Einstein condensates. Spinors. Symmetry. Topology.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – Curva $\mu/k_B T$ por T calculada numericamente para partículas clássicas (linha contínua), bosônicas e fermiônicas (linhas tracejadas).	32
Figura 2 – Fração de átomos no estado fundamental para um gás ideal, N_0/N , em função da temperatura. Para $T > T_0$: $N_0/N = 0$. Para $T < T_0$: $N_0/N = 1 - (T/T_0)^{3/2}$	34
Figura 3 – Processo de interação entre duas partículas: (a) aproximação de duas partículas com estados de spin definidos $ f, m_1\rangle$ e $ f, m_2\rangle$; (b) partículas interagem em distâncias curtas (interação localizada); (c) partículas após a interação são encontradas com novos estados de spin $\sum_{m_3, m_4} C_{m_3, m_4} f, m_3\rangle \otimes f, m_4\rangle$, tal que $m_3 + m_4 = m_1 + m_2$	36
Figura 4 – Diagramas de fase para um CBE uniforme e estacionário ($f = 1$) para (a) $c_1 > 0$, (b) $c_1 = 0$ e (c) $c_1 < 0$. I, II, III, IV, V relacionam-se respectivamente aos estados ferromagnético positivo, ferromagnético negativo, antiferromagnético, polar e QSA. A área hachurada em cinza indica os estados que <i>quebram</i> a simetria axial SO(2) do sistema.	59
Figura 5 – Representação em harmônicos esféricos dos cinco estados possíveis de um CBE espinorial, uniforme e estacionário. I, II, III, IV, V relacionam-se respectivamente aos estados ferromagnético positivo, ferromagnético negativo, antiferromagnético, polar e QSA.	60
Figura 6 – Representação de um vórtice. (a) Linha singular que determina a localização de um vórtice. (b) Caminho fechado (<i>loop</i>) que determina as propriedades de circulação em torno de um vórtice.	101
Figura 7 – Representação de um (a) monopolo envolto por uma (b) superfície fechada.	107
Figura 8 – Representação de um <i>anel Alice</i> . O anel C representa a região singular de vórtice que geram as linhas de campo de $\vec{j}$ para $r \rightarrow \infty$. O caminho Γ , que envolve C , exemplifica o caminho da circulação de fase nessa estrutura topológica.	111
Figura 9 – Representação gráfica de um mapa $\pi_3(S^2)$ com carga de Hopf $Q = 1$	113
Figura 10 – Simulação numérica do processo de formação de <i>nós</i> no estado polar $f = 1$ devido a presença de um campo magnético de quadrupolo, contida na Ref. (6). Acima, as curvas escuras representam as pré-imagens de $\hat{s} = \hat{x}$ e as curvas acinzentadas, as pré-imagens de $\hat{s} = -\hat{z}$. Abaixo, os gráficos representam a magnitude da densidade da componente $m = -1$ do parâmetro de ordem sobre o plano $x - y$. O período da precessão de Larmor é denotado por T_L	115

Figura 11 – Esquemática do experimento da dupla fenda modificado, que ilustra o efeito Aharonov-Bohm.	162
Figura 12 – Representação ilustrativa de uma variedade $\mathcal{M}$ como uma superfície bidimensional. Os objetos marcados na figura são: (a) o ponto ζ ; (b) a órbita $\mathcal{M}_o(\zeta)$; (c) a reta tangente a $\mathcal{M}_o(\zeta)$: $T_\zeta(\mathcal{M}_o(\zeta))$; (d) a curva $r^{-1}(\zeta)$; (e) a reta tangente à curva $r^{-1}(\zeta)$: $T_\zeta(r^{-1}(\zeta))$	168

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Lista dos valores experimentais dos comprimentos de espalhamento a_0 e a_2 para condensados ($f = 1$) de átomos de ^{87}Rb e ^{23}Na em termos do <i>raio de Bohr</i> $r_0 \simeq 0,54 \times 10^{-10} m$. Os valores de a_0 , a_2 e $a_2 - a_1$ são retirados da Ref. (4). Os valores dos coeficientes c_0 e c_1 (Cap. 3) são <i>estimativas</i> calculadas a partir dos valores experimentais dos comprimentos de espalhamento.	61
---	----

LISTA DE SÍMBOLOS

h	Constante de Planck
$\hbar$	Constante de Planck dividida por 2π
k_B	Constante de Boltzmann
$\vec{\mathbf{f}}$	Operador spin atômico total
f	Spin atômico total: $\vec{\mathbf{f}}^2 f, m_f\rangle = f(f+1) f, m_f\rangle$
m_f ou m	Projeção do spin: $\mathbf{f}_z f, m_f\rangle = m_f f, m_f\rangle$
a_i	Operador destruição: $a_i n_i\rangle = \sqrt{n_i} n_i-1\rangle$
$a_i^\dagger$	Operador criação: $a_i^\dagger n_i\rangle = \sqrt{n_i+1} n_i+1\rangle$
$ \emptyset\rangle$	Estado de vácuo do espaço de Fock
M	Massa atômica total
$\Gamma(s)$	Função Gama
$\zeta(s)$	Função Zeta de Riemann
$\delta(s)$	“Função” Delta de Dirac
x	Posição espacial em $\mathbb{R}^N$
dx	Elemento de volume em $\mathbb{R}^N$

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	21
2	NOTAÇÃO	25
2.1	Notação Genérica de Matrizes	25
2.1.1	Negrito: $\mathbf{M}$	25
2.1.2	Barra: $\bar{\mathbf{M}}$	25
2.2	Ordenamento Normal	26
2.3	Descrição Vetorial do Operador de Campo	27
2.4	Operadores dos Observáveis Físicos	28
3	HAMILTONIANO DE UM CONDENSADO DE BOSE-EINSTEIN ESPINORIAL	31
3.1	Sobre o Modelo Estatístico de Einstein	31
3.2	Contribuições de Energia	34
3.3	Origem do Hamiltoniano de Interação	36
3.4	Grandezas Físicas Importantes	39
3.5	Caso de um Espinor $f = 1$	41
4	APROXIMAÇÃO DE CAMPO MÉDIO	45
4.1	Parâmetro de Ordem, Energia Média e Pseudo-spin	45
4.2	Dinâmica do Parâmetro de Ordem	48
5	ESTADOS DE UM CONDENSADO ESPINORIAL UNIFORME	55
5.1	Estados Ferromagnéticos	56
5.2	Estado Antiferromagnético	57
5.3	Estados Polar e de Quebra de Simetria Axial	57
5.4	Diagrama de Fases e Representação Gráfica de um CBE Espinorial Uniforme	58
6	A TEORIA DE BOGOLIUBOV	63
6.1	Hamiltoniano de Bogoliubov e suas Particularidades	64
6.2	Transformações de Bogoliubov e Diagonalização	67
6.3	Estados Excitados Quânticos e suas Energias	72
7	EQUAÇÕES HIDRODINÂMICAS E O PARALELO COM A FÍSICA DE ALTAS ENERGIAS	75
7.1	Fatoração do Parâmetro de Ordem e a Estrutura da Ação	75

7.2	Campo de Velocidades e Equações Hidrodinâmicas	79
7.3	Quebra Espontânea de Simetria e Física de Altas Energias	81
7.4	Quebra Espontânea de Simetria: Observáveis	85
8	GRUPOS DE SIMETRIA DOS CONDENSADOS ESPINORIAIS	89
8.1	A Variedade do Parâmetro de Ordem	89
8.2	Estados Ferromagnéticos	93
8.3	Estado Polar	94
8.4	Algumas Observações	96
9	TOPOLOGIA DOS CONDENSADOS ESPINORIAIS	97
9.1	Grupos de Homotopia	97
9.2	Vórtices	100
9.2.1	Vórtices nos Estados Ferromagnéticos	101
9.2.2	Vórtices no Estado Polar	105
9.3	Monopolos	106
9.3.1	Monopolo de Dirac	108
9.3.2	Monopolo de 't-Hooft-Polyakov	109
9.4	Skyrmions e Sólitons-nó	111
9.4.1	Skyrmion de Shankar	111
9.4.2	Sólitons-nó	112
10	TEORIA DAS EXCITAÇÕES TOPOLÓGICAS QUÂNTICAS	117
10.1	Definindo as Aproximações Necessárias e o Hamiltoniano das ETQs	118
10.2	Transformação do Operador de Campo e Diagonalização	123
10.2.1	Primeiro Teorema	124
10.2.2	Segundo Teorema	126
10.3	Compatibilização entre Resultados Matemáticos e Físicos	127
10.3.1	Caso sem Bombeamento ($H_1 = 0$)	128
10.3.2	Caso com Bombeamento ($H_1 \neq 0$)	134
10.3.3	Encontrando a Função Acoplamento $p(i)$	139
10.4	Procedimento Quando a Compatibilização Falha	140
11	CONCLUSÃO E ESTUDOS FUTUROS	145
	REFERÊNCIAS	149

APÊNDICES	151
APÊNDICE A – CRITÉRIO DE PENROSE-ONSAGER PARA A CONDENSAÇÃO DE BOSE-EINSTEIN	153
A.1 Construção do operador de Densidade	154
A.2 CPO e a Expansão Assintótica da Matriz Densidade	156
APÊNDICE B – INTERPRETAÇÕES DA INTEGRAL $I(\hat{s})$	161
B.1 Princípio de <i>Gauge</i>	161
B.2 Efeito Aharonov-Bohm	162
B.3 Fase de Berry	164
APÊNDICE C – TEOREMAS DE MICHEL E A EXTREMIZAÇÃO DA AÇÃO DE UM ESPINOR	167
C.1 Primeiro Teorema de Michel	168
C.2 Segundo Teorema de Michel	170
C.3 Regras Gerais para a Aplicação do Método de Michel	171
C.4 Simetria dos Condensados de Spin 1	171

1 INTRODUÇÃO

Para estudar, discutir ou até mesmo ensinar *condensação de Bose-Einstein* é importante ter em mente sua rica história de quase 100 anos. (3) Podemos tomar como ponto de partida o ano 1924 com o trabalho do físico indiano Satyendra Nath Bose (2) sobre a natureza estatística e quântica do gás de fótons de Planck, sistema que explica a *radiação de corpo negro*. No ano seguinte, 1925, Albert Einstein adaptou o formalismo discutido por Bose para um gás ideal de partículas monoatômicas e quânticas que satisfizessem a mesma estatística do fóton. (1,3) Atualmente, essas partículas são conhecidas como *bósons*, um nome dado em homenagem a Bose. Em seus trabalhos, Einstein previu também a existência de um novo estado da matéria, caracterizado pelo adensamento das partículas do gás no estado de menor energia quando em temperaturas próximas do zero absoluto. Esse novo estado foi chamado de *condensado de Bose-Einstein* (CBE) e muitos anos se passaram até sua primeira observação experimental. Mais precisamente em 1995, 70 anos após a predição teórica de Einstein, o primeiro CBE em um gás diluto foi produzido em laboratório pela equipe dos pesquisadores Eric Cornell e Carl Wieman (7) na Universidade do Colorado, em Boulder, EUA. No experimento, eles utilizaram um gás de átomos de rubídio 87 muito rarefeito, arrefecido opticamente a 170 nK e aprisionado em um potencial produzido por uma armadilha magnética. Pouco tempo depois, ainda no mesmo ano, a equipe liderada pelo pesquisador Wolfgang Ketterle, do MIT, também foi bem sucedida em produzir CBE em um gás de átomos de sódio 23. (8) Devido a suas pioneiras contribuições experimentais, esses três pesquisadores foram laureados com o prêmio Nobel de Física em 2001.

No âmbito da descrição teórica desses sistemas, muito se avançou desde os trabalhos de Einstein de 1925. Neles, Einstein considerava um gás quântico ideal e, portanto, sem interação entre as partículas do sistema. Entretanto, hoje sabemos que, por mais que tais sistemas experimentais sejam muito rarefeitos, as contribuições dessas interações devem ser consideradas — sobretudo quando se deseja calcular o *perfil de densidade* espacial de um condensado. A teoria de Gross-Pitaevskii (9), hoje em dia, é a mais utilizada para descrever os condensados dilutos a temperatura $T = 0$ K. Essa teoria considera que, em boa aproximação, todas as partículas populam o estado de menor energia do sistema. Além disso, ela surge a partir de uma aproximação de *campo médio* (Hartree-Fock) para a função de onda do estado fundamental, que, neste caso, por descrever todas as partículas, faz o papel do parâmetro de ordem do sistema. É importante deixar claro que, apesar de tratar em essência de sistemas *sem spin*, essa teoria é capaz de descrever bem um sistema experimental similar ao que foi construído em Boulder para átomos de rubídio

87, preparados nos estados de spin atômico total* $f = 1$. Isso se deve ao fato de que o potencial que aprisionava os átomos naquele experimento era de origem magnética e privilegiava energeticamente o estado de spin $|f = 1, m_f = -1\rangle$, de modo que **apenas** os átomos nesse estado seriam capazes de condensar (7) — de forma análoga ao único estado $|f = 0, m_f = 0\rangle$ de um condensado sem spin.

Apesar de ser uma ótima abordagem para a descrição da maior parte dos sistemas experimentais com CBEs, a teoria de Gross-Pitaevskii, da maneira como foi concebida (9), é bastante limitada quando diferentes estados de spin coexistem na fase condensada. Fisicamente, isso acontece quando o potencial de aprisionamento do condensado não depende do estado de spin das partículas (simetria SU(2) do aprisionamento). Assim, para um condensado de átomos de rubídio 87 (preparados em $f = 1$) nesse tipo de potencial, é de se esperar que ele apresente uma mistura de três espécies distintas — uma para cada estado de spin possível: $m_f = 1, 0$ ou -1 .

Uma técnica experimental de aprisionamento de átomos que não causa tal quebra de simetria — e que se desenvolveu muito nos últimos anos — é a geração de potenciais ópticos, como os produzidos por holografia digital. (10) Com esse método, é possível manipular a *fase espacial* da luz e, de maneira quase arbitrária, moldar espacialmente o perfil de intensidade de um feixe laser, o qual gera o potencial óptico desejado. É importante citar que a natureza de interação que esse potencial introduz efetivamente no sistema é do tipo *dipolo elétrico*, para o qual é *irrelevante* o estado de spin das partículas.

Assim, quando um potencial de aprisionamento permite a coexistência de diferentes estados de spin em um mesmo sistema, diz-se que o condensado em questão é um *espinor* (4). As equações dinâmicas que descrevem os *espinores* continuam a ser do tipo Gross-Pitaevskii, mas para um parâmetro de ordem vetorial com $2f + 1$ componentes† que interagem entre si. A cada uma dessas componentes é geralmente dito que representam estados de *pseudo-spin*. Isto é, pelo fato do parâmetro de ordem não ser exatamente a função de onda do sistema (devido à aproximação de *campo médio* envolvida), cada uma de suas componentes não podem ser consideradas coeficientes dos estados de spin $|f, m_f\rangle$, pois essa identificação tem sentido físico apenas para a função de onda. Mas, apesar disso, a interpretação física do *pseudo-spin* é bem similar à do spin na maioria dos casos — tanto que essa distinção costuma ignorada em boa parte das discussões na literatura da área.

Além disso, pelo fato do parâmetro de ordem de um espinor ser expresso em $2f + 1$ componentes, propriedades *simétricas* e *topológicas* aparecem naturalmente em sua estrutura, o que gera uma grande variedade de estados e *texturas de spin* que podem, em

* Soma do spin nuclear e eletrônico.

† Aqui, devemos deixar claro que o que chamamos de espinor remete-se a uma definição distinta do que se aborda em *física de altas energias* — com o campo quântico de elétrons e pósitrons proveniente da equação de Dirac. (11) Espinor, neste trabalho, refere-se simplesmente à existência de uma *estrutura vetorial* no parâmetro de ordem do condensado.

muitos casos, ser relacionados a outros sistemas e estruturas provenientes de diversas áreas da Física, como *vórtices*, *monopolos*, *Skyrmions*, entre outros. Ou seja, os *espinores* são uma plataforma muito importante para o estudo das propriedades topológicas da matéria em um âmbito *inter-áreas*, seja por analogias com outros sistemas ou por características únicas de seu próprio sistema.

É importante citar que comumente, na literatura, os estados topológicos do parâmetro de ordem de um CBE *espinorial* são chamados de *excitações topológicas*. Contudo, não podemos confundir esses estados — que são coletivos e envolvem apenas as partículas no estado fundamental — com os estados excitados que descrevemos para um sistema quântico qualquer. Tendo isso em mente, não é difícil perceber que saber qual é o parâmetro de ordem do sistema não devolve automaticamente quais são os estados excitados quânticos do mesmo. Ou seja, se desejamos encontrá-los, devemos buscar um método para isso.

Assim, dada essa distinção e sabendo que o parâmetro de ordem está limitado a descrever apenas o estado fundamental do sistema, uma pergunta natural que podemos nos fazer é:

Quais são os estados excitados (quânticos) de uma excitação topológica qualquer em um CBE espinorial?

Na literatura, atualmente, essa pergunta está parcialmente respondida. O que se tem resolvido é que, para um *espinor uniforme* — portanto, de *topologia trivial* —, seus estados excitados quânticos são descritos por *ondas planas* e as energias podem ser encontradas ao descrevermos o sistema por uma teoria de Bogoliubov. (4,5) Essa descrição, apesar de útil em diversas situações, deixa de lado certos graus de liberdade e propriedades topológicas únicas que os *espinores* possuem. Logo, outra pergunta que se faz natural é a seguinte:

É possível que o parâmetro de ordem imprima, de alguma maneira, as suas características simétricas e topológicas nos estados excitados quânticos?

E, de fato, essa pergunta não é trivial.

Neste trabalho de mestrado, abordamos uma revisão teórica aprofundada da literatura dos CBEs *espinoriais*, envolvendo: a teoria dos *espinores* em primeiros princípios, do formalismo de campos (Cap. 3) até a teoria de Gross-Pitaevkii (Cap. 4); a análise dos possíveis estados que o parâmetro de ordem de um espinor consegue comportar, seja para um condensado uniforme (topologia trivial, Cap. 5) ou não (excitação topológica proveniente de uma *quebra espontânea de simetria*, Caps. 7-9); e o método de determinar os estados excitados quânticos de um espinor uniforme (Cap. 6).

Além da revisão da literatura, neste trabalho apresentamos também uma *teoria* que descreve os estados excitados quânticos de uma excitação topológica geral (Cap. 10) e

mostramos que as propriedades simétricas e topológicas desses estados estão intimamente ligadas ao parâmetro de ordem. Por consequência, estados excitados quânticos de um espinor são também *espinores*. Para simplificar a nomenclatura, denominaremos tais estados por *excitações topológicas quânticas* daqui em diante.

2 NOTAÇÃO

Como a área de pesquisa dos condensados de Bose-Einstein espinoriais ainda não é muito difundida e sua comunidade está em expansão, para colocar todos os possíveis tipos de leitores (oriundos de diversas áreas) à par da notação utilizada e tornar a leitura desta dissertação mais simples, um capítulo como esse se torna necessário — haja vista que o tipo de notação adotado costuma carregar muita informação e não é, em algumas situações, a representação padrão que encontramos na literatura de Física como um todo.

2.1 Notação Genérica de Matrizes

2.1.1 Negrito: $\mathbf{M}$

Como será mostrado adiante neste trabalho, toda a descrição dos CBEs espinoriais pode ser dada por meio de matrizes. Logo, uma notação sólida, que reduz a chance de ambiguidades e que consiga conectar os mais diversos conceitos, é importante. Tendo isso em mente, a notação escolhida para toda e qualquer matriz deste trabalho, seja ela coluna, linha ou quadrada, é a representação em *negrito*.

Assim, podemos representar uma matriz $m \times n$ qualquer, por exemplo, com o símbolo $\mathbf{M}$. Esta matriz, por sua vez, pode depender de algum parâmetro λ (como posição e tempo) e, ao descrever suas *entradas* (componentes), por convenção aqui utilizada, *não* iremos representá-las em *negrito*:

$$[\mathbf{M}(\lambda)]_{i,j} = M_{i,j}(\lambda). \quad (2.1)$$

É importante destacar que, se *nenhuma* das entradas de uma matriz $\mathbf{M}$ ($M_{i,j}$) depender de operadores *criação* ($a^\dagger$) ou *destruição* (a), as operações de transposição ($\mathbf{M}^T$) e conjugação ($\mathbf{M}^*$) — ou de ambas simultaneamente ($\mathbf{M}^\dagger$) — são as usuais:

$$\begin{cases} [\mathbf{M}^T]_{i,j} = M_{j,i}, \\ [\mathbf{M}^*]_{i,j} = M_{i,j}^*, \\ [\mathbf{M}^\dagger]_{i,j} = M_{j,i}^*. \end{cases} \quad (2.2)$$

2.1.2 Barra: $\bar{\mathbf{M}}$

Contudo, quando há a dependência de operadores *criação* ou *destruição* nas entradas da matriz $\mathbf{M}$, o símbolo $\mathbf{M}^\dagger$ pode se tornar ambíguo. Um exemplo claro disso é o seguinte:

se definirmos $\mathbf{a}$ como uma matriz coluna (3×1) cujas entradas sejam operadores destruição, ou seja,

$$\mathbf{a} = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_0 \\ a_{-1} \end{pmatrix}, \quad (2.3)$$

a notação $\mathbf{a}^\dagger$, em tese, poderia representar duas matrizes distintas, dadas por

$$\mathbf{a}^\dagger = \begin{pmatrix} a_1^\dagger \\ a_0^\dagger \\ a_{-1}^\dagger \end{pmatrix} \text{ ou } \begin{pmatrix} a_1^\dagger & a_0^\dagger & a_{-1}^\dagger \end{pmatrix}. \quad (2.4)$$

Isso ocorre pois o símbolo *adaga* $\dagger$ pode ser ambíguo quanto a sua atuação — se apenas nos operadores destruição (que os torna operadores criação) ou se também na estrutura matricial. Assim, *quando* houver situações em que ambas matrizes aparecem numa mesma expressão ao descrevermos um CBE espinorial, é necessário definir uma maneira de diferenciá-las. A solução geralmente usada na literatura é definir um símbolo alternativo para a *transposição* de uma matriz e, aqui, foi escolhido o símbolo *barra*: $\bar{\mathbf{M}}$. Dessa forma, a possível ambiguidade discutida anteriormente é resolvida e temos*

$$\mathbf{a}^\dagger = \begin{pmatrix} a_1^\dagger \\ a_0^\dagger \\ a_{-1}^\dagger \end{pmatrix} \text{ e } \bar{\mathbf{a}}^\dagger = \begin{pmatrix} a_1^\dagger & a_0^\dagger & a_{-1}^\dagger \end{pmatrix}. \quad (2.5)$$

Entretanto, pelo fato de uma notação como $\bar{\mathbf{a}}^\dagger$ ser mais carregada e se fazer necessária **apenas** quando os dois tipos de matrizes acima estiverem numa mesma expressão (o que acontece em poucos pontos desta dissertação), na maior parte do texto podemos subentender que a operação $\dagger$ atua tanto na estrutura matricial (i.e., **transposição**) quanto nos operadores criação e destruição ($a_i \rightarrow a_i^\dagger$).

2.2 Ordenamento Normal

A operação *ordenamento normal* é muito difundida no estudo de sistemas quânticos de *muitos corpos* (seja no contexto da *física de altas energias e campos* ou da *física atômica*). Como os CBEs espinoriais podem ser descritos por campos quânticos (no formalismo da *segunda quantização*), o ordenamento ordenamento normal aparece naturalmente ao descrevermos alguns dos operadores dos observáveis físicos do sistema (Cap. 3).

* Mesmo tipo de notação utilizada da Ref. (4).

Seja um operador $\hat{A}$ dado por um produto de operadores criação e aniquilação. O exemplo mais simples para nosso propósito é $\hat{A} = a a^\dagger$. O *ordenamento normal do operador* $\hat{A}$, denotado por $: \hat{A} :$, é definido por

$$: \hat{A} : = : a a^\dagger : = a^\dagger a. \quad (2.6)$$

Em outras palavras, a operação acima nos diz que, ao ordenar normalmente um operador, sempre devemos posicionar o operador criação à *esquerda* do seu destruição respectivo, sem levar em conta os comutadores $[a, a^\dagger]$ envolvidos, pois, de maneira geral:

$$a a^\dagger = a^\dagger a + [a, a^\dagger]. \quad (2.7)$$

Além disso, a operação de ordenamento $: \hat{A} :$ aparece também como uma ferramenta útil para *simplificar* a notação e dar *interpretação física* a certas grandezas (o que pode ser visto nos Caps. 3, 6 e 10).

2.3 Descrição Vetorial do Operador de Campo

Como será visto nos próximos capítulos, ao abordarmos os CBEs espinoriais em primeiros princípios, é necessário utilizar o *formalismo de campos* (*segunda quantização*) para descrevê-los. A estrutura base para esse formalismo é o *operador de campo* e ele é definido, em um sistema de muitos átomos (12), por exemplo, como

$$\hat{\psi}(x) = \sum_i \phi_i(x) a_i. \quad (2.8)$$

Aqui, a variável x indica a posição espacial na dimensionalidade desejada. O índice i , por sua vez, indica uma das possíveis combinações de números quânticos que um átomo, individualmente, pode ter — como uma dada energia, um dado momento etc. O operador a_i é um operador destruição *bosônico* usual ($[a_i, a_{i'}^\dagger] = \delta_{i,i'}$) referente ao estado i . Já o conjunto $\{\phi_i(x)\}$ é uma base ortonormal completa do *espaço de Hilbert* que descreve todo o sistema quântico. É interessante pontuar que, se estivéssemos tratando o sistema em *primeira quantização*, tal conjunto descreveria completamente a *função de onda* em um sistema de N átomos:

$$\psi(x) = \sum_{i_1, \dots, i_N} C(i_1, \dots, i_N) \phi_{i_1}(x_1) \cdots \phi_{i_N}(x_N). \quad (2.9)$$

Contudo, estamos interessados em CBEs *espinoriais*. Para este tipo de sistema, pelo fato de seus átomos possuírem spin $f \neq 0$, surgem $2f + 1$ operadores de campo distintos,

$$\hat{\psi}_m(x) = \sum_i \phi_{i,m}(x) a_{i,m}, \quad (2.10)$$

com os valores $m = -f, -(f-1), \dots, 0, \dots, (f-1), f$. Assim como anteriormente, para cada valor m fixo, o conjunto $\{\phi_{i,m}(x)\}$ é uma base ortonormal completa e $a_{i,m}$ é um operador destruição bosônico usual ($[a_{i,m}, a_{i',m'}^\dagger] = \delta_{m,m'} \delta_{i,i'}$).

Dado o fato acima, com respaldo na interação entre os diferentes estados de spin no condensado (Cap. 3), a notação vantajosa que escolhemos aqui é a da *representação vetorial* do operador de campo. Para ela, definimos o seguinte operador de campo *vetorial*, representado por meio de uma matriz coluna,

$$\hat{\boldsymbol{\psi}}(x) = \begin{pmatrix} \hat{\psi}_f(x) \\ \hat{\psi}_{f-1}(x) \\ \vdots \\ \hat{\psi}_0(x) \\ \vdots \\ \hat{\psi}_{-(f-1)}(x) \\ \hat{\psi}_{-f}(x) \end{pmatrix}, \quad (2.11)$$

o que simplifica e torna mais clara a expressão e a interpretação dos operadores dos observáveis físicos do sistema.

2.4 Operadores dos Observáveis Físicos

Uma vez definida a notação vetorial para o operador de campo, existe uma notação muito natural para os operadores que representam observáveis físicos em *segunda quantização*. Devido ao fato das partículas que constituem o espinor possuírem em geral *spin não nulo*, todos os operadores de observáveis físicos (no contexto da *primeira quantização*) podem ser descritos como *matrizes*[†]. Seja $\mathbf{A}$ um operador de algum observável físico em primeira quantização (como o spin $\vec{\mathbf{f}}$, o momento linear $[\vec{\mathbf{p}}]_{m,m'} = -\delta_{m,m'} i\hbar \vec{\nabla}$, a energia cinética $[\mathbf{E}_C]_{m,m'} = -\delta_{m,m'} \hbar^2 \nabla^2 / 2M$ e outros). O operador *densidade de* $\mathbf{A}$, representado por $\hat{A}(x)$ em segunda quantização, é definido por

$$\hat{A}(x) \equiv \hat{\boldsymbol{\psi}}^\dagger(x) \mathbf{A} \hat{\boldsymbol{\psi}}(x) = \sum_{m,m'} \hat{\psi}_m^\dagger(x) [\mathbf{A}]_{m,m'} \hat{\psi}_{m'}(x). \quad (2.12)$$

[†] Convenientemente representadas na base dos estados de spin $|f, m\rangle$, $m = -f, \dots, f$.

Note que não se usa **negrito** em $\hat{A}(x)$ pois esse operador não possui estrutura matricial (i.e., ele toma a contribuição de *todas* as componentes m do vetor operador de campo $\hat{\psi}$). Além disso, o sinal *circunflexo* é utilizado para denotar que o operador em questão está escrito em termos de operadores criação e destruição.

Um exemplo de um caso que pode ser um pouco confuso ao utilizar essa notação surge quando tomamos $\mathbf{A} = \vec{\mathbf{f}}$, em que $\vec{\mathbf{f}} = \mathbf{f}_x \vec{i} + \mathbf{f}_y \vec{j} + \mathbf{f}_z \vec{k}$ é o operador matricial de spin. Com ele, podemos definir operador *densidade de spin*, $\hat{\vec{F}}(x)$, que é dado por:

$$\hat{\vec{F}}(x) = \hat{\psi}^\dagger(x) \vec{\mathbf{f}} \hat{\psi}(x). \quad (2.13)$$

Note que aqui, apesar de ser um vetor, não foi utilizado *negrito* em $\hat{\vec{F}}(x)$. Isso se deve ao fato de que esse operador tem estrutura de um vetor no *espaço físico* (i.e., $\hat{\vec{F}} = \hat{F}_x \vec{i} + \hat{F}_y \vec{j} + \hat{F}_z \vec{k}$) e não no *espaço de estados de spin* (como o operador de campo vetorial $\hat{\psi}$). Pela convenção que escolhemos utilizar nesta dissertação, apenas os vetores no espaço dos estados de spin são representados em **negrito**.

3 HAMILTONIANO DE UM CONDENSADO DE BOSE-EINSTEIN ESPINORIAL

A descrição teórica dos condensados de Bose-Einstein evoluiu muito desde os primeiros trabalhos de Bose e de Einstein. No caso desses últimos, o sistema tratado era simplesmente um gás ideal quântico (i.e., átomos livres de potencial externo e sem interação entre eles) e sua descrição é bem mais simples do que num caso geral. Os observáveis físicos desse sistema, como número de átomos, energia e temperatura crítica para a *condensação de Bose-Einstein*, podem ser obtidos a partir do ferramental da *mecânica estatística*. Contudo, esse tipo de modelo é muito limitado. Basta impor um potencial externo e/ou algum tipo interação entre pares de átomos que a descrição do modelo estatístico de Einstein falha. Para tratar de situações mais gerais, precisamos abordar o sistema de uma outra maneira. A abordagem que é amplamente utilizada na literatura mais moderna dessa área é descrever o condensado como um sistema quântico de muitos corpos por meio do *formalismo de campos quânticos*. As vantagens de utilizar tal formalismo vêm da simplicidade de escrever, interpretar e operar com o hamiltoniano e outros observáveis físicos em um sistema de muitos átomos.

Neste capítulo, será abordada a construção do hamiltoniano de um CBE espinorial (spin f inteiro qualquer, incluindo $f = 0$) em primeiros princípios, desde a discussão para o caso de um gás ideal, com base no modelo estatístico que Einstein considerava em suas previsões teóricas, até a descrição mais moderna para um condensado, utilizando o formalismo de campos quânticos.

3.1 Sobre o Modelo Estatístico de Einstein

Einstein, enquanto adaptava o formalismo estatístico de Bose para um gás ideal monoatômico e quântico, descobriu a existência de um novo estado da matéria. Nesse modelo estatístico, apenas a *energia cinética* das partículas contribuía com a energia total do gás. Para uma partícula quântica livre, descrita por ondas planas, a relação de dispersão *energia-vetor de onda* tem o seguinte formato:

$$\epsilon_{\vec{k}} = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2M}. \quad (3.1)$$

Para um gás contido em um volume finito, o vetor de onda

$$\vec{k} = \frac{2\pi}{V^{1/3}}(m_x \hat{x} + m_y \hat{y} + m_z \hat{z}), \text{ com } m_x, m_y, m_z \in \mathbb{Z}, \quad (3.2)$$

é quantizado e o estado fundamental tem energia *nula*. Segundo o formalismo do *ensemble grande canônico* da *mecânica estatística* (13), o número de partículas N que constituem esse gás em função do potencial químico μ (definido como a variação da energia do sistema ao adicionar nele uma partícula), do espectro de energia $\{\epsilon_i\}$ (que devolve a dependência do volume V) e da temperatura T é dado por:

$$N(\mu, V, T) = \sum_i \langle n_i \rangle = \sum_i \frac{1}{e^{(\epsilon_i - \mu)/k_B T} - 1}, \quad (3.3)$$

em que $\langle n_i \rangle$ é o número médio de átomos em um dado estado i . Se o número de partículas do sistema é conservado, considera-se que N é fixo. Logo, é possível inverter a expressão acima de modo a achar a curva $\mu/k_B T$ por T (Fig. 1). Com ela, é possível concluir que,

Figura 1 – Curva $\mu/k_B T$ por T calculada numericamente para partículas clássicas (linha contínua), bosônicas e fermiônicas (linhas tracejadas).

Fonte: SALINAS. (13)

para temperaturas altas, o comportamento de partículas clássicas e quânticas, sejam elas bósons (f inteiro) ou férmions (f semi-inteiro), é coincidente. Contudo, a medida que a temperatura decresce, o potencial químico para as partículas clássicas e fermiônicas aumenta e se torna positivo, enquanto que, para as partículas bosônicas, o potencial químico se fixa em *zero* a partir de uma temperatura crítica,

$$T_0 = \frac{\hbar^2}{2Mk_b} \left[\frac{4\pi^2}{(2f+1)\Gamma(3/2)\zeta(3/2)} \right]^{2/3} \left(\frac{N}{V} \right)^{2/3}, \quad (3.4)$$

que é da ordem de 10^{-7} K para os experimentos de Cornell e Wieman com átomos de

rubídio 87. Essa mudança brusca de comportamento do potencial químico do gás de bósons marca uma *transição de fase*. Seu principal efeito pode ser visto se analisarmos, no limite termodinâmico, o número médio de átomos no estado fundamental ($\epsilon_0 = 0$) e compararmos esse valor com o número total de átomos no sistema. Para isso, é conveniente explicitarmos o número de átomos por unidade de volume em cada estado:

$$\frac{N}{V} = \frac{1}{V} \frac{1}{e^{-\mu/k_B T} - 1} + \frac{1}{V} \sum_{i \neq 0} \frac{1}{e^{(\epsilon_i - \mu)/k_B T} - 1}. \quad (3.5)$$

É notável que, com $\mu \neq 0$, o limite termodinâmico — que é uma abstração dada por $N \rightarrow \infty$ ($\sim$ número grande finito) e $V \rightarrow \infty$ ($\sim$ volume grande finito), mantendo N/V finito — força com que $\langle n_i \rangle/V$ e $\langle n_i \rangle/N$ sejam infinitesimais para qualquer estado i^* . Contudo, para temperaturas abaixo de T_0 , pelo fato de μ ir a zero, o valor $\langle n_0 \rangle$ vai a infinito, o que mostra que existe um adensamento de átomos no estado fundamental. Então, no limite termodinâmico, podemos considerar

$$\frac{\langle n_0 \rangle}{V} \rightarrow \frac{N_0}{V}, \quad (3.6)$$

em que a fração N_0/V se torna um valor finito. Quando esse fenômeno ocorre, é dito que ocorreu uma *condensação de Bose-Einstein* no sistema e o conjunto de átomos no estado fundamental é chamado de *condensado de Bose-Einstein*. Mais especificamente, é possível encontrar a fração de átomos no estado fundamental em função da temperatura (13):

$$\frac{N_0}{N} = 1 - \left(\frac{T}{T_0} \right)^{3/2}, \text{ para } T < T_0. \quad (3.7)$$

Assim, podemos analisar por completo o comportamento geral de N_0/N para todas as temperaturas (Fig. 2). Para temperaturas acima da temperatura crítica, o condensado não está formado e portanto a fração N_0/N deve ser nula. Quando se atinge a temperatura crítica, N_0/N se torna diferente de zero (Eq. 3.7), o que caracteriza a transição de fase (de *segunda ordem*, pois $\frac{d}{dT}(N_0/N)$ é descontínua em T_0), e cresce até atingir o valor 1 para $T = 0$ K.

Embora fosse inovador e capturasse muito dos comportamentos físicos dos CBEs, o modelo de Einstein carrega muitas idealizações e falha em descrever sistemas mais complicados (como os que são tratados hoje em dia). Isso se deve ao fato de que a mecânica quântica ainda era uma área de estudo razoavelmente nova naquela época e o ferramental mais moderno para abordar um sistema quântico de muitos corpos ainda não existia.

* Isso ocorre devido a existência de infinitos estados quânticos i que contribuem para um número finito de átomos no sistema.

Figura 2 – Fração de átomos no estado fundamental para um gás ideal, N_0/N , em função da temperatura. Para $T > T_0$: $N_0/N = 0$. Para $T < T_0$: $N_0/N = 1 - (T/T_0)^{3/2}$.

Fonte: SALINAS. (13)

3.2 Contribuições de Energia

Para descrever um condensado de Bose-Einstein espinorial em completude, fugindo do tratamento de Einstein e considerando um caso mais geral, é bem comum descrever o sistema de acordo com o formalismo de campos quânticos — que muitos conhecem também por *segunda quantização*. Por motivos didáticos, adaptando o texto para diversos tipos de leitores, primeiro discutiremos as contribuições energéticas do sistema quântico de muitos corpos em termos da *primeira quantização*.

Consideremos um sistema de N partículas quânticas idênticas e de *spin* f inteiro (por exemplo, um conjunto de átomos bosônicos indistinguíveis). Uma maneira de modelar o hamiltoniano desse sistema é a seguinte (4):

$$H(x_1, \dots, x_N) = \sum_{i=1}^N -\frac{\hbar^2 \nabla_i^2}{2M} + U_{\text{apr}}(x_i) - p\mathbf{f}_z + q\mathbf{f}_z^2 + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j=1}^N V_{\text{int}}(|x_i - x_j|). \quad (3.8)$$

Aqui, $U_{\text{apr}}(x)$ é um potencial externo de aprisionamento — por exemplo, um potencial óptico (10) — que é idêntico para todas as partículas do sistema e independe da projeção de *spin* $|f, m\rangle$ em que essas se encontram. A constante p é proporcional a um campo magnético (uniforme e não intenso) aplicado no sistema e modela o *efeito Zeeman linear*. Já a constante q é proporcional ao quadrado do campo magnético e modela o *efeito Zeeman quadrático*[†]. O operador $V_{\text{int}}(|x - x'|)$ modela a interação entre duas partículas distintas (podendo depender do estado de projeção de *spin*, entre outros fatores). Para um

[†] A natureza exata das constantes p e q não serão discutidas aqui. Como será visto, os estados de maior interesse para esse trabalho são dados para um campo magnético nulo. Para mais detalhes sobre essas constantes veja a referência (4).

condensado *diluto* (i.e., rarefeito), espera-se que efetivamente esse potencial apenas tenha efeito *localizado*. Ou seja,

$$V_{\text{int}}(|x - x'|) \propto \delta(x - x'). \quad (3.9)$$

Em geral, essa *primeira aproximação* para o caso de um CBE com interação entre partículas é a mais natural pelo fato dos *gases quânticos* serem tipicamente *rarefeitos* quando há neles um condensado formado. Logo, o alcance característico de interação se torna consideravelmente menor do que a separação média entre as partículas, o que, em aproximação, faz com que potencial de interação tenha contribuição efetiva apenas localmente (i.e., $x = x'$, análogo a um potencial do tipo “*esfera dura*” para partículas sem dimensão apreciável).

Pelo procedimento padrão (12), o hamiltoniano em segunda quantização $\hat{H}$ é escrito em termos do hamiltoniano em primeira quantização H e dos operadores de campo $\hat{\psi}_m(x)$ (brevemente abordados na seção 2.3) como $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}_{\text{int}}$:

$$\hat{H}_0 = \int \sum_{m=-f}^f \hat{\psi}_m^\dagger(x) \left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2M} + U_{\text{apr}}(x) - p[\mathbf{f}_z]_{m,m} + q[\mathbf{f}_z^2]_{m,m} \right] \hat{\psi}_m(x) dx, \quad (3.10)$$

$$\hat{V}_{\text{int}} = \frac{1}{2} \int \int \sum_{m_1, m_2, m_3, m_4} \hat{\psi}_{m_4}^\dagger(x') \hat{\psi}_{m_3}^\dagger(x) [V_{\text{int}}(|x - x'|)]_{m_1, m_2}^{m_3, m_4} \hat{\psi}_{m_1}(x) \hat{\psi}_{m_2}(x') dx dx', \quad (3.11)$$

em que $\hat{V}_{\text{int}}$ modela a interação entre as diferentes partículas do sistema.

Apesar de, em tese, poder modelar qualquer tipo de interação entre duas partículas com spin, a expressão acima para $\hat{V}_{\text{int}}$ não tem significado físico claro, além de possuir uma notação extremamente carregada que, em situações práticas — como um experimento ou uma simulação computacional —, não é conveniente para analisar ou interpretar um sistema físico real. Cientes disso, é muito mais interessante analisar a origem das interações descritas em $\hat{V}_{\text{int}}$ já no formalismo de campos, sem a necessidade de abordar o sistema em primeira quantização — haja vista que, em segunda quantização, sua interpretação física é bem mais clara e os mecanismos que formam efetivamente a interação são evidentes. Essa *importante* análise é discutida em detalhes na próxima seção.

3.3 Origem do Hamiltoniano de Interação

Para modelar o hamiltoniano de interação $\hat{V}_{\text{int}}$ é muito útil construir o seguinte esquema (representado na Fig. 3). Ao analisar a Eq. 3.11, é visível que o processo de interação pode ser interpretado como a destruição de duas partículas em estados de spin definidos (i.e., a *destruição da informação* acerca delas) para que, imediatamente após, elas reapareçam em outros possíveis estados — *emaranhados* por satisfazerem certos vínculos, como a conservação da soma das projeções do spin $m_1 + m_2$ das duas partículas. É importantíssimo notar também que esse processo faz com que percamos a informação da *identificação* dessas partículas, pois elas são indistinguíveis. Em suma, se inicialmente tivéssemos a partícula 1 no estado de spin $|f, m_1\rangle$ e a partícula 2 em $|f, m_2\rangle$, após a interação surge uma combinação linear de estados $|f, m_3\rangle \otimes |f, m_4\rangle$, em que $m_3 + m_4 = m_1 + m_2$, e não é possível identificar com certeza qual das duas partículas (3 ou 4) refere-se à 1 ou à 2. Dada a natureza muito localizada da interação, esse processo de destruição de informação e emaranhamento acontece apenas quando as partículas estão muito próximas.

Figura 3 – Processo de interação entre duas partículas: (a) aproximação de duas partículas com estados de spin definidos $|f, m_1\rangle$ e $|f, m_2\rangle$; (b) partículas interagem em distâncias curtas (interação localizada); (c) partículas após a interação são encontradas com novos estados de spin $\sum_{m_3, m_4} C_{m_3, m_4} |f, m_3\rangle \otimes |f, m_4\rangle$, tal que $m_3 + m_4 = m_1 + m_2$.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Além desse esquema, existe uma observação muito importante acerca da *paridade* da função de onda pela *permutação* de duas partículas idênticas (4). É amplamente sabido que, para bósons, essa permutação *preserva o sinal* da função de onda, enquanto que, para férmions, o *sinal é trocado*. Em outras palavras, para um conjunto de partículas de spin

f (bósons ou férmions), a função de onda é multiplicada por $(-1)^{2f}$ quando um par de partículas é permutado.

Durante a interação (Fig. 3), podemos analisar, em aproximação, a função de onda de um par de partículas interagentes isoladamente e supor que sua *paridade* seja compatível com a da função de onda do sistema completo. Sem perda de generalidade, podemos supor também que a função de onda desse par seja dada pelo produto da parte do *momento angular de spin total* do par $|\mathcal{F}, m_{\mathcal{F}}\rangle$ ($\mathcal{F} = 0, 1, 2, \dots$ ou $2f$) pela parte do *momento angular orbital total* $|\mathcal{L}, m_{\mathcal{L}}\rangle$ ($\mathcal{L} = 0, 1, 2, \dots$ ou $2l$, supondo o mesmo momento angular orbital l para as duas partículas).

Da paridade dos coeficientes de Clebsch-Gordan, que regem a soma do momento angular orbital e de spin, ao permutar um par de partículas, a função de onda é multiplicada por $(-1)^{\mathcal{F}+2f}(-1)^{\mathcal{L}+2l}$. Como $2l$ é sempre par e a paridade da função de onda aproximada deve ser sempre compatível à natureza das partículas envolvidas (i.e., $(-1)^{\mathcal{F}+2f}(-1)^{\mathcal{L}} = (-1)^{2f}$) é possível mostrar que $\mathcal{F} + \mathcal{L}$ sempre resulta em um número par.

Em situações de baixas energias (caso de um CBE), apenas o espalhamento de menor energia (devido à interação entre as partículas) é considerado: o espalhamento por onda “s” ($\mathcal{L} = 0$), o qual preserva o momento angular de spin durante a interação ($\equiv$ conservação de $m_1 + m_2$). Logo, para partículas idênticas em baixas energias (sejam bósons ou férmions), $\mathcal{F}$ pode somente ser um número par.

Levando em conta todas as considerações acima, é natural escrever o hamiltoniano de interação $\hat{V}_{\text{int}}$ de um gás quântico bosônico, em baixas energias, como

$$\hat{V}_{\text{int}} = \sum_{\mathcal{F}=0,2,\dots,2f} \hat{V}_{\mathcal{F}}, \quad (3.12)$$

em que são separadas as contribuições das possíveis somas do momento angular de spin dos pares de partículas interagentes. Um operador muito útil para descrever o hamiltoniano de interação é o operador destruição $\hat{A}_{\mathcal{F},m_{\mathcal{F}}}(x, x')$, definido por

$$\hat{A}_{\mathcal{F},m_{\mathcal{F}}}(x, x') = \sum_{m,m'} \langle \mathcal{F}, m_{\mathcal{F}} | f, m; f, m' \rangle \hat{\psi}_m(x) \hat{\psi}_{m'}(x') \quad (3.13)$$

e que “destrói” um par de partículas cujos estados contribuem para o estado de spin total $|\mathcal{F}, m_{\mathcal{F}}\rangle$. Os coeficientes $\langle \mathcal{F}, m_{\mathcal{F}} | f, m; f, m' \rangle$, que aparecem na definição desse operador, são os coeficientes de Clebsch-Gordan, que podem ser não-nulos apenas se $m_{\mathcal{F}} = m + m'$ e, como citado previamente, eles têm a seguinte propriedade de paridade:

$$\langle \mathcal{F}, m_{\mathcal{F}} | f, m; f, m' \rangle = (-1)^{\mathcal{F}+2f} \langle \mathcal{F}, m_{\mathcal{F}} | f, m'; f, m \rangle. \quad (3.14)$$

Sendo assim, dada a propriedade $[\hat{\psi}_m(x), \hat{\psi}_{m'}(x')] = 0$, para bósons, e $\{\hat{\psi}_m(x), \hat{\psi}_{m'}(x')\} = \hat{\psi}_m(x)\hat{\psi}_{m'}(x') + \hat{\psi}_{m'}(x')\hat{\psi}_m(x) = 0$, para férmions, é possível inferir que, quando $x = x'$,

$$\begin{cases} \hat{A}_{\mathcal{F}, m_{\mathcal{F}}}(x, x) = 0, \text{ para } \mathcal{F} \text{ ímpar (bósons)} \\ \hat{A}_{\mathcal{F}, m_{\mathcal{F}}}(x, x) = 0, \text{ para } \mathcal{F} \text{ par (férmions)} \end{cases}. \quad (3.15)$$

Logo, uma maneira *razoavelmente intuitiva* de definir o hamiltoniano de interação $\hat{V}_{\text{int}}$, em termos de $\hat{A}_{\mathcal{F}, m_{\mathcal{F}}}(x, x')$ e levando em conta a conservação da projeção do spin (Fig. 3), é dada por (4):

$$\hat{V}_{\text{int}} = \frac{1}{2} \sum_{\mathcal{F}=0,2,\dots,2f} \int v_{\mathcal{F}}(x, x') \sum_{m_{\mathcal{F}}=-\mathcal{F}}^{\mathcal{F}} \hat{A}_{\mathcal{F}, m_{\mathcal{F}}}^{\dagger}(x, x') \hat{A}_{\mathcal{F}, m_{\mathcal{F}}}(x, x') dx dx'. \quad (3.16)$$

Note que o hamiltoniano escrito acima, de fato, guarda a propriedade da conservação da projeção de spin durante a interação. Isso ocorre pois, uma vez que o operador $\hat{A}_{\mathcal{F}, m_{\mathcal{F}}}(x, x')$ “destrói” um par de partículas com $m_1 + m_2 = m_{\mathcal{F}}$, o operador $\hat{A}_{\mathcal{F}, m_{\mathcal{F}}}^{\dagger}(x, x')$ “cria” um par com $m_3 + m_4 = m_{\mathcal{F}}$ e, dessa maneira, $m_1 + m_2 = m_3 + m_4$ (Fig. 3). Para modelar o caso de um condensado rarefeito, $v_{\mathcal{F}}(x, x')$ pode ser definido como:

$$v_{\mathcal{F}}(x, x') = g_{\mathcal{F}} \delta(x - x'), \quad (3.17)$$

em que a constante $g_{\mathcal{F}}$ está relacionada com o *comprimento de espalhamento* $a_{\mathcal{F}}$ (onda “s”) por:

$$g_{\mathcal{F}} = \frac{4\pi\hbar^2}{M} a_{\mathcal{F}}. \quad (3.18)$$

Assim, o hamiltoniano de interação resume-se a

$$\hat{V}_{\text{int}} = \frac{1}{2} \sum_{\mathcal{F}=0,2,\dots,2f} g_{\mathcal{F}} \int \sum_{m_{\mathcal{F}}=-\mathcal{F}}^{\mathcal{F}} \hat{A}_{\mathcal{F}, m_{\mathcal{F}}}^{\dagger}(x, x) \hat{A}_{\mathcal{F}, m_{\mathcal{F}}}(x, x) dx. \quad (3.19)$$

A primeira conclusão (curiosa) em que podemos chegar, analisando a equação acima e a propriedade da Eq. 3.15, é que, para um gás rarefeito de *férmions idênticos*, a baixas energias, o hamiltoniano de interação é igual a *zero* sempre. Ou seja, nas condições aqui tratadas, férmions idênticos não interagem entre si. Esse é um fato já conhecido na literatura e é um dos motivos que tornam o resfriamento *evaporativo* desse tipo de gás impossível (nessa situação) a medida que a energia do sistema diminui. Por isso, até hoje, a realização experimental de gases de férmions ultrafrios é uma tarefa muito mais complicada do que no caso bosônico, em que tal propriedade não se verifica.

3.4 Grandezas Físicas Importantes

Para que possamos dar interpretação ao hamiltoniano de interação $\hat{V}_{\text{int}}$ encontrado anteriormente, é conveniente definirmos os operadores das grandezas físicas relevantes para o sistema e relacioná-los com os operadores $\hat{A}_{\mathcal{F},m_{\mathcal{F}}}(x,x')$, que descrevem completamente a interação no sistema.

O primeiro operador que aqui trataremos é o operador *densidade de número* $\hat{n}(x)$ e sua definição em termos do operador de campo vetorial $\hat{\psi}(x)$ é (4)

$$\hat{n}(x) = \hat{\psi}^\dagger(x) \hat{\psi}(x) = \sum_{m=-f}^f \hat{\psi}_m^\dagger(x) \hat{\psi}_m(x). \quad (3.20)$$

Quando integramos esse operador em todo o espaço, o operador *número total de partículas* $\hat{N}$ é obtido:

$$\hat{N} = \int \hat{n}(x) dx = \sum_{i,m} a_{i,m}^\dagger a_{i,m} = \sum_{i,m} \hat{N}_{i,m}, \quad (3.21)$$

em que $\hat{N}_{i,m}$ é o operador número de partículas no estado quântico (i, m) , com i denotando os números quânticos de uma partícula, exceto o número quântico m , que refere-se ao estado de spin $|f, m\rangle$.

Uma maneira de encontrar uma relação entre os operadores $\hat{A}_{\mathcal{F},m_{\mathcal{F}}}(x,x')$ e o operador densidade de número é a seguinte. Consideremos o operador *identidade* para um par de partículas com spin f , que pode ser escrito como a completeza:

$$\mathbf{1} = \sum_{\mathcal{F}=0}^{2f} \sum_{m_{\mathcal{F}}=-\mathcal{F}}^{\mathcal{F}} |\mathcal{F}, m_{\mathcal{F}}\rangle \langle \mathcal{F}, m_{\mathcal{F}}|. \quad (3.22)$$

Pela ortonormalidade dos estados de spin de um par de partículas, $\langle f, m_1; f, m_2 | f, m_3; f, m_4 \rangle = \delta_{m_1, m_3} \delta_{m_2, m_4}$, podemos escrever o operador $:\hat{n}(x)\hat{n}(x'):$ como

$$:\hat{n}(x)\hat{n}(x'):= \sum_{m_1, m_2, m_3, m_4} \hat{\psi}_{m_1}^\dagger(x) \hat{\psi}_{m_2}^\dagger(x') \langle f, m_1; f, m_2 | f, m_3; f, m_4 \rangle \hat{\psi}_{m_3}(x) \hat{\psi}_{m_4}(x'). \quad (3.23)$$

Inserindo a completeza (Eq. 3.22) entre os estados de spin na equação acima e utilizando a definição de $\hat{A}_{\mathcal{F},m_{\mathcal{F}}}(x,x')$ (Eq. 3.13), podemos encontrar (4):

$$:\hat{n}(x)\hat{n}(x'):= \sum_{\mathcal{F}} \sum_{m_{\mathcal{F}}} \hat{A}_{\mathcal{F},m_{\mathcal{F}}}^\dagger(x,x') \hat{A}_{\mathcal{F},m_{\mathcal{F}}}(x,x'). \quad (3.24)$$

Para bósons, com $x = x'$ na expressão final de $\hat{V}_{\text{int}}$, podemos reduzir o somatório acima da seguinte maneira (4):

$$: \hat{n}^2(x) : = \sum_{\mathcal{F}_{\text{par}}} \sum_{m_{\mathcal{F}}} \hat{A}_{\mathcal{F}, m_{\mathcal{F}}}^{\dagger}(x, x) \hat{A}_{\mathcal{F}, m_{\mathcal{F}}}(x, x). \quad (3.25)$$

Outro operador importante na descrição da interação entre partículas é o operador *densidade de spin* $\hat{\vec{F}}(x)$ (brevemente discutido na seção 2.4) e pode ser definido como (4):

$$\hat{\vec{F}}(x) = \hat{\psi}^{\dagger}(x) \vec{\mathbf{f}} \hat{\psi}(x) = \sum_{m, m' = -f}^f \hat{\psi}_m^{\dagger}(x) [\vec{\mathbf{f}}]_{m, m'} \hat{\psi}_{m'}(x). \quad (3.26)$$

De maneira análoga ao caso do operador densidade de número, é possível relacionar $\hat{\vec{F}}(x)$ com os operadores $\hat{A}_{\mathcal{F}, m_{\mathcal{F}}}(x, x)$. Para isso, é conveniente introduzirmos a matriz $\vec{\mathbf{f}}_1 \cdot \vec{\mathbf{f}}_2$, que é o produto escalar dos operadores de spin para duas partículas (1 e 2) de spin f . Da propriedade da soma do momento angular de spin, podemos escrever esse operador como

$$\vec{\mathbf{f}}_1 \cdot \vec{\mathbf{f}}_2 = \frac{1}{2} [(\vec{\mathbf{f}}_1 + \vec{\mathbf{f}}_2)^2 - \vec{\mathbf{f}}_1^2 - \vec{\mathbf{f}}_2^2], \quad (3.27)$$

que, na base da soma do momento angular de spin $\{|\mathcal{F}, m_{\mathcal{F}}\rangle\}$, pode ser escrito da seguinte maneira:

$$\vec{\mathbf{f}}_1 \cdot \vec{\mathbf{f}}_2 = \sum_{\mathcal{F}} \sum_{m_{\mathcal{F}}} \left[\frac{1}{2} \mathcal{F}(\mathcal{F} + 1) - f(f + 1) \right] |\mathcal{F}, m_{\mathcal{F}}\rangle \langle \mathcal{F}, m_{\mathcal{F}}|. \quad (3.28)$$

Ao analisarmos o operador $: \hat{\vec{F}}(x) \cdot \hat{\vec{F}}(x') :$, é simples mostrar que ele está relacionado com o operador $\vec{\mathbf{f}}_1 \cdot \vec{\mathbf{f}}_2$ por

$$: \hat{\vec{F}}(x) \cdot \hat{\vec{F}}(x') : = \sum_{m_1, m_2, m_3, m_4} \hat{\psi}_{m_1}^{\dagger}(x) \hat{\psi}_{m_2}^{\dagger}(x') \langle f, m_1; f, m_2 | \vec{\mathbf{f}}_1 \cdot \vec{\mathbf{f}}_2 | f, m_3; f, m_4 \rangle \hat{\psi}_{m_3}(x) \hat{\psi}_{m_4}(x') \quad (3.29)$$

e, ao escrever $\vec{\mathbf{f}}_1 \cdot \vec{\mathbf{f}}_2$ na base da soma do momento angular de spin, encontramos que (4):

$$: \hat{\vec{F}}(x) \cdot \hat{\vec{F}}(x') : = \sum_{\mathcal{F}} \sum_{m_{\mathcal{F}}} \left[\frac{1}{2} \mathcal{F}(\mathcal{F} + 1) - f(f + 1) \right] \hat{A}_{\mathcal{F}, m_{\mathcal{F}}}^{\dagger}(x, x') \hat{A}_{\mathcal{F}, m_{\mathcal{F}}}(x, x'). \quad (3.30)$$

Para $x = x'$, finalmente concluímos que $: \hat{F}^2(x) :$ se relaciona com $\hat{A}_{\mathcal{F}, m_{\mathcal{F}}}(x, x)$ pela equação:

$$: \hat{F}^2(x) : = \sum_{\mathcal{F}_{\text{par}}} \sum_{m_{\mathcal{F}}} \left[\frac{1}{2} \mathcal{F}(\mathcal{F} + 1) - f(f + 1) \right] \hat{A}_{\mathcal{F}, m_{\mathcal{F}}}^{\dagger}(x, x) \hat{A}_{\mathcal{F}, m_{\mathcal{F}}}(x, x). \quad (3.31)$$

Dadas essas duas relações aqui expostas, uma para $: \hat{n}^2(x) :$ e outra para $: \hat{F}^2(x) :$ (4), mostraremos, na próxima seção, que elas descrevem inteiramente o hamiltoniano de interação $\hat{V}_{\text{int}}$ para partículas com spin $f = 0$ ou 1. Para os casos $f \geq 2$, que não são o foco desse trabalho (devido a maior complexidade e ao fato de que o caso $f = 1$ já engloba boa parte dos efeitos relevantes de um sistema espinorial), é necessário definir o operador *tensor nemático de spin* de posto k , $\hat{\mathcal{N}}_{\nu_1, \nu_2, \dots, \nu_k}^{(k)}(x)$, descrito aqui por razão de completeza. Sua definição é dada pelo seguinte produto matricial

$$\hat{\mathcal{N}}_{\nu_1, \nu_2, \dots, \nu_k}^{(k)}(x) = \hat{\psi}^{\dagger}(x) \mathbf{f}_{\nu_1} \mathbf{f}_{\nu_2} \cdots \mathbf{f}_{\nu_k} \hat{\psi}(x), \quad (3.32)$$

em que os índices do tensor, ν_i , podem ser iguais às direções espaciais x, y ou z . É possível relacionar esse operador com os operadores $\hat{A}_{\mathcal{F}, m_{\mathcal{F}}}(x, x')$ a partir da contração de seus índices desse tensoriais, por um procedimento análogo ao que foi feito com o operador densidade de spin. A relação em questão é:

$$\begin{aligned} \sum_{\nu_1, \nu_2, \dots, \nu_k} : \hat{\mathcal{N}}_{\nu_1, \nu_2, \dots, \nu_k}^{(k)}(x) \hat{\mathcal{N}}_{\nu_1, \nu_2, \dots, \nu_k}^{(k)}(x) : &= \\ &= \sum_{\mathcal{F}_{\text{par}}} \sum_{m_{\mathcal{F}}} \left[\frac{1}{2} \mathcal{F}(\mathcal{F} + 1) - f(f + 1) \right]^k \hat{A}_{\mathcal{F}, m_{\mathcal{F}}}^{\dagger}(x, x) \hat{A}_{\mathcal{F}, m_{\mathcal{F}}}(x, x). \end{aligned} \quad (3.33)$$

3.5 Caso de um Espinor $f = 1$

Por propósitos de simplicidade — e por ser o suficiente para o que será tratado nesta dissertação — iremos tratar, daqui em diante, o caso de um espinor formado por átomos de spin $f = 1$, apenas. Nesse caso, as contribuições do hamiltoniano de interação, $\hat{V}_{\text{int}} = \hat{V}_0 + \hat{V}_2$, resumem-se a

$$\hat{V}_0 = \frac{1}{2} g_0 \int \hat{A}_{0,0}^{\dagger}(x, x) \hat{A}_{0,0}(x, x) dx, \quad (3.34)$$

$$\hat{V}_2 = \frac{1}{2} g_2 \int \sum_{m=-2}^2 \hat{A}_{2,m}^{\dagger}(x, x) \hat{A}_{2,m}(x, x) dx. \quad (3.35)$$

Além disso, os operadores $:\hat{n}^2(x):$ e $:\hat{F}^2(x):$ podem ser escritos, em termos de $\hat{A}_{\mathcal{F},m_{\mathcal{F}}}(x,x)$, como

$$:\hat{n}^2(x): = \hat{A}_{0,0}^\dagger(x,x) \hat{A}_{0,0}(x,x) + \sum_{m=-2}^2 \hat{A}_{2,m}^\dagger(x,x) \hat{A}_{2,m}(x,x), \quad (3.36)$$

$$:\hat{F}^2(x): = -2 \hat{A}_{0,0}^\dagger(x,x) \hat{A}_{0,0}(x,x) + \sum_{m=-2}^2 \hat{A}_{2,m}^\dagger(x,x) \hat{A}_{2,m}(x,x). \quad (3.37)$$

Finalmente, resolvendo o sistema de equações acima, podemos descrever o hamiltoniano de interação de maneira completa em termos dos operadores das grandezas físicas $:\hat{n}^2(x):$ e $:\hat{F}^2(x):$ (4),

$$\hat{V}_{\text{int}} = \frac{1}{2} \int c_0 : \hat{n}^2(x) : + c_1 : \hat{F}^2(x) : dx, \quad (3.38)$$

cujas constantes c_0 e c_1 são expressas por

$$c_0 = \frac{g_0 + 2g_2}{3} \quad \text{e} \quad c_1 = \frac{g_2 - g_0}{3}. \quad (3.39)$$

Portanto, para a interação de contado da Eq. 3.17, verificamos que, no caso de um gás de bósons rarefeito, a energia de interação entre as partículas, escrita inicialmente para cada par, explicita-se por meio de duas grandezas físicas que podem, em princípio, ser relacionadas a propriedades coletivas do sistema: o quadrado da *densidade de número* e o módulo quadrado da *densidade de spin*[‡]. Outro fato que não pode ser ignorado é que os operadores que formam o hamiltoniano de interação $\hat{V}_{\text{int}}$ estão *ordenados normalmente* (seção 2.2), dada ordem dos operadores de criação e destruição na Eq. 3.11.

Assim, pelas propriedades acima, podemos concluir que a interação que estamos tratando conserva o número de partículas (o que, matematicamente, quer dizer que, em cada termo do hamiltoniano, o número de operadores criação é igual ao número de operadores destruição) e que a energia do vácuo é nula (consequência do ordenamento normal).

[‡] Ao realizarmos um paralelo com física de *altas energias e campos*, o termo proporcional ao quadrado da densidade de partículas pode ser relacionado com a primeira aproximação para um *potencial de matéria* $V = V(\psi)$ (sem dependência do spin) para um campo *auto-interagente*. (11) Esse potencial é geralmente chamado de *potencial quártico*, pois $V \sim n^2 \sim |\psi|^4$. O termo dependente da densidade do spin segue a mesma analogia, só que para um campo auto-interagente com interação devido ao spin.

Por completeza, vale citar o caso trivial $f = 0$, que é o de um CBE comum. Nesse caso, basta *anular* todos os termos dependentes do spin e o hamiltoniano de interação que encontramos é

$$\hat{V}_{\text{int}} = \frac{1}{2} \int g_0 : \hat{n}^2(x) : dx. \quad (3.40)$$

Com esse tipo de interação, todas as previsões teóricas *originais* da teoria de Gross-Pitaevskii (9) foram feitas.

Após todas as considerações tratadas aqui, podemos finalmente escrever o hamiltoniano em segunda quantização completo para um gás de bósons rarefeitos com spin $f = 1$:

$$\hat{H} = \int \left\{ \hat{\psi}^\dagger(x) \left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2M} + U_{\text{apr}}(x) - p\mathbf{f}_z + q\mathbf{f}_z^2 \right] \hat{\psi}(x) + \frac{c_0}{2} : \hat{n}^2(x) : + \frac{c_1}{2} : \hat{F}^2(x) : \right\} dx. \quad (3.41)$$

Como última observação, podemos notar que todas as grandezas físicas que formam este hamiltoniano guardam em essência a *estrutura vetorial* do operador de campo. Esse fato, como será mostrado em capítulos posteriores, gera toda a estrutura *simétrica* e *topológica* não triviais dos espinores, motivo pelo qual esse tipo de sistema é importante para compreender as propriedades topológicas da matéria no âmbito da *física atômica* e de todas as suas analogias com outras áreas da física.

4 APROXIMAÇÃO DE CAMPO MÉDIO

Basta uma análise rápida do hamiltoniano encontrado no final do último capítulo (Eq. 3.41) para sabermos que tratar o sistema espinorial de maneira exata (isto é, sem fazermos aproximações), buscando previsões acerca dos estados e observáveis físicos do sistema, é uma tarefa muito complicada para uma situação genérica.

Felizmente, os CBEs são sistemas especiais e com propriedades muito particulares (veja apêndice A). Por isso, há uma aproximação que representa muito bem o sistema físico e que torna seu tratamento muito mais simples. Basta lembrarmos que, na descrição de Einstein, quando a temperatura tende ao *zero absoluto* todas as partículas populam o estado de menor energia do sistema (Fig. 2). A partir disso, podemos assumir que tal propriedade restringe bastante os *estados quânticos de número* (vetores do *espaço de Fock*) em que o sistema pode estar. (4, 12) Ou seja, se os átomos que formam o espinor possuem spin f , é de se esperar que apenas $2f + 1$ estados sejam populados — referentes aos estados de menor energia para cada $|f, m\rangle$. Assim, um estado de N partículas de um espinor (em $T = 0$ K) pode ser escrito como (4):

$$|\zeta\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \left(\sum_{m=-f}^f \zeta_m a_{0,m}^\dagger \right)^N |\emptyset\rangle, \quad (4.1)$$

em que $|\emptyset\rangle$ é o estado de vácuo do espaço de Fock. Para tal estado, considera-se que ao adicionar uma partícula à fase condensada esta possui uma probabilidade $|\zeta_m|^2$ de popular o estado fundamental de $|f, m\rangle$. É importante citar que o valor dessas probabilidades não são conhecidas *a priori* e estão relacionadas pela maneira com que os átomos do sistema interagem entre si e com o ambiente externo (ex.: potencial externo, preparação do estado inicial etc.). Ou seja, essas probabilidades dependem de como os átomos tendem a se arranjar quando populam os $2f + 1$ estados que geram o espinor. Além disso, como $\sum_m |\zeta_m|^2 = 1$, é possível mostrar que $|\zeta\rangle$ é normalizado: $\langle\zeta|\zeta\rangle = 1$.

Uma vez definido o estado que representa efetivamente o sistema físico, nesse caso $|\zeta\rangle$, é possível calcular *médias* a partir dele e assim tirar conclusões acerca dos observáveis físicos do espinor. Tal procedimento é chamado de *aproximação de campo médio* e possui inúmeras aplicações não somente aqui, mas em diversas áreas da física. Nas seções seguintes abordaremos mais a fundo essa aproximação para o caso de um CBE espinorial com $f = 1$.

4.1 Parâmetro de Ordem, Energia Média e Pseudo-spin

O objeto matemático (e físico) utilizado para representar *completamente* um sistema numa aproximação de campo médio é o *parâmetro de ordem*. Nele, fica expressa toda a

informação sobre a transição de fase (condensação de Bose-Einstein, neste caso) e, a partir dele, podemos inferir todas as grandezas físicas *médias* do sistema. Uma maneira de definir o parâmetro de ordem de um condensado espinorial surge da motivação de encontrar qual a *energia média* E do sistema, representado efetivamente pelo estado $|\zeta\rangle$:

$$E = \langle \zeta | \hat{H} | \zeta \rangle. \quad (4.2)$$

Para calcularmos essa média, precisamos primeiro calcular duas relações para o operador de campo (4), dadas por

$$\langle \zeta | \hat{\psi}_{m_1}^\dagger(x_1) \hat{\psi}_{m_2}(x_2) | \zeta \rangle = \psi_{m_1}^*(x_1) \psi_{m_2}(x_2), \quad (4.3)$$

$$\langle \zeta | \hat{\psi}_{m_1}^\dagger(x_1) \hat{\psi}_{m_2}^\dagger(x_2) \hat{\psi}_{m_3}(x_3) \hat{\psi}_{m_4}(x_4) | \zeta \rangle = \left(1 - \frac{1}{N}\right) \psi_{m_1}^*(x_1) \psi_{m_2}^*(x_2) \psi_{m_3}(x_3) \psi_{m_4}(x_4) \quad (4.4)$$

e com as quais *define-se* as $2f + 1$ funções $\psi_m(x)$, escritas como:

$$\psi_m(x) = \sqrt{N} \zeta_m \phi_{0,m}(x). \quad (4.5)$$

Um fato interessante é que tais funções são capazes de descrever completamente todas os valores médios do sistema condensado, pois todas as grandezas físicas (em segunda quantização), quando tomadas em média, podem ser escritas em termos das duas relações dadas pelas Eqs. 4.3 e 4.4. Assim, por representar o sistema físico como um todo nessa situação, é natural definir tais funções como componentes do parâmetro de ordem (vetorial) para um condensado de Bose-Einstein espinorial, que denotaremos por $\boldsymbol{\psi}(x)$. Logo, a energia média E pode ser escrita em termos de $[\boldsymbol{\psi}(x)]_m = \psi_m(x)$, para $N \gg 1$ e $f = 1$, como

$$E = \int \boldsymbol{\psi}^\dagger(x) \left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2M} + U_{\text{apr}}(x) - p\mathbf{f}_z + q\mathbf{f}_z^2 \right] \boldsymbol{\psi}(x) + \frac{c_0}{2} n^2(x) + \frac{c_1}{2} \vec{F}^2(x) dx, \quad (4.6)$$

tal que $n(x)$ e $\vec{F}(x)$ referem-se às grandezas discutidas nas seções anteriores ao tomarmos suas médias no estado quântico $|\zeta\rangle$:

$$n(x) = \langle \zeta | \hat{n}(x) | \zeta \rangle = \boldsymbol{\psi}^\dagger(x) \boldsymbol{\psi}(x), \quad (4.7)$$

$$\vec{F}(x) = \langle \zeta | \hat{\vec{F}}(x) | \zeta \rangle = \boldsymbol{\psi}^\dagger(x) \vec{\mathbf{f}} \boldsymbol{\psi}(x) \quad (4.8)$$

e são denominadas *média da densidade de número de partículas* e *média da densidade de spin*, respectivamente.

Agora, para compreendermos melhor a interpretação física do parâmetro de ordem, abordaremos algumas das suas propriedades. Pela Eq. 4.7 é possível inferir que o parâmetro de ordem é normalizado pelo número de partículas do condensado, ou seja,

$$\int \boldsymbol{\psi}^\dagger(x) \boldsymbol{\psi}(x) dx = N, \quad (4.9)$$

e cada uma de suas componentes $\psi_m(x)$ são normalizadas pelo número *médio* de partículas nos estados de spin $|f, m\rangle$, o que quer dizer

$$\int \psi_m^*(x) \psi_m(x) dx = \int \langle \zeta | \hat{\psi}_m^\dagger(x) \hat{\psi}_m(x) | \zeta \rangle dx = \int \langle \zeta | \hat{n}_m(x) | \zeta \rangle dx = N_m. \quad (4.10)$$

Pela definição do parâmetro de ordem (Eq. 4.5), é possível concluir que a probabilidade $|\zeta_m|^2$, discutida anteriormente, pode ser representada por N_m , da seguinte maneira:

$$|\zeta_m|^2 = \frac{N_m}{N}. \quad (4.11)$$

Além das condições de normalização vistas acima, é possível verificar que o parâmetro de ordem vetorial $\boldsymbol{\psi}(x)$ satisfaz a álgebra dos estados de spin e, por sua vez, pertence ao espaço vetorial da representação de spin f do grupo SU(2) (14). Tal afirmação pode parecer um tanto técnica, mas, em essência, ela simplesmente quer dizer que uma grandeza como $\vec{F}(x) = \boldsymbol{\psi}^\dagger(x) \vec{\mathbf{f}} \boldsymbol{\psi}(x)$ sempre guarda sentido matemático claro. Logo, é natural a associação de cada uma das funções $\psi_m(x)$ com um estado de spin específico e defini-las como componentes de $\boldsymbol{\psi}(x)$ na base $\{|f, m\rangle\}_{m=-f \dots f}$. Ou seja*,

$$\boldsymbol{\psi}(x) = \sum_m \psi_m(x) |f, m\rangle. \quad (4.12)$$

Outra boa propriedade de $\boldsymbol{\psi}(x)$ é a de possuir estrutura de *função de onda* de uma *única* partícula quântica de spin f , apesar de ser normalizada por N (fato que fica

* Nas equações a seguir, ignoramos brevemente a regra da notação “negrito = matriz” por motivos didáticos, apenas para *explicitar* que $\boldsymbol{\psi}$ satisfaz a álgebra dos estados de spin.

evidente na Eq. 4.6). Se redefinirmos a normalização de ψ pela *unidade* e tomarmos o caso em que ψ_m é *constante*, é possível encontrar

$$\psi = \sum_m \sqrt{\frac{N_m}{N}} |f, m\rangle. \quad (4.13)$$

Um estado quântico de uma única partícula, análogo ao acima, pode ser escrito como

$$|\psi\rangle = \sum_m C_m |f, m\rangle. \quad (4.14)$$

Do ponto de vista conceitual, deixando de lado o número de partículas que cada um dos estados representa, a origem das constantes C_m é diferente das constantes $\sqrt{N_m/N}$. A primeira surge da natureza *probabilística* intrínseca da mecânica quântica, em que a probabilidade de se encontrar a partícula no estado $|f, m\rangle$ é simplesmente $|C_m|^2$. Já no caso da segunda, a constante $\sqrt{N_m/N}$ é proveniente de um *estado médio*, uma vez que N_m é caracterizado por uma *média*. Por conta disso, não é possível afirmar que N_m/N seja exatamente a probabilidade de encontrarmos uma partícula do condensado no estado $|f, m\rangle$, dado que isso somente pode ser obtido pelo estado quântico $|\zeta\rangle$. Contudo, quando a lei dos *grandes números* é válida, $N \gg 1$, é possível mostrar que tal probabilidade se torna $|\zeta_m|^2 = N_m/N$. Ou seja, o parâmetro de ordem é capaz de retornar as *probabilidades* dos estados de spin no regime de muitas partículas. Contudo, quando as retorna, sua construção ignora todas as combinações de estados de N partículas possíveis (que seriam obtidas em $|\zeta\rangle$), pois ψ possui estrutura de uma função de onda de uma *única* partícula.

Assim, é necessário distinguir as propriedades *tipo-spin* do parâmetro de ordem e da função de onda, pois elas não possuem mesma natureza apesar da estrutura muito similar. Dessa necessidade, surge o conceito do *pseudo-spin*, que é a denominação dada para qualquer propriedade quântica análoga ao spin que parâmetro de ordem $\psi(x)$ venha a possuir. Ou seja, de agora em diante, as funções $\psi_m(x)$ do parâmetro de ordem serão referidas como componentes de estados de *pseudo-spin* (e não de *spin*).

4.2 Dinâmica do Parâmetro de Ordem

É amplamente sabido na literatura que, para qualquer sistema quântico, seja ele de uma ou de muitas partículas, existem estados quânticos de energia definida. Também é sabido que uma combinação linear desses devolve um outro estado quântico legítimo e, possivelmente, arbitrário. A *equação de Schrödinger* rege a dinâmica temporal desses estados:

$$\hat{H}|\psi\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle \quad (4.15)$$

Portanto, a dinâmica dos estados quânticos de um CBE espinorial (como $|\zeta\rangle$) sempre segue a equação acima. Se $|\psi\rangle$ for um estado de energia definida E_ψ , ele vai ser um autoestado do operador $\hat{H}$, $\hat{H}|\psi\rangle = E_\psi|\psi\rangle$, e a evolução temporal dele é regida por essa energia:

$$|\psi\rangle_t = e^{-iE_\psi t/\hbar}|\psi\rangle_0. \quad (4.16)$$

Assim, de maneira alternativa, podemos definir a aproximação de campo médio para os CBEs espinoriais ao *aproximar* o estado $|\zeta\rangle$ por um autoestado de energia E (Eq. 4.6), em que o sistema espinorial estabelece-se a temperatura nula. Das médias das grandezas físicas para esse estado surge o conceito de parâmetro de ordem, que apresenta características similares e distintas da função de onda do sistema. Apesar das distinções, o parâmetro de ordem é o objeto matemático mais importante ao descrever os CBEs espinoriais em média e, assim, conhecer sua evolução temporal acarreta conhecer a evolução do sistema condensado como um todo. Contudo, a equação de Schrödinger, da maneira como explicitada na Eq. 4.15, descreve *dinâmica* de um estado quântico como $|\zeta\rangle$, e não do parâmetro de ordem. Logo, é necessário abordar a dinâmica de ψ de outra maneira. Existem muitos métodos para introduzir a dinâmica do parâmetro de ordem na literatura. (4, 15) Aqui, escolhemos tratá-la a partir da *teoria clássica de campos*. (16)

Nesse contexto, um fato importante que ainda não foi discutido acerca da energia média E dos espinores é que a mesma define um *funcional* do parâmetro de ordem $\psi(x)$ e de seu complexo conjugado $\psi^\dagger(x)$. Em outras palavras, para a teoria de *campo médio* aqui abordada, o parâmetro de ordem pode ser interpretado como um *campo clássico*. Logo, o sistema espinorial, nessa aproximação, pode ser tratado como qualquer outro descrito pela *teoria clássica de campos*. Tendo isso em mente, se desejamos encontrar a equação que descreve a dinâmica do parâmetro de ordem, primeiro precisamos encontrar a *lagrangiana* desse campo.

Como motivação, podemos tomar como ponto de partida o caso da função de onda de uma única partícula. A equação de Schrödinger, nesse caso, é

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = H(x) \psi(x, t), \quad (4.17)$$

em que $H(x)$ é o operador hamiltoniano em primeira quantização. Algo que geralmente não é muito abordado em mecânica quântica (talvez por estar fora do escopo da maioria dos trabalhos científicos e didáticos) é que, na representação da posição, é possível construir uma *lagrangiana* L para a função de onda, que, pelo *princípio de Hamilton* (também conhecido como princípio da *extremização da ação* $S = \int L(t)dt$), devolve a equação de

Schrödinger. Tal lagrangiana pode ser escrita como

$$L(t) = \int \frac{i\hbar}{2} \left(\psi^* \frac{\partial}{\partial t} \psi - \psi \frac{\partial}{\partial t} \psi^* \right) - \psi^* H \psi \, dx. \quad (4.18)$$

Não é difícil perceber que o termo $\int \psi^* H \psi \, dx$ pode ser interpretado como o *valor esperado* da energia da partícula quântica, muito semelhante ao obtido anteriormente para a energia média E do espinor (Eq. 4.6). Além disso, pelo fato da estrutura do parâmetro de ordem ser *muito similar* ao de uma função de onda de uma *única partícula*, é razoável esperar que a dinâmica de ambas sejam similares também. Por isso, podemos *impor* que a lagrangiana para $\psi(x, t)$ seja:

$$L(t) = \int \frac{i\hbar}{2} \left(\psi^\dagger \frac{\partial}{\partial t} \psi - \psi^T \frac{\partial}{\partial t} \psi^* \right) dx - E. \quad (4.19)$$

Aqui, explicitamos a dependência temporal do parâmetro de ordem pelo fato de não podemos impor que sua dinâmica seja trivial sempre: $\psi(x, t) = \psi(x) e^{-i\omega t}$ (4, 15). Isso é verdade pois, apesar da sua definição (Eq. 4.5) poder guardar tal *trivialidade* com ζ_m (em princípio, uma constante) e com $\phi_{0,m}(x)$ (uma *autofunção* para o estado de uma partícula), por se tratar de um estado *coletivo* médio, ambos podem adquirir dinâmicas não-triviais. Ou seja, pelo fato do parâmetro de ordem descrever aproximadamente todas as partículas do condensado, ignorando os diferentes estados e configurações descritos em $|\zeta\rangle$, tal aproximação faz com que $\phi_{0,m}(x, t)$ perca o caráter de autofunção e evolua de maneira distinta da esperada ($\phi_{0,m}(x, t) = \phi_{0,m}(x) e^{-i\omega_{0,m}t}$), assim como ζ_m , que deixa de ser uma constante e passa a evoluir no tempo.

A ação do parâmetro de ordem do espinor pode ser escrita, para spin $f = 1$, como:

$$\begin{aligned} S &= \int \frac{i\hbar}{2} \left[\psi^\dagger \frac{\partial}{\partial t} \psi - \psi^T \frac{\partial}{\partial t} \psi^* \right] - \psi^\dagger \left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2M} + U_{\text{apr}} - p\mathbf{f}_z + q\mathbf{f}_z^2 \right] \psi \, dx \, dt \\ &- \int \frac{c_0}{2} n^2 + \frac{c_1}{2} \vec{F}^2 \, dx \, dt \end{aligned} \quad (4.20)$$

e, pelo princípio de Hamilton, a equação dinâmica para o parâmetro de ordem do sistema pode ser obtida ao extremizar a ação S em termos de ψ e de $\psi^\dagger$. Pelas propriedades do *cálculo variacional* (16), o funcional ação $S[\psi, \psi^\dagger]$ é extremizado quando as *derivadas variacionais*[†] são nulas, ou seja:

[†] Detalhes acerca desse tipo de derivada e seu cálculo são encontrados na Ref. (16).

$$\frac{\delta S}{\delta \psi_m} = 0 \text{ e } \frac{\delta S}{\delta \psi_m^*} = 0 \quad (4.21)$$

para cada $m = -f, \dots, f$. Tomando a segunda condição acima, gera-se $2f + 1 = 3$ equações acopladas para as componentes do parâmetro de ordem, que podem ser escritas em notação matricial por (4, 9, 15):

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2M} + U_{\text{apr}} - p\mathbf{f}_z + q\mathbf{f}_z^2 + c_0 n + c_1 \vec{F} \cdot \vec{\mathbf{f}} \right] \psi. \quad (4.22)$$

A equação acima é chamada de *equação de Gross-Pitaevskii* (EGP) para um espinor $f = 1$ e é a mais importante na descrição de campo médio dos CBEs espinoriais. Com ela é possível abordar a maior parte das propriedades existentes da fase condensada do sistema, como o perfil espacial da densidade de número e outras propriedades de natureza *hidrodinâmica*, abordadas no capítulo 7. Uma observação importante pode ser feita ao tomarmos o caso mais conhecido de uma EGP, para um CBE comum ($f = 0$), dado por (15):

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2M} + U_{\text{apr}} + g_0 |\psi|^2 \right] \psi. \quad (4.23)$$

Por ser mais simples, é possível concluir (mais rapidamente do que no caso $f = 1$) que a EGP é meramente uma equação de Schrödinger com termos *não lineares* do parâmetro de ordem. Ou seja, em ambos casos ($f = 0$ ou 1), as boas propriedades de *linearidade* e *sobreposição* de estados quânticos não aparecem na EGP. Na verdade, isso é o esperado, pois, por caracterizar um estado *médio* (isto é, com a sobreposição de estados já tomada em média na estrutura de ψ), o parâmetro de ordem não precisa ser capaz de se *sobrepor* a outro (ao menos de maneira linear). Além disso, a *não-linearidade* é uma consequência direta do parâmetro de ordem ser um campo clássico *auto-interagente*.

A EGP, como mostrada anteriormente, é capaz de descrever uma dinâmica genérica de um espinor. Contudo, existe o caso da dinâmica estacionária, que é importante por descrever a distribuição de *equilíbrio* do sistema:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = 0. \quad (4.24)$$

Por tratar-se de uma situação de equilíbrio do sistema, e pelo fato dos CBEs, quando em equilíbrio, serem descritos pelo *grande potencial da termodinâmica* Ξ em modelos

estatísticos (13), podemos utilizá-lo para encontrar o parâmetro de ordem do sistema nessa situação. Tal potencial é definido pela seguinte transformação de Legendre:

$$\Xi = E - T\mathcal{S} - \mu N, \quad (4.25)$$

em que $\mathcal{S}$ é a entropia e μ , o potencial químico do sistema. Pelo fato de estarmos tratando o sistema em temperatura nula, Ξ reduz-se a

$$\Xi = E - \mu N, \quad (4.26)$$

o que mostra que essa grandeza é um *funcional* para o parâmetro de ordem. Seguindo o critério de Ginzburg-Landau para uma transição de fase (13), o parâmetro de ordem que representa o condensado é aquele que *extremiza* Ξ . Seguindo os mesmos princípios matemáticos utilizados para extremizar a ação S anteriormente, a extremização de Ξ retorna

$$\left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2M} + U_{\text{apr}} - p\mathbf{f}_z + q\mathbf{f}_z^2 + c_0 n + c_1 \vec{F} \cdot \vec{\mathbf{f}} \right] \psi = \mu \psi, \quad (4.27)$$

que é a equação de Gross-Pitaevskii para o caso estacionário e, como consequência, a evolução temporal do parâmetro de ordem é a trivial, regida pela frequência $\mu/\hbar$:

$$\psi(x, t) = \psi(x) e^{-i\mu t/\hbar}. \quad (4.28)$$

Impondo explicitamente a representação matricial dos operadores de spin para $f = 1$ (4)

$$\mathbf{f}_x = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{f}_y = \frac{i}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{f}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (4.29)$$

as componentes da média da densidade de spin $\vec{F}$ são expressas por:

$$F_x = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\psi_1^* \psi_0 + \psi_0^* (\psi_1 + \psi_{-1}) + \psi_{-1}^* \psi_0 \right], \quad (4.30)$$

$$F_y = \frac{i}{\sqrt{2}} \left[-\psi_1^* \psi_0 + \psi_0^* (\psi_1 - \psi_{-1}) + \psi_{-1}^* \psi_0 \right], \quad (4.31)$$

$$F_z = |\psi_1|^2 - |\psi_{-1}|^2. \quad (4.32)$$

Dessa maneira, as 3 equações acopladas ($m = 1, 0, -1$) que formam a equação matricial de Gross-Pitaevskii no caso estacionário (Eq. 4.27) reduzem-se a (4):

$$\left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2M} + U_{\text{apr}} - p + q + c_0 n + c_1 F_z - \mu \right] \psi_1 + \frac{c_1}{\sqrt{2}} F_- \psi_0 = 0, \quad (4.33)$$

$$\frac{c_1}{\sqrt{2}} F_+ \psi_1 + \left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2M} + U_{\text{apr}} + c_0 n - \mu \right] \psi_1 + \frac{c_1}{\sqrt{2}} F_- \psi_{-1} = 0, \quad (4.34)$$

$$\frac{c_1}{\sqrt{2}} F_+ \psi_0 + \left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2M} + U_{\text{apr}} + p + q + c_0 n - c_1 F_z - \mu \right] \psi_{-1} = 0, \quad (4.35)$$

em que $F_{\pm} \equiv F_x \pm iF_y$.

5 ESTADOS DE UM CONDENSADO ESPINORIAL UNIFORME

Existe uma importante classe de estados do parâmetro de ordem de um CBE espinorial: os estados *uniformes*. (4) Como o próprio nome já sugere, um *condensado uniforme* é aquele cujo parâmetro de ordem é uma *constante* em todo espaço e representa um estado *estacionário*. Em outras palavras, ψ pode ser escrito como:

$$\psi = \sqrt{\frac{N}{\Omega}} \zeta, \quad (5.1)$$

em que $\zeta = (\zeta_f, \dots, \zeta_{-f})^T$ e Ω é o volume no qual o condensado está contido. Da simplicidade do parâmetro de ordem, é possível encontrar os possíveis estados *fundamentais* do sistema, os quais descrevem as características mais *básicas* dos CBEs espinoriais (em analogia, principalmente, com materiais de propriedades *magnéticas*) e simplificam o tratamento dos seus *estados excitados quânticos*, como será visto no próximo capítulo ao abordar a teoria de Bogoliubov (5) aplicada a esse tipo de sistema.

Dada a estrutura de ψ para um condensado uniforme, os valores possíveis de ζ ($f = 1$) são encontrados a partir da sua EGP (4):

$$\left[-p\mathbf{f}_z + q\mathbf{f}_z^2 + c_1 n \vec{f} \cdot \vec{f} \right] \zeta = \tilde{\mu} \zeta, \quad (5.2)$$

em que $n = N/\Omega$ é a densidade de número *uniforme*, $\vec{f} = \zeta^\dagger \vec{\mathbf{f}} \zeta$ é o spin médio por partícula e $\tilde{\mu} = \mu - c_0 n$ é o potencial químico ajustado pela *interação* que não depende do spin. Aqui, considerou-se, sem perda de generalidade, que o potencial de aprisionamento U_{apr} é nulo. Isso é possível, pois ψ constante acarreta automaticamente U_{apr} constante. Logo, esse potencial apresenta-se apenas como uma energia de *ponto zero*, que não influencia a estrutura final de ζ . Além da EGP, a energia média por partícula ε , nesse caso (4), é:

$$\varepsilon = \zeta^\dagger \left(-p\mathbf{f}_z + q\mathbf{f}_z^2 \right) \zeta + \frac{c_0 n}{2} + \frac{c_1 n |\vec{f}|^2}{2}. \quad (5.3)$$

Como o sistema que está sendo tratado é estático, podemos escolher o eixo z como aquele sobre o qual a interação magnética é simétrica (i.e., eixo com a direção e sentido do campo magnético). Além disso, dada essa *simetria axial*, é possível escolhermos, sem perda de generalidade: $f_y = 0$, o que gera um vínculo para ζ . (4) Isso é equivalente a dizer que, se houver alguma componente de $\vec{f}$ fora do eixo z , os potenciais aplicados no sistema são simétricos o suficiente para podermos rotacionar o sistema de coordenadas de modo a

$\vec{f}$ pertencer ao plano x - z . Ao ajustar a *fase* global do parâmetro de ordem, podemos tomar $\zeta_0 \in \mathbb{R}$, o que automaticamente implica: $\text{Im}[\zeta_1] = \text{Im}[\zeta_{-1}] = \delta$. Dadas essas considerações, a EGP retorna três equações vinculadas para as componentes de ζ (4)

$$(-p + q + c_1 n f_z - \tilde{\mu})\zeta_1 + c_1 n (\zeta_1^R + \zeta_{-1}^R) \zeta_0^2 = 0, \quad (5.4)$$

$$[\tilde{\mu} - c_1 n (\zeta_1^R + \zeta_{-1}^R) (\zeta_1^R + \zeta_{-1}^R + 2i\delta)] \zeta_0 = 0, \quad (5.5)$$

$$c_1 n (\zeta_1^R + \zeta_{-1}^R) \zeta_0^2 + (p + q - c_1 n f_z - \tilde{\mu})\zeta_{-1} = 0, \quad (5.6)$$

em que $\zeta_{\pm 1}^R = \text{Re}[\zeta_{\pm 1}]$. Ao observar a Eq. 5.5, nota-se duas situações de solução distintas: uma com $\zeta_0 = 0$ e outra com $\tilde{\mu} = c_1 n (\zeta_1^R + \zeta_{-1}^R) (\zeta_1^R + \zeta_{-1}^R + 2i\delta)$. A partir delas conseguimos encontrar todos os *cinco* estados uniformes e estacionários de um espinor $f = 1$.

5.1 Estados Ferromagnéticos

Materiais ferromagnéticos são geralmente associados a conjuntos de spins, tal como no modelo de Ising tradicional (13), e esses se alinham *completamente* a favor ou contra o campo magnético em temperatura *nula*, o que provoca a máxima *magnetização* do sistema. Ao tomarmos o caso $\zeta_0 = 0$, as Eqs. 5.4 e 5.6 mostram que é possível termos dois estados *magnetizados completamente*. O primeiro é caracterizado por $\zeta_{-1} = 0$ e, portanto, pode ser escrito como (4):

$$\zeta = e^{ix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}^T. \quad (5.7)$$

A esse estado é dado o nome de *ferromagnético positivo*, pois a magnetização é máxima, $|\vec{f}| = |f_z| = 1$, e se dá a favor do campo magnético, $f_z = 1$. A energia por partícula nesse caso é (4):

$$\varepsilon = -p + q + \frac{c_0 n}{2} + \frac{c_1 n}{2}. \quad (5.8)$$

Já o segundo estado é caracterizado por $\zeta_1 = 0$. Análogo ao caso ferromagnético positivo, temos (4):

$$\zeta = e^{ix} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}^T \quad \text{e} \quad \varepsilon = p + q + \frac{c_0 n}{2} + \frac{c_1 n}{2}. \quad (5.9)$$

Esse estado é chamado de *ferromagnético negativo*, pois possui magnetização máxima e oposta ao campo magnético, $f_z = -1$.

5.2 Estado Antiferromagnético

Similarmente ao que ocorre num ferromagneto, num *antiferromagneto*, os spins que formam material tendem a se alinhar completamente com o campo magnético em temperatura nula. Contudo, a interação entre seus spins faz com que eles tendam a se dispor de maneira *antiparalela* em relação a seus vizinhos mais próximos, o que, em geral, diminui a magnetização resultante do material. (13) Assim, para aumentar a magnetização total é necessário que se aumente a intensidade do campo magnético nele aplicado.

Curiosamente, os CBEs espinoriais conseguem comportar um estado que guarda muita similaridade com essa classe de materiais. Tal estado surge diretamente do caso em que $\zeta_0 = 0$, $\zeta_1 \neq 0$ e $\zeta_{-1} \neq 0$, e é dado por (4):

$$\zeta = \left(e^{\chi_1} \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 + \frac{p}{c_1 n} \right)} \quad 0 \quad e^{\chi_{-1}} \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 - \frac{p}{c_1 n} \right)} \right)^T. \quad (5.10)$$

Ao analisar $\vec{f}$ é possível ver que sua única componente não nula é f_z , o que diz que, em média, os spins das partículas que formam o condensado estão ordenados e alinhados com o campo magnético. Contudo, essa magnetização não é *máxima*, pois

$$-1 < f_z = \frac{p}{c_1 n} < 1. \quad (5.11)$$

Ou seja, existe um grau de configuração *antiparalela* entre os spins, que é alterado somente pelo aumento (linear, nesse caso) da intensidade do campo magnético aplicado no espinor. A energia por partícula desse estado é

$$\varepsilon = q + \frac{c_0 n}{2} - \frac{p^2}{2c_1 n}. \quad (5.12)$$

5.3 Estados Polar e de Quebra de Simetria Axial

Agora, abordaremos mais dois estados uniformes e estacionários do parâmetro de ordem, os quais surgem a partir da relação $\tilde{\mu} = c_1 n \left(\zeta_1^R + \zeta_{-1}^R \right) \left(\zeta_1^R + \zeta_{-1}^R + 2i\delta \right)$: os estados *polar* e de *quebra de simetria axial*. Como $\tilde{\mu} \in \mathbb{R}$, temos que $\delta = 0$. Logo: $\zeta_1, \zeta_{-1} \in \mathbb{R}$.

O estado *polar* é o primeiro aqui tratado com spin médio por partícula $\vec{f}$ identicamente *nulo*, independente do campo magnético nele aplicado. Tal estado é o que mais se

aproxima do caso de um condensado comum, pois toda dependência de c_1 desaparece de suas grandezas físicas. Ele surge ao se impor $\zeta_1 = \zeta_{-1} = 0$ e pode ser escrito como (4)

$$\boldsymbol{\zeta} = e^{i\chi} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}^T. \quad (5.13)$$

A energia média por partícula desse estado é dada simplesmente por

$$\varepsilon = \frac{c_0 n}{2} \quad (5.14)$$

e, além de não depender de c_1 , tal estado é completamente *independente* do campo magnético.

O estado de *quebra de simetria axial* (QSA) é o mais distinto de todos tratados até agora. Como seu nome já sugere, ele quebra *explicitamente* a simetria axial do sistema, $SO(2)$, pelo fato de $f_x \neq 0$. O parâmetro de ordem para esse estado surge ao supor que todas as componentes de $\boldsymbol{\zeta}$ são diferentes de zero e ele é dado por (4, 17)

$$\zeta_{\pm 1} = e^{i(\chi_0 \mp \chi_z)} \frac{q \pm p}{2q} \sqrt{\frac{-p^2 + q^2 + 2c_1 n q}{2c_1 n q}}, \quad (5.15)$$

$$\zeta_0 = e^{i\chi_0} \sqrt{\frac{(q^2 - p^2)(-p^2 - q^2 + 2c_1 n q)}{4c_1 n q^3}}, \quad (5.16)$$

tal que os termos dentro das raízes quadradas devem ser sempre positivos (condição $\tilde{\mu} \in \mathbb{R}$). As fases adicionadas nas componentes de $\boldsymbol{\zeta}$ surgem ao rotacionarmos o sistema: χ_0 é uma fase arbitrária global e χ_z é originário de uma rotação sobre o eixo z ($\mathbf{R}_z(\chi_z) = e^{-i\mathbf{f}_z \chi_z}$). A energia média por partícula do estado QSA é

$$\varepsilon = \frac{(-p^2 + q^2 + 2c_1 n q)^2}{8c_1 n q^2} + \frac{c_0 n}{2} \quad (5.17)$$

e, ao compará-la com as outras energias do sistema, é possível mostrar que esse estado poderá ser o *fundamental* para alguma região do espaço de configuração (q, p) somente se c_1 for *negativo*. (4)

5.4 Diagrama de Fases e Representação Gráfica de um CBE Espinorial Uniforme

Uma vez encontradas as cinco classes de estados possíveis para o parâmetro de ordem de um CBE espinorial, uniforme e estacionário, é possível analisar as energias encontradas no espaço de parâmetros (q, p) e determinar qual classe representa o estado

fundamental em cada um desses pontos. Supondo que o condensado sempre permaneça em sua configuração de menor energia, os trabalhos das referências (4,18) mostram *três* diagramas de fase possíveis, um para cada situação de c_1 : positivo, negativo ou nulo (Fig. 4). Nesses diagramas, fica claro que os estados ferromagnéticos e polar são possíveis seja qual for o valor de c_1 . Já os estados antiferromagnético e QSA podem ocorrer apenas quando tem-se, respectivamente, $c_1 > 0$ e $c_1 < 0$.

Figura 4 – Diagramas de fase para um CBE uniforme e estacionário ($f = 1$) para (a) $c_1 > 0$, (b) $c_1 = 0$ e (c) $c_1 < 0$. I, II, III, IV, V relacionam-se respectivamente aos estados ferromagnético positivo, ferromagnético negativo, antiferromagnético, polar e QSA. A área hachurada em cinza indica os estados que *quebram* a simetria axial SO(2) do sistema.

Fonte: KAWAGUCHI; UEDA. (4)

Uma discussão interessante desses trabalhos é que, além do estado QSA, o estado *antiferromagnético* quebra a simetria axial SO(2) do sistema, apesar de $f_x = f_y = 0$. Isso acontece nesse caso, pois a quebra de simetria SO(2) é dada pelo tensor nemático de spin médio de posto 2: $\mathcal{N}_{\nu_1, \nu_2} = \langle \zeta | \hat{\mathcal{N}}_{\nu_1, \nu_2} | \zeta \rangle$. (4) Com o parâmetro de ordem encontrado para o estado antiferromagnético (Eq. 5.10), é possível calcular $\mathcal{N}_{x,x}$ e $\mathcal{N}_{y,y}$ (supondo $\chi_1 = \chi_{-1} = 0$), os quais são dados por

$$\mathcal{N}_{x,x} = \frac{n}{2} \left(1 + \sqrt{1 - \left(\frac{p}{c_1 n} \right)^2} \right), \quad (5.18)$$

$$\mathcal{N}_{y,y} = \frac{n}{2} \left(1 - \sqrt{1 - \left(\frac{p}{c_1 n} \right)^2} \right). \quad (5.19)$$

Quando um sistema tem simetria axial — sobre o eixo z , por exemplo —, isso quer dizer que todas as propriedades relacionadas a direções ortogonais ao eixo de simetria devem ser indistintas; caso contrário, a simetria é desfeita. Em outras palavras, uma vez definidos os eixos x e y , podemos tomar uma grandeza relacionada a tais direções, digamos A_x e A_y . Portanto, se o sistema possui simetria axial, deve-se sempre obter $A_x = A_y$ (direções

intercambiáveis). Contudo, se identificarmos $\mathcal{N}_{x,x} = A_x$ e $\mathcal{N}_{y,y} = A_y$, vê-se claramente que a simetria $SO(2)$ é quebrada nesse estado.

Uma representação gráfica muito útil para a visualização das cinco classes de estados aqui discutida é a dos *harmônicos esféricos*: $Y_{f,m}(\theta, \varphi)$. Para essa representação basta identificar cada elemento da base do espaço dos estados de pseudo-spin $|f, m\rangle$ com os harmônicos esféricos $Y_{f,m}$. Assim, em vez da representação *matricial*, obtém-se

$$\zeta(\theta, \varphi) = \sum_m \zeta_m Y_{1,m}(\theta, \varphi). \quad (5.20)$$

Ao levantar o gráfico de cada um dos parâmetros de ordem obtidos anteriormente, encontra-se as imagens contidas na Fig. 5.

Figura 5 – Representação em harmônicos esféricos dos cinco estados possíveis de um CBE espinorial, uniforme e estacionário. I, II, III, IV, V relacionam-se respectivamente aos estados ferromagnético positivo, ferromagnético negativo, antiferromagnético, polar e QSA.

Fonte: KAWAGUCHI; UEDA. (4)

Como conclusão, é importante destacar também os condensados produzidos experimentalmente, por exemplo, em sistemas com átomos de rubídio (^{87}Rb) e de sódio (^{23}Na). Quando preparados nos estados com spin $f = 1$, eles formam um condensado espinorial. Por meio de uma variedade técnicas experimentais (destacadas em mais detalhe na Ref. (4)), é possível encontrar os comprimentos de espalhamento a_0 e a_2 , que geram os coeficientes c_0 e c_1 (mais detalhes no Cap. 3). Essas grandezas estão listadas para os átomos de rubídio e sódio ($f = 1$) na tabela 1. Assim, podemos analisar em mais detalhes quais *estados uniformes* são permitidos para os condensados ($f = 1$) de ^{87}Rb e ^{23}Na . De acordo com o diagrama de fases da Fig. 4, os estados ferromagnéticos (positivo e negativo) e polar são permitidos em condensados uniformes de *ambos* os átomos. Como $c_1 > 0$ no caso do ^{23}Na , é esperado que o estado antiferromagnético seja *permitido* (19) e que o estado QSA não seja permitido. (4) No caso do ^{87}Rb ($c_1 < 0$), o *contrário* é esperado. (4)

Tabela 1 – Lista dos valores experimentais dos comprimentos de espalhamento a_0 e a_2 para condensados ($f = 1$) de átomos de ^{87}Rb e ^{23}Na em termos do *raio de Bohr* $r_0 \simeq 0,54 \times 10^{-10} m$. Os valores de a_0 , a_2 e $a_2 - a_1$ são retirados da Ref. (4). Os valores dos coeficientes c_0 e c_1 (Cap. 3) são *estimativas* calculadas a partir dos valores experimentais dos comprimentos de espalhamento.

	^{87}Rb	^{23}Na
a_0	$(101,8 \pm 0,2) \times r_0$	$(47,36 \pm 0,80) \times r_0$
a_2	$(100,4 \pm 0,1) \times r_0$	$(52,98 \pm 0,40) \times r_0$
$a_2 - a_1$	$(-1,07 \pm 0,09) \times r_0$	$(2,47 \pm 0,27) \times r_0$
c_0	$\simeq 0,217 \text{ eV } r_0^3$	$\simeq 0,416 \text{ eV } r_0^3$
c_1	$\simeq -7,67 \times 10^{-4} \text{ eV } r_0^3$	$\simeq 6,70 \times 10^{-3} \text{ eV } r_0^3$

Fonte: Elaborada pelo autor.

6 A TEORIA DE BOGOLIUBOV

Para conhecermos completamente um sistema quântico é evidente que, além do estado fundamental, precisamos conhecer os seus estados excitados. No contexto da condensação de Bose-Einstein, os Caps. 4 e 5 deixam claro que o parâmetro de ordem do sistema está restrito a descrever apenas os estados *coletivos* das partículas no *estado fundamental*. Nesse sentido, o parâmetro de ordem não é capaz de descrever flutuações quânticas do sistema que envolvem os seus *estados excitados* (i.e., aqueles que não formam a fase condensada). Assim, podemos nos perguntar:

Quais são os estados excitados quânticos referentes a um dado parâmetro de ordem?

Ao tomar um parâmetro de ordem geral, encontrar os estados excitados quânticos não é uma tarefa trivial. Apesar desse fato, neste trabalho de mestrado buscamos um método para encontrar os estados excitados quânticos de parâmetros de ordem com propriedades simétricas e topológicas não triviais (Cap. 10). Como motivação para as ideias que abordaremos mais adiante é importante destacar o método para encontrar os estados excitados quânticos de parâmetros de ordem *uniformes* (como os discutidos no capítulo anterior), dado que esse método é consideravelmente mais simples do que o do caso geral.

Para um condensado uniforme, toda a interação do condensado não depende da posição. Assim, espera-se que a representação mais *conveniente* para o operador de campo $\hat{\psi}_m(x)$ seja dada por uma superposição de *ondas planas* (como na descrição de partículas livres). Ou seja,

$$\hat{\psi}_m(\vec{x}) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} a_{\vec{k},m}. \quad (6.1)$$

Note que a indexação dos estados é dada pelo vetor de onda $\vec{k}$ (i.e., $(i, m) \rightarrow (\vec{k}, m)$) e que, por sua vez, o estado fundamental é dado por $k = 0$. Assim, o hamiltoniano completo do sistema (“condensado” + “estados excitados”) pode ser escrito como $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}_{\text{int}}$ que, no caso $f = 1$, é (4)

$$\hat{H}_0 = \sum_{\vec{k},m} \left(\frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2M} - pm + qm^2 \right) \hat{n}_{\vec{k},m}, \quad (6.2)$$

$$\hat{V}_{\text{int}} = \frac{1}{2\Omega} \sum_{m_1, m_2, m'_1, m'_2} \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{k}_3, \vec{k}_4} \delta_{\vec{k}_1 + \vec{k}_2, \vec{k}_3 + \vec{k}_4} C_{m'_1 m'_2}^{m_1 m_2} a_{\vec{k}_1, m_1}^\dagger a_{\vec{k}_2, m_2}^\dagger a_{\vec{k}_3, m'_2} a_{\vec{k}_4, m'_1}, \quad (6.3)$$

em que $C_{m'_1 m'_2}^{m_1 m_2}$ é dado por

$$C_{m'_1 m'_2}^{m_1 m_2} = c_0 \delta_{m_1, m'_1} \delta_{m_2, m'_2} + c_1 [\vec{\mathbf{f}}]_{m_1 m'_1} \cdot [\vec{\mathbf{f}}]_{m_2, m'_2}. \quad (6.4)$$

Apesar de muito mais simples do que um caso geral, o hamiltoniano para as ondas planas acima ainda é muito complicado para ser resolvido exatamente. Uma aproximação muito boa surge quando é imposto que a maior parte das partículas do sistema está no estado fundamental (i.e., fase condensada) e, então, pode-se *expandir* o hamiltoniano em termos dos operadores criação e aniquilação dos estados excitados. Essa aproximação, muito conhecida na literatura, é chamada de Teoria de Bogoliubov (4, 5) e contribuiu muito para a explicação de fenômenos muito relevantes atualmente, como a *superfluididez* (5) e, alguns anos após sua formulação, a *supercondutividade*, com a teoria BCS. (20) Nas próximas seções, abordaremos a teoria de Bogoliubov aplicada ao sistema condensado aqui tratado.

6.1 Hamiltoniano de Bogoliubov e suas Particularidades

O primeiro passo para prosseguir com a teoria de Bogoliubov é expandir o hamiltoniano até certa ordem dos operadores dos estados excitados. Tradicionalmente, expande-se $\hat{H}$ até a segunda ordem de $a_{\vec{k} \neq 0, m}^{(\dagger)}$, pois, assim, desconsidera-se os efeitos de auto-interação dos estados excitados. Além disso, termos originários de potências ímpares de $a_{0, m}^{(\dagger)}$ são desconsiderados, dado que, na aproximação, subentende-se que a fase condensada seja bem descrita pelo estado $|\zeta\rangle$, o qual, em adição às propriedades das Eqs. 4.3 e 4.4, deve satisfazer:

$$\langle \zeta | \text{potências ímpares de } \hat{\psi}_m^{(\dagger)} | \zeta \rangle = 0. \quad (6.5)$$

A partir dessas considerações, a expansão do hamiltoniano fica (4):

$$\hat{H}_0 = \sum_m (-pm + qm^2) \hat{n}_{0, m} + \sum_{\vec{k} \neq 0, m} \left(\frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2M} - pm + qm^2 \right) \hat{n}_{\vec{k}, m}, \quad (6.6)$$

$$\begin{aligned} \hat{V}_{\text{int}} &\simeq \frac{1}{2\Omega} \sum_{m_1, m_2, m'_1, m'_2} C_{m'_1 m'_2}^{m_1 m_2} a_{0, m_1}^\dagger a_{0, m_2}^\dagger a_{0, m'_2} a_{0, m'_1} \\ &+ \frac{1}{\Omega} \sum_{m_1, m_2, m'_1, m'_2} \sum_{\vec{k} \neq 0} C_{m'_1 m'_2}^{m_1 m_2} \left(a_{0, m_1}^\dagger a_{\vec{k}, m_2}^\dagger a_{0, m'_2} a_{\vec{k}, m'_1} + a_{0, m_1}^\dagger a_{\vec{k}, m_2}^\dagger a_{\vec{k}, m'_2} a_{0, m'_1} \right) \\ &+ \frac{1}{2\Omega} \sum_{m_1, m_2, m'_1, m'_2} \sum_{\vec{k} \neq 0} C_{m'_1 m'_2}^{m_1 m_2} \left(a_{0, m_1}^\dagger a_{0, m_2}^\dagger a_{-\vec{k}, m'_2} a_{\vec{k}, m'_1} + a_{\vec{k}, m_1}^\dagger a_{-\vec{k}, m_2}^\dagger a_{0, m'_2} a_{0, m'_1} \right). \end{aligned} \quad (6.7)$$

Partindo do fato de que $|\zeta\rangle$ representa bem a fase condensada, é possível afirmar que o mesmo vale para a parte espinorial do parâmetro de ordem ζ . Para inserir essa informação no hamiltoniano é possível tomar (heurísticamente) as seguintes substituições (4)

$$a_{0,m}^\dagger a_{0,m'} \rightarrow \hat{N}_0 \zeta_m^* \zeta_{m'}, \quad (6.8)$$

$$a_{0,m_1}^\dagger a_{0,m_2}^\dagger a_{0,m'_2} a_{0,m'_1} \rightarrow \hat{N}_0 (\hat{N}_0 - 1) \zeta_{m_1}^* \zeta_{m_2}^* \zeta_{m'_2} \zeta_{m'_1}, \quad (6.9)$$

em que o operador *número de partículas condensadas* $\hat{N}_0$ é definido como

$$\hat{N}_0 = \hat{N} - \sum_{\vec{k} \neq 0, m} \hat{n}_{\vec{k}, m}, \quad (6.10)$$

para que haja conservação do número total de partículas do sistema. Para um sistema com número fixo de átomos, pode-se supor a troca $\hat{N} \rightarrow N$, pois subtrair os termos $\hat{n}_{\vec{k}, m}$ garante que a teoria de Bogoliubov conserve número sem a necessidade de introduzir o *potencial químico* em sua formulação. (4, 12)

Logo, o hamiltoniano de Bogoliubov (ou seja, o hamiltoniano do sistema levando em consideração as aproximações da teoria de Bogoliubov) é dado por* (4):

$$\begin{aligned} \hat{H}_B = & E_0 + \sum_{\vec{k} \neq 0, m} \left(\frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2M} - pm + qm^2 - \mu \right) \hat{n}_{\vec{k}, m} \\ & + \frac{N}{\Omega} \sum_{m_1, m_2, m'_1, m'_2} \sum_{\vec{k} \neq 0} \left(C_{m'_1 m'_2}^{m_1 m'_2} + C_{m_2 m'_1}^{m_1 m'_2} \right) \zeta_{m'_1}^* \zeta_{m'_2}^* a_{\vec{k}, m_1}^\dagger a_{\vec{k}, m_2} \\ & + \frac{N}{2\Omega} \sum_{m_1, m_2, m'_1, m'_2} \sum_{\vec{k} \neq 0} C_{m'_1 m'_2}^{m_1 m_2} \left(\zeta_{m_1}^* \zeta_{m_2}^* a_{-\vec{k}, m'_2} a_{\vec{k}, m'_1} + a_{\vec{k}, m_1}^\dagger a_{-\vec{k}, m_2}^\dagger \zeta_{m'_2} \zeta_{m'_1} \right), \quad (6.11) \end{aligned}$$

em que E_0 é a energia da fase condensada, proveniente da teoria de campo médio, e μ é o potencial químico, como definido na EGP para um sistema uniforme e estacionário. Para

* Na referência (4), atribui-se um termo de energia extra, independente de $a_{\vec{k}, m}$ (i.e., energia de ponto-zero) e proporcional a $1/\vec{k}^2$, referente a segunda ordem da aproximação de Born para o espalhamento que definiu o as constantes de auto-interação g_0 e g_2 ($f = 1$). Contudo, adicionar essa correção de energia *não altera* a diagonalização do hamiltoniano nem o espectro de energia dos estados excitados que é obtido. Então, nos propósitos deste trabalho, escolhemos omitir esse termo extra. Uma importante aplicação desse termo, que foge do escopo da dissertação, é dada na Sec. 5.2.1 da Ref. (4).

$N \gg 1$:

$$E_0 = N \left[\sum_m (-pm + qm^2) |\zeta_m|^2 + \frac{N}{2\Omega} \sum_{m_1, m_2, m'_1, m'_2} C_{m'_1 m'_2}^{m_1 m_2} \zeta_{m_1}^* \zeta_{m_2}^* \zeta_{m'_2} \zeta_{m'_1} \right], \quad (6.12)$$

$$\mu = \sum_m (-pm + qm^2) |\zeta_m|^2 + \frac{N}{\Omega} \sum_{m_1, m_2, m'_1, m'_2} C_{m'_1 m'_2}^{m_1 m_2} \zeta_{m_1}^* \zeta_{m_2}^* \zeta_{m'_2} \zeta_{m'_1}. \quad (6.13)$$

Apesar da definição de $\hat{N}_0$ guardar as características necessárias para que a teoria de Bogoliubov conserve o número de partículas, a substituição necessária (e inevitável, pela construção da teoria):

$$a_{0, m_1}^{(\dagger)} a_{0, m_2}^{(\dagger)} \rightarrow N \zeta_{m_1}^{(*)} \zeta_{m_2}^{(*)}, \quad (6.14)$$

utilizada na terceira linha da Eq. 6.11, faz com que o hamiltoniano $\hat{H}_B$ não conserve o número total de partículas do sistema[†]. Em outras palavras, $[\hat{N}, \hat{H}_B] \neq 0$ (a menos que o operador número seja considerado simplesmente um escalar, definindo uma situação média do sistema), fato que mostra que, para a teoria de Bogoliubov ter validade, o sistema deve satisfazer $N \sim N_0 \gg 1$. Portanto, a condição de validade da teoria coincide com a consideração (aproximada) da fase condensada ser uma *fonte de partículas* para o sistema.

É conveniente definir as matrizes 3×3 (4):

$$\mathbf{H}_{\vec{k}}^{(0)} = \left(\frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2M} - \mu \right) \mathbf{1} - p\mathbf{f}_z + q\mathbf{f}_z^2, \quad (6.15)$$

$$[\mathbf{H}^{(1)}]_{m_1, m_2} = \frac{N}{\Omega} \sum_{m'_1, m'_2} (C_{m'_1 m'_2}^{m_1 m'_2} + C_{m_2 m'_1}^{m'_2 m_1}) \zeta_{m'_1} \zeta_{m'_2}^*, \quad (6.16)$$

$$[\mathbf{H}^{(2)}]_{m_1, m_2} = \frac{N}{\Omega} \sum_{m'_1, m'_2} C_{m'_1 m'_2}^{m_1 m_2} \zeta_{m'_1} \zeta_{m'_2}, \quad (6.17)$$

para que escrevamos $\hat{H}_B$ na forma matricial (o que será útil na próxima seção). Das matrizes acima, $\mathbf{H}_{\vec{k}}^0$ e $\mathbf{H}^{(1)}$ são *hermitianas*, enquanto $\mathbf{H}^{(2)}$ é apenas simétrica. Assim a representação matricial de $\hat{H}_B$ fica (4)

$$\begin{aligned} \hat{H}_B = & E_0 + \frac{1}{2} \sum_{\vec{k} \neq 0} (\bar{\mathbf{a}}_{\vec{k}}^\dagger \quad \bar{\mathbf{a}}_{-\vec{k}}) \begin{pmatrix} \mathbf{H}_{\vec{k}}^0 + \mathbf{H}^{(1)} & \mathbf{H}^{(2)} \\ [\mathbf{H}^{(2)}]^* & [\mathbf{H}_{-\vec{k}}^0 + \mathbf{H}^{(1)}]^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{a}_{\vec{k}} \\ \mathbf{a}_{-\vec{k}}^\dagger \end{pmatrix} \\ & - \frac{1}{2} \sum_{\vec{k} \neq 0} \text{Tr}[\mathbf{H}_{-\vec{k}}^0 + \mathbf{H}^{(1)}], \end{aligned} \quad (6.18)$$

[†] Na verdade ele conserva o número de *quasi-partículas*, como será visto na seção 6.3.

para $\mathbf{a}_{\vec{k}} = (a_{\vec{k},1}, a_{\vec{k},0}, a_{\vec{k},-1})^T$, com $\mathbf{a}_{\vec{k}}^\dagger$ e $\bar{\mathbf{a}}_{\vec{k}}$ definidos a partir da notação discutida no Cap. 2. O termo dependente do *traço*, escrito na segunda linha da Eq. 6.18, é originário da mudança do ordenamento dos operadores criação e destruição referentes à interação dada pela matriz $[\mathbf{H}_{-\vec{k}}^0 + \mathbf{H}^{(1)}]$. É notável que, caso tal reordenamento não fosse computado, não seria possível escrever o hamiltoniano $\hat{H}_B$ em representação matricial. O próximo passo da teoria de Bogoliubov é encontrar quais os *estados quânticos* que diagonalizam o hamiltoniano do sistema — o que é obtido por meio de uma *transformação de Bogoliubov*.

6.2 Transformações de Bogoliubov e Diagonalização

Os conceitos matemáticos por trás de uma transformação de Bogoliubov são muito úteis e, além de serem usados diretamente na teoria de Bogoliubov, possuem diversas aplicações em outras situações físicas. Explicando de maneira simples, uma transformação de Bogoliubov é uma transformação (geralmente linear) que leva um conjunto de operadores criação e destruição, $\{a_i, a_i^\dagger\}_{i=1,2,\dots}$, em outro, $\{b_i, b_i^\dagger\}_{i=1,2,\dots}$, preservando as *relações de comutação* dos operadores. O exemplo mais simples de tal transformação é o seguinte:

$$a = \beta b + \gamma b^\dagger. \quad (6.19)$$

Se for imposto que a é um operador bosônico ($[a, a^\dagger] = 1$) e que a transformação acima é de Bogoliubov (ou seja, que preserva $[b, b^\dagger] = 1$), os coeficientes β e γ devem satisfazer o vínculo:

$$|\beta|^2 - |\gamma|^2 = 1. \quad (6.20)$$

O mesmo procedimento acima é útil também para operadores *fermiônicos*: basta utilizarmos as relações de *anti-comutação* e alterarmos o vínculo acima, o qual determina $|\beta|^2 + |\gamma|^2 = 1$ nesse caso.

Além de preservar as relações de comutação, as transformações de Bogoliubov são muito úteis para *diagonalizarmos formas bilineares* dos operadores criação e destruição. Um exemplo simples de tal forma bilinear é o hamiltoniano $\hat{H}_A$ de um sistema de muitas partículas *bombeadas*[‡] por um campo clássico para um estado quântico específico, codificado pelo operador destruição a :

$$\hat{H}_A = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} a^\dagger & a \end{pmatrix} \begin{pmatrix} h & g \\ g^* & h \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ a^\dagger \end{pmatrix} = h \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right) + \frac{g}{2} a^\dagger a^\dagger + \frac{g^*}{2} a a, \quad (6.21)$$

em que $h \in \mathbb{R}$ e $g \in \mathbb{C}$. Como o hamiltoniano acima não é diagonal para os estados com

[‡] Bombeamento quadrático.

número definido de partículas (os autoestados do operador *número* físico $\hat{N}_a = a^\dagger a$), é conveniente acharmos uma transformação do espaço de estados ($a \rightarrow b$) de modo que $\hat{H}_A$ seja diagonal para estados com número definido de “*entes*”, definidos por $\hat{N}_b = b^\dagger b$. Esses “*entes*”, na literatura, geralmente são chamados de *quasi-partículas*, pois, apesar de serem excitações provenientes da sobreposição de *infinitos* estados quânticos físicos, elas se comportam como partículas genuínas, em estados quânticos genuínos. Assim, podemos impor que a transformação de Bogoliubov dada pela Eq. 6.19 seja a que diagonaliza o hamiltoniano $\hat{H}_A$:

$$\hat{H}_A = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} b^\dagger & b \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \beta^* & \gamma \\ \gamma^* & \beta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} h & g \\ g^* & h \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \beta & \gamma \\ \gamma^* & \beta^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b \\ b^\dagger \end{pmatrix}. \quad (6.22)$$

Para que diagonalização ocorra de fato, é necessário que a transformação de Bogoliubov satisfaça a condição extra:

$$\mathbf{M} \begin{pmatrix} \beta \\ \gamma^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} h & g \\ g^* & h \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \beta \\ \gamma^* \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \beta \\ -\gamma^* \end{pmatrix}, \quad (6.23)$$

sendo E a energia de uma quasi-partícula. Contudo, E pode adquirir dois valores possíveis

$$E = \begin{cases} +\sqrt{h^2 - |g|^2}, & \text{se } h > 0, \\ -\sqrt{h^2 - |g|^2}, & \text{se } h < 0. \end{cases} \quad (6.24)$$

As condições de escolha do sinal de E acima surgem ao garantir que $|\beta|^2 - |\gamma|^2 > 0$ e que seja possível ajustar a transformação para que a condição da Eq. 6.20 seja satisfeita. Aqui, consideramos apenas o caso de $h^2 \geq |g|^2$, pois, se isso não fosse satisfeito, encontraríamos $E \notin \mathbb{R}$ — o que, pelo fato da matriz $\mathbf{M}$ ser *hermitiana*, implicaria diretamente $|\beta|^2 - |\gamma|^2 = 0$. Dadas as considerações acima, o hamiltoniano $\hat{H}_A$ após a diagonalização fica:

$$\hat{H}_A = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} b^\dagger & b \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E(|\beta|^2 - |\gamma|^2) & 0 \\ 0 & E(|\beta|^2 - |\gamma|^2) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b \\ b^\dagger \end{pmatrix} = E \left(b^\dagger b + \frac{1}{2} \right). \quad (6.25)$$

Uma última observação antes de voltarmos a considerar o sistema condensado deve ser feita. É importante notar que o espaço dos estados de número de partículas e de quasi-partículas são *distintos*. Ou seja, um estado de N partículas, $|N_a\rangle$, é diferente de um estado de N quasi-partículas, $|N_b\rangle$. Isso fica claramente evidenciado no fato de que o *vácuo* das quasi-partículas não é o mesmo que o das partículas:

$$\langle \emptyset_b | a^\dagger a | \emptyset_b \rangle = |\gamma|^2 \langle \emptyset_b | b b^\dagger | \emptyset_b \rangle = |\gamma|^2 \neq 0. \quad (6.26)$$

Ou seja, o vácuo de quasi-partículas possui um número médio de partículas (que populam *virtualmente* o estado quântico descrito por a), dado pelo termo $|\gamma|^2$ da transformação de Bogoliubov.

Voltando para o caso da teoria de Bogoliubov de um CBE espinorial, uniforme e estacionário, é possível adaptar o procedimento de diagonalização visto acima para o hamiltoniano $\hat{H}_B$. A transformação de Bogoliubov conveniente nesse caso é (4):

$$a_{\vec{k},m} = \sum_{m'} \left(U_{\vec{k},m m'} b_{\vec{k},m'} + V_{-\vec{k},m m'}^* b_{-\vec{k},m'}^\dagger \right), \quad (6.27)$$

$$a_{-\vec{k},m}^\dagger = \sum_{m'} \left(U_{-\vec{k},m m'}^* b_{-\vec{k},m'}^\dagger + V_{\vec{k},m m'} b_{\vec{k},m'} \right), \quad (6.28)$$

que pode ser escrita de forma matricial como

$$\begin{pmatrix} \mathbf{a}_{\vec{k}} \\ \mathbf{a}_{-\vec{k}}^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{U}_{\vec{k}} & \mathbf{V}_{-\vec{k}}^* \\ \mathbf{V}_{\vec{k}} & \mathbf{U}_{-\vec{k}}^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{b}_{\vec{k}} \\ \mathbf{b}_{-\vec{k}}^\dagger \end{pmatrix}. \quad (6.29)$$

Ao impor que a transformação acima é de Bogoliubov e que as relações de comutação dos operadores são *canônicas* (isto é, $[a, a^\dagger] = \delta_{\vec{k},\vec{k}'} \delta_{m,m'} \rightarrow [b, b^\dagger] = \delta_{\vec{k},\vec{k}'} \delta_{m,m'}$), a equação acima gera as seguintes identidades matriciais (análogas à condição da Eq. 6.20):

$$\mathbf{U}_{\vec{k}} \mathbf{U}_{\vec{k}}^\dagger - \mathbf{V}_{-\vec{k}}^* \mathbf{V}_{-\vec{k}}^T = \mathbf{1}, \quad (6.30)$$

$$\mathbf{U}_{\vec{k}} \mathbf{V}_{\vec{k}}^\dagger - \mathbf{V}_{-\vec{k}}^* \mathbf{U}_{-\vec{k}}^T = \mathbf{0}. \quad (6.31)$$

Com essas identidades (4), é possível inverter a forma matricial da transformação da Eq. 6.29, obtendo:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{b}_{\vec{k}} \\ \mathbf{b}_{-\vec{k}}^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{U}_{\vec{k}}^\dagger & -\mathbf{V}_{\vec{k}}^\dagger \\ -\mathbf{V}_{-\vec{k}}^T & \mathbf{U}_{-\vec{k}}^T \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{a}_{\vec{k}} \\ \mathbf{a}_{-\vec{k}}^\dagger \end{pmatrix}, \quad (6.32)$$

o que gera outras duas identidades matriciais:

$$\mathbf{U}_{\vec{k}}^\dagger \mathbf{U}_{\vec{k}} - \mathbf{V}_{\vec{k}}^\dagger \mathbf{V}_{\vec{k}} = \mathbf{1}, \quad (6.33)$$

$$\mathbf{U}_{\vec{k}}^T \mathbf{V}_{-\vec{k}} - \mathbf{V}_{\vec{k}}^T \mathbf{U}_{-\vec{k}} = \mathbf{0}. \quad (6.34)$$

Guardadas as propriedades das matrizes $\mathbf{V}_{\vec{k}}$ e $\mathbf{U}_{\vec{k}}$, o hamiltoniano $\hat{H}_B$ em termos dos operadores $b_{\vec{k},m}$ pode ser escrito como (4):

$$\begin{aligned}
\hat{H}_B &= E_0 - \frac{1}{2} \sum_{\vec{k} \neq 0} \text{Tr}[\mathbf{H}_{-\vec{k}}^0 + \mathbf{H}^{(1)}] \\
&+ \frac{1}{2} \sum_{\vec{k} \neq 0} \begin{pmatrix} \bar{\mathbf{b}}_{\vec{k}}^\dagger & \bar{\mathbf{b}}_{-\vec{k}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{U}_{\vec{k}}^\dagger & \mathbf{V}_{\vec{k}}^\dagger \\ \mathbf{V}_{-\vec{k}}^T & \mathbf{U}_{-\vec{k}}^T \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{H}_{\vec{k}}^0 + \mathbf{H}^{(1)} & \mathbf{H}^{(2)} \\ [\mathbf{H}^{(2)}]^* & [\mathbf{H}_{-\vec{k}}^0 + \mathbf{H}^{(1)}]^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{U}_{\vec{k}} & \mathbf{V}_{-\vec{k}}^* \\ \mathbf{V}_{\vec{k}} & \mathbf{U}_{-\vec{k}}^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{b}_{\vec{k}} \\ \mathbf{b}_{-\vec{k}}^\dagger \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{6.35}$$

Análogo ao exemplo discutido no início da seção, o hamiltoniano acima é diagonal para os operadores $b_{\vec{k},m}$ se as matrizes $\mathbf{V}_{\vec{k}}$ e $\mathbf{U}_{\vec{k}}$ satisfazem uma condição similar à da Eq. 6.23, dada por (4):

$$\begin{pmatrix} \mathbf{H}_{\vec{k}}^0 + \mathbf{H}^{(1)} & \mathbf{H}^{(2)} \\ [\mathbf{H}^{(2)}]^* & [\mathbf{H}_{-\vec{k}}^0 + \mathbf{H}^{(1)}]^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{U}_{\vec{k}} \\ \mathbf{V}_{\vec{k}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{U}_{\vec{k}} \mathbf{E}_{\vec{k}} \\ -\mathbf{V}_{\vec{k}} \mathbf{E}_{\vec{k}} \end{pmatrix}, \tag{6.36}$$

em que $\mathbf{E}_{\vec{k}}$ é uma matriz $(2f+1) \times (2f+1)$ diagonal. É conveniente expressar a equação matricial acima em termos das matrizes *coluna* $\mathbf{v}_{\vec{k},m}$ e $\mathbf{u}_{\vec{k},m}$, as quais constituem as matrizes $\mathbf{V}_{\vec{k}}$ e $\mathbf{U}_{\vec{k}}$ da seguinte maneira:

$$\mathbf{U}_{\vec{k}} = \begin{pmatrix} \mathbf{u}_{\vec{k},1} & \mathbf{u}_{\vec{k},0} & \mathbf{u}_{\vec{k},-1} \end{pmatrix}, \tag{6.37}$$

$$\mathbf{V}_{\vec{k}} = \begin{pmatrix} \mathbf{v}_{\vec{k},1} & \mathbf{v}_{\vec{k},0} & \mathbf{v}_{\vec{k},-1} \end{pmatrix}. \tag{6.38}$$

Assim a Eq. 6.36 resume-se a (4):

$$\mathbf{M}_{\vec{k}} \begin{pmatrix} \mathbf{u}_{\vec{k},m} \\ \mathbf{v}_{\vec{k},m} \end{pmatrix} = E_{\vec{k},m} \begin{pmatrix} \mathbf{u}_{\vec{k},m} \\ -\mathbf{v}_{\vec{k},m} \end{pmatrix}, \tag{6.39}$$

em que as energias $E_{\vec{k},m}$ são os elementos da diagonal da matriz $\mathbf{E}_{\vec{k}}$ e $\mathbf{M}_{\vec{k}}$ é uma matriz hermitiana dada por:

$$\mathbf{M}_{\vec{k}} \equiv \begin{pmatrix} \mathbf{H}_{\vec{k}}^0 + \mathbf{H}^{(1)} & \mathbf{H}^{(2)} \\ [\mathbf{H}^{(2)}]^* & [\mathbf{H}_{-\vec{k}}^0 + \mathbf{H}^{(1)}]^* \end{pmatrix}. \tag{6.40}$$

Tomando a Eq. 6.33, se a transformação $a_{\vec{k},m} \rightarrow b_{\vec{k},m}$ é de Bogoliubov, $\mathbf{u}_{\vec{k},m}$ e $\mathbf{v}_{\vec{k},m}$ satisfazem a seguinte relação de *ortonormalidade*

$$\mathbf{u}_{\vec{k},m}^\dagger \mathbf{u}_{\vec{k},n} - \mathbf{v}_{\vec{k},m}^\dagger \mathbf{v}_{\vec{k},n} = \delta_{m,n}, \tag{6.41}$$

que tem exatamente o mesmo papel da relação 6.20 do primeiro exemplo. Logo, é possível concluir que $E_{\vec{k},m} \in \mathbb{R}$, pois, caso contrário, $\mathbf{u}_{\vec{k},m}^\dagger \mathbf{u}_{\vec{k},m} - \mathbf{v}_{\vec{k},m}^\dagger \mathbf{v}_{\vec{k},m} = 0$. Além disso, as condições de escolha do sinal de $E_{\vec{k},m}$ devem sempre garantir que

$$\mathbf{u}_{\vec{k},m}^\dagger \mathbf{u}_{\vec{k},m} - \mathbf{v}_{\vec{k},m}^\dagger \mathbf{v}_{\vec{k},m} > 0, \quad (6.42)$$

pois, dessa maneira, a condição de ortonormalidade da Eq. 6.41 pode ser alcançada. Um fato curioso e que surge a partir da simetria da Eq. 6.39 é que, se $(\mathbf{u}_{\vec{k},m}, \mathbf{v}_{\vec{k},m})$ é uma solução com energia $E_{\vec{k},m}$, então $(\mathbf{u}'_{\vec{k},m}, \mathbf{v}'_{\vec{k},m}) = (\mathbf{v}_{\vec{k},m}^*, \mathbf{u}_{\vec{k},m}^*)$ é uma solução de energia $E'_{\vec{k},m} = -E_{\vec{k},m}$. Contudo, a relação 6.42 pode ser alcançada apenas por uma das duas soluções acima e, logo, somente uma delas é relevante para a diagonalização do hamiltoniano.

Dadas as considerações acerca da transformação de Bogoliubov discutidas anteriormente, o hamiltoniano $\hat{H}_B$ diagonalizado em termos de $b_{\vec{k},m}$ fica (4):

$$\hat{H}_B = E_0 + \frac{1}{2} \sum_{\vec{k} \neq 0} \text{Tr}[\mathbf{E}_{\vec{k}} - \mathbf{H}_{-\vec{k}}^0 - \mathbf{H}^{(1)}] + \sum_{\vec{k} \neq 0, m} E_{\vec{k},m} b_{\vec{k},m}^\dagger b_{\vec{k},m}, \quad (6.43)$$

em que o termo *extra* da energia de ponto zero

$$E^q = \frac{1}{2} \sum_{\vec{k} \neq 0} \text{Tr}[\mathbf{E}_{\vec{k}} - \mathbf{H}_{-\vec{k}}^0 - \mathbf{H}^{(1)}] \quad (6.44)$$

tem origem *quântica* e equivale a uma *correção de energia* da fase condensada, uma vez que a série que o define convirja.

Além disso, uma observação importante acerca do espectro de energia de Bogoliubov pode ser feita. Se $E_{\vec{k},m} < 0$ para algum estado $(\vec{k}, m)$ com $k \neq 0$, então é possível afirmar que o parâmetro de ordem *não representa* o estado fundamental do sistema, pois sua energia pode ser diminuída ao criar uma quasi-partícula $b_{\vec{k},m}^\dagger$. (4) Isso mostra que a fase condensada do sistema é *instável* nessa situação, pois energeticamente é mais vantajoso as partículas formarem *modos de excitação* dos estados excitados quânticos do que permanecerem no estado fundamental. A esse comportamento particular é dado o nome de *instabilidade de Landau*. (4) Logo, para o sistema condensado ser *estável*, o espectro de energia de Bogoliubov deve ser estritamente *positivo*.

O número médio de partículas virtualmente excitadas no espaço das quasi-partículas N^q , também conhecido como “*quantum depletion*”, pode ser calculado como

$$N^q = \sum_{\vec{k} \neq 0, m} \langle \emptyset_b | a_{\vec{k},m}^\dagger a_{\vec{k},m} | \emptyset_b \rangle = \sum_{\vec{k} \neq 0} \text{Tr}(\mathbf{V}_{\vec{k}}^\dagger \mathbf{V}_{\vec{k}}) = \sum_{\vec{k} \neq 0, m} |\mathbf{v}_{\vec{k},m}|^2 \quad (6.45)$$

e tem um resultado análogo à Eq. 6.26.

6.3 Estados Excitados Quânticos e suas Energias

Uma vez visto o procedimento completo da teoria de Bogoliubov para um CBE espinorial uniforme e estacionário, pode-se calcular o espectro de energia de Bogoliubov para um sistema específico. Aqui, escolhemos mostrar o exemplo dessa teoria aplicada a um condensado uniforme *ferromagnético* (definido na seção 5.1).

Dado o formato do parâmetro de ordem, isto é $\boldsymbol{\zeta} = (1, 0, 0)^T$, pode-se encontrar o formato das matrizes que constituem $\mathbf{M}_{\vec{k}}$ (4):

$$\mathbf{H}_{\vec{k}}^0 + \mathbf{H}^{(1)} = \begin{pmatrix} \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2M} + (c_0 + c_1)n & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2M} + p - q & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2M} + 2p - c_1n \end{pmatrix}, \quad (6.46)$$

$$\mathbf{H}^{(2)} = \begin{pmatrix} (c_0 + c_1)n & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (6.47)$$

Pela estrutura diagonal das matrizes acima e pelo fato de $\mathbf{H}^{(2)}$ possuir apenas um elemento não nulo, ao resolver a Eq. 6.39, encontra-se que, das três soluções $(\mathbf{u}_{\vec{k},m}, \mathbf{v}_{\vec{k},m})$, apenas uma delas tem $\mathbf{v}_{\vec{k},m} \neq 0$.

Escolhendo $\mathbf{v}_{\vec{k},1} \neq 0$, encontra-se as seguintes estruturas (4):

$$\mathbf{u}_{\vec{k},1} = \begin{pmatrix} u \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \text{ e } \mathbf{v}_{\vec{k},1} = \begin{pmatrix} v \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (6.48)$$

$$\mathbf{u}_{\vec{k},0} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \text{ e } \mathbf{v}_{\vec{k},0} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (6.49)$$

$$\mathbf{u}_{\vec{k},-1} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \text{ e } \mathbf{v}_{\vec{k},-1} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (6.50)$$

em que $|u|^2 - |v|^2 = 1$. Para o estado $m = 1$, ao resolver a Eq. 6.39, o espectro de energia e a transformação de Bogoliubov (inversa) encontrados são (4)

$$E_{\vec{k},1} = \sqrt{\varepsilon_{\vec{k}}[\varepsilon_{\vec{k}} + 2(c_0 + c_1)n]}, \quad (6.51)$$

$$b_{\vec{k},1} = \sqrt{\frac{\varepsilon_{\vec{k}} + (c_0 + c_1)n + E_{\vec{k},1}}{2E_{\vec{k},1}}} a_{\vec{k},1} + \sqrt{\frac{\varepsilon_{\vec{k}} + (c_0 + c_1)n - E_{\vec{k},1}}{2E_{\vec{k},1}}} a_{-\vec{k},1}^\dagger, \quad (6.52)$$

com $\varepsilon_{\vec{k}} = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2M}$. Ao analisar a dependência funcional de $E_{\vec{k},1}$, percebe-se que esse espectro não possui *salto* de energia em relação a do estado fundamental (i.e., fase condensada), pois $|\vec{k}| \rightarrow 0$ implica que $E_{\vec{k},1} \rightarrow 0$. Além desse fato, é notável que $E_{\vec{k},1}$ independe do campo magnético aplicado no sistema.

Já para os estados $m = 0$ e $m = -1$, encontra-se transformações de Bogoliubov triviais e espectros do tipo partícula livre (4):

$$E_{\vec{k},0} = \varepsilon_{\vec{k}} + p - q, \quad (6.53)$$

$$b_{\vec{k},0} = a_{\vec{k},0}; \quad (6.54)$$

$$E_{\vec{k},-1} = \varepsilon_{\vec{k}} + 2p - 2c_1 n, \quad (6.55)$$

$$b_{\vec{k},-1} = a_{\vec{k},-1}. \quad (6.56)$$

Para os espectros encontrados acima, verifica-se a dependência do campo magnético, assim como os *saltos* da energia em relação à fase condensada, dados por $E_{\vec{0},0} = p - q$ e $E_{\vec{0},-1} = 2p - 2c_1 n$, respectivamente para $m = 0$ e $m = -1$. Logo, se o condensado é estável, devemos obter $p \geq q$ e $p \geq c_1 n$. Curiosamente, segundo o diagrama de fases da Fig. 4, essa é a configuração de parâmetros (q, p) que garante que o condensado esteja no estado ferromagnético (e que, por sua vez, ele seja *estável* segundo o critério de energia discutido na seção 5.4). Contudo, quando o campo magnético aplicado sobre esse tipo de condensado é nulo ($p = q = 0$), ele pode ser estável apenas se $c_1 \leq 0$. Dessa maneira, o estado ferromagnético é instável para ^{23}Na a campo magnético nulo (Ref. (4) e Cap. 5).

Discussões posteriores acerca das propriedades de superfluido que um CBE espinorial uniforme pode apresentar, como a *velocidade do som* e a *velocidade crítica de Landau* para superfluidez, fogem do escopo dessa dissertação. Aqui, escolhemos focar na abordagem das propriedades simétricas e topológicas de um condensado *não uniforme* e com *textura de spin* não trivial (tanto em termos do parâmetro de ordem, quanto dos estados excitados quânticos). Contudo, as referências (4, 15) discutem muito bem tais propriedades de superfluidez no caso de um espinor ($f \neq 0$) e no caso de um condensado comum ($f = 0$), e são recomendadas para os leitores interessados nessa discussão específica.

Acima, escolhemos diagonalizar os estados excitados quânticos do parâmetro de ordem de um condensado ferromagnético e uniforme como um exemplo do uso da teoria de Bogoliubov. Esse tipo de condensado foi escolhido pela simplicidade da solução e, principalmente, pelo *paralelo simples* que ele possui com os estados excitados quânticos de um CBE ferromagnético com textura de spin *não trivial*[§], fato que guia a obtenção das propriedades simétricas, topológicas e estruturais não triviais das *excitações topológicas quânticas*, discutidas no Cap. 10.

[§] O parâmetro de ordem desse tipo de sistema é definido no próximo capítulo.

7 EQUAÇÕES HIDRODINÂMICAS E O PARALELO COM A FÍSICA DE ALTAS ENERGIAS

Nos dois últimos capítulos, abordamos basicamente todas as propriedades dos estados quânticos (fundamentais e excitados) dos CBEs espinoriais uniformes e estacionários. Contudo, o sistema espinorial se torna relevante e realmente se destaca do caso de um condensado comum quando suas propriedades simétricas e topológicas não triviais emergem naturalmente em sua estrutura de spin. Assim, a partir deste capítulo, discutiremos as propriedades dos CBEs espinoriais *não uniformes* — desde as possíveis *texturas de spin* do parâmetro de ordem, até a análise da *assinatura simétrica e topológica* dos seus estados excitados quânticos.

Para isso, precisamos, primeiramente, voltar um passo e analisar mais a fundo a *dinâmica* do parâmetro de ordem de um espinor *genérico* e os *vínculos* por ele obedecidos — os quais geram as ricas propriedades simétricas contidas nas texturas de spin de um CBE espinorial. Como abordaremos logo mais, tais propriedades geralmente emergem no sistema como *observáveis hidrodinâmicos* e, assim, muitas analogias com outras áreas da física podem ser feitas (por exemplo, com a *física de altas energias*, em sistemas que apresentam quebra espontânea de simetria).

7.1 Fatoração do Parâmetro de Ordem e a Estrutura da Ação

Uma propriedade que qualquer parâmetro de ordem de um CBE espinorial possui é a de *fatoração*. Logo, é possível *separar* a parte *escalar* $\psi(x, t)$ da parte *espinorial* $\zeta(x, t)$ em um parâmetro de ordem $\boldsymbol{\psi}(x, t)$:

$$\boldsymbol{\psi}(x, t) = \psi(x, t)\zeta(x, t), \quad (7.1)$$

tal que $|\psi(x, t)|^2 = n(x, t)$ e $\zeta^\dagger(x, t)\zeta(x, t) = 1$. Como visto no Cap. 4, a dinâmica do parâmetro de ordem é definida pela extremização da ação S (Eq. 4.20). Além disso, é possível separarmos a parte *cinética* $S_T[\boldsymbol{\psi}, \partial\boldsymbol{\psi}]$ da parte *potencial* $S_V[\boldsymbol{\psi}]$ da ação $S[\boldsymbol{\psi}, \partial\boldsymbol{\psi}]$, de modo que $S = S_T - S_V$:

$$S_T = \int \frac{i\hbar}{2} \left[\boldsymbol{\psi}^\dagger \frac{\partial}{\partial t} \boldsymbol{\psi} - \boldsymbol{\psi}^T \frac{\partial}{\partial t} \boldsymbol{\psi}^* \right] - \frac{\hbar^2}{2M} \vec{\nabla} \boldsymbol{\psi}^\dagger \cdot \vec{\nabla} \boldsymbol{\psi} \, dx \, dt, \quad (7.2)$$

$$S_V = \int \boldsymbol{\psi}^\dagger \left[U_{\text{apr}} - p\mathbf{f}_z + q\mathbf{f}_z^2 \right] \boldsymbol{\psi} + \frac{c_0}{2} n^2 + \frac{c_1}{2} \vec{F}^2 \, dx \, dt. \quad (7.3)$$

Ao impor a *fatoração do parâmetro de ordem*, o termo cinético da ação S_T adquire uma estrutura muito particular, pois a parte espinorial $\zeta(x, t)$ interage com a parte escalar $\psi(x, t)$ assim como um campo *eletromagnético* interage com uma partícula carregada, da seguinte maneira (4):

$$S_T = \int \frac{i\hbar}{2} \left[\psi^* \frac{\partial}{\partial t} \psi - \psi \frac{\partial}{\partial t} \psi^* \right] - \frac{\hbar^2}{2M} (\vec{\nabla} + i\vec{A})\psi^* \cdot (\vec{\nabla} - i\vec{A})\psi - \left(\frac{\hbar^2}{2M} \Lambda + \hbar\Phi \right) |\psi|^2 dx dt, \quad (7.4)$$

em que as grandezas $\vec{A}$ e Φ , análogas aos potenciais vetor e escalar do eletromagnetismo, são dadas em termos das derivadas da parte espinorial do parâmetro de ordem:

$$\Phi = -i\zeta^\dagger \frac{\partial}{\partial t} \zeta, \quad (7.5)$$

$$\vec{A} = i\zeta^\dagger \vec{\nabla} \zeta. \quad (7.6)$$

O fator Λ , utilizado na Eq. 7.4, corresponde à energia cinética da parte espinorial do parâmetro de ordem (4):

$$\Lambda = \vec{\nabla} \zeta^\dagger \cdot \vec{\nabla} \zeta - \vec{A}^2. \quad (7.7)$$

É válido ressaltar aqui que a identificação dos potenciais $\vec{A}$ e Φ como geradores de uma interação tipo *eletromagnética* vem do *princípio de gauge**. Por tal princípio, os operadores derivada do sistema são *redefinidos* em termos dos potenciais escalar e vetor, para uma partícula com carga q , como:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rightarrow \frac{\partial}{\partial t} + iq\Phi, \quad (7.8)$$

$$\vec{\nabla} \rightarrow \vec{\nabla} - iq\vec{A}. \quad (7.9)$$

Obviamente, como aqui $\vec{A}$ e Φ são potenciais *artificiais*, q não representa uma carga elétrica de fato, tanto que, mesmo para um condensado de átomos eletricamente neutros, essa

* Conduziremos a discussão desse princípio em termos da simetria de fase U(1) do sistema na seção 7.4. Os grupos de Lie (U(1), SO(2), SO(3) e outros), que caracterizam as simetrias do sistema, são bem discutidos na Ref. (14).

propriedade pode ser verificada. Logo, no caso de um CBE espinorial, podemos definir uma carga para a parte escalar q_e e outra para a parte espinorial q_s . Ao tomarmos a parte cinética da ação S_T apenas em termos de ψ e ζ :

$$S_T = \int \frac{i\hbar}{2} \left[\left(\psi^* \frac{\partial}{\partial t} \psi - \psi \frac{\partial}{\partial t} \psi^* \right) + |\psi|^2 \left(\zeta^\dagger \frac{\partial}{\partial t} \zeta - \zeta^T \frac{\partial}{\partial t} \zeta^* \right) \right] - \frac{\hbar^2}{2M} \left[\vec{\nabla} \psi^* \cdot \vec{\nabla} \psi + |\psi|^2 \vec{\nabla} \zeta^\dagger \cdot \vec{\nabla} \zeta - \zeta^\dagger \vec{\nabla} \zeta \cdot (\psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^*) \right] dx dt, \quad (7.10)$$

é possível mostrar que definir $q_e = 1$ e $q_s = -1$ faz com que a expressão de S_T acima transforme-se na Eq. 7.4 pelo princípio de *gauge*. Ou seja, a aplicação de tal princípio é equivalente à simples manipulação algébrica das partes espinorial e escalar de ψ na Eq. 7.10 até que ela se torne a 7.4[†]. Essa é uma característica simétrica particular dos *campos clássicos vetoriais* e tem origem no fato de que a própria parte espinorial campo ζ gera os potenciais “tipo-eletromagnéticos”. Outro fato que justifica essa característica importante é a *carga total* do parâmetro de ordem: q_p . Pelas propriedades do princípio de *gauge* de ψ e ζ , é possível mostrar que:

$$q_p = q_e + q_s = 0. \quad (7.11)$$

Portanto, os potenciais Φ e $\vec{A}$ não tem efeito sobre ψ , nem alteram a parte cinética da ação $S_T[\psi, \partial\psi]$.

Além das propriedades discutidas anteriormente, os potenciais Φ e $\vec{A}$ têm papel fundamental em várias analogias que um CBE espinorial pode estabelecer com sistemas e estruturas de outras áreas da física. Um caso de interesse, relacionado a esse princípio, é a analogia com o monopolo de Dirac. (4) Pelo fato dos potenciais escalar e vetor, nesse caso, serem artificiais, eles não precisam satisfazer nenhuma equação análoga às *equações de Maxwell* — as quais, com base em todos os experimentos que exploram as propriedades do eletromagnetismo feitos até hoje, desconsideram a existência de *monopolos magnéticos*. Ou seja, dados os graus de liberdade relacionados à textura de spin ζ , nesse sentido menos restritos do que o comportamento real dos potenciais eletromagnéticos, é possível produzir para algum sistema condensado (mais informações no Cap. 9):

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{B}_{\text{artificial}} = 4\pi g \delta(r), \quad (7.12)$$

que é a assinatura de um monopolo magnético (artificial), comumente denominado por

[†] Isto é, a aplicação do princípio de *gauge* não altera S_T .

monopolo de Dirac na literatura. O *campo magnético artificial* $\vec{B}_{\text{artificial}}$ é definido aos modos do que é feito na teoria eletromagnética usual:

$$\vec{B}_{\text{artificial}} = \vec{\nabla} \times \vec{A}. \quad (7.13)$$

Portanto, inspirados pela identidade acima e com o intuito de atribuir maior significado a analogias similares à introduzida acima, é muito conveniente definir o *potencial 4-vetor artificial* $\mathbb{U}_\nu$ e o *tensor do campo eletromagnético artificial* $\mathbb{F}_{\sigma\nu}$ (4):

$$\mathbb{U}^\nu = (\hbar\Phi, \hbar\vec{A}), \quad (\nu = 0, 1, 2, 3), \quad (7.14)$$

$$\begin{aligned} \mathbb{F}_{\sigma\nu} &= \partial_\sigma \mathbb{U}_\nu - \partial_\nu \mathbb{U}_\sigma \\ &= i\hbar \left[(\partial_\sigma \zeta^\dagger)(\partial_\nu \zeta) - (\partial_\nu \zeta^\dagger)(\partial_\sigma \zeta) \right] \quad (\sigma, \nu = 0, 1, 2, 3). \end{aligned} \quad (7.15)$$

O posicionamento dos índices[†] nessas duas grandezas (*subscrito* ou *sobrescrito*) é alterado pela ação da métrica $\eta_{\lambda\nu} = \text{diag}(-1, 1, 1, 1)$. Por exemplo:

$$\mathbb{U}_\lambda = \eta_{\lambda\nu} \mathbb{U}^\nu, \quad (7.16)$$

aplicando a convenção de Einstein para a soma nos índices repetidos. Da teoria eletromagnética, os campos elétrico ($\vec{\mathcal{E}}$) e magnético ($\vec{\mathcal{B}} \equiv \hbar\vec{B}_{\text{artificial}}$) artificiais podem ser escritos em termos das grandezas definidas acima (4):

$$(\vec{\mathcal{E}})_i = \mathbb{F}_{i0} = \partial_i \mathbb{U}_0 - \partial_0 \mathbb{U}_i \Rightarrow \vec{\mathcal{E}} = -\hbar \left(\vec{\nabla} \Phi + \frac{\partial}{\partial t} \vec{A} \right), \quad (7.17)$$

$$(\vec{\mathcal{B}})_i = \frac{1}{2} \epsilon_{ijk} \mathbb{F}^{jk} = \epsilon_{ijk} \partial^j \mathbb{U}^k \Rightarrow \vec{\mathcal{B}} = \hbar \vec{\nabla} \times \vec{A}, \quad (7.18)$$

em que $i, j, k = 1, 2, 3$ e ϵ_{ijk} é o *símbolo de Levi-Civita*:

$$\epsilon_{ijk} = \begin{cases} +1, & (i, j, k) = (1, 2, 3), (3, 1, 2), (2, 3, 1), \\ -1, & (i, j, k) = (2, 1, 3), (3, 2, 1), (1, 3, 2), \\ 0, & \text{nos demais casos.} \end{cases} \quad (7.19)$$

[†] Os índices $\sigma, \nu = 0, 1, 2, 3$ referem-se à identificação $x^\sigma \equiv (x^0, x^1, x^2, x^3) \equiv (t, x, y, z)$. Desse modo, a notação de derivada fica definida: $\partial_\sigma \equiv \partial/\partial x^\sigma$

7.2 Campo de Velocidades e Equações Hidrodinâmicas

Uma vez introduzido o paralelo entre a teoria eletromagnética e os efeitos da parte espinorial do parâmetro de ordem na parte cinética da ação de um CBE espinorial genérico, é natural buscar uma maneira de *reescrever* a equação de Gross-Pitaevskii de modo que fique claro o efeito que os potenciais eletromagnéticos artificiais tem sobre o perfil espacial de densidade e sobre as propriedades *hidrodinâmicas* de um condensado. Como $\boldsymbol{\psi}(x) = \psi(x)\boldsymbol{\zeta}(x)$ e $\boldsymbol{\psi}^\dagger\boldsymbol{\psi} = |\psi|^2 = n$, podemos identificar (4):

$$\psi(x) = \sqrt{n(x)} e^{i\theta(x)}. \quad (7.20)$$

Sem perda de generalidade, aqui escolhemos $f = 1$. A primeira relação acerca do perfil espacial de densidade $n(x)$ que a equação de Gross-Pitaevskii gera é uma *equação de continuidade* (i.e., conservação *local* do número de partículas). Ao tomar a *parte imaginária* da equação

$$i\hbar\boldsymbol{\psi}^\dagger\frac{\partial}{\partial t}\boldsymbol{\psi} = \boldsymbol{\psi}^\dagger\left[-\frac{\hbar^2\nabla^2}{2M} + U_{\text{apr}} - p\mathbf{f}_z + q\mathbf{f}_z^2 + c_0n + c_1\vec{F}\cdot\vec{\mathbf{f}}\right]\boldsymbol{\psi} \quad (7.21)$$

é possível encontrar (4):

$$\frac{\partial n}{\partial t} = -\vec{\nabla} \cdot \left(\frac{\hbar}{M} \text{Im}[\boldsymbol{\psi}^\dagger \vec{\nabla} \boldsymbol{\psi}] \right) = -\vec{\nabla} \cdot \vec{J} \quad (\text{Equação de Continuidade}), \quad (7.22)$$

em que $\vec{J}$ é a *densidade de corrente de número* do condensado. A partir da densidade de corrente, o *campo de velocidades* fica definido como:

$$\vec{v} = \frac{1}{n} \vec{J}. \quad (7.23)$$

Ao expressar a equação acima em termos das partes escalar e espinorial do parâmetro de ordem, percebemos que a interpretação física de $\vec{A}$ está intimamente ligada às propriedades de superfluidez (4):

$$\vec{v} = \frac{\hbar}{M} (\vec{\nabla}\theta - \vec{A}), \quad (7.24)$$

pois, pelas propriedades de circulação da fase θ (e também dos geradores de $\vec{A}$, quando há *quebra espontânea de simetria*), um CBE espinorial admite a formação de *vórtices*, que são estruturas de circulação de corrente *não dissipativas* (i.e., *estáveis* e *quantizadas*,

por exemplo, devido à continuidade de $e^{i\theta(x(\lambda))}$ em um caminho fechado $x(\lambda)$ qualquer). Contudo, diferentemente do caso de um condensado sem spin, $\vec{A}$ faz com que um CBE espinorial não seja necessariamente um fluido *irrotacional*:

$$\vec{\nabla} \times \vec{v} = -\frac{\vec{B}}{M} \neq 0. \quad (7.25)$$

Além das propriedades discutidas acima, é importante destacar que a estrutura da densidade de corrente de número superfluida em um CBE espinorial é completamente análoga à da densidade de corrente elétrica supercondutiva $\vec{J}_S$ em um supercondutor (como descrito pela teoria de Ginzburg-Landau (21)):

$$\vec{J}_S = n_p e_p \frac{\hbar}{M_p} \left(\vec{\nabla} \theta - \frac{e_p}{\hbar} \vec{A}_{\text{EM}} \right), \quad (7.26)$$

em que e_p , M_p e n_p são, respectivamente, a carga elétrica, a massa e a densidade de número dos *pares de Cooper* (i.e., acoplamento de pares de elétrons) no sistema. O potencial vetor $\vec{A}_{\text{EM}}$, utilizado acima, é proveniente da teoria eletromagnética usual.

A segunda relação que a equação de Gross-Pitaevskii gera estabelece a *conservação local de energia*. Ela pode ser obtida ao tomar a *parte real* da Eq. 7.21 (4):

$$\hbar \left(\frac{\partial \theta}{\partial t} + \Phi \right) + \mu_{\text{local}} + \frac{1}{2} M \vec{v}^2 = 0 \quad (\text{Conservação Local de Energia}). \quad (7.27)$$

Como $-\hbar \partial \theta / \partial t = \delta E / \delta n + \hbar \Phi$ para um *condensado espinorial qualquer*, a relação acima representa, de fato, a conservação local de *energia* e o potencial escalar artificial $\hbar \Phi$ pode ser interpretado como um termo extra ao *potencial químico local* μ_{local} (4):

$$\mu_{\text{local}} = -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{\nabla^2 \sqrt{n}}{\sqrt{n}} + \frac{\hbar^2}{2M} \Lambda + U_{\text{apr}} + \zeta^\dagger (-p \mathbf{f}_z + q \mathbf{f}_z^2) \zeta + c_0 n + \frac{c_1}{n} \vec{F}^2. \quad (7.28)$$

A última relação que a equação de Gross-Pitaevskii devolve acerca das propriedades hidrodinâmicas de um CBE espinorial abordada aqui é a da *segunda lei de Newton local* para o campo de velocidades $\vec{v}$. Ao tomar o gradiente da equação 7.27 é obtida a expressão (4):

$$M \frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + \vec{\nabla} \left\{ \mu_{\text{local}} + \frac{1}{2} M \vec{v}^2 \right\} = \vec{\mathcal{E}}. \quad (7.29)$$

Pela definição da *derivada material* $\frac{D}{Dt}$,

$$\frac{D}{Dt} \equiv \frac{\partial}{\partial t} + \vec{v} \cdot \vec{\nabla}, \quad (7.30)$$

e pela identidade vetorial

$$\vec{\nabla} \vec{v}^2 = 2\vec{v} \times (\vec{\nabla} \times \vec{v}) + 2(\vec{v} \cdot \vec{\nabla})\vec{v}, \quad (7.31)$$

a Eq. 7.29 é reduzida à estrutura da dinâmica de uma partícula carregada (4):

$$M \frac{D\vec{v}}{Dt} = \vec{\mathcal{E}} + \vec{v} \times \vec{\mathcal{B}} - \vec{\nabla} \mu_{\text{local}} \quad (2^{\text{a}} \text{ Lei de Newton Local}). \quad (7.32)$$

7.3 Quebra Espontânea de Simetria e Física de Altas Energias

Além das propriedades hidrodinâmicas dos CBEs espinoriais, as quais dão significado físico claro às grandezas relevantes no sistema, existe uma outra característica fundamental acerca do parâmetro de ordem: a *quebra espontânea de simetria*. Para abordar as origens desse fenômeno, que guarda muita semelhança ao que é estudado em física de *altas energias*, devemos analisar em mais detalhes as simetrias da *ação* S (Eq. 4.20) e da equação de Gross-Pitaevskii (Eq. 4.22). Contudo, para que as discussões abordadas a partir daqui tenham significado físico, devemos considerar que os comprimentos típicos do sistema sejam muito maiores que os *comprimentos de coerência* ξ_i (4):

$$\xi_i^2 = \frac{\hbar^2 \Omega}{2M|c_i|N}, \quad i = 0, 1. \quad (7.33)$$

Esses comprimentos, do inglês *healing lengths*[§], são as distâncias típicas que o sistema precisa para sair de uma região de densidade nula ($|\psi|^2 = 0$) e chegar até outra de densidade considerável ($|\psi|^2 \sim N/\Omega$). Dessa maneira, é possível garantir que o parâmetro de ordem represente apenas um estado (ferromagnético, polar etc.) em toda extensão do condensado. (4)

Primeiramente, como desejamos analisar a simetria da ação em conjunto com a equação de Gross-Pitaevskii, é conveniente encontrar a expressão da ação S quando extremizada (S_E). Para isso, basta impor que o parâmetro de ordem ψ satisfaz a condição de extremização (Eq. 4.22) ao substituir $\partial_t \psi$ na expressão genérica da ação 4.20. Assim, podemos encontrar:

[§] Ou *coherence lengths*. (15)

$$S_E = \int \frac{c_0}{2} n^2 + \frac{c_1}{2} \vec{F}^2 dx dt. \quad (7.34)$$

Da definição das grandezas $n(x)$ e $\vec{F}(x)$, é possível mostrar que S_E é *invariante* por qualquer *rotação tridimensional* do parâmetro de ordem $\psi' = \mathbf{R}\psi$, $\mathbf{R} \in \text{SO}(3)$. Mais precisamente, no caso aqui abordado, as grandezas n e $\vec{F}^2$ são invariantes pela rotação $\mathbf{R}$. Ao tomar a propriedade fundamental das rotações $\mathbf{R}^\dagger = \mathbf{R}^{-1}$, é simples mostrar que n é invariante:

$$n' = \psi'^\dagger \psi' = \psi^\dagger \mathbf{R}^\dagger \mathbf{R} \psi = \psi^\dagger \psi = n. \quad (7.35)$$

Diferentemente do simples caso de n , é necessário atribuir uma *estrutura específica* de $\mathbf{R}$ para que sejamos capazes de provar a invariância de $\vec{F}^2$. Esse passo é fundamental, pois a propriedade de invariância depende do efeito da rotação sobre as matrizes de spin $\vec{\mathbf{f}}$; e isso é obtido apenas ao escrever $\mathbf{R}$ em termos dessas matrizes.

Em geral, uma rotação tridimensional arbitrária ($\in \text{SO}(3)$) pode ser definida em termos de uma sequência de *três* rotações simples ($\in \text{SO}(2)$) em três eixos distintos. (4) Um exemplo dessa sequência é:

$$\mathbf{R}(\alpha, \beta, \gamma) = \mathbf{R}_z(\alpha) \mathbf{R}_y(\beta) \mathbf{R}_z(\gamma), \quad (7.36)$$

em que $\mathbf{R}_y$ e $\mathbf{R}_z$ representam, respectivamente, rotações sobre os eixos y e z . Os parâmetros α, β e γ são chamados de *ângulos de Euler* e caracterizam completamente a rotação. (4) Tradicionalmente, os ângulos de Euler são definidos para os intervalos $\alpha, \gamma \in [0, 2\pi)$ (ângulos azimutais) e $\beta \in [0, \pi]$ (ângulo polar). Das propriedades da mecânica quântica, o efeito de uma rotação simples (i.e., $\mathbf{R} \in \text{SO}(2)$) sobre um estado de spin é dado por um operador como:

$$\mathbf{R}_{\hat{d}}(\theta) = e^{-i\theta \hat{d} \cdot \vec{\mathbf{f}}}, \quad (7.37)$$

que representa a rotação de um ângulo θ em relação a um eixo $\hat{d}$. Portanto, uma *rotação tridimensional arbitrária* de um espinor é dada por (4):

$$\mathbf{R}(\alpha, \beta, \gamma) = e^{-i\alpha \mathbf{f}_z} e^{-i\beta \mathbf{f}_y} e^{-i\gamma \mathbf{f}_z}. \quad (7.38)$$

Pela propriedade dos operadores de spin:

$$e^{i\theta\mathbf{f}_k}\mathbf{f}_je^{-i\theta\mathbf{f}_k} = \begin{cases} \mathbf{f}_j\cos(\theta) + \epsilon_{jkl}\mathbf{f}_l\sin(\theta), & j \neq k = x, y, z \\ \mathbf{f}_j, & j = k = x, y, z \end{cases}, \quad (7.39)$$

com um pouco de trabalho algébrico (aqui omitido), é possível mostrar que $\vec{F}^2$ é invariante pela ação de uma rotação qualquer:

$$(\vec{F}')^2 = (\psi'^\dagger \vec{f} \psi')^2 = (\psi^\dagger \mathbf{R}^\dagger \vec{f} \mathbf{R} \psi)^2 = (\psi^\dagger \vec{f} \psi)^2 = \vec{F}^2. \quad (7.40)$$

Assim, pode-se provar que S_E é invariante por qualquer rotação do parâmetro de ordem. Contudo, pela aplicação de $\mathbf{R}$, S_E pode não mais representar o valor *extremizado* da ação S . Para verificar essa possibilidade, precisamos investigar as propriedades simétricas da equação de Gross-Pitaevskii. Em particular, podemos considerar primeiramente o caso de $\mathbf{R}$ constante. É possível mostrar que, se ψ é um parâmetro de ordem que extremiza a ação S (i.e., ψ satisfaz a equação de Gross-Pitaevskii), $\mathbf{R}\psi$ também vai extremizá-la se $\mathbf{R}$ satisfizer:

$$(\vec{F}' \cdot \vec{f})\mathbf{R} = \mathbf{R}(\vec{F} \cdot \vec{f}), \quad (7.41)$$

$$[\partial_\mu, \mathbf{R}] = 0, \quad (7.42)$$

$$[-p\mathbf{f}_z + q\mathbf{f}_z^2, \mathbf{R}] = 0. \quad (7.43)$$

A primeira equação acima é uma identidade matemática que pode ser obtida a partir da propriedade da Eq. 7.39 e, portanto, *sempre* se verifica. A segunda equação também é verdadeira devido à escolha $\partial_\mu \mathbf{R} = 0$. Já a terceira equação pode ser verdadeira apenas em dois casos: a campo magnético $\vec{B}$ nulo ($p = q = 0$) ou a $\beta = 0$. No primeiro caso, a ausência do campo magnético dá liberdade para que $\mathbf{R}$ seja qualquer rotação tridimensional. No segundo caso, a existência de campo magnético não nulo restringe $\mathbf{R}$ a rotações apenas em torno do eixo z . Logo, podemos concluir (para $\mathbf{R}$ constante) que a **dinâmica** de um CBE espinorial é **invariante** perante rotações $\mathbf{R} \in SO(3)$, no primeiro caso, e $\mathbf{R} \in SO(2)$, no segundo caso (detalhes acerca desses dois *grupos de Lie* estão contidos na Ref. (14)).

Uma propriedade importante acerca da invariância da dinâmica do sistema é a maneira como as rotações $\mathbf{R}$ podem descrever parâmetros de ordem provenientes de uma *quebra espontânea de simetria*. Em associação com a simetria de fase $e^{i\phi}$ ($\partial_\mu \phi = 0$) do parâmetro de ordem (Ref. (14), o grupo unitário $U(1)$), a *transformação* mais geral que deixa a dinâmica da fase condensada invariante é do tipo:

$$\psi' = e^{i\phi} \mathbf{R} \psi, \quad (7.44)$$

e pertence ao grupo de simetria $\mathcal{G}$:

$$e^{i\phi}\mathbf{R} \in \mathcal{G} = \begin{cases} U(1) \times SO(2), \vec{B} \neq 0, \\ U(1) \times SO(3), \vec{B} = 0. \end{cases} \quad (7.45)$$

É importante deixar claro que o *grupo de simetria* escrito acima representa a *máxima simetria* do sistema, codificada pelos parâmetros $(\phi, \alpha, \beta, \gamma)$. Além disso, ao manter *fixado* um único ψ , o grupo $\mathcal{G}$ representa também a *maior variedade* (14) à qual ψ' pode pertencer.

Contudo, é possível que, para os elementos $e^{i\phi_{\mathcal{H}}}\mathbf{R}_{\mathcal{H}}$ de algum *subgrupo* de simetria $\mathcal{H} \subset \mathcal{G}$, um dado ψ (fixo) seja sempre invariante:

$$e^{i\phi_{\mathcal{H}}}\mathbf{R}_{\mathcal{H}}\psi = \psi, \forall e^{i\phi_{\mathcal{H}}}\mathbf{R}_{\mathcal{H}} \in \mathcal{H}. \quad (7.46)$$

Assim, fisicamente, podemos interpretar $\mathcal{H}$ como a *simetria residual* de um estado *ordenado*, representado por ψ . (4) De maneira geral, se um subgrupo como $\mathcal{H}$ existe, a ***simetria resultante*** do sistema (ou a *variedade resultante* de ψ') é ***restrita*** a uma *variedade “menor”*[¶]. Uma possível consequência dessa restrição, que será vista em casos específicos, é a independência de ψ' perante algum dos parâmetros $(\phi, \alpha, \beta, \gamma)$. Logo, se existe um subgrupo $\mathcal{H}$ que restringe $\mathcal{G}$ para um dado parâmetro de ordem, o sistema condensado possui um grau de ordenamento, o que, em outras palavras, representa uma *quebra espontânea de simetria*.

Um exemplo de parâmetro de ordem simples, resultado de uma quebra espontânea de simetria, é o *estado ferromagnético* (Eq. 5.7) para $\vec{B} = 0$. Neste caso, $\mathcal{G} = U(1) \times SO(3)$, o que não privilegia direção alguma do sistema. Os elementos do subgrupo $\mathcal{H}$, que geram a invariância do parâmetro de ordem ferromagnético, são do tipo $h(\phi) = e^{i\phi}e^{-i\phi\mathbf{f}_z}$:

$$e^{i\phi}e^{-i\phi\mathbf{f}_z} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \forall \phi \in [0, 2\pi). \quad (7.47)$$

Logo, $\mathcal{H}$ é *isomorfo* ao grupo $SO(2)$ (i.e., ambos grupos possuem a mesma estrutura) e, dessa maneira, *privilegia* um eixo de simetria do sistema (estado ordenado), dado pela direção da densidade média de spin:

$$\frac{\vec{F}}{|\vec{F}|} = \hat{z}. \quad (7.48)$$

[¶] Mais detalhes acerca disso estão contidos no próximo capítulo.

É importante citar que, além do estado ferromagnético, todos os parâmetros de ordem uniformes e estacionários abordados no Cap. 5 são provenientes da quebra espontânea da simetria do sistema (Cap. 8).

Uma vez definido o que é quebra espontânea de simetria e quais transformações deixam a dinâmica do parâmetro de ordem invariante, é possível dar um passo além. Anteriormente, consideramos o caso em que a transformação $e^{i\phi}\mathbf{R}$ é dada em termos de parâmetros $(\phi, \alpha, \beta, \gamma)$ *constantes*. Essa era uma das condições necessárias para que um parâmetro de ordem arbitrário ψ continuasse a extremizar a ação mesmo após ser transformado, sem alterar seu perfil de densidade $n(x)$ nem o módulo quadrado da densidade de spin $\vec{F}^2(x)$. Então, se os parâmetros $(\phi, \alpha, \beta, \gamma)$ não forem constantes ($\partial_\mu e^{i\phi}\mathbf{R} \neq 0$), a transformação $\psi' = e^{i\phi}\mathbf{R}\psi$ não preserva a dinâmica de ψ e, logo, ψ' não extremiza a ação S . Contudo, mesmo nessa situação, é sempre possível *redefinir* matematicamente $n(x)$ e $\vec{F}^2(x)$ de modo que ψ' satisfaça a equação de Gross-Pitaevskii e extremize a ação (ao preço de ψ não mais extremizá-la). Esse procedimento, muito similar ao que é feito em *física de altas energias* (do processo de formação das *partículas elementares* até a integração dessas no *modelo padrão* (11)), nada mais é do que a expansão do parâmetro de ordem em torno de um extremo da ação, levando em conta a simetria da dinâmica do sistema $\mathcal{G}$. Logo, uma aplicação natural desse tipo de expansão é a *generalização* do parâmetro de ordem dos *estados uniformes e estacionários* vistos no Cap. 5. Em notação genérica, a parte espinorial *constante* do parâmetro de ordem desses estados é denotada por ζ_0 , a expansão é definida como:

$$\psi(x, t) = \sqrt{n(x, t)} e^{i\theta(x, t)} e^{-i\alpha(x, t)\mathbf{f}_z} e^{-i\beta(x, t)\mathbf{f}_y} e^{-i\gamma(x, t)\mathbf{f}_z} \zeta_0 \quad (7.49)$$

e a *textura de spin* do parâmetro de ordem deixa de ser trivial, assim como suas características simétricas e topológicas (Caps. 8 e 9).

7.4 Quebra Espontânea de Simetria: Observáveis

Uma pergunta muito natural que podemos fazer com base na discussão acerca das origens da quebra espontânea da simetria de um CBE espinorial, abordada anteriormente, é:

Quais os efeitos da expansão dos estados de quebra espontânea de simetria sobre as propriedades hidrodinâmicas e os observáveis do sistema?

Primeiramente, como essa expansão modifica a parte espinorial ζ_0 do condensado, é esperado que $\vec{F}$ também seja alterado. Pela propriedade da Eq. 7.39 e em conjunto com o fato de que, para os estados uniformes e estacionários (Cap. 5, exceto para o estado QSA),

o spin médio por partícula é sempre paralelo ao eixo z (ou seja, $\zeta_0^\dagger \vec{f} \zeta_0 = \zeta_0^\dagger \mathbf{f}_z \zeta_0 \hat{z} = f_0 \hat{z}$), podemos escrever $\vec{F}$ como (4):

$$\vec{F} = n f_0 (\sin(\beta) \cos(\alpha) \hat{x} + \sin(\beta) \sin(\alpha) \hat{y} + \cos(\beta) \hat{z}), \quad (7.50)$$

que é a simples rotação da direção da *magnetização* pelos ângulos polar β e azimutal α . Além disso, como α e β podem ser funções da posição (e do tempo), a direção para onde $\vec{F}$ aponta não é necessariamente constante por toda a extensão do condensado. Então, quando $\nabla(\vec{F}/n f_0) \neq 0$, é dito que a *textura de spin* do condensado *não é trivial*.

Outras grandezas que são afetadas também pela expansão do parâmetro de ordem são o potencial 4-vetor artificial $\mathbb{U}_\nu$ e o tensor do campo eletromagnético artificial $\mathbb{F}_{\sigma\nu}$. Tomando as mesmas considerações utilizadas no cálculo de $\vec{F}$ acima, encontramos o seguinte formato para $\mathbb{U}_\nu$ (4):

$$\mathbb{U}_\nu = i\hbar \zeta^\dagger \partial_\nu \zeta = i\hbar \zeta_0^\dagger (\mathbf{R}^\dagger \partial_\nu \mathbf{R}) \zeta_0 = \hbar f_0 (\cos(\beta) \partial_\nu \alpha + \partial_\nu \gamma). \quad (7.51)$$

É importante notar que γ se comporta como um “calibre” (*gauge*) do potencial eletromagnético, pois, seja qual for sua escolha, não há alteração nos campos eletromagnéticos obtidos (a menos de singularidades). Logo, $\mathbb{F}_{\sigma\nu}$ pode ser encontrado (4):

$$\mathbb{F}_{\sigma\nu} = \partial_\sigma \mathbb{U}_\nu - \partial_\nu \mathbb{U}_\sigma = \hbar f_0 \sin(\beta) [(\partial_\sigma \alpha)(\partial_\nu \beta) - (\partial_\nu \alpha)(\partial_\sigma \beta)]. \quad (7.52)$$

Com base no resultado acima, podemos também escrever $\mathbb{F}_{\sigma\nu}$ em termos do vetor unitário $\hat{s} \equiv \vec{F}/n f_0 = s^i \hat{x}_i$ ($i = 1, 2, 3$) (4):

$$\mathbb{F}_{\sigma\nu} = -\hbar f_0 \epsilon_{ijk} s^i (\partial_\sigma s^j) (\partial_\nu s^k) = -\hbar f_0 \hat{s} \cdot (\partial_\sigma \hat{s}) \times (\partial_\nu \hat{s}), \quad (7.53)$$

o que vai facilitar a interpretação de algumas das propriedades topológicas das texturas de spin, abordadas no Cap. 9 (Eq. 9.37).

Uma vez encontrados os efeitos da expansão do parâmetro de ordem sobre as grandezas acima, intimamente ligadas às propriedades da parte espinorial ζ , podemos naturalmente investigar o mesmo para as propriedades hidrodinâmicas mais genéricas do condensado, como o campo de velocidades $\vec{v}$. Tomando a estrutura desse campo (Eq. 7.24),

juntamente com a expressão do potencial vetor artificial $\vec{A}$ (Eq. 7.51), $\vec{v}$ pode ser escrito como (4):

$$\vec{v} = \frac{\hbar}{M} \left[\vec{\nabla}\theta - f_0 \left(\cos(\beta) \vec{\nabla}\alpha + \vec{\nabla}\gamma \right) \right] \quad (7.54)$$

e a *circulação de massa* sobre um caminho fechado $\mathcal{C}$ é dada por:

$$\oint_{\mathcal{C}} \vec{v} \cdot d\vec{l} = \frac{\hbar}{M} \left[\oint_{\mathcal{C}} d\theta - f_0 \oint_{\mathcal{C}} (d\alpha + d\gamma) \right] + \frac{\hbar}{M} f_0 \oint_{\mathcal{C}} (1 - \cos(\beta)) \vec{\nabla}\alpha \cdot d\vec{l}. \quad (7.55)$$

Como sempre podemos escolher o caminho $\mathcal{C}$ de modo que o spin por partícula $f_0 \hat{s}$ seja bem definido nele (i.e., $\hat{s}$ definida *univocamente* em cada ponto do caminho), as variações de α e β devem satisfazer os vínculos (4):

$$\oint_{\mathcal{C}} d\alpha = 2\pi n_{\alpha} \quad (n_{\alpha} \in \mathbb{Z}), \quad (7.56)$$

$$\oint_{\mathcal{C}} d\beta = 0. \quad (7.57)$$

Similarmente, $\oint_{\mathcal{C}} d\theta$ e $\oint_{\mathcal{C}} d\gamma$ também são quantizados a múltiplos ou frações de 2π , o que é obtido ao considerar que o parâmetro de ordem é definido univocamente no caminho $\mathcal{C}$. (4) Logo, a grandeza

$$\oint_{\mathcal{C}} \vec{v} \cdot d\vec{l} - \frac{\hbar}{M} f_0 \oint_{\mathcal{C}} (1 - \cos(\beta)) \vec{\nabla}\alpha \cdot d\vec{l}$$

é quantizada. Contudo, para termos uma interpretação matemática e física mais clara de tal grandeza, devemos analisar mais a fundo a estrutura da integral

$$I(\hat{s}) = \oint_{\mathcal{C}} (1 - \cos(\beta)) \vec{\nabla}\alpha \cdot d\vec{l}. \quad (7.58)$$

De maneira geral, é possível escrever $I(\hat{s})$ como uma *integral dupla* (4):

$$I(\hat{s}) = \int_0^{2\pi n_{\alpha}} \int_0^{\beta(\alpha)} \sin(\beta) d\beta d\alpha. \quad (7.59)$$

Ou seja, $I(\hat{s})$ devolve a *área* entre o *polo norte* e o caminho $(\alpha, \beta(\alpha))$ desenvolvido por

$\hat{s}$ numa esfera unitária. Mas, mais do que essa simples interpretação geométrica, há *três analogias* interessantes que mostram o significado físico dessa integral: o *princípio de gauge*, o *efeito Aharonov-Bohm* e a *fase de Berry*. Para mais informações acerca dessas analogias, veja o apêndice [B](#).

8 GRUPOS DE SIMETRIA DOS CONDENSADOS ESPINORIAIS

Como já abordado em detalhes no capítulo anterior, a quebra espontânea da simetria de um sistema condensado pode gerar estruturas matemáticas não triviais no parâmetro de ordem, principalmente nas grandezas *hidrodinâmicas*. Em particular, na seção 7.3, introduzimos *fisicamente* conceitos que mostram que um sistema espinorial admite soluções geradas pela quebra espontânea da sua simetria. Logo, para compreendermos mais a fundo esses estados gerados, é necessário que *classifiquemos* a simetria de cada uma dessas soluções do parâmetro de ordem (um passo fundamental para classificar também a topologia e estabilidade do parâmetro de ordem).

Para isso, será útil introduzir brevemente alguns conceitos matemáticos relacionados à *teoria dos grupos de Lie* que vão um pouco além do que a Ref. (14) discute. Por simplicidade, escolhemos não carregar o texto com “jargões” matemáticos (que, de fato, justificam passagens, propriedades e afins, mas que, em suma, contribuem pouco para a interpretação dos *resultados físicos* deste e dos demais capítulos). Assim, quando necessário, exemplificaremos os conceitos matemáticos em situações simplificadas e recapitulando situações discutidas nos capítulos anteriores.

Em síntese, neste capítulo abordaremos a classificação da simetria dos CBEs espinoriais do ponto de vista matemático, mantendo o foco nas suas aplicações físicas imediatas — como a *determinação* dos estados que extremizam a ação do parâmetro de ordem S apenas pela análise da sua simetria. (22)

8.1 A Variedade do Parâmetro de Ordem

A palavra “variedade” já foi brevemente mencionada no capítulo anterior, mas (além do que é abordado na Ref. (14)) não dedicamos muita atenção acerca do que ela significa matematicamente. Isto é, utilizamos “variedade” apenas para denotar alguma *característica* que está relacionada aos *graus de liberdade* dos parâmetros da transformação de simetria $\mathbf{R}$ e da fase global $e^{i\theta}$. Apesar da simplicidade dessa consideração, a “definição”^{*} de *variedade* (diferenciável) não é tão distante dessa noção.

Ou seja, uma *variedade diferenciável* $\mathcal{M}$ pode ser descrita matematicamente, por exemplo, por uma *hiper-superfície* em $\mathbb{R}^{N+1}$ construída de modo que sempre seja possível definir *um plano tangente* ($\cong \mathbb{R}^N$) em cada um dos seus pontos (i.e., uma hiper-superfície sem *cortes*, *vincos* ou *bicos*). De forma mais específica, uma variedade de dimensão N pode ser descrita como um espaço topológico com a propriedade de que, para cada ponto do espaço, pode-se definir uma vizinhança que é homeomórfica a um subconjunto aberto

^{*} Utilizamos as *aspas*, pois não trataremos *rigorosamente* da sua definição

de um espaço Euclidiano de dimensão N . Em outras palavras, pode-se definir um mapa que leva cada ponto desta vizinhança em um ponto distinto na vizinhança próxima do espaço Euclidiano de mesma dimensão.

De maneira geral, uma variedade diferenciável sempre pode ser descrita por um conjunto de parâmetros (coordenadas) $(\alpha_1, \dots, \alpha_N)$ de modo que suas propriedades sejam dadas em termos deles. Por exemplo, o grupo de Lie $\mathcal{G} = SO(3) \times U(1)$, utilizado para descrever a simetria completa da ação S na ausência de campos magnéticos no capítulo anterior, é uma *variedade diferenciável* e um sistema de coordenadas que descreve $\mathcal{G}$ é $(\theta, \alpha, \beta, \gamma)$, os parâmetros vistos na Eq. 7.49. É importante deixar claro que, apesar desse exemplo de variedade ser um grupo de Lie (14), nem sempre uma variedade terá tal tipo de estrutura.

Assim, podemos entender uma variedade como um espaço de parâmetros “bem comportado” no qual podemos caracterizar objetos matemáticos, como a transformação geradora do parâmetro de ordem $\mathbf{R}e^{i\theta}$ (Eq. 7.49) e o parâmetro de ordem em si. Sem considerar as simetrias envolvidas no hamiltoniano de um CBE espinorial (spin f), o parâmetro de ordem pode ser descrito genericamente por um vetor complexo de $2f + 1$ componentes. Se considerarmos apenas a sua parte normalizada $\boldsymbol{\zeta}$, a maior variedade que o parâmetro de ordem define é a hiper-superfície esférica $S^{4f+1} \subset \mathbb{R}^{4f+2}$, pois:

$$\sum_{m=-f}^f \text{Re}\{\zeta_m\}^2 + \text{Im}\{\zeta_m\}^2 = 1. \quad (8.1)$$

Contudo, da maneira que o parâmetro de ordem $\boldsymbol{\psi}(x)$ foi definido na Eq. 7.49 (isto é, a maneira que ele foi gerado pela quebra espontânea da simetria do sistema), a maior variedade que ele pode definir é $\mathcal{G}$ (Eq. 7.45), que é o grupo de simetria da ação S . No capítulo anterior (Eq. 7.45), discutimos duas possibilidades para $\mathcal{G}$: na ausência campo magnético ($p = q = 0$) e na presença de efeito Zeeman linear ($p \neq 0$). No entanto, existe mais um caso (menos comum) que é a presença **apenas** do efeito Zeeman quadrático ($p = 0$ e $q \neq 0$). Nesse tipo de interação magnética ($\propto \mathbf{f}_z^2$), a ação S apresenta uma *simetria extra* de rotação de um ângulo π em relação a qualquer eixo no plano $x - y$. Dessa maneira, o grupo $\mathcal{G}$, que contem as transformações que deixam a ação e a energia do sistema invariantes, é resumido a (4):

$$\mathcal{G} = \begin{cases} U(1)_\theta \times SO(3)_{\tilde{\mathbf{f}}}, & p = q = 0, \\ U(1)_\theta \times SO(2)_{\mathbf{f}_z}, & p \neq 0, \\ U(1)_\theta \times (D_\infty)_{\mathbf{f}_z}, & p = 0, q \neq 0, \end{cases} \quad (8.2)$$

em que $D_\infty = SO(2) \star \mathbb{Z}_2$ é chamado de *grupo diedral*, $\mathbb{Z}_2 \cong \{1, e^{-i\pi \mathbf{f}_y}\}$ (14) e o símbolo $\cong$ denota a relação de *isomorfismo* entre grupos. O símbolo “ $\star$ ” é utilizado para denotar um

produto semidireto entre os dois grupos. Nos termos mais simples possíveis, ele *informa* que a atuação dos elementos de $\mathbb{Z}_2$ influenciam os elementos de $SO(2) \cong \{e^{-i\alpha\mathbf{f}_z} \mid \alpha \in [0, 2\pi)\}$, dado que o comutador $[\mathbf{f}_z, \mathbf{f}_y] \neq 0$ (diferente do caso do produto direto “ $\times$ ” com $U(1) \cong \{e^{i\theta}\}$, cujos elementos comutam com os outros grupos em questão). Os índices extras que aparecem na Eq. 8.2 servem para informar a *origem* da simetria (fase, spin etc.). Logo, seja lá qual for a situação de $\mathcal{G}$, os elementos g desse grupo podem ser representados por (4)

$$g(\theta, \alpha, \beta, \gamma) = e^{i\theta} e^{-i\alpha\mathbf{f}_z} e^{-i\beta\mathbf{f}_y} e^{-i\gamma\mathbf{f}_z}, \quad (8.3)$$

a menos de certas escolhas dos parâmetros (α, β, γ) quando o campo magnético aplicado não for nulo. Ou seja: $\beta = 0$, quando $p \neq 0$, e $\beta = \pi$ (juntamente com $\alpha = 0$ ou $\gamma = 0$), quando $p = 0$ e $q \neq 0$.

Mas, assim como S^{4f+1} não representa a variedade que descreve o parâmetro de ordem gerado pela quebra espontânea de simetria, $\mathcal{G}$ também não o representa. Isso acontece, pois $\mathcal{G}$ leva em conta apenas a simetria da *dinâmica* do parâmetro de ordem ζ (i.e., simetria da ação), e não a simetria de ζ especificamente. Ou seja, para cada ζ na variedade $\mathcal{M}$, pode existir um subgrupo de simetria associado ($\subset \mathcal{G}$) que o deixa invariante. Esse grupo, denotado por $\mathcal{H}_\zeta$, é chamado de *grupo de isotropia* (4):

$$\mathcal{H}_\zeta = \{g \in \mathcal{G} \mid g\zeta = \zeta\} \quad (8.4)$$

e pode ser interpretado fisicamente como a “assinatura” da *restrição* da variedade que descreve o parâmetro de ordem ζ (a qual difere para os diferentes estados uniformes do Cap. 5). Em sistemas magnéticos (em um ferromagneto, por exemplo), a existência de um grupo de isotropia pode geralmente ser interpretada como uma “assinatura” do *ordenamento* do sistema.

Assim, para encontrarmos a variedade que caracteriza de fato o parâmetro de ordem ζ , inicialmente precisamos classificar a atuação do grupo $\mathcal{G}$ sobre ele. O conjunto que define essa atuação é chamado de *órbita* e denotado por $\mathcal{M}_o(\zeta)$ (4):

$$\mathcal{M}_o(\zeta) = \{g\zeta \mid g \in G\} \subset \mathcal{M} = S^{4f+1}. \quad (8.5)$$

Da maneira que foi definido, $\mathcal{M}_o(\zeta)$ representa um *espaço degenerado*, pois cada um de seus elementos deixam o valor da ação S inalterado (assim como o valor da energia E). Uma maneira alternativa (e conveniente) de representar esse conjunto é dada ao escrever um parâmetro de ordem genérico da órbita em termos dos parâmetros da transformação

de simetria g : $\zeta = \zeta(\theta, \alpha, \beta, \gamma)$. No caso do *estado ferromagnético*, na ausência de campo magnético, a sua órbita pode ser representada por[†]:

$$\mathcal{M}_o(\zeta_0^{\text{ferro}}) \ni \zeta^{\text{ferro}}(\theta, \alpha, \beta, \gamma) = e^{i(\theta-\gamma)} \begin{pmatrix} e^{-i\alpha} \cos^2 \frac{\beta}{2} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \beta \\ e^{i\alpha} \sin^2 \frac{\beta}{2} \end{pmatrix} \quad (8.6)$$

Por uma análise superficial (e ainda pouco rigorosa), é possível perceber que o ângulo de Euler γ , nesse caso, contribui apenas para a fase global θ' do parâmetro de ordem: $\theta' = \theta - \gamma$. De maneira alternativa, também é possível considerar que a fase θ contribui para o ângulo de Euler γ' , presente na simetria de rotação do espinor: $(\alpha, \beta, \gamma') = (\alpha, \beta, \gamma - \theta)$. Logo, em essência, a variedade $\mathcal{R}_{\text{ferro}}$, que representa o estado ferromagnético, é (a menos de possíveis grupos de simetria discretos):

$$\mathcal{R}_{\text{ferro}} = SO(3)_{\vec{f}, \theta}. \quad (8.7)$$

Contudo, existe uma maneira puramente matemática de encontrarmos a variedade do parâmetro de ordem de um estado. Suponha que ζ seja invariante pelo grupo de isotropia $\mathcal{H}_\zeta \subset \mathcal{G}$. Logo, a atuação de um elemento genérico $g \in \mathcal{G}$ em ζ é inalterada se houver qualquer elemento $h \in \mathcal{H}_\zeta$ à sua direita. Ou seja:

$$\mathcal{M}_o(\zeta) \ni g\zeta = gh\zeta, \forall h \in \mathcal{H}_\zeta. \quad (8.8)$$

Coincidentemente, podemos concluir que, na verdade, são os conjuntos $g\mathcal{H}_\zeta = \{gh | h \in \mathcal{H}_\zeta\}$ ($g \in \mathcal{G}$), chamados de *cosets de $\mathcal{H}_\zeta$ à esquerda* (14), que geram a órbita de ζ . O conjunto de todos os cosets de $\mathcal{H}_\zeta$ formam o *espaço coset à esquerda* $\mathcal{G}/\mathcal{H}_\zeta$,

$$\mathcal{G}/\mathcal{H}_\zeta = \{g\mathcal{H}_\zeta | g \in \mathcal{G}\}. \quad (8.9)$$

É importante notar que o espaço coset é um *conjunto de subconjuntos disjuntos* e que cada coset determina uma *classe de equivalência*. Ou seja, todos os elementos de um coset (digamos $g\mathcal{H}_\zeta$) atuam em ζ como se fossem apenas um único elemento (g). Logo, o grupo de isotropia $\mathcal{H}_\zeta$, de fato, *restringe* a variedade que descreve a órbita de ζ de modo que ela pode ser descrita completamente pelo espaço coset:

$$\mathcal{R}_\zeta = \mathcal{G}/\mathcal{H}_\zeta. \quad (8.10)$$

[†] Justificaremos esse formato logo mais, ainda nesta seção.

Sabendo que, sobre uma órbita, o grupo de isotropia $\mathcal{H}_\zeta$ satisfaz a propriedade (4):

$$\mathcal{H}_{g\zeta} = g\mathcal{H}_\zeta g^{-1}, \forall g \in \mathcal{G}, \quad (8.11)$$

não é difícil mostrar que $\mathcal{G}/\mathcal{H}_\zeta$ e $\mathcal{G}/\mathcal{H}_{g\zeta}$ são conjuntos isomórficos (14):

$$\mathcal{G}/\mathcal{H}_{g\zeta} = \mathcal{G}/(g\mathcal{H}_\zeta g^{-1}) = g(\mathcal{G}/\mathcal{H}_\zeta)g^{-1} \cong \mathcal{G}/\mathcal{H}_\zeta. \quad (8.12)$$

Logo, a variedade $\mathcal{R}_\zeta$, que descreve a órbita $\mathcal{M}_o(\zeta)$ (e, conseqüentemente, todos os parâmetros de ordem no estado definido por ζ), independe do *ponto da órbita* escolhido como referência.

Uma vez definida a variedade $\mathcal{R}_\zeta$, exemplificaremos as variedades de três estados nessa seção: dos dois estados ferromagnéticos (positivo e negativo) e do estado polar. Para isso, precisamos descrever os elementos g do grupo $\mathcal{G}$ na forma matricial. No caso de spin $f = 1$, utilizando a base canônica (diagonal em $\mathbf{f}_z$), tais elementos são iguais a (4):

$$g(\theta, \alpha, \beta, \gamma) = e^{i\theta} \begin{pmatrix} e^{-i(\alpha+\gamma)} \cos^2 \frac{\beta}{2} & -\frac{e^{-i\alpha}}{\sqrt{2}} \sin \beta & e^{-i(\alpha-\gamma)} \sin^2 \frac{\beta}{2} \\ \frac{e^{-i\gamma}}{\sqrt{2}} \sin \beta & \cos \beta & -\frac{e^{i\gamma}}{\sqrt{2}} \sin \beta \\ e^{i(\alpha-\gamma)} \sin^2 \frac{\beta}{2} & \frac{e^{i\alpha}}{\sqrt{2}} \sin \beta & e^{i(\alpha+\gamma)} \cos^2 \frac{\beta}{2} \end{pmatrix}. \quad (8.13)$$

8.2 Estados Ferromagnéticos

Tomando o caso de campo magnético nulo, o grupo $\mathcal{G}$ fica definido pela variedade $U(1)_\theta \times SO(3)_{\vec{f}}$. Para o estado ferromagnético *positivo*, primariamente definido pelo parâmetro de ordem $\zeta_0^{\text{ferro}+} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}^T$ (Cap. 5), é simples mostrar que ele é invariante pelo grupo de isotropia (4)

$$\mathcal{H}_{\text{ferro}+} = \{e^{i\alpha} e^{-i\alpha \mathbf{f}_z} | \alpha \in [0, 2\pi)\} \cong SO(2)_{\theta+\mathbf{f}_z} \subset \mathcal{G} \quad (8.14)$$

Portanto, a variedade do estado ferromagnético positivo é escrita como o espaço coset:

$$\mathcal{R}_{\text{ferro}+} = \frac{U(1)_\theta \times SO(3)_{\vec{f}}}{SO(2)_{\theta+\mathbf{f}_z}}. \quad (8.15)$$

De maneira puramente matemática, encontrar a estrutura do espaço coset acima pode

não ser simples. Contudo, ao analisar o formato de um elemento genérico da *órbita ferromagnética* $\mathcal{M}_o(\zeta_0^{\text{ferro}+})$ (Eq. 8.6)

$$\zeta^{\text{ferro}+} = g\zeta_0^{\text{ferro}+} = e^{i(\theta-\gamma)} \begin{pmatrix} e^{-i\alpha} \cos^2 \frac{\beta}{2} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \beta \\ e^{i\alpha} \sin^2 \frac{\beta}{2} \end{pmatrix}, \quad (8.16)$$

já mostramos que a fase θ tem comportamento efetivo de um ângulo de Euler $(\alpha, \beta, \gamma - \theta)$ e que a variedade desse estado é dada pelo grupo $SO(3)_{\vec{f}, \theta}$. Portanto (4):

$$\mathcal{R}_{\text{ferro}+} = \frac{U(1)_\theta \times SO(3)_{\vec{f}}}{SO(2)_{\theta+\vec{f}_z}} \cong SO(3)_{\vec{f}, \theta}. \quad (8.17)$$

É notável que, na situação de campo magnético nulo, ambos estados ferromagnéticos (*positivo* e *negativo*) compartilham a mesma órbita, uma vez que $\zeta_0^{\text{ferro}-} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}^T$ (Cap. 5) pode ser transformado em $\zeta_0^{\text{ferro}+}$ pelo elemento $g(0, 0, \pi, 0)$:

$$\zeta_0^{\text{ferro}-} = g(0, 0, \pi, 0)\zeta_0^{\text{ferro}+}. \quad (8.18)$$

Logo, a variedade que descreve o estado ferromagnético negativo também é $SO(3)$:

$$\mathcal{R}_{\text{ferro}-} \cong \mathcal{R}_{\text{ferro}+} \cong SO(3)_{\vec{f}, \theta}. \quad (8.19)$$

8.3 Estado Polar

O estado polar é definido pelo parâmetro de ordem $\zeta_0^{\text{polar}} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}^T$ (Cap. 5). Na ausência de campo magnético, $\mathcal{G} = U(1)_\theta \times SO(3)_{\vec{f}}$, o grupo de isotropia $\mathcal{H}_{\text{polar}}$ é definido por duas simetrias distintas: a *invariância* por qualquer *rotação na direção z*,

$$\{e^{-i\alpha\vec{f}_z} | \alpha \in [0, 2\pi)\} \cong SO(2)_{\vec{f}_z} \subset \mathcal{G}, \quad (8.20)$$

e a *invariância* por *rotações de ângulo π* em qualquer eixo contido no *plano $x - y$* (eixo y , por exemplo) acompanhadas de uma transformação de *fase* $e^{i\pi}$,

$$\{1, e^{i\pi} e^{-i\pi\vec{f}_y}\} \cong (\mathbb{Z}_2)_{\theta, \vec{f}} \subset \mathcal{G}. \quad (8.21)$$

Como $[\vec{f}_z, \vec{f}_y] \neq 0$, os dois grupos, geradores do grupo de isotropia $\mathcal{H}_{\text{polar}}$, definem um produto semi-direto. Assim, é obtido (4):

$$\mathcal{H}_{\text{polar}} = SO(2)_{\mathbf{f}_z} \star (\mathbb{Z}_2)_{\theta, \vec{\mathbf{f}}} \subset \mathcal{G}. \quad (8.22)$$

A variedade que descreve, portanto, o parâmetro de ordem do estado polar é:

$$\mathcal{R}_{\text{polar}} = \frac{U(1)_{\theta} \times SO(3)_{\vec{\mathbf{f}}}}{SO(2)_{\mathbf{f}_z} \star (\mathbb{Z}_2)_{\theta, \vec{\mathbf{f}}}}. \quad (8.23)$$

Para encontrar a estrutura do espaço coset acima, podemos explicitar o parâmetro de ordem genérico do estado polar $\zeta^{\text{polar}}(\theta, \alpha, \beta, \gamma)$:

$$\zeta^{\text{polar}}(\theta, \alpha, \beta, \gamma) = g(\theta, \alpha, \beta, \gamma) \zeta_0^{\text{polar}} = e^{i\theta} \begin{pmatrix} -\frac{e^{-i\alpha}}{\sqrt{2}} \sin \beta \\ \cos \beta \\ \frac{e^{i\alpha}}{\sqrt{2}} \sin \beta \end{pmatrix}. \quad (8.24)$$

A primeira observação que podemos fazer é que o estado polar não depende do ângulo de Euler γ . Logo, os parâmetros da variedade $\mathcal{R}_{\text{polar}}$ são (θ, α, β) , o que *poderia* nos dizer que $\mathcal{R}_{\text{polar}} \cong U(1)_{\theta} \times S_{\mathbf{f}}^2$ (interpretando α e β como os ângulos azimutal e polar que definem a esfera de raio unitário S^2). Contudo, para cada ponto nesse espaço de parâmetros, existe outro, definido por *uma reflexão*, que retorna o mesmo parâmetro de ordem:

$$\zeta^{\text{polar}}(\theta, \alpha, \beta) = \zeta^{\text{polar}}(\theta + \pi, \alpha + \pi, \pi - \beta). \quad (8.25)$$

Dessa maneira, o espaço de parâmetros (θ, α, β) é *reduzido* a metade e, para cada par refletido de pontos, podemos atribuir uma classe de equivalência com apenas dois elementos. Ou seja, a simetria de reflexão descrita na equação acima é isomórfica a $\mathbb{Z}_2$ e, para $g(\theta, \alpha, \beta, 0) \in U(1) \times S^2$, obtemos:

$$g(\theta, \alpha, \beta, 0) \zeta_0^{\text{polar}} = g(\theta, \alpha, \beta, 0) \mathbb{Z}_2 \zeta_0^{\text{polar}}. \quad (8.26)$$

Portanto (4):

$$\mathcal{R}_{\text{polar}} = \frac{U(1)_{\theta} \times SO(3)_{\vec{\mathbf{f}}}}{SO(2)_{\mathbf{f}_z} \star (\mathbb{Z}_2)_{\theta, \vec{\mathbf{f}}}} \cong \frac{U(1)_{\theta} \times S_{\mathbf{f}}^2}{(\mathbb{Z}_2)_{\theta, \vec{\mathbf{f}}}}. \quad (8.27)$$

8.4 Algumas Observações

Neste capítulo, abordamos a classificação da simetria dos diferentes estados que o parâmetro de ordem de um CBE espinorial define a partir do estudo das suas respectivas variedades $\mathcal{R}$. Contudo, nessa abordagem partimos do princípio de que os estados uniformes *ferromagnéticos* e *polar* satisfazem a equação de Gross-Pitaevskii (Cap. 5) e, por sua vez, extremizam a ação S . Alternativamente, é importante destacar que existe um tratamento matemático (desenvolvido pelo físico francês Louis Michel em 1971 (22)) em que, a partir de um estudo detalhado das possíveis *isotropias* $\mathcal{H}$ e *órbitas* $\mathcal{M}_o(\zeta)$ relacionadas a um funcional invariante sob a atuação de um grupo de simetria (como a ação S e o grupo $\mathcal{G}$), é possível encontrar os parâmetros de ordem que extremizam a ação S perante a quebra espontânea da simetria do sistema. Dessa forma, o método de Michel pode ser interpretado como o *caminho inverso* da análise que realizamos neste capítulo. Para mais detalhes acerca do método de Michel, veja o apêndice C.

Assim, uma vez determinadas as variedades $\mathcal{R}$, que representam os parâmetros de ordem quando a quebra espontânea da simetria do sistema ocorre, podemos estudar a estabilidade desses estados perante suas *transformações de simetria*. Com esse intuito, no capítulo seguinte abordamos as *propriedades topológicas* dos CBEs espinoriais a partir do estudo dos *grupos de homotopia*, os quais classificam as *cargas topológicas* emergentes no condensado.

9 TOPOLOGIA DOS CONDENSADOS ESPINORIAIS

Além das propriedades simétricas dos CBEs espinoriais, o parâmetro de ordem do sistema condensado é capaz de comportar estados de origem topológica: as ***excitações topológicas***. Foi visto no capítulo anterior que as propriedades simétricas da ação S , que regem a *dinâmica* do condensado, são capazes de (sozinhas) ditar as soluções em que o parâmetro de ordem pode estar. Então, se já somos capazes de encontrar as soluções do parâmetro de ordem do sistema, qual é a utilidade de estudar as propriedades topológicas de um CBE espinorial? A resposta resume-se a uma única palavra: ***estabilidade***.

No estudo da simetria dos possíveis estados do parâmetro de ordem de um espinor (Cap. 8), subentendemos que os *parâmetros da simetria* da ação S eram, simplesmente, *números reais*: $(\theta, \alpha, \beta, \gamma)$. Contudo, segundo a análise do Cap. 7, esses parâmetros podem ser elevados ao patamar de *funções reais*: $(\theta(x, t), \alpha(x, t), \beta(x, t), \gamma(x, t))$. Quando isso ocorre, os parâmetros da simetria passam a influenciar, por exemplo, a *energia cinética do condensado*. Ou seja, mesmo que o parâmetro de ordem (e sua órbita) mantenha-se como uma solução válida, a energia dela pode não ser favorável, de modo que o sistema não seja estável nessa solução. Além do argumento energético, para caracterizar a estabilidade de uma solução do parâmetro de ordem, devemos estudar as propriedades topológicas do estado em que ela se encontra — pois excitações topológicas, em geral, são associadas a *cargas topológicas*, que emergem no sistema físico como grandezas *quantizadas* diversas. Pelo fato de serem grandezas quantizadas em sistemas de muitas partículas, *cargas topológicas* não se alteram facilmente (devido a sua *robustez*) durante a evolução *espacial* e *temporal* do parâmetro de ordem (4), garantindo a *estabilidade* do estado em que o sistema se encontra.

9.1 Grupos de Homotopia

Então, ao estudar as propriedades topológicas do parâmetro de ordem, encontrando quais são as suas *excitações topológicas*, é fundamental que busquemos uma maneira de determinar as cargas topológicas correspondentes — classificando a estrutura matemática dos seus possíveis valores. A área da matemática que estuda as propriedades das *cargas topológicas* é a teoria dos ***grupos de homotopia***. (23)

De maneira resumida, os grupos de homotopia classificam as propriedades de *mapas fechados* em um *espaço topológico*. Um *mapa fechado* pode ser uma *curva fechada* (*loop*), uma *superfície fechada* ou até uma *hiper-superfície fechada* que é *parametrizada* em um “espaço” (em uma variedade, por exemplo). Já um *espaço topológico** pode ser

* Não abordaremos a sua definição e propriedades matemáticas rigorosas (23), uma vez que isso foge do escopo do trabalho.

uma *variedade diferenciável*, como $\mathcal{R}$, a variedade do parâmetro de ordem de um estado específico.

O caso mais simples desses grupos é o *grupo de homotopia fundamental* $\pi_1(\mathcal{R})$, que classifica *loops* em $\mathcal{R}$. Matematicamente, um *loop* genérico α pode ser definido pelo mapa contínuo $\alpha : I = [0, 1] \rightarrow \mathcal{R}$, tal que $\alpha(0) = \alpha(1) = x_0 \in \mathcal{R}$. É importante destacar que o fato da fronteira de I (denotada por $\partial I = \{0, 1\}$) mapear seus pontos em apenas um elemento de $\mathcal{R}$ faz com que os elementos de ∂I formem uma classe de equivalência e que o domínio I seja efetivamente *quocientado* ao círculo S^1 :

$$I/\partial I = \{\partial I\} \cup \{\{t\} \mid t \in (0, 1)\} \cong S^1, \quad (9.1)$$

o que caracteriza α como um *loop* de fato. (23) Além da relação de equivalência definida para o domínio I , podemos definir uma relação de equivalência para *loops*: a **homotopia**. Sejam dois *loops* α e β ($\alpha(0) = \beta(0) = x_0$). Esses dois *loops* serão *homotópicos* se existir um mapa contínuo $F : I \times I \rightarrow \mathcal{R}$, tal que (23):

$$\begin{cases} F(s, 0) = \alpha(s), \\ F(s, 1) = \beta(s), \\ F(0, t) = F(1, t) = x_0, \quad \forall t \in I. \end{cases} \quad (9.2)$$

Nessa situação, F é chamado de *homotopia* entre α e β . Assim, é conveniente definirmos $[\alpha]$ como o conjunto de *loops* homotópicos a α :

$$[\alpha] = \{\beta : I \rightarrow \mathcal{R} \mid \beta \text{ é homotópico a } \alpha\}, \quad (9.3)$$

o qual expressa uma *classe de equivalência*. (23)

Indo além das propriedades de equivalência, é possível definir *operações* entre *loops*. Por exemplo, a operação de *composição* $*$ pode ser definida como:

$$\alpha * \beta(s) = \begin{cases} \beta(2s), & s \in [0, 1/2) \\ \alpha(2s - 1), & s \in [1/2, 1] \end{cases} \quad (9.4)$$

para qualquer par de *loops* (α, β) com $\alpha(0) = \beta(0) = x_0 \in \mathcal{R}$. Também é possível definir o *loop inverso* como:

$$\alpha^{-1}(s) = \alpha(1 - s), \quad (9.5)$$

que é simplesmente o caminho α parametrizado de forma reversa. É importante destacar

também que, apesar de ser sempre possível definir *loops* inversos, em geral, **não** podemos afirmar que $\alpha^{-1} * \alpha(s) = \epsilon(s) = x_0$ ($\equiv$ *loop identidade*). Contudo, a expressão

$$[\alpha^{-1} * \alpha] = [\epsilon] \quad (9.6)$$

é sempre verdadeira para qualquer *loop* α . (23) Logo, é natural definir o *produto* entre *classes de equivalências* como:

$$[\alpha] * [\beta] = [\alpha * \beta]. \quad (9.7)$$

É possível mostrar que o *conjunto* de todas as *classes de equivalência* de *loops* tem *estrutura de grupo* pela operação de composição $*$ (23), o que define o **grupo de homotopia fundamental** $\pi_1(\mathcal{R})$ (conhecido também como **primeiro grupo de homotopia** ou **grupo de homotopia de ordem 1**):

$$\pi_1(\mathcal{R}) = \{[\alpha] \mid \alpha \text{ é um loop em } \mathcal{R}\}. \quad (9.8)$$

Acima, definimos o grupo de homotopia fundamental $\pi_1(\mathcal{R})$. Contudo, existem outros *infinitos* grupos de homotopia de *ordem mais alta* $\pi_n(\mathcal{R})$. Felizmente, as suas definições são exatamente análogas ao caso do grupo fundamental, bastando adaptar o tipo *mapa* que eles descrevem. Por exemplo, tomemos o caso do *segundo grupo de homotopia* $\pi_2(\mathcal{R})$. Os mapas utilizados para definir esse grupo são do tipo $\alpha : I^2 = [0, 1] \times [0, 1] \rightarrow \mathcal{R}$, tal que $\alpha(s_1, s_2) = x_0$ se $(s_1, s_2) \in \partial I^2$ ($\equiv$ fronteira de I^2). Nesse caso, o domínio I^2 é quocientado à superfície esférica S^2 , pois ∂I^2 (as arestas do quadrado definido por I^2) é mapeado em um único ponto, formando uma superfície *diferenciável* e *fechada*. Em notação matemática: $I^2 / \partial I^2 \cong S^2$. Assim, para o caso do n -ésimo grupo de homotopia $\pi_n(\mathcal{R})$, os mapas definidos são do tipo $\alpha : I^n \rightarrow \mathcal{R}$, tal que $\alpha(s_1, \dots, s_n) = x_0$ se $(s_1, \dots, s_n) \in \partial I^n$. Similarmente ao caso $n = 2$, pelo fato da fronteira ∂I^n ser mapeada em apenas um ponto, o domínio I^n é quocientado à *hiper-superfície* esférica S^n (i.e., $I^n / \partial I^n \cong S^n$).

A definição de homotopia para os mapas de dimensão maior mantém-se a mesma. Ou seja, $\alpha, \beta : I^n \rightarrow \mathcal{R}$ são dois mapas homotópicos se existir uma homotopia (mapa contínuo) $F : I^n \times I \rightarrow \mathcal{R}$ entre eles:

$$\begin{cases} F(s_1, \dots, s_n, 0) = \alpha(s_1, \dots, s_n), \\ F(s_1, \dots, s_n, 1) = \beta(s_1, \dots, s_n), \\ F(s_1, \dots, s_n, t) = x_0, \text{ se } (s_1, \dots, s_n) \in \partial I^n, \forall t \in I, \end{cases} \quad (9.9)$$

o que mantém a mesma definição de classe de equivalência $[\alpha]$ (Eq. 9.3). A composição entre dois mapas pode ser definida por:

$$\alpha * \beta(s_1, \dots, s_n, 0) = \begin{cases} \beta(2s_1, s_2, \dots, s_n), & s_1 \in [0, 1/2) \\ \alpha(2s_1 - 1, s_2, \dots, s_n), & s_1 \in [1/2, 1] \end{cases}. \quad (9.10)$$

Pela definição da composição de mapas acima, o mapa inverso deve ser definido por:

$$\alpha^{-1}(s_1, s_2, \dots, s_n) = \alpha(1 - s_1, s_2, \dots, s_n), \quad (9.11)$$

Assim, analogamente ao caso do grupo de homotopia fundamental $\pi_1(\mathcal{R})$, ao definir a mesma operação $*$ entre as diferentes classes de equivalência dos mapas $I^n/\partial I^n \rightarrow \mathcal{R}$ (Eq. 9.7), é possível mostrar que o conjunto de todas elas forma um grupo, chamado de n -ésimo grupo de homotopia $\pi_n(\mathcal{R})$ (23):

$$\pi_n(\mathcal{R}) = \{[\alpha] \mid \alpha \text{ é um mapa } I^n/\partial I^n \rightarrow \mathcal{R}\}. \quad (9.12)$$

Um propriedade matemática importante que distingue o grupo de homotopia fundamental $\pi_1(\mathcal{R})$ dos de ordem mais alta $\pi_n(\mathcal{R})$ (com $n \geq 2$) é o fato de que os últimos são necessariamente *abelianos* (i.e., a operação entre classes de equivalência é *comutativa* (23)). Essa propriedade, surge do fato de que a composição $*$ envolve apenas um parâmetro que descreve o mapa. Assim, para $n \geq 2$, existe uma *dimensão* extra, pela qual sempre é possível construir uma homotopia entre $\alpha * \beta$ e $\beta * \alpha$. (23) Em suma:

$$[\alpha] * [\beta] = [\alpha * \beta] = [\beta * \alpha] = [\beta] * [\alpha], \quad n \geq 2. \quad (9.13)$$

Nesse trabalho, não pretendemos calcular explicitamente exemplos de grupos de homotopia (a menos de alguns poucos casos triviais), uma vez que esse cálculo pode ser dispendioso e foge do escopo da dissertação. Exemplos práticos da utilização dos grupos de homotopia para descrever as excitações topológicas em CBEs espinoriais são discutidos nas próximas seções.

9.2 Vórtices

As estruturas topológicas mais simples que podem ser descritas com os grupos de homotopia são os vórtices. Em sistemas com três dimensões espaciais, vórtices podem ser descritos geralmente por um “defeito” (i.e., uma singularidade) em formato de *linha*, de modo que o material, em torno da linha singular, apresente algum tipo de circulação (Fig.

6). Tomando o caso de um vórtice em um condensado sem spin ($\psi = \sqrt{n}e^{i\theta}$), a densidade de número de átomos na linha singular vai a zero e a circulação do campo de velocidades é quantizada:

$$\oint_C \vec{v} \cdot d\vec{l} = \frac{\hbar}{M} \oint_C \vec{\nabla}\theta \cdot d\vec{l} = \frac{\hbar}{M} n_\theta, \quad n_\theta \in \mathbb{Z}. \quad (9.14)$$

Da expressão acima e da Fig 6, podemos concluir dois fatos. O primeiro é que vórtices são descritos pelo grupo de homotopia fundamental $\pi_1(\mathcal{R})$, já que o caminho C , que descreve a circulação, é um *loop*. (4) O segundo fato nos diz que o grupo de homotopia fundamental da variedade do parâmetro de ordem de um condensado de spin nulo ($\mathcal{R} \cong U(1)$) é o conjunto dos números inteiros $\mathbb{Z}$ (dado que $n_\theta \in \mathbb{Z}$). Ou seja, a *vorticidade* (*winding number*) n_θ é uma *carga topológica* do sistema, uma vez que ela pertence ao grupo $\pi_1(\mathcal{R} \cong U(1)) \cong \mathbb{Z}$, e mostra que vórtices com qualquer circulação *inteira* são estáveis topologicamente em condensados $f = 0^\dagger$.

Figura 6 – Representação de um vórtice. (a) Linha singular que determina a localização de um vórtice. (b) Caminho fechado (*loop*) que determina as propriedades de circulação em torno de um vórtice.

Fonte: Elaborada pelo autor.

9.2.1 Vórtices nos Estados Ferromagnéticos

Agora abordaremos alguns exemplos de vórtices em espinores $f = 1$. Começando com os estados ferromagnéticos, podemos analisar duas situações: campo magnético *não nulo* ou *nulo*. No primeiro caso, a simetria da ação S é restrita e, por consequência, a variedade que descreve os parâmetros de ordem ferromagnéticos também é: $\mathcal{R}_{\text{ferro}\pm} \cong$

[†] É importante destacar que nem sempre a estabilidade topológica (i.e., por deformações) implica a estabilidade do sistema físico do ponto de vista energético. Isso fica claro a medida que exploramos os exemplos.

$SO(2)_{\theta, \mathbf{f}_z}$. Como $SO(2) \cong U(1)$, então podemos concluir que, nessa situação, qualquer vórtice com circulação de fase *inteira* é topologicamente estável nos estados ferromagnéticos (análogo ao caso $f = 0$):

$$\pi_1(\mathcal{R}_{\text{ferro}\pm}) \cong \mathbb{Z}. \quad (9.15)$$

Já no caso de campo magnético nulo, a variedade do parâmetro de ordem é $\mathcal{R}_{\text{ferro}\pm} \cong SO(3)_{\theta, \mathbf{f}_z}$. Segundo a Ref. (23),

$$\pi_1(\mathcal{R}_{\text{ferro}\pm}) \cong \pi_1(SO(3)) \cong \mathbb{Z}_2 = \{0, 1\}. \quad (9.16)$$

Portanto, nessa situação, existem apenas *duas* classes de vórtices topologicamente estáveis, o que pode ser ilustrado pelo seguinte argumento energético. Partindo do parâmetro de ordem ferromagnético (4):

$$\psi^{\text{ferro}+} = \sqrt{n} e^{i\theta'} \begin{pmatrix} e^{-i\alpha} \cos^2 \frac{\beta}{2} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \beta \\ e^{i\alpha} \sin^2 \frac{\beta}{2} \end{pmatrix}, \quad (9.17)$$

podemos supor que ele represente um vórtice dado pelas vorticidades $n_{\theta'}$ e n_α :

$$\begin{cases} \theta' = n_{\theta'} \varphi, \\ \alpha = n_\alpha \varphi, \end{cases} \quad (9.18)$$

em que φ é o ângulo azimutal de um sistema de coordenadas cilíndrico $x = (r, \varphi, z)$. A parte da energia cinética média referente às vorticidades é proporcional a:

$$E_{\text{cinética}} \propto \begin{pmatrix} \cos^2 \frac{\beta}{2} & \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \beta & \sin^2 \frac{\beta}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} (n_{\theta'} - n_\alpha)^2 & 0 & 0 \\ 0 & n_{\theta'}^2 & 0 \\ 0 & 0 & (n_{\theta'} + n_\alpha)^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos^2 \frac{\beta}{2} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \beta \\ \sin^2 \frac{\beta}{2} \end{pmatrix} \quad (9.19)$$

Consideremos os casos $n_{\theta'} + n_\alpha = 0$ e $n_{\theta'} + n_\alpha = 1$. Para a condição inicial do ângulo de Euler $\beta(t=0) = 0$, os parâmetros de ordem são, respectivamente, $\zeta_1(0) = (e^{i(2n_{\theta'})\varphi}, 0, 0)^T$ e $\zeta_2(0) = (e^{i(2n_{\theta'}-1)\varphi}, 0, 0)^T$, representando vórtices de circulação inteira qualquer. As energias cinéticas correspondentes são $E_1(0) \propto (2n_{\theta'})^2$ e $E_2(0) \propto (2n_{\theta'} - 1)^2$. Assim, a medida que o sistema evolui, é esperado que o parâmetro $\beta(t)$ se ajuste até que se estabeleça a situação de menor energia (i.e., $\beta \rightarrow \pi$). Ou seja, vórtices com vorticidade

maior que 1 tendem a decair para $\zeta_1(\infty) = (0, 0, 1)^T$ (sem vórtice) ou $\zeta_2(\infty) = (0, 0, e^{i\varphi})^T$ (vorticidade 1), o que ilustra a estrutura do grupo de homotopia $\pi_1(SO(3)) \cong \mathbb{Z}_2$. (4)

Além da análise energética acima, podemos concluir essencialmente que vórtices no estado ferromagnético (na ausência de campo magnético) com vorticidades maiores que 1 são *continuamente transformáveis* em duas classes de vórtices: de vorticidade nula ou de vorticidade igual a 1. De maneira geral, quando a textura de spin do condensado não é trivial ($\beta = \beta(x)$), essas duas classes podem ser representadas por dois tipos de estados: vórtices *com núcleo* (*core*) e vórtices *sem núcleo* (*coreless*). (4)

Vórtices sem núcleo são representados pela identidade $\theta' = \pm\alpha$ e, por consequência, são homotópicos ao caso de vorticidade nula. Tomando particularmente $n_{\theta'} = n_\alpha$, o parâmetro de ordem desse vórtice é:

$$\psi^{\text{sem núcleo}} = \sqrt{n(x)} \begin{pmatrix} \cos^2 \frac{\beta(x)}{2} \\ e^{i(n_{\theta'}\varphi)} \frac{\sin \beta(x)}{\sqrt{2}} \\ e^{i(2n_{\theta'})\varphi} \sin^2 \frac{\beta(x)}{2} \end{pmatrix}. \quad (9.20)$$

Apesar de ser um estado de vórtice legítimo, é possível que, para o estado acima, a densidade de número $n(x)$ seja diferente de zero na região singular do vórtice: $r = 0$. (4) Isso acontece, pois, ao impor a condição de contorno $\beta(r = 0) = 0$, a parte espinorial do parâmetro de ordem reduz-se a $\zeta^{\text{sem núcleo}}(r = 0) = (1, 0, 0)^T$, o que retira a singularidade do parâmetro de ordem em $r = 0$ (essa singularidade desaparece também no campo de velocidades na origem $\vec{v}(r = 0)$ (4)). Dessa maneira, a nomenclatura “*sem núcleo*” refere-se ao possível valor *não nulo* de $n(r = 0)$ (i.e., ausência de “buraco” no perfil de densidade do condensado).

Já para os vórtices *com núcleo*, é esperado que a parte espinorial do seu parâmetro de ordem apresente uma singularidade na região singular do vórtice, independentemente da escolha das condições de contorno (para $\beta(r)$). Em geral, existem vórtices *com núcleo* homotópicos tanto para o caso de vorticidade nula quanto para o de vorticidade 1. Como já demos o exemplo dos vórtices *sem núcleo* (que são necessariamente *homotópicos* aos vórtices com *vorticidade nula*), descreveremos o exemplo de um vórtice *com núcleo* homotópico ao caso de vorticidade 1. Em particular, podemos tomar $n_\alpha = n_\theta + 1$:

$$\psi^{\text{com núcleo}} = \sqrt{n(x)} \begin{pmatrix} e^{-i\varphi} \cos^2 \frac{\beta(x)}{2} \\ e^{i(n_{\theta'}\varphi)} \frac{\sin \beta(x)}{\sqrt{2}} \\ e^{i(2n_{\theta'}+1)\varphi} \sin^2 \frac{\beta(x)}{2} \end{pmatrix}. \quad (9.21)$$

Com uma análise simples dos possíveis valores de β , podemos concluir que, independente da escolha de β , a *parte espinorial* do parâmetro de ordem de um vórtice com núcleo sempre será proporcional a $e^{in_R\varphi}$ ($n_R \in \mathbb{Z}$) em $r = 0$, o que caracteriza uma singularidade.

Ou seja, para que $\psi^{\text{com núcleo}}$ não seja singular, obrigatoriamente $n(r=0) = 0$ (i.e., núcleo $\equiv$ “buraco” no perfil de densidade do condensado).

É importante notar que todas as discussões dos últimos três capítulos se baseiam no fato de que o condensado esteja no limite de *grandes comprimentos de onda* (de forma equivalente, que o condensado esteja em um *único estado* em toda a sua extensão). Contudo, vale a pena mencionarmos que existe uma situação (observada experimentalmente (4, 24)) que não satisfaz esse limite e mantém a estabilidade topológica do estado em questão: o vórtice com *núcleo polar* (*polar-core*). Em essência, esse tipo de vórtice é formado quando $n_{\theta'} = 0$, $n_{\alpha} = 1$ (incluído nos possíveis casos de $\psi^{\text{com núcleo}}$) e $n(r=0) \neq 0$. Assim, longe da região singular do vórtice, é esperado que $\psi^{\text{núcleo polar}}$ seja (4):

$$\psi_{r \rightarrow \infty}^{\text{núcleo polar}} = \sqrt{n(x)} \begin{pmatrix} e^{-i\varphi} \cos^2 \frac{\beta(x)}{2} \\ \frac{\sin \beta(x)}{\sqrt{2}} \\ e^{i\varphi} \sin^2 \frac{\beta(x)}{2} \end{pmatrix}. \quad (9.22)$$

Contudo, impor que $n(r=0) \neq 0$ sempre deixa o parâmetro de ordem ferromagnético acima singular. A única maneira de manter as vorticidades desse estado inalteradas em $r \rightarrow \infty$ e considerar que $n(r=0) \neq 0$ é impor que o núcleo do vórtice seja preenchido pelo estado polar, de modo que (4):

$$\psi_{r \rightarrow 0}^{\text{núcleo polar}} = \sqrt{n(x)} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (9.23)$$

Na literatura, o parâmetro de ordem $\psi^{\text{núcleo polar}}$, que representa o vórtice com núcleo polar nos dois regimes vistos acima, é descrito variacionalmente pela expressão (4):

$$\psi^{\text{núcleo polar}} = \sqrt{n} \begin{pmatrix} e^{-i\varphi} g_1(r) \cos^2 \frac{\beta}{2} \\ \sqrt{1 - g_1^2(r) \cos^4 \frac{\beta}{2} - g_2^2(r) \sin^4 \frac{\beta}{2}} \\ e^{i\varphi} g_2(r) \sin^2 \frac{\beta}{2} \end{pmatrix}, \quad (9.24)$$

em que $g_1(r)$ e $g_2(r)$ são parâmetros (funções) variacionais, obtidos ao extremizar a ação S levando em conta as condições de contorno $g_1(0) = g_2(0) = 0$ e $g_1(\infty) = g_2(\infty) = 1$.

Assim, é claro que parâmetro de ordem de um vórtice com núcleo polar não pode ser descrito pelas teorias que descrevem a quebra espontânea da simetria (Caps. 7,8) vistas nessa dissertação, uma vez que ele não representa um único estado estacionário em toda a dimensão do condensado. Portanto, como já citado, ele não pode satisfazer o limite dos grandes comprimentos de onda. A produção desse tipo de vórtice em laboratório é discutida na Ref. (24).

9.2.2 Vórtices no Estado Polar

Os vórtices do estado polar são descritos pelo grupo $\pi_1(\mathcal{R}_{\text{polar}})$, com $\mathcal{R}_{\text{polar}} = (U(1)_\theta \times S^2_{\vec{f}})/(\mathbb{Z}_2)_{\theta, \vec{f}}$. Como visto no Cap. 8, a variedade $\mathcal{R}_{\text{polar}}$ é descrita por um conjunto de classes de equivalências de dois pontos:

$$[(\theta, \alpha, \beta)] = \{(\theta, \alpha, \beta), (\theta + \pi, \alpha + \pi, \pi - \beta)\}. \quad (9.25)$$

Ao tomar um *loop* C na variedade do estado polar $C : [(\theta(t), \alpha(t), \beta(t))]$ podemos concluir dois fatos. O primeiro é que a parte do *loop* $[(\alpha(t), \beta(t))]$ pode sempre ser deformada continuamente a um único ponto $[(\alpha_0, \beta_0)]$ (S^2 é simplesmente conexo (23)) independentemente de $[\theta(t)]$. O segundo é que qualquer *loop* $[(\theta(t), \alpha(t), \beta(t))]$ é homotópico a $[(\theta(t), \alpha_0, \beta_0)]$ e, por sua vez, define um isomorfismo entre $\pi_1(\mathcal{R}_{\text{polar}})$ e $\pi_1(U(1))$. Dessa maneira,

$$\pi_1(\mathcal{R}_{\text{polar}}) \cong \pi_1(U(1)) \cong \mathbb{Z}. \quad (9.26)$$

Portanto, os vórtices do estado polar são topologicamente estáveis para um número infinito de vorticidades, descritas isomorficamente pelos *números inteiros*. (4) Dado o parâmetro de ordem do estado polar (com vorticidades $\alpha = n_\alpha \varphi$ e $\theta = n_\theta \varphi$):

$$\psi^{\text{polar}} = \sqrt{n} \begin{pmatrix} -\frac{e^{i(n_\theta - n_\alpha)\varphi}}{\sqrt{2}} \sin \beta \\ e^{in_\theta \varphi} \cos \beta \\ \frac{e^{i(n_\theta + n_\alpha)\varphi}}{\sqrt{2}} \sin \beta \end{pmatrix}, \quad (9.27)$$

é possível concluir que, alterando continuamente $\beta \rightarrow 0$, o parâmetro de ordem se transforma em um vórtice do estado $m = 0$ com vorticidade inteira n_θ (homotopia $\mathbb{Z}$).

Uma propriedade do estado polar é que ele sempre apresenta circulação de massa quantizada:

$$\frac{M}{h} \oint \vec{v}^{\text{polar}} \cdot d\vec{l} = \frac{1}{2\pi} \oint \vec{\nabla} \theta \cdot d\vec{l} = n_\theta. \quad (9.28)$$

Contudo, a circulação de massa pode não ser *inteira*. Por exemplo, ao tomar $n_\alpha = n_\theta = n_R/2$, com $n_R \in \mathbb{Z}$ e $\beta = \pi/2$, o parâmetro de ordem $\psi^{1/2\text{-polar}}$ fica bem definido (4):

$$\psi^{1/2\text{-polar}} = \sqrt{\frac{n}{2}} \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ e^{in_R \varphi} \end{pmatrix}, \quad (9.29)$$

apesar de sua circulação de massa ser semi-inteira (4):

$$\frac{M}{h} \oint \vec{v}^{1/2\text{-polar}} \cdot d\vec{l} = \frac{n_R}{2}. \quad (9.30)$$

Vórtices com circulação de massa semi-inteira são chamados de *semi-vórtices* (*half-vortex*) e o motivo de eles serem estruturas topologicamente estáveis no estado polar (i.e., não ser possível transformar continuamente um vórtice semi-inteiro (n_R ímpar) em um inteiro sem deixar o parâmetro de ordem mal definido durante a transformação) surge do fato de que, na estrutura da variedade $\mathcal{R}_{\text{polar}}$, o grupo $\mathbb{Z}_2$ é uma isotopia *residual* (ou seja, que não se *simplifica* ou *desaparece*). Como $\mathbb{Z}_2$ tem dois elementos, as cargas topológicas se arranjam no conjunto dos inteiros divididos por 2: $\mathbb{Z}_{1/2} = \{0, \pm 1/2, \pm 1, \pm 3/2, \pm 2, \dots\} \cong \mathbb{Z}$, que possui duas classes de equivalência evidentes:

$$\begin{cases} [\text{carga inteira}] = \{0, \pm 1, \pm 2, \dots\}, \\ [\text{carga semi-inteira}] = \{\pm 1/2, \pm 3/2, \dots\}, \end{cases} \quad (9.31)$$

representando os vórtices e os semi-vórtices, respectivamente. (4)

9.3 Monopolos

A estrutura matemática de um monopolo é descrita por uma singularidade pontual no espaço. De maneira geral, as propriedades físicas de um monopolo são mensuráveis a partir de *fluxos* sobre superfícies fechadas que englobam essa singularidade (Fig. 7). O exemplo físico mais simples e conhecido que ilustra esse fato é a *lei de Gauss* do eletromagnetismo para cargas elétricas pontuais e estáticas:

$$\iint_{S_o} \vec{E} \cdot d\vec{S} = N_{\text{dentro}} \frac{q_E}{\epsilon_0}, \quad (9.32)$$

em que N_{dentro} é o número de cargas pontuais q_E que são englobadas pela superfície S_o .

No contexto dos CBEs espinoriais, um monopolo escrito em termos da variedade $\mathcal{R}$ é descrito por mapas de superfícies fechadas ($\cong S^2$) e, portanto, as suas cargas topológicas são descritas pelo segundo grupo de homotopia $\pi_2(\mathcal{R})$.

Num contexto matemático, se $\mathcal{R}$ for isomorfo a S^2 , as cargas topológicas de $\pi_2(\mathcal{R})$ são isomórficas ao conjunto dos inteiros $\mathbb{Z}$ (4, 23), pois

$$\pi_2(S^2) \cong \mathbb{Z}. \quad (9.33)$$

Além disso, se $\mathcal{R} \cong S^2$, essa variedade pode ser representada completamente também pelo

Figura 7 – Representação de um (a) monopolo envolto por uma (b) superfície fechada.

Fonte: Elaborada pelo autor.

vetor unitário $\hat{s} = (\sin\beta \cos\alpha, \sin\beta \sin\alpha, \cos\beta)$, que determina a direção do spin médio por partícula $\vec{f}$. Assim, um mapa genérico que determina $\pi_2(S^2 \cong \mathcal{R})$ pode ser dado por:

$$(\theta, \varphi) \in S^2 \text{ (i.e., coordenadas físicas)} \rightarrow \hat{s}(\theta, \varphi) \quad (9.34)$$

Considerando que a singularidade do monopolo esteja na origem do sistema de coordenadas, podemos definir a referente carga topológica de $\pi_2(S^2)$ como o número de vezes N_2 que $\hat{s}(\theta, \varphi)$ envolve a esfera S^2 ao percorrer todo o seu domínio $(\theta, \varphi) \in S^2$. (4) Numericamente, podemos calcular essa carga como a seguinte área (normalizada por $4\pi \equiv$ a área de S^2):

$$N_2 = \frac{1}{4\pi} \iint_{(\theta, \varphi) \in S^2} \sin\beta(\theta, \varphi) d\alpha(\theta, \varphi) d\beta(\theta, \varphi). \quad (9.35)$$

Ao mudar as coordenadas da integral acima ($\alpha, \beta \rightarrow \varphi, \theta$) e escrever o integrando em termos de $\hat{s}$, é possível encontrar (4):

$$N_2 = \frac{1}{4\pi} \iint_{S^2} d\varphi d\theta \hat{s} \cdot \left(\frac{\partial \hat{s}}{\partial \theta} \times \frac{\partial \hat{s}}{\partial \varphi} \right) = \frac{1}{4\pi} \iint_{S^2} \vec{j} \cdot d\vec{S}, \quad (9.36)$$

o que define o fluxo de $\vec{j}$ sobre a superfície fechada S^2 . O campo vetorial $\vec{j}$ pode ser escrito em termos de $\hat{s}$ da seguinte maneira (4):

$$\vec{j} = \frac{1}{2} \sum_{\nu_1, \nu_2, \nu_3 = x, y, z} \epsilon_{\nu_1 \nu_2 \nu_3} s_{\nu_1} (\vec{\nabla}_{s_{\nu_2}} \times \vec{\nabla}_{s_{\nu_3}}), \quad (9.37)$$

proporcional ao rotacional do campo de velocidades $\vec{v}$ (Eq. 7.25), e determina a *lei de Gauss*:

$$n_{mp}(x) = \frac{1}{4\pi} \vec{\nabla} \cdot \vec{j}, \quad (9.38)$$

onde $n_{mp}(x)$ é a densidade espacial de monopolos no interior de S^2 .

9.3.1 Monopolo de Dirac

Monopolo de Dirac ou *monopolo magnético* é uma construção matemática do eletromagnetismo (i.e., ainda sem observação experimental). Ela trata do análogo magnético da carga elétrica quantizada ao definir a lei de Gauss para o campo magnético (4):

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 4\pi g \delta(\vec{r}), \quad (9.39)$$

em que g determina a intensidade da carga do monopolo magnético. O campo magnético que resolve a lei de Gauss anterior é $\vec{B} = g\vec{r}/r^3$, análogo ao campo elétrico de uma carga pontual (4). O potencial vetor $\vec{A}$ que gera esse campo é:

$$\vec{A} = -\frac{g}{r(r-z)}(-y, x, 0) = -\frac{g(1+\cos\theta)}{r\sin\theta}\hat{\phi}, \quad (9.40)$$

para as coordenadas esféricas (r, θ, φ) . Tomando o rotacional de $\vec{A}$, é possível identificar que esse potencial gera o campo de monopolo em todo o espaço, exceto na parte positiva do eixo z , onde existe uma singularidade chamada de *linha de Dirac* (4):

$$\vec{\nabla} \times \vec{A} = g \frac{\vec{r}}{r^3} - 4\pi g \delta(x)\delta(y)\Theta(z)\hat{z}. \quad (9.41)$$

Acima, a função $\Theta(z)$ denota a famosa *função degrau de Heaviside*, definida por $\Theta(z > 0) = 1$ e $\Theta(z < 0) = 0$.

Apesar de não possuir estados de monopolo estáveis (4,23), o *estado ferromagnético* ($\pi_2(SO(3)) \cong 0$) é capaz de comportar potencial vetor e campo magnético artificiais ($\vec{A}$ e $\vec{B}$) que reproduzem a estrutura matemática do monopolo de Dirac. (4) Ao impor

$n_\alpha = -n_{\theta'} = 1$ e $\beta(x) = \theta^\ddagger$, a parte espinorial do parâmetro de ordem fica:

$$\zeta^{\text{Dirac}} = \begin{pmatrix} e^{-2i\varphi} \cos^2 \frac{\theta}{2} \\ e^{-i\varphi} \frac{\sin \theta}{\sqrt{2}} \\ \sin^2 \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \quad (9.42)$$

e gera $\vec{A} = i\zeta^\dagger \vec{\nabla} \zeta$ análogo à Eq. 9.40. Como o campo magnético artificial é definido por $\vec{B} = \vec{\nabla} \times \hbar \vec{A}$, é possível concluir que a constante de monopolo de um CBE espinorial é $g = \hbar$.

Como visto na seção anterior sobre vórtices, o parâmetro de ordem ζ^{Dirac} não é topologicamente estável, uma vez que ele pode ser deformado continuamente até $\zeta^{\text{Dirac}} = (0, 0, 1)^T$ por $\beta(\lambda)$:

$$\beta(\lambda) = (1 - \lambda)\theta + \lambda\pi, \quad \lambda \in [0, 1], \quad (9.43)$$

explicitando as propriedades dos dois primeiros grupos de homotopia do estado ferromagnético: $\pi_1(SO(3)) \cong \mathbb{Z}_2$ e $\pi_2(SO(3)) \cong 0$.

9.3.2 Monopolo de 't-Hooft-Polyakov

Os monopolos de 't-Hooft-Polyakov são estruturas *topologicamente estáveis* do estado polar de um condensado de spin $f = 1$. Eles surgem do fato de que a única parte da variedade $\mathcal{R}_{\text{polar}}$ que contribui para o segundo grupo de homotopia é S^2 . Portanto, $\pi_2(\mathcal{R}_{\text{polar}})$ é[§]:

$$\pi_2(\mathcal{R}_{\text{polar}}) \cong \pi_2(S^2) \cong \mathbb{Z} \quad (9.44)$$

Como a fase global $U(1)$ não contribui para os monopolos do estado polar, podemos impor, sem nenhuma perda, que ela é nula no parâmetro de ordem que gera um *monopolo esférico* de 't-Hooft-Polyakov. (4) Assim, a carga de monopolo N_2 pode ser calculada pela definição da Eq. 9.35, pois $\mathcal{R}_{\text{polar}} \cong S^2$ (a menos da simetria discreta $\mathbb{Z}_2$). Uma maneira alternativa de representar ψ^{polar} nessa situação é:

$$\psi^{\text{polar}} = \sqrt{\frac{n}{2}} \begin{pmatrix} -s_x + is_y \\ \sqrt{2}s_z \\ s_x + is_y \end{pmatrix}, \quad (9.45)$$

[‡] Aqui, θ representa a coordenada polar do sistema de coordenadas (e não o parâmetro da variedade $\mathcal{R}$).

[§] O cálculo de $\pi_2(\mathcal{R}_{\text{polar}})$ é análogo ao procedimento da seção anterior para calcular $\pi_1(\mathcal{R}_{\text{polar}})$. Basta impor $\pi_2(S^2) \cong \mathbb{Z}$ e $\pi_2(U(1)) \cong 0$. (23)

em que $\hat{s} = (s_x, s_y, s_z) = (\sin\beta \cos\alpha, \sin\beta \sin\alpha, \cos\beta)$. Impondo $\alpha = \varphi$ e $\beta = \theta$, o monopolo esférico de 't-Hooft-Polyakov é definido (4):

$$\hat{s} = \frac{\vec{r}}{r} \quad (9.46)$$

e é simples encontrar que $N_2 = 1$ é a carga desse monopolo. Além disso, de maneira geral, se $\alpha = n_\alpha \varphi$ e $\beta = \theta$, a carga de monopolo resume-se a:

$$N_2 = n_\alpha. \quad (9.47)$$

Ou seja, a carga N_2 é, em essência, relacionada a um tipo de *vorticidade* ou *número de circulação* (*winding number*), assim como os vórtices. O campo vetorial $\vec{j}$, gerador da lei de Gauss para os monopolos em um condensado (Eq. 9.37), emerge no estado polar em termos dos campos de velocidades de spin $\vec{v}_{\nu=x,y,z}^{\text{spin}}$:

$$\vec{j} = -\frac{M}{2\hbar} \sum_{\nu=x,y,z} s_\nu (\vec{\nabla} \times \vec{v}_\nu^{\text{spin}}), \quad (9.48)$$

onde

$$\vec{v}_\nu^{\text{spin}} = \frac{-i\hbar}{2Mn} (\psi^\dagger \mathbf{f}_\nu (\vec{\nabla} \psi) - (\vec{\nabla} \psi^\dagger) \mathbf{f}_\nu \psi), \quad (9.49)$$

de modo que

$$\iint_{S^2} \sum_{\nu=x,y,z} s_\nu (\vec{\nabla} \times \vec{v}_\nu^{\text{spin}}) \cdot d\vec{S} = -\frac{4\hbar}{M} N_2. \quad (9.50)$$

Na situação de um monopolo de 't-Hooft-Polyakov ($N_2 = 1$), $\hat{s}$ apresenta uma singularidade na origem do sistema de coordenadas, o que implicaria, em princípio, que $n(r=0) = 0$. Dessa maneira, apesar de ser um estado *topologicamente estável*, esse tipo de monopolo não é *energeticamente estável*. (4) Ou seja, o monopolo de 't-Hooft-Polyakov decai em um estado de menor energia, chamado de *anel Alice* (do inglês, *Alice ring*). Esse estado é caracterizado por duas cargas topológicas, referentes a π_1 ($N_1 = 1/2$) e π_2 ($N_2 = 1$). Um anel Alice (Fig. 8) aparenta ser um monopolo longe da origem do sistema de coordenadas, enquanto que, nas proximidades da origem, ele apresenta uma *singularidade de vórtice* (especificamente, um semi-vórtice do estado polar) em formato de *anel* (o qual gera $\vec{j}$ em $r \rightarrow \infty$). Pelo fato de possuírem a mesma carga topológica $N_2 = 1$, um monopolo de 't-Hooft-Polyakov pode ser continuamente transformado em um anel Alice.

Figura 8 – Representação de um *anel Alice*. O anel C representa a região singular de vórtice que geram as linhas de campo de $\vec{j}$ para $r \rightarrow \infty$. O caminho Γ , que envolve C , exemplifica o caminho da circulação de fase nessa estrutura topológica.

Fonte: KAWAGUCHI; UEDA. (4)

Mas, diferente do caso desse monopolo, em que $n(r=0) = 0$, o anel Alice admite $n \neq 0$ na região singular do vórtice C , dado que ela pode ser preenchida com condensado no estado ferromagnético, o que diminui sua energia. Assim, como no caso do vórtice com núcleo polar (Eq. 9.24), o anel Alice caracteriza-se por ser um estado que não satisfaz o limite de *grandes comprimentos de onda*.

9.4 Skyrmions e Sólitons-nó

Das excitações topológicas vistas até aqui, *skyrmions* e *sólitons-nó* (*knot solitons*) são as menos intuitivas. Do ponto de vista matemático, elas são regidas pelo terceiro grupo de homotopia $\pi_3(\mathcal{R})$. Logo, os mapas que regem a estrutura desse grupo são tridimensionais (por exemplo, o espaço físico tridimensional $\mathbb{R}^3$) de modo que as suas bordas (i.e., $|\vec{r}'| \rightarrow \infty \cong S^2$) mapeiam o parâmetro de ordem em um *valor fixo*. Contudo, diferentemente dos casos de π_1 e π_2 não existe uma maneira simples de representar graficamente a singularidade de $\mathcal{R}$ que gera π_3 .

9.4.1 Skyrmion de Shankar

As propriedades topológicas do Skyrmion de Shankar são regidas pelo grupo de homotopia $\pi_3(SO(3)) \cong \mathbb{Z}$. (4,23) Portanto, esse tipo de estado é estável topologicamente para um condensado ferromagnético com spin $f = 1$. Um exemplo de parâmetro de ordem que corresponde a um elemento de $\pi_3(SO(3))$ pode ser definido por (4):

$$\zeta^{\text{skyrmion}} = \exp(-if(r)\vec{\Omega}(\vec{r}) \cdot \vec{f}) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (9.51)$$

em que $\vec{\Omega}(\vec{r}) = \vec{r}/r$, $f(r)$ é uma função contínua (com $f(0) = 2\pi N_3$ e $f(\infty) = 0$) e $N_3 \in \mathbb{Z}$

(a carga topológica de skyrmion). Da definição da função $f(r)$,

$$\zeta_{r \rightarrow \infty}^{\text{skyrmion}} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (9.52)$$

o que mostra que a fronteira do domínio $\mathbb{R}^3$ é *quocientada* a um único ponto ($\mathbb{R}^3/S^2 \cong S^3$), de modo que o mapa $\vec{r} \rightarrow \zeta^{\text{skyrmion}}$ legitimamente define classes de homotopia em $\pi_3(SO(3))$.

A maneira de definir a carga topológica N_3 segue um procedimento análogo ao usado para definir N_2 (Eq. 9.35). Para isso, é necessário definir um vetor unitário quadridimensional $\hat{m} \in S^3$ (4):

$$\hat{m}(\vec{r}) = \left(\frac{x}{r} \sin \frac{f(r)}{2}, \frac{y}{r} \sin \frac{f(r)}{2}, \frac{z}{r} \sin \frac{f(r)}{2}, \cos \frac{f(r)}{2} \right). \quad (9.53)$$

O invariante que retorna a carga N_3 é definido pelo número de vezes que $\hat{m}$ envolve S^3 ao ser percorrido todo o seu domínio $\cong S^3$, representado pela seguinte integral em termos de $\hat{m}$ (4):

$$N_3 = \frac{1}{12\pi^2} \iiint_{\mathbb{R}^3} dV \sum_{\alpha, \beta, \gamma, \delta=1,2,3,4} \sum_{i,j,k=x,y,z} \epsilon_{\alpha\beta\gamma\delta} \epsilon_{ijk} m_\alpha \partial_i m_\beta \partial_j m_\gamma \partial_k m_\delta. \quad (9.54)$$

Similarmente ao que foi discutido para os monopolos de 't-Hooft-Polyakov, a carga N_3 é também, em essência, um *número de circulação* (*winding number*), de modo que ele codifica quantas vezes o o parâmetro de ordem “gira” ao seguir um caminho radial qualquer.

9.4.2 Sólitons-nó

Sólitons-nó são descritos pelo grupo de homotopia $\pi_3(S^2) \cong \mathbb{Z}$ (4, 23). Como o estado polar ($f = 1$) tem variedade $\mathcal{R}_{\text{polar}} \cong (S^2 \times U(1))/\mathbb{Z}_2$ e $\pi_3(U(1)) = 0$ (23), é possível mostrar que (4)

$$\pi_3(\mathcal{R}_{\text{polar}}) \cong \pi_3(S^2) \cong \mathbb{Z}, \quad (9.55)$$

o que implica que *sólitons-nó* são topologicamente estáveis nesse estado. A carga topológica que caracteriza um sóliton-nó é a chamada *carga de Hopf* Q , característica de mapas $S^3 \rightarrow S^2$. (4, 23) Ela é definida como o número de vezes que as *pré-imagens* de dois pontos

Figura 9 – Representação gráfica de um mapa $\pi_3(S^2)$ com carga de Hopf $Q = 1$.

Fonte: KAWAGUCHI; UEDA. (4)

distintos genéricos de S^2 se *entrelaçam* em S^3 (Fig. 9). Ou seja, no contexto do estado polar, para um mapa

$$\vec{r} \in \mathbb{R}^3/S^2 \cong S^3 \rightarrow \hat{s}(\vec{r}) \in S^2 \cong \mathcal{R}_{\text{polar}}, \quad (9.56)$$

considerando nula a fase global $U(1)$, pelo fato de S^2 ter dimensão menor que S^3 , ao tomar dois pontos distintos $\hat{s}_1$ e $\hat{s}_2$, eles definem duas curvas fechadas em $\mathbb{R}^3$. O número de vezes que essas curvas se entrelaçam (*linking number*) é a carga de Hopf Q (Fig. 9). Assim, diferentemente das cargas N_2 e N_3 definidas anteriormente, a carga Q não representa um número de circulação (*winding number*). (4)

A carga de Hopf pode ser definida alternativamente, em termos do mapa $\hat{s}(\vec{r})$, por meio da integral (4,25):

$$Q = \frac{1}{4\pi^2} \iiint_{\mathbb{R}^3} dV \epsilon_{ijk} F_{ij} A_k, \quad (9.57)$$

em que $i, j, k = x, y, z$ e

$$\begin{cases} F_{ij} = \hat{s} \cdot (\partial_i \hat{s}) \times (\partial_j \hat{s}), \\ F_{ij} = \partial_i A_j - \partial_j A_i. \end{cases} \quad (9.58)$$

No cálculo prático de Q , é usual considerar o vetor unitário quadridimensional $\hat{m}(\vec{r})$, que pode ser representado pelo vetor complexo $\mathbf{Z}(\vec{r})$:

$$\mathbf{Z}(\vec{r}) \equiv \begin{pmatrix} Z_1(\vec{r}) \\ Z_2(\vec{r}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} m_1(\vec{r}) + im_2(\vec{r}) \\ m_3(\vec{r}) + im_4(\vec{r}) \end{pmatrix}, \quad (9.59)$$

em que $|Z_1|^2 + |Z_2|^2 = \sum_j m_j^2 = 1$. Dessa maneira, o mapa que determina a carga de

Hopf muda de domínio: de $\vec{r} \in \mathbb{R}^3/S^2$ para $\hat{m} \in S^3$ (analogia com uma mudança de coordenadas). Assim, o *mapa de Hopf* $\hat{s}(\hat{m})$ pode ser definido (4):

$$\hat{s} = \mathbf{Z}^\dagger \vec{\sigma} \mathbf{Z}, \quad (9.60)$$

para $\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$, o vetor das matrizes de Pauli. Como $\hat{s}$ é definido pelos parâmetros (α, β) , o mapa de Hopf determina também $(\alpha(\hat{m}(\vec{r})), \beta(\hat{m}(\vec{r})))$, para funções genéricas $|\hat{m}| = 1$. Ao escrever F_{jk} e A_j em termos de $\mathbf{Z}$, encontramos (4):

$$\begin{cases} F_{jk} = i \left[(\partial_j \mathbf{Z}^\dagger)(\partial_k \mathbf{Z}) - (\partial_k \mathbf{Z}^\dagger)(\partial_j \mathbf{Z}) \right], \\ A_j = \frac{i}{2} \left[\mathbf{Z}^\dagger (\partial_j \mathbf{Z}) - (\partial_j \mathbf{Z}^\dagger) \mathbf{Z} \right], \end{cases} \quad (9.61)$$

o que guarda muita semelhança com as definições do potencial 4-vetor eletromagnético artificial $\mathbb{U}_\nu$ e do tensor do campo eletromagnético artificial $\mathbb{F}_{\sigma\nu}$, introduzidos no Cap. 7. Da definição do mapa de Hopf, $\hat{s}$ é invariante por uma transformação de fase $U(1)$, pois, impondo $\mathbf{Z} = e^{i\phi} \mathbf{Z}'$, o vetor $\hat{s}$ encontrado é independente ao escolher $\mathbf{Z}$ ou $\mathbf{Z}'$. A simetria de fase $U(1)$ emerge em A_j como um calibre:

$$A_j = A'_j + \partial_j \phi, \quad (9.62)$$

que deixa F_{jk} invariante ($F_{jk} = F'_{jk}$). A carga de Hopf Q se relaciona com Q' , gerada a partir de $\mathbf{Z}'$, por:

$$Q = Q' + \frac{1}{4\pi^2} \iiint_{\mathbb{R}^3} dV \epsilon_{ijk} F_{ij} \partial_k \phi. \quad (9.63)$$

Definindo $(\vec{G})_k \equiv \epsilon_{ijk} F_{ij}$ (i.e., $\vec{G}$ tem estrutura de campo magnético: $\vec{\nabla} \cdot \vec{G} = 0$), fica evidente que a integral acima é nula, pois (sabendo que $F_{jk} = 0$ para $|\vec{r}| \rightarrow \infty$):

$$0 = \iint_{\partial\mathbb{R}^3} d\vec{S} \cdot (\vec{G}\phi) = \iiint_{\mathbb{R}^3} dV \vec{\nabla} \cdot (\vec{G}\phi) = \iiint_{\mathbb{R}^3} dV \vec{G} \cdot \vec{\nabla} \phi = \iiint_{\mathbb{R}^3} dV \epsilon_{ijk} F_{ij} \partial_k \phi. \quad (9.64)$$

Assim, é possível concluir que $Q = Q'$, o que explicita a invariância da carga de Hopf pela simetria $U(1)$.

Sólitons-nó podem ser produzidos em um condensado espinorial no estado polar ($f = 1$) ao manipular um campo magnético externo. Em geral, a presença do efeito Zeeman linear causa a *precessão de Larmor* de $\hat{s}$, enquanto que o efeito Zeeman quadrático faz com que $\hat{s}$ tenda a se tornar paralelo ao campo magnético (4). Na Ref. (6), existe uma

proposta experimental que leva em conta os princípios acima para a produção da estrutura topológica de *nó* no estado polar $f = 1$ (i.e., sólitons-nó). Ao preparar inicialmente um condensado aprisionado opticamente no estado $m = 0$ com auxílio de um campo magnético uniforme externo na direção z , o sistema é descrito por $\hat{s} = \hat{z}$. Mudando rapidamente o campo magnético para uma configuração de *quadrupolo*, $\hat{s}(\vec{r})$ começa a rotacionar em torno do campo magnético *local* e gera *nós* $Q \neq 0$ a medida que o tempo passa (4, 6), exemplificado na Fig. 10.

Figura 10 – Simulação numérica do processo de formação de *nós* no estado polar $f = 1$ devido a presença de um campo magnético de quadrupolo, contida na Ref. (6). Acima, as curvas escuras representam as pré-imagens de $\hat{s} = \hat{x}$ e as curvas acinzentadas, as pré-imagens de $\hat{s} = -\hat{z}$. Abaixo, os gráficos representam a magnitude da densidade da componente $m = -1$ do parâmetro de ordem sobre o plano $x - y$. O período da precessão de Larmor é denotado por T_L .

Fonte: KAWAGUCHI; UEDA. (4)

Assim, após introduzir o conceito das excitações topológicas do parâmetro de ordem de um CBE espinorial nesse capítulo, resta apenas uma pergunta que desejamos responder nesta dissertação: *o que é necessário para que sejamos capazes de descrever os estados excitados quânticos das excitações topológicas?* Certamente, tendo em vista o Cap. 6, não podemos utilizar o tratamento (até certo ponto limitado) da teoria usual de Bogoliubov, haja vista que excitações topológicas possuem textura de spin não trivial. Contudo, essa teoria serve de molde para um tratamento genérico em segunda quantização dos estados excitados quânticos das excitações topológicas: as **excitações topológicas quânticas**, abordadas no próximo capítulo.

10 TEORIA DAS EXCITAÇÕES TOPOLÓGICAS QUÂNTICAS

Uma vez que discutimos as propriedades simétricas e topológicas não triviais do parâmetro de ordem quando há a quebra espontânea da simetria do sistema condensado, podemos retornar a pergunta que introduzimos no Cap. 6:

Quais são os estados excitados quânticos referentes a um dado parâmetro de ordem?

Revisitando os conceitos utilizados na teoria de Bogoliubov para um condensado uniforme, podemos expandir a atuação desse método para parâmetros de ordem mais gerais, em particular, os gerados pela quebra espontânea de simetria. Neste capítulo, apresentamos uma nova teoria, desenvolvida neste trabalho de mestrado e abordada em dois artigos em vias de serem submetidos para publicação.

Essa teoria, aqui denotada por teoria das *excitações topológicas quânticas* (ETQs), surge como uma tentativa de analisar robustamente as *propriedades* estruturais não triviais dos estados excitados quânticos (i.e., os estados quânticos que não formam a fase condensada) de condensados que apresentam excitações *topológicas* em seu parâmetro de ordem. Em outras palavras, a teoria das ETQs aqui apresentada é uma maneira de *generalizar* o tratamento *em segunda quantização* da teoria de Bogoliubov (Cap. 6) para condensados não uniformes e de textura de spin não trivial, como os estados abordados no capítulo anterior (isto é, nossa teoria é *conceitualmente análoga* à formulação de Bogoliubov-de Gennes para supercondutores não uniformes (21)), o que conecta todos os conceitos vistos até agora nesta dissertação.

Como importantes resultados dessa teoria, podemos destacar em antemão (indo além da diagonalização dos estados excitados, conceitualmente abordada já no Cap. 6) a presença da assinatura *simétrica e topológica* do parâmetro de ordem na dependência funcional das ETQs e a emergência da *estrutura espinorial* desses estados quando a textura de spin do parâmetro de ordem não é trivial.

10.1 Definindo as Aproximações Necessárias e o Hamiltoniano das ETQs

Partindo do hamiltoniano do sistema bosônico completo $\hat{H}$ ($f = 1$ e sem campo magnético externo) abordado no Cap. 3:

$$\hat{H} = \int \hat{\psi}^\dagger(x) \left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2M} + U_{\text{apr}}(x) \right] \hat{\psi}(x) + \frac{c_0}{2} : \hat{n}^2(x) : + \frac{c_1}{2} : \hat{\vec{F}}^2(x) : dx, \quad (10.1)$$

podemos expressá-lo em termos do parâmetro de ordem ao impor a aproximação da energia média $E = \langle \zeta | \hat{H} | \zeta \rangle$, em que

$$|\zeta\rangle = \frac{1}{\sqrt{N_0!}} \left(\sum_{m=-f}^f \zeta_m a_{0,m}^\dagger \right)^{N_0} |\emptyset\rangle \quad (10.2)$$

é a função de onda que representa a fase condensada. Contudo, ao observar a estrutura da energia média E (Eq. 4.6) e a definição do parâmetro de ordem ψ , a informação acerca dos estados excitados quânticos $a_{i \neq 0, m}$ é perdida. Isso ocorre porque E e ψ são originários de uma *aproximação de campo médio*.

Como queremos abordar os estados excitados $i \neq 0$, a aproximação de campo médio, da maneira descrita anteriormente (e em todos os capítulos desta dissertação até agora), não é conveniente. Primeiro, podemos considerar o caso em que desejamos encontrar um *hamiltoniano aproximado* que **conserva** o número total de partículas e que seja escrito em termos do *parâmetro de ordem* e dos *estados excitados quânticos*. Para isso, é muito conveniente definir um objeto matemático que é *parte estado* e *parte operador*: o **operador-estado** $\hat{\zeta}$. Esse objeto é gerado pelo estado $|\zeta\rangle$ expandido na seguinte forma genérica:

$$|\zeta\rangle = \sum_s c_s \left(\bigotimes_m |n_{0,m}^s\rangle \right) \otimes \left(\bigotimes_{i \neq 0, m} |\emptyset_{i,m}\rangle \right), \quad (10.3)$$

em que c_s é um coeficiente complexo, $\sum_m n_{0,m}^s = N_0$ e s é uma das possíveis configurações da distribuição das N_0 partículas condensadas nos $2f + 1$ estados $i = 0$. Então, $\hat{\zeta}$ é definido ao substituir os estados de vácuo $|\emptyset_{i \neq 0, m}\rangle$ pelos operadores identidade $1_{i \neq 0, m}$ dos estados correspondentes:

$$\hat{\zeta} = \sum_s c_s \left(\bigotimes_m |n_{0,m}^s\rangle \right) \otimes \left(\bigotimes_{i \neq 0, m} 1_{i,m} \right). \quad (10.4)$$

Dessa maneira, as informações do parâmetro de ordem ficam impressas em $\hat{\zeta}$ e, ao tomar a definição do hamiltoniano aproximado como $\hat{H}_B = \hat{\zeta}^\dagger \hat{H} \hat{\zeta}$, a informação dos estados excitados quânticos não é perdida. Como já foi abordado nos capítulos anteriores, o operador de campo do sistema pode ser descrito em representação matricial como:

$$\hat{\psi}(x) = \begin{pmatrix} \sum_i \phi_{i,1}(x) a_{i,1} \\ \sum_i \phi_{i,0}(x) a_{i,0} \\ \sum_i \phi_{i,-1}(x) a_{i,-1} \end{pmatrix} = \sum_i \begin{pmatrix} \phi_{i,1}(x) a_{i,1} \\ \phi_{i,0}(x) a_{i,0} \\ \phi_{i,-1}(x) a_{i,-1} \end{pmatrix} = \hat{\psi}_0(x) + \hat{\gamma}(x) \quad (10.5)$$

em que $\hat{\psi}_0(x)$ é a parte do operador de campo que depende apenas da fase condensada:

$$\hat{\psi}_0(x) = \begin{pmatrix} \phi_{0,1}(x) a_{0,1} \\ \phi_{0,0}(x) a_{0,0} \\ \phi_{0,-1}(x) a_{0,-1} \end{pmatrix}, \quad (10.6)$$

e $\hat{\gamma}(x)$ é a parte que depende apenas dos estados excitados quânticos:

$$\hat{\gamma}(x) = \sum_{i \neq 0} \hat{\gamma}_i(x) = \sum_{i \neq 0} \begin{pmatrix} \phi_{i,1}(x) a_{i,1} \\ \phi_{i,0}(x) a_{i,0} \\ \phi_{i,-1}(x) a_{i,-1} \end{pmatrix}. \quad (10.7)$$

Ao calcular $\hat{H}_B = \hat{\zeta}^\dagger \hat{H} \hat{\zeta}$ podemos considerar que o sistema possui $N \gg 1$ partículas, das quais $N_0 \approx N \gg 1$ estão condensadas. Ou seja, a maioria das partículas do sistema estão condensadas e, portanto, as partículas dos estados excitados quânticos formam um sistema *rarefeito* (mais diluto do que o próprio condensado), de modo que os termos de auto-interação de $\hat{\gamma}$ (quarta potência em $\hat{H}_B$) podem ser desprezados. Assim, o hamiltoniano aproximado do sistema é:

$$\hat{H}_B = E + \int dx \bar{\gamma}^\dagger \mathbf{H}_0 \gamma, \quad (10.8)$$

em que E é a energia do campo médio (Eq. 4.6) e $\mathbf{H}_0$ é a matriz de interação dos estados excitados quânticos:

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_0 = & - \frac{\hbar^2}{2M} \mathbf{1} \nabla^2 + (U(x) + c_0 n(x)) \mathbf{1} + c_0 \boldsymbol{\psi}(x) \boldsymbol{\psi}^\dagger(x) + \\ & + c_1 (\vec{F}(x) \cdot \vec{\mathbf{f}} + \vec{\mathbf{f}} \boldsymbol{\psi}(x) \cdot \boldsymbol{\psi}^\dagger(x) \vec{\mathbf{f}}). \end{aligned} \quad (10.9)$$

Acima, além de considerar que $\boldsymbol{\psi}$ é normalizado a N_0 (um indicativo de que o

número de partículas condensadas é muito maior que o número de partículas nos outros estados), é possível considerar que a dinâmica do parâmetro de ordem não é alterada pela ação dos estados excitados. Ou seja, é possível considerar que ψ satisfaça a equação de Gross-Pitaevskii (Eq. 4.22) e, portanto, já esteja *completamente determinada*.

O hamiltoniano dos estados excitados é determinado por $\Delta\hat{H}_B = \hat{H}_B - E$. Para os passos seguintes dessa teoria, é conveniente escrever $\Delta\hat{H}_B$ na seguinte forma normalmente ordenada:

$$\Delta\hat{H}_B = \frac{1}{2} \sum_{i,i'} \int dx \left(: \bar{\hat{\gamma}}_i^\dagger \mathbf{H}_0 \hat{\gamma}_{i'} + \bar{\hat{\gamma}}_i \mathbf{H}_0^* \hat{\gamma}_{i'}^\dagger : \right). \quad (10.10)$$

Isso é possível, porque $\mathbf{H}_0$ é um operador matricial hermitiano ($\mathbf{H}_0 = \mathbf{H}_0^\dagger$), segundo a definição:

$$\int dx p_i^*(x) [\mathbf{H}_0(x)]_{i,j} q_j(x) = \left(\int dx q_j^*(x) [\mathbf{H}_0^\dagger(x)]_{j,i} p_i(x) \right)^*, \quad (10.11)$$

para quaisquer vetores $[\mathbf{p}(x)]_i = p_i(x)$ e $[\mathbf{q}(x)]_i = q_i(x)$. Além da representação ordenada, é possível (e conveniente) representar $\Delta\hat{H}_B$ na forma matricial (resolvendo o ordenamento normal):

$$\begin{aligned} \Delta\hat{H}_B &= \frac{1}{2} \sum_{i,i'} \int dx \begin{pmatrix} \bar{\hat{\gamma}}_i^\dagger & \bar{\hat{\gamma}}_i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{H}_0 & 0 \\ 0 & \mathbf{H}_0^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{\gamma}_{i'} \\ \hat{\gamma}_{i'}^\dagger \end{pmatrix} + \\ &- \frac{1}{2} \sum_{m,m'} \sum_{i \neq 0} [a_{i,m}, a_{i,m'}^\dagger] \int dx \phi_{im} [\mathbf{H}_0^*]_{mm'} \phi_{im'}^*. \end{aligned} \quad (10.12)$$

É importante notar que, acima, não explicitamos o valor do comutador $[a_{i,m}, a_{i,m'}^\dagger]$ propositalmente. Normalmente (i.e., nas mais diversas teorias físicas, como as abordadas na Ref. (12)), é sempre esperado que $[a_{i,m}, a_{i,m'}^\dagger] = \delta_{m,m'}$. Contudo, ao tomar uma aproximação “tipo Bogoliubov” para o sistema, em que se expande o operador de campo em torno do parâmetro de ordem (que é um espinor), não é possível determinar o valor do comutador de antemão (embora não seja esperado que ele admita um valor *exótico*, como um outro operador), dado que não sabemos ainda que tipo de solução $\hat{\gamma}$ retorna. Por exemplo, se $\hat{\gamma}$ tem solução do tipo *espinor*, a relação de comutação deixa de ser canônica $[a_{i,m}, a_{i,m'}^\dagger] \neq \delta_{m,m'}$, pois $a_{i,m} \propto a_{i,m'}$. Discutiremos a fundo essas possibilidades na seção 10.3.

Além da possível mudança das relações de comutação, quando uma aproximação $\hat{\zeta}$ é aplicada em um sistema, invariavelmente o operador número de partículas condensadas

$\hat{N}_0$ passa a ser tratado como um escalar N_0 , o que pode gerar possíveis discrepâncias em resultados experimentais. Para corrigir esse problema, podemos introduzir uma correção de energia em $\hat{H}_B$. Partindo da relação de conservação de número:

$$\hat{N}_0 = \hat{N} - \sum_{i \neq 0, m} a_{i, m}^\dagger a_{i, m} = \hat{N} - \sum_{i \neq 0} \int \bar{\hat{\gamma}}_i^\dagger(x) \hat{\gamma}_i(x) dx, \quad (10.13)$$

é possível impor o fator de correção $\hat{N}_0/N$ sobre a magnitude do parâmetro de ordem (considerando fixo $N \gg 1$):

$$\int \psi^\dagger \psi dx = N_0 \rightarrow \int \psi^\dagger \psi dx = N, \quad (10.14)$$

$$\psi_{m_1}^* \psi_{m_2} \rightarrow \frac{\hat{N}_0}{N} \psi_{m_1}^* \psi_{m_2}, \quad (10.15)$$

$$\psi_{m_1}^* \psi_{m_2}^* \psi_{m_3} \psi_{m_4} \rightarrow \frac{\hat{N}_0^2}{N^2} \psi_{m_1}^* \psi_{m_2}^* \psi_{m_3} \psi_{m_4}. \quad (10.16)$$

Aplicando essas correções em $\hat{H}_B$ (mantendo a ordem de expansão de $\hat{\gamma}$), é gerada uma correção para $\mathbf{H}_0$:

$$\mathbf{H}_0 \rightarrow \mathbf{H}_0 - \frac{i\hbar}{N} \int \psi^\dagger \frac{\partial}{\partial t} \psi dx, \quad (10.17)$$

que, quando o condensado em questão é estacionário (e não necessariamente uniforme), torna-se simplesmente o potencial químico μ da fase condensada (i.e., $\mathbf{H}_0 \rightarrow \mathbf{H}_0 - \mu$).

Quanto à estrutura matricial de $\Delta \hat{H}_B$, é evidente o paralelo entre esse hamiltoniano e o utilizado na teoria de Bogoliubov (Eq. 6.11). Ou seja, os operadores $\hat{\gamma}_i(x)$ e $\mathbf{a}_k$ têm papéis análogos, assim como as matrizes $\mathbf{H}_0$ (Eqs. 10.9 e 10.17) e $\mathbf{H}_k^{(0)} + \mathbf{H}^{(1)}$ (Eqs. 6.15 e 6.16), que possuem a mesma estrutura de interação. Contudo, da maneira que foi definido $\hat{\zeta}$, não há termos de interação de *bombeamento* (típicos de uma teoria de Bogoliubov) gerados em $\Delta \hat{H}_B$ (i.e., os termos fora da diagonal da matriz de interação são nulos na Eq. 10.12), o que caracteriza um hamiltoniano que conserva o número total de partículas:

$$[\hat{N}, \Delta \hat{H}_B] = 0. \quad (10.18)$$

Dessa maneira, para construirmos um análogo completo da teoria de Bogoliubov, é conveniente adaptarmos a definição de $\hat{\zeta}$ de modo que sejamos capazes de encontrar um hamiltoniano $\Delta \hat{H}_B$ análogo à Eq. 6.11.

Uma maneira de introduzir a **interação de bombeamento** em $\hat{H}_B$ é redefinindo o estado $|\zeta\rangle \rightarrow |\zeta'\rangle$, que gera $\hat{\zeta}'$. Para isso, basta impor (além das propriedades usuais de $|\zeta\rangle$, dadas pelas Eqs. 4.3 e 4.4) que o estado $|\zeta'\rangle$ satisfaça também as seguintes relações:

$$\langle \zeta' | \hat{\psi}_{0,m}^{(\dagger)}(x) \hat{\psi}_{0,m'}^{(\dagger)}(x) | \zeta' \rangle = \psi_m^{(*)}(x) \psi_{m'}^{(*)}(x) \neq 0, \quad (10.19)$$

$$\langle \zeta' | \text{Potências ímpares de } \hat{\psi}_{0,m}^{(\dagger)}(x) | \zeta' \rangle = 0. \quad (10.20)$$

Assim, ao redefinir $\hat{H}_B = \hat{\zeta}'^\dagger \hat{H} \hat{\zeta}'$ (expandido até a segunda ordem de $\hat{\gamma}$), encontramos:

$$\hat{H}_B = E + \int dx \bar{\gamma}^\dagger \mathbf{H}_0 \hat{\gamma} + \frac{1}{2} \int dx \bar{\gamma}^\dagger \mathbf{H}_1 \hat{\gamma}^\dagger + \frac{1}{2} \int dx \bar{\gamma} \mathbf{H}_1^* \hat{\gamma}, \quad (10.21)$$

em que E e $\mathbf{H}_0$ (aplicada a correção da Eq. 10.17) já foram abordados no caso sem interação de bombeamento. O operador matricial $\mathbf{H}_1$, que leva em conta a interação de bombeamento dos estados excitados quânticos devido à presença do parâmetro de ordem (i.e., bombeamento devido a um “campo clássico”), é dado por

$$\mathbf{H}_1 = c_0 \boldsymbol{\psi}(x) \boldsymbol{\psi}^T(x) + c_1 \vec{\mathbf{f}} \boldsymbol{\psi}(x) \cdot \boldsymbol{\psi}^T(x) \vec{\mathbf{f}}^*, \quad (10.22)$$

e satisfaz $\mathbf{H}_1^T = \mathbf{H}_1$. A representação matricial de $\Delta \hat{H}_B$ nessa situação é dada por:

$$\Delta \hat{H}_B = \frac{1}{2} \sum_{i,i'} \int dx \begin{pmatrix} \bar{\gamma}_i^\dagger & \bar{\gamma}_i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{H}_0 & \mathbf{H}_1 \\ \mathbf{H}_1^* & \mathbf{H}_0^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{\gamma}_{i'} \\ \hat{\gamma}_{i'}^\dagger \end{pmatrix} - \frac{1}{2} R(\mathbf{H}_0), \quad (10.23)$$

para $R(\mathbf{H}_0)$, o termo de energia de ponto zero que depende das relações de comutação:

$$R(\mathbf{H}_0) = \sum_{m,m'} \sum_{i \neq 0} [a_{i,m}, a_{i,m'}^\dagger] \int dx \phi_{im} [\mathbf{H}_0^*]_{mm'} \phi_{im'}^*. \quad (10.24)$$

Denotamos o operador matricial 6×6 hermitiano que codifica todos os possíveis tipos de interação dos estados excitados por $\mathbf{M}(x)$:

$$\mathbf{M}(x) = \begin{pmatrix} \mathbf{H}_0(x) & \mathbf{H}_1(x) \\ \mathbf{H}_1^*(x) & \mathbf{H}_0^*(x) \end{pmatrix}. \quad (10.25)$$

É importante destacar que, no caso com interação de bombeamento ($\mathbf{H}_1 \neq 0$), o hamiltoniano $\Delta\hat{H}_B$ deixa de conservar o número total de átomos do sistema: $[\hat{N}, \Delta\hat{H}_B] \neq 0$. Esse é um **problema** típico de uma teoria de Bogoliubov, pois, invariavelmente, devemos tratar o parâmetro de ordem ψ como um campo clássico (i.e., $\hat{\psi} \rightarrow \psi$). Com essa construção, os termos de bombeamento $\bar{\gamma}^\dagger \mathbf{H}_1 \hat{\gamma}^\dagger$ e $\bar{\gamma} \mathbf{H}_1^* \hat{\gamma}$ não comutam com o operador número $\hat{N}$. Logo, como estamos interessados em *situações físicas reais*, devemos supor que o número total de átomos no sistema N deva ser *muito maior* do que o número de átomos nos estados excitados, tal que o estado fundamental perder (ou ganhar) uma partícula não afeta aproximadamente o parâmetro de ordem*. Ou seja, $\Delta\hat{H}_B$ conserva número quando $N_0/N \rightarrow 1$, pois, assim, $\hat{N}$ pode ser tratado como um escalar:

$$[\Delta\hat{H}_B, \hat{N}] \rightarrow [\Delta\hat{H}_B, N] = 0. \quad (10.26)$$

Uma vez determinado o hamiltoniano dos estados excitados quânticos de um CBE espinorial **genérico** $\Delta\hat{H}_B$, análogo ao caso da teoria de Bogoliubov (abordada no Cap. 6), o próximo passo, naturalmente, é definir uma transformação de $\hat{\gamma}$ que o diagonalize, de modo que encontremos as propriedades estruturais e o espectro de energia desses estados.

10.2 Transformação do Operador de Campo e Diagonalização

Antes de começarmos o processo de diagonalização de $\Delta\hat{H}_B$, precisamos definir a transformação que $\hat{\gamma}_i$ deve satisfazer. Primeiramente, é notável que a representação matricial de $\Delta\hat{H}_B$ tem estrutura *bilinear* para os operadores $\hat{\gamma}_i$. Dessa maneira, podemos partir do *Ansatz* de que a transformação que diagonaliza o hamiltoniano seja linear e dada por:

$$\hat{\gamma}(x) = \sum_{i \neq 0} \mathbf{V}_i(x) \mathbf{b}_i + \mathbf{U}_i(x) \mathbf{b}_i^\dagger, \quad (10.27)$$

em que $\mathbf{V}_i(x)$ e $\mathbf{U}_i(x)$ são *funções matriciais* 3×3 e $\mathbf{b}_i = (b_{i,1}, b_{i,0}, b_{i,-1})^T$, um vetor de operadores aniquilação. Além da estrutura da transformação de $\hat{\gamma}$, é necessário buscar uma maneira de conectar o significado físico de cada $\hat{\gamma}_i$ (Eq. 10.7) com cada um dos termos do somatório acima, de modo a podermos determinar a transformação $a_{i,m} \rightarrow b_{i,m}$. Para isso, o tipo particular de transformação para $\hat{\gamma}_i$:

$$\hat{\gamma}_i(x) = \mathbf{V}_i(x) \mathbf{b}_i + \mathbf{U}_{p(i)}(x) \mathbf{b}_{p(i)}^\dagger \quad (10.28)$$

* Mesma situação considerada ao impor que os estados excitados formam um sistema rarefeito.

é válido ao supor que um estado i acopla-se com apenas um outro estado, denotado por $p(i)$ — o que define a função inversível p . Os métodos para determinar a função *acoplamento* p são discutidos na seção 10.3. A atuação da transformação de $\hat{\gamma}_i$ no operador $\hat{M} = \Delta\hat{H}_B + R(\mathbf{H}_0)/2$ é:

$$\hat{M} = \frac{1}{2} \sum_{i,i'} \int dx \begin{pmatrix} \bar{\mathbf{b}}_i^\dagger & \bar{\mathbf{b}}_{p(i)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{V}_i^\dagger & \mathbf{U}_i^T \\ \mathbf{U}_{p(i)}^\dagger & \mathbf{V}_{p(i)}^T \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{H}_0 & \mathbf{H}_1 \\ \mathbf{H}_1^* & \mathbf{H}_0^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{V}_{i'} & \mathbf{U}_{p(i')} \\ \mathbf{U}_{i'}^* & \mathbf{V}_{p(i')}^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{b}_{i'} \\ \mathbf{b}_{p(i')}^\dagger \end{pmatrix}. \quad (10.29)$$

Podemos definir uma *transformação diagonal* como aquela cujas matrizes $\mathbf{V}_i$ e $\mathbf{U}_i$ satisfazem a equação:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{H}_0 & \mathbf{H}_1 \\ \mathbf{H}_1^* & \mathbf{H}_0^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{V}_i \\ \mathbf{U}_i^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{V}_i \mathbf{E}_i \\ -\mathbf{U}_i^* \mathbf{E}_i \end{pmatrix}, \quad (10.30)$$

em que a matriz diagonal e constante $\mathbf{E}_i = \text{diag}(E_{i,1}, E_{i,0}, E_{i,-1})$ tem a informação das energias de cada uma das *colunas* de $\mathbf{V}_i$ e $\mathbf{U}_i$ (em notação matricial: $[\mathbf{v}_{i,m}]_{m'} = [\mathbf{V}_i]_{m',m}$ e $[\mathbf{u}_{i,m}]_{m'} = [\mathbf{U}_i]_{m',m}$). De maneira geral, a Eq. 10.30 pode também ser escrita em termos dessas colunas:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{H}_0 & \mathbf{H}_1 \\ \mathbf{H}_1^* & \mathbf{H}_0^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{v}_{i,m} \\ \mathbf{u}_{i,m}^* \end{pmatrix} = E_{i,m} \begin{pmatrix} \mathbf{v}_{i,m} \\ -\mathbf{u}_{i,m}^* \end{pmatrix}, \quad (10.31)$$

o que explicita a analogia (conceitual) entre essa equação e as equações de Bogoliubov-de Gennes para supercondutores não uniformes. (21) O processo de diagonalização de $\Delta\hat{H}_B$ a partir das definições acima é garantido por *dois teoremas* que provaremos a seguir. Para simplificar a notação da Eq. 10.31, é conveniente reescrevê-la como:

$$\mathbf{M}\mathbf{p}_a = E_a \boldsymbol{\sigma}_z \mathbf{p}_a, \quad (10.32)$$

para $a = (i, m)$, $\mathbf{p}_a = \begin{pmatrix} \mathbf{v}_a \\ \mathbf{u}_a^* \end{pmatrix}$ e $\boldsymbol{\sigma}_z = \text{diag}(\mathbf{1}, -\mathbf{1})$ a matriz de Pauli 6×6 bloco-diagonal.

10.2.1 Primeiro Teorema

O primeiro teorema diz que, para a *forma bilinear conjugada* $(\mathbf{p}, \mathbf{q})$, definida por:

$$(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \int dx \mathbf{p}^\dagger(x) \boldsymbol{\sigma}_z \mathbf{q}(x), \quad (10.33)$$

se $\mathbf{p}_a$ é uma solução de $\mathbf{M}\mathbf{p}_a = E_a\sigma_z\mathbf{p}_a$, então a seguinte relação é verdadeira:

$$\text{Im}\{E_a\} \neq 0 \Rightarrow (\mathbf{p}_a, \mathbf{p}_a) = 0. \quad (10.34)$$

Para provar esse teorema, basta usar o fato de que $\mathbf{M}$ é um operador matricial hermitiano. Logo, temos a identidade:

$$E_a(\mathbf{p}_{a'}, \mathbf{p}_a) = \int dx \mathbf{p}_{a'}^\dagger \mathbf{M} \mathbf{p}_a = \int dx \mathbf{p}_a^T \mathbf{M}^* \mathbf{p}_{a'}^* = E_{a'}^*(\mathbf{p}_{a'}, \mathbf{p}_a), \quad (10.35)$$

que retorna $(E_a - E_{a'}^*)(\mathbf{p}_{a'}, \mathbf{p}_a) = 0$. Impondo $a = a'$, encontramos a expressão $\text{Im}\{E_a\}(\mathbf{p}_a, \mathbf{p}_a) = 0$, a qual implica que $(\mathbf{p}_a, \mathbf{p}_a)$ é sempre nulo quando $E_a \notin \mathbb{R}$ (i.e., $\text{Im}\{E_a\} \neq 0$), provando o primeiro teorema ■.

Prosseguindo com o processo de diagonalização, é conveniente analisarmos as situações nas quais a matriz projetada $\mathbf{M}_{i,i'}$, definida por:

$$\mathbf{M}_{i,i'} = \int dx \begin{pmatrix} \mathbf{V}_i^\dagger & \mathbf{U}_i^T \\ \mathbf{U}_{p(i)}^\dagger & \mathbf{V}_{p(i)}^T \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{H}_0 & \mathbf{H}_1 \\ \mathbf{H}_1^* & \mathbf{H}_0^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{V}_{i'} & \mathbf{U}_{p(i')} \\ \mathbf{U}_{i'}^* & \mathbf{V}_{p(i')}^* \end{pmatrix}, \quad (10.36)$$

é diagonal ou não. Aqui, chamamos $\mathbf{M}_{i,i'}$ de diagonal se ela puder ser escrita como o produto entre $\delta_{i,i'}$ e uma matriz diagonal. Como estamos interessados nas matrizes $\mathbf{V}_i$ e $\mathbf{U}_i$ provenientes de transformações diagonais, a matriz projetada $\mathbf{M}_{i,i'}$ é escrita como:

$$\mathbf{M}_{i,i'} = \int dx \begin{pmatrix} [\mathbf{V}_i^\dagger \mathbf{V}_{i'} - \mathbf{U}_i^T \mathbf{U}_{i'}^*] \mathbf{E}_{i'} & [\mathbf{U}_i^\dagger \mathbf{V}_{p(i')} - \mathbf{V}_i^T \mathbf{U}_{p(i')}^*] \mathbf{E}_{p(i')}^* \\ [\mathbf{U}_{p(i)}^\dagger \mathbf{V}_{i'} - \mathbf{V}_{p(i)}^T \mathbf{U}_{i'}^*] \mathbf{E}_{i'} & [\mathbf{V}_{p(i)}^\dagger \mathbf{V}_{p(i')} - \mathbf{U}_{p(i)}^T \mathbf{U}_{p(i')}^*] \mathbf{E}_{p(i')}^* \end{pmatrix}. \quad (10.37)$$

É notável que cada uma das entradas da matriz acima são escritas em termos da forma bilinear $(\cdot, \cdot)$ que definimos anteriormente. Portanto, para analisar se $\mathbf{M}_{i,i'}$ é diagonal, é necessário analisar primeiro todas as situações em que $(\mathbf{p}_a, \mathbf{p}_{a'})$ é nulo ou não. Isso seria uma tarefa muito simples se precisássemos apenas verificar o valor de $E_a - E_{a'}^*$. Contudo, existem alguns elementos do espectro E_a que devolvem informação *redundante* acerca do sistema e, assim, precisamos identificá-los. Isso é evidente para a seguinte relação de simetria (*sempre verdadeira*) para a Eq. 10.31:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{H}_0 & \mathbf{H}_1 \\ \mathbf{H}_1^* & \mathbf{H}_0^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{u}_{i,m} \\ \mathbf{v}_{i,m}^* \end{pmatrix} = -E_{i,m}^* \begin{pmatrix} \mathbf{u}_{i,m} \\ -\mathbf{v}_{i,m}^* \end{pmatrix}. \quad (10.38)$$

Ou seja, para todo vetor $\mathbf{p}_a$, definido a partir do par $(\mathbf{v}_{i,m}, \mathbf{u}_{i,m}^*)$ e com energia E_a , sempre vai existir um vetor correspondente $\tilde{\mathbf{p}}_a$, definido a partir de $(\mathbf{u}_{i,m}, \mathbf{v}_{i,m}^*)$ e com energia

$-E_a^*$, cuja forma bilinear satisfaz $(\tilde{\mathbf{p}}_a, \tilde{\mathbf{p}}_a) = -(\mathbf{p}_a, \mathbf{p}_a)$ e $(\tilde{\mathbf{p}}_a, \mathbf{p}_a) = 0$. Não é difícil mostrar que, se considerássemos válidos ambos vetores $\mathbf{p}_a$ e $\tilde{\mathbf{p}}_a$, os termos fora dos blocos da diagonal principal de $\mathbf{M}_{i,i'}$ seriam diferente de zero quando $(p(i), m) = a$ e $(i', m) = \tilde{a}$ (ou, equivalentemente, quando $(i, m) = a$ e $(p(i'), m) = \tilde{a}$), o que tornaria o processo de diagonalização *impossível*. Além disso, também é razoavelmente simples mostrar que apenas um desses vetores é necessário para a diagonalização de $\hat{M}$, dado que a identificação $\tilde{\mathbf{b}}_a = \mathbf{b}_a^\dagger$ devolve um mesmo hamiltoniano e operador de campo, independente da escolha de $\mathbf{p}_a$ ou $\tilde{\mathbf{p}}_a$. Daqui em diante, sempre denotaremos $\mathbf{p}_a$ como os vetores que satisfazem $(\mathbf{p}_a, \mathbf{p}_a) \geq 0$ e não levaremos mais em conta os vetores $\tilde{\mathbf{p}}_a$.

10.2.2 Segundo Teorema

O segundo teorema diz que, se o sistema for *especialmente não-degenerado* (de acordo com a definição dada a seguir), dado o conjunto $\{(\mathbf{p}_a, E_a)\}$ de todos os vetores $(\mathbf{p}_a, \mathbf{p}_a) \geq 0$ e energias E_a , então o operador $\hat{M}$ será diagonalizado e apenas estados com $E_a \in \mathbb{R}$ contribuem com ele.

Para as entradas dos blocos diagonais de $\mathbf{M}_{i,i'}$, podemos utilizar o resultado do primeiro teorema. Para os blocos fora da diagonal, derivamos a seguinte propriedade (sabendo que $\mathbf{M}^* = \boldsymbol{\sigma}_x \mathbf{M} \boldsymbol{\sigma}_x$ e $\mathbf{M}^* \boldsymbol{\sigma}_x \mathbf{p}_a = E_a \boldsymbol{\sigma}_x \boldsymbol{\sigma}_z \mathbf{p}_a$):

$$\begin{aligned} E_{a'} \int dx \mathbf{p}_a^T \boldsymbol{\sigma}_x \boldsymbol{\sigma}_z \mathbf{p}_{a'} &= \int dx \mathbf{p}_a^T \mathbf{M}^* \boldsymbol{\sigma}_x \mathbf{p}_{a'} \\ &= \int dx \mathbf{p}_{a'}^T \boldsymbol{\sigma}_x \mathbf{M} \mathbf{p}_a = -E_a \int dx \mathbf{p}_a^T \boldsymbol{\sigma}_x \boldsymbol{\sigma}_z \mathbf{p}_{a'}, \end{aligned} \quad (10.39)$$

que retorna $(E_{a'} + E_a) \int dx \mathbf{p}_a^T \boldsymbol{\sigma}_x \boldsymbol{\sigma}_z \mathbf{p}_{a'} = 0$. A integral da expressão anterior é equivalente a cada uma das entradas fora do bloco diagonal de $\mathbf{M}_{i,i'}$, as quais serão nulas se $E_{a'} + E_a \neq 0$.

Logo, um sistema é chamado de *especialmente não-degenerado* se cada energia E_a de seu espectro se relaciona com apenas um vetor $\mathbf{p}_a$ e **não existe** nenhuma outra energia $E_{a'}$ que satisfaça alguma das equações abaixo:

$$\begin{cases} E_a - E_{a'}^* = 0, \\ E_a + E_{a'} = 0. \end{cases} \quad (10.40)$$

Note que escolher $\mathbf{p}_a$ no lugar de $\tilde{\mathbf{p}}_a$ é necessário mas não suficiente para que o sistema seja especialmente não-degenerado, uma vez que essa propriedade depende das particularidades do sistema e das interações envolvidas nele.

Então, se o sistema é *especialmente não-degenerado*, a matriz $\mathbf{M}_{i,i'}$ se simplifica:

$$\mathbf{M}_{i,i'} = \begin{cases} \delta_{i,i'} \begin{pmatrix} \mathbf{E}_i & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{E}_{p(i)} \end{pmatrix}, & \text{para } \text{Im}\{E_a\} = 0; \\ \mathbf{0}, & \text{para } \text{Im}\{E_a\} \neq 0, \end{cases} \quad (10.41)$$

impondo a normalização $(\mathbf{p}_a, \mathbf{p}_a) = 1$ para $E_a \in \mathbb{R}$. Também é possível escrevermos o operador $\hat{M}$ como:

$$\hat{M} = \frac{1}{2} \sum_{i,m} E_{i,m} b_{i,m}^\dagger b_{i,m} + E_{p(i),m} b_{p(i),m} b_{p(i),m}^\dagger. \quad (10.42)$$

Ao supor que os operadores $b_{i,m}$ são bosônicos, finalmente encontramos:

$$\hat{M} = \sum_{i,m} \left[b_{i,m}^\dagger b_{i,m} + \frac{1}{2} \right] E_{i,m}, \quad (10.43)$$

o que mostra que $\hat{M}$ é diagonalizado pelo conjunto $\{(\mathbf{p}_a, E_a)\}$ ■.

10.3 Compatibilização entre Resultados Matemáticos e Físicos

Do processo de diagonalização visto acima, a propriedade mais notável é que ele é matematicamente possível independentemente das relações de comutação dos operadores $a_{i,m}$ e $b_{i,m}$ (a menos da condição $[a_{i,m}, a_{i,m'}^\dagger] \in \mathbb{C}$). Ou seja, a diagonalização de $\Delta \hat{H}_B$ não depende da transformação $a_{i,m} \rightarrow b_{i,m}$. Contudo, ao tratar um sistema físico real, nem sempre todas essas transformações são válidas. Para isso, nesta seção analisamos dois exemplos do processo de *compatibilização* dos resultados matemáticos da estrutura do operador $\hat{\gamma}_i$ em termos de $a_{i,m}$ e $b_{i,m}$.

Aqui, como tratamos de um sistema bosônico, partiremos da hipótese de que $b_{i,m}$ é um operador aniquilação de bósons:

$$[b_{i,m}, b_{i',m'}^\dagger] = \delta_{i,i'} \delta_{m,m'}. \quad (10.44)$$

Afirmar a mesma propriedade para os operadores $a_{i,m}$ não é possível, como ilustramos nos dois exemplos seguintes. Esse fato, em particular, é o que nos faz concluir que as soluções de $\hat{\gamma}$ possuem estrutura *espinorial*.

10.3.1 Caso sem Bombeamento ($\mathbf{H}_1 = 0$)

Esse é o caso mais simples do processo de compatibilização dos estados excitados quânticos. Como ele parte do princípio de que $\mathbf{H}_1 = 0$, a Eq. 10.31 se simplifica:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{H}_0 & 0 \\ 0 & \mathbf{H}_0^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{v}_{i,m} \\ \mathbf{u}_{i,m}^* \end{pmatrix} = E_{i,m} \begin{pmatrix} \mathbf{v}_{i,m} \\ -\mathbf{u}_{i,m}^* \end{pmatrix}. \quad (10.45)$$

e também as relações de ortogonalidade dos vetores $\mathbf{v}_{i,m}$ e $\mathbf{u}_{i,m}$:

$$\begin{cases} \int \mathbf{v}_{i,m}^\dagger \mathbf{v}_{i',m'} dx = 0 & \Leftrightarrow E_{i,m} \neq E_{i',m'}, \\ \int \mathbf{u}_{i,m}^\dagger \mathbf{u}_{i',m'} dx = 0 & \Leftrightarrow E_{i,m} \neq E_{i',m'}, \\ \int \mathbf{u}_{i,m}^\dagger \mathbf{v}_{i',m'} dx = 0 & \Leftrightarrow E_{i,m} + E_{i',m'} \neq 0. \end{cases} \quad (10.46)$$

Dessas relações, para o espectro $\{E_{i,m}\}$ não-degenerado com $(\mathbf{p}_a, \mathbf{p}_a) > 0$, a seguinte normalização:

$$\int \mathbf{v}_{i,m}^\dagger \mathbf{v}_{i',m'} - \mathbf{u}_{i,m}^\dagger \mathbf{u}_{i',m'} dx = \delta_{i,i'} \delta_{m,m'} \quad (10.47)$$

define duas amplitudes:

$$\begin{cases} \int \mathbf{v}_{i,m}^\dagger \mathbf{v}_{i,m} dx = |A_{i,m}|^2, \\ \int \mathbf{u}_{i,m}^\dagger \mathbf{u}_{i,m} dx = |B_{i,m}|^2, \end{cases} \quad (10.48)$$

que satisfazem $|A_{i,m}|^2 - |B_{i,m}|^2 = 1$. Como as soluções $\mathbf{v}_{i,m}$ são independentes de $\mathbf{u}_{i,m}$ devido à estrutura bloco-diagonal de $\mathbf{M}(x)$, não há outro vínculo específico entre as amplitudes $A_{i,m}$ e $B_{i,m}$ (e suas diferentes escolhas não afetam o espectro de energia encontrado). Portanto, podemos tomar uma representação conveniente do operador $\hat{\gamma}$ tomando $B_{i,m} = 0$, que significa:

$$\hat{\gamma}_i = \mathbf{V}_i(x) \mathbf{b}_i. \quad (10.49)$$

Assim, no caso $\mathbf{H}_1 = 0$, o uso da função *acoplamento* $p(i)$ não é necessária.

Agora, consideremos que o parâmetro de ordem ψ represente um condensado *estacionário* (i.e., que possua potencial químico μ bem definido):

$$\mu = -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{\psi^\dagger(x) \nabla^2 \psi(x)}{n(x)} + U(x) + c_0 n(x) + c_1 \frac{|\vec{F}(x)|^2}{n(x)}. \quad (10.50)$$

Utilizando essa versão da equação de Gross-Pitaevskii, podemos substituir o potencial químico μ na definição de $\mathbf{H}_0$ e encontramos:

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_0 = & -\frac{\hbar^2}{2M} \mathbf{1} \left(\nabla^2 - \frac{\boldsymbol{\psi}^\dagger(x) \nabla^2 \boldsymbol{\psi}(x)}{n(x)} \right) + c_0 \boldsymbol{\psi}(x) \boldsymbol{\psi}^\dagger(x) + \\ & + c_1 \left(\vec{F}(x) \cdot \vec{\mathbf{f}} + \vec{\mathbf{f}} \boldsymbol{\psi}(x) \cdot \boldsymbol{\psi}^\dagger(x) \vec{\mathbf{f}} - \frac{|\vec{F}(x)|^2}{n(x)} \mathbf{1} \right). \end{aligned} \quad (10.51)$$

Por exemplo, podemos inicialmente considerar que $\boldsymbol{\psi}$ represente um estado ferromagnético com textura de spin *trivial*:

$$\boldsymbol{\psi} = \sqrt{n(x)} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (10.52)$$

Assim, a estrutura de $\mathbf{H}_0$ fica análoga à de $\mathbf{H}_k^{(0)} + \mathbf{H}^{(1)}$ (Eq. 6.46) quando o campo magnético aplicado no sistema é nulo:

$$\mathbf{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2M} \mathbf{1} \left(\nabla^2 - \frac{\nabla^2 \sqrt{n(x)}}{\sqrt{n(x)}} \right) + c_0 n(x) \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + c_1 n(x) \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -2 \end{pmatrix}. \quad (10.53)$$

Como $\mathbf{H}_0$ é um operador matricial diagonal nesse caso, é esperado que a estrutura das soluções $\mathbf{V}_i(x)$ seja bastante simples (i.e., matrizes diagonais):

$$\mathbf{V}_i(x) = \begin{pmatrix} f_{i,1}(x) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} & f_{i,0}(x) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} & f_{i,-1}(x) \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \end{pmatrix}, \quad (10.54)$$

de modo que a identificação $\phi_{i,m} = f_{i,m}$ e $a_{i,m} = b_{i,m}$ resolve a estrutura (trivial) da solução do operador $\hat{\gamma}_i$.

Contudo, se tivéssemos escolhido um parâmetro de ordem com textura de spin *não trivial*, a análise da estrutura da solução $\hat{\gamma}_i$ não seria tão simples. Para ilustrar esse fato, tomamos o parâmetro de ordem do estado ferromagnético (em coordenadas cilíndricas):

$$\boldsymbol{\psi} = \sqrt{n(r, z)} e^{-i\alpha \mathbf{f}_z} e^{-i\beta \mathbf{f}_y} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (10.55)$$

em que $\alpha = n_\alpha \varphi$ ($n_\alpha \in \mathbb{Z}$) e $\beta = \beta(r) \ll 1$ é uma função arbitrariamente suave (i.e., $\beta'(r) \ll 1/r_m$ e $\beta''(r) \ll 1/r_m^2$, para r_m o raio médio do perfil da densidade de número). Escolhemos tais parâmetros em específico para ψ devido a propriedade $\beta \ll 1$ torná-lo arbitrariamente próximo (em sua órbita de simetria) ao estado ferromagnético com textura de spin trivial ($\beta = 0$).

Para simplificar a equação de autovalores para $\mathbf{v}_{i,m}$ (Eq. 10.45), é conveniente definirmos a seguinte mudança de base:

$$\mathbf{v}_{i,m} = \mathbf{R} \mathbf{t}_{i,m}, \quad (10.56)$$

para a matriz unitária $\mathbf{R}$:

$$\mathbf{R} = e^{i\tau\varphi} e^{-i\alpha\mathbf{f}_z} e^{-i\beta\mathbf{f}_y}, \quad (10.57)$$

com $\tau \in \mathbb{Z}$. Dessa maneira, o vetor $\mathbf{t}_{i,m}$ satisfaz a equação:

$$\mathbf{R}^\dagger \mathbf{H}_0 \mathbf{R} \mathbf{t}_{i,m} = E_{i,m} \mathbf{t}_{i,m}. \quad (10.58)$$

Como o operador $\mathbf{R}^\dagger \mathbf{H}_0 \mathbf{R}$,

$$\begin{aligned} \mathbf{R}^\dagger \mathbf{H}_0 \mathbf{R} = & -\frac{\hbar^2 \mathbf{1}}{2M} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + \frac{\hbar^2}{2Mr^2} e^{i\beta\mathbf{f}_y} \begin{pmatrix} (n_\alpha - \tau)^2 & 0 & 0 \\ 0 & \tau^2 & 0 \\ 0 & 0 & (n_\alpha + \tau)^2 \end{pmatrix} e^{-i\beta\mathbf{f}_y} \\ & + \frac{\hbar^2}{2M} \frac{\psi^\dagger(x) \nabla^2 \psi(x)}{n(x)} + c_0 n(r, z) \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ & + c_1 \left(\vec{F}(x) \cdot e^{i\beta\mathbf{f}_y} e^{i\alpha\mathbf{f}_z} \vec{\mathbf{f}} e^{-i\alpha\mathbf{f}_z} e^{-i\beta\mathbf{f}_y} + e^{i\beta\mathbf{f}_y} e^{i\alpha\mathbf{f}_z} \vec{\mathbf{f}} \psi(x) \cdot \psi^\dagger(x) \vec{\mathbf{f}} e^{-i\alpha\mathbf{f}_z} e^{-i\beta\mathbf{f}_y} - |\vec{F}|^2(x) \mathbf{1} \right), \end{aligned} \quad (10.59)$$

possui estrutura altamente *não trivial*, o uso de métodos aproximativos para determinarmos $\mathbf{t}_{i,m}$ pode ser uma necessidade real. Antes de abordarmos esses métodos, é válido citar que, na estrutura de $\mathbf{R}^\dagger \mathbf{H}_0 \mathbf{R}$ acima, impusemos a situação simplificada de que toda dependência de φ em $\mathbf{v}_{i,m}$ estivesse contida na rotação $\mathbf{R}$, o que é possível, pois $\partial_\varphi \mathbf{H}_0 \rightarrow 0$ quando $\beta \rightarrow 0$ (ou seja, $\partial_\varphi \mathbf{t}_{i,m} = 0$).

Aqui, descrevemos brevemente o procedimento aproximativo para simplificarmos a estrutura do operador $\mathbf{R}^\dagger \mathbf{H}_0 \mathbf{R}$. Primeiramente, devemos considerar o fato de que $\beta \ll 1$ juntamente com $|c_1| \ll c_0$ (por exemplo, o caso do ^{87}Rb : $|c_1|/c_0 \approx 0,01$) e expandir todas as matrizes de $\mathbf{R}^\dagger \mathbf{H}_0 \mathbf{R}$ até a primeira ordem nesses parâmetros. Então, para as matrizes

dependentes de β e c_1 resultantes, aplicamos a *teoria de perturbação independente do tempo* (TPIT). Para os autovetores

$$g_{i,1}(r, z) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad g_{i,0}(r, z) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad g_{i,-1}(r, z) \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (10.60)$$

da parte de $\mathbf{R}^\dagger \mathbf{H}_0 \mathbf{R}$ independente de β e c_1 (i.e., do caso $\beta = 0$ e $c_1 = 0$), podemos calcular as correções de energia. Contudo, é possível mostrar que essas correções independem de β em primeira ordem. Então, $\mathbf{R}^\dagger \mathbf{H}_0 \mathbf{R}$ depende *efetivamente* de ordens superiores de β e, portanto, permanece similar à Eq. 10.53:

$$\begin{aligned} (\mathbf{R}^\dagger \mathbf{H}_0 \mathbf{R})_{\text{ef}} &\simeq -\frac{\hbar^2 \mathbf{1}}{2M} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{\nabla^2 \sqrt{n}}{\sqrt{n}} \right) + \\ &+ \frac{\hbar^2}{2Mr^2} \begin{pmatrix} (n_\alpha - \tau)^2 - n_\alpha^2 & 0 & 0 \\ 0 & \tau^2 - n_\alpha^2 & 0 \\ 0 & 0 & (n_\alpha + \tau)^2 - n_\alpha^2 \end{pmatrix} + \\ &+ c_0 n(r, z) \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + c_1 n(r, z) \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -2 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (10.61)$$

Dada a estrutura diagonal de $(\mathbf{R}^\dagger \mathbf{H}_0 \mathbf{R})_{\text{ef}}$, seria esperado que a matriz $\mathbf{V}_i$ fosse:

$$\mathbf{V}_i(x) = \begin{pmatrix} g_{i,1}(x) \mathbf{R} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} & g_{i,0}(x) \mathbf{R} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} & g_{i,-1}(x) \mathbf{R} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \end{pmatrix}. \quad (10.62)$$

Contudo, a expressão acima não é correta e, conseqüentemente, $[a_{i,m}, a_{i,m'}^\dagger] \neq \delta_{m,m'}$. Para provar essa afirmação *por contradição*, tomaremos por hipótese $[a_{i,m}, a_{i,m'}^\dagger] = \delta_{m,m'}$. Assim, partindo da Eq. 10.49, seríamos capazes de encontrar:

$$\mathbf{V}_i \mathbf{V}_i^\dagger = \text{diag}(|\phi_{i,1}|^2, |\phi_{i,0}|^2, |\phi_{i,-1}|^2). \quad (10.63)$$

Contudo, calcular $\mathbf{V}_i \mathbf{V}_i^\dagger$ com a expressão de $\mathbf{V}_i$ dada pela Eq. 10.62 retornaria uma matriz diagonal apenas se as funções $|g_{i,1}|^2$, $|g_{i,0}|^2$ e $|g_{i,-1}|^2$ fossem idênticas — o que não é verdade em geral, haja vista os termos de interação de $(\mathbf{R}^\dagger \mathbf{H}_0 \mathbf{R})_{\text{ef}}$ para os diferentes estados de spin. Ou seja, a estrutura de $\mathbf{V}_i$ expressa na Eq. 10.62 não é correta.

Para investigar as possíveis estruturas de $\mathbf{V}_i$, sem perda de generalidade, consideramos o seguinte:

$$\hat{\gamma}_i = \phi_i \mathbf{a}_i = \mathbf{V}_i \mathbf{b}_i, \quad (10.64)$$

em que $\phi_i = \text{diag}(\phi_{i,1}, \phi_{i,0}, \phi_{i,-1})$ e $\mathbf{a}_i = (a_{i,1}, a_{i,0}, a_{i,-1})^T$. Se $\phi_{i,m} \neq 0$, a matriz ϕ_i é inversível e encontramos a relação:

$$\mathbf{a}_i = \mathbf{T}_i \mathbf{b}_i, \quad (10.65)$$

gerada pela matriz *constante* $\mathbf{T}_i$ (dado que $\mathbf{a}_i$ e $\mathbf{b}_i$ não dependem da posição e do tempo). Dessa maneira, a expressão genérica de $\mathbf{V}_i$ é:

$$\mathbf{V}_i(x) = \phi_i(x) \mathbf{T}_i. \quad (10.66)$$

Expandindo o produto de matrizes acima:

$$\mathbf{V}_i = \begin{pmatrix} \phi_{i,1} T_{1,1}^i & \phi_{i,1} T_{1,0}^i & \phi_{i,1} T_{1,-1}^i \\ \phi_{i,0} T_{0,1}^i & \phi_{i,0} T_{0,0}^i & \phi_{i,0} T_{0,-1}^i \\ \phi_{i,-1} T_{-1,1}^i & \phi_{i,-1} T_{-1,0}^i & \phi_{i,-1} T_{-1,-1}^i \end{pmatrix}, \quad (10.67)$$

e comparando essa expressão com a Eq. 10.62, é notável que, enquanto 10.62 *não repete* funções proporcionais em cada uma de suas colunas (i.e., a parte dependente de $g_{i,m}$), as funções $\phi_{i,1}$, $\phi_{i,0}$ e $\phi_{i,-1}$ se repetem na estrutura de $\mathbf{V}_i$ acima. Ou seja, enquanto a *dependência espacial* de diferentes colunas na Eq. 10.62 pode, em geral, ser muito diferente, ela se mantém a mesma na Eq. 10.67. Assim, dada a independência entre as colunas $\mathbf{v}_{i,m}$, para conciliar essas duas estruturas em um único caso, é conveniente a definição de *três* matrizes $\mathbf{V}_i \rightarrow \mathbf{V}_{i,m}$ de modo que apenas uma de suas colunas não seja nula. Por exemplo:

$$\mathbf{V}_{i,1} = \begin{pmatrix} \phi_{(i,1),1} T_{1,1}^i & 0 & 0 \\ \phi_{(i,1),0} T_{0,1}^i & 0 & 0 \\ \phi_{(i,1),-1} T_{-1,1}^i & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (10.68)$$

Redefinindo o operador de campo $\hat{\gamma}_i \rightarrow \hat{\gamma}_{i,m}$, encontramos:

$$\hat{\gamma}_{i,1} = \begin{pmatrix} \phi_{(i,1),1} a_{(i,1),1} \\ \phi_{(i,1),0} a_{(i,1),0} \\ \phi_{(i,1),-1} a_{(i,1),-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \phi_{(i,1),1} T_{1,1}^i \\ \phi_{(i,1),0} T_{0,1}^i \\ \phi_{(i,1),-1} T_{-1,1}^i \end{pmatrix} b_{i,1} = g_{i,1} \mathbf{R} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} b_{i,1}. \quad (10.69)$$

Logo, pela simples análise da última equação, concluímos que:

$$\begin{cases} a_{(i,1),m} = T_{m,1}^i b_{i,1}, \\ [a_{(i,1),m}, a_{(i,1),m'}^\dagger] \neq \delta_{m,m'}. \end{cases} \quad (10.70)$$

Esse fato mostra diretamente que a solução de $\hat{\gamma}_{i,1}$ é do tipo *espinorial*, assim como o parâmetro de ordem do estado fundamental ψ , compartilhando os mesmos parâmetros α e β em $\mathbf{R}$. Em outras palavras, a ação α e β é o que força com que $\hat{\gamma}_{i,1}$ represente um estado de espinor e, portanto, aponta que a *natureza espinorial* dos estados excitados quânticos surge diretamente das *propriedades simétricas* do estado fundamental. Em particular, quando esses estados quânticos emergem de uma *excitação topológica* do parâmetro de ordem, escolhemos denominá-los por *excitações topológicas quânticas* (ETQs).

Mas uma questão ainda precisa ser respondida: *uma solução desse tipo representa realmente um sistema físico?* Na literatura (4,5,12), é usual *definir* $[a_{(i,1),m}, a_{(i,1),m'}^\dagger] = \delta_{m,m'}$ e, assim, escrever todas as quantidades observáveis do sistema em termos desses operadores. O operador de campo, nesse caso, é intimamente relacionado com a *função de onda* do sistema e podemos interpretá-lo como a *expansão* da função de onda no formalismo da segunda quantização. Contudo, todas as hipóteses que abordamos nesse trabalho apontam que o operador de campo $\hat{\gamma}$ efetivamente expande o *parâmetro de ordem* ψ . Como o parâmetro de ordem possui naturalmente a estrutura de espinor (vetorial), seus estados excitados (que representam partículas do mesmo tipo que aquelas no estado fundamental) devem possuir a mesma estrutura espinorial. Então, uma boa aproximação para o operador de campo do sistema $\hat{\psi}$ é:

$$\hat{\psi} = \frac{\psi}{\sqrt{N}} a_0 + \hat{\gamma}. \quad (10.71)$$

Dada a discussão acima, é conveniente redefinir um pouco a notação (a fim de simplificá-la). Como todos os operadores $a_{(i,1),m}$ ($m = 1, 0, -1$) referem-se ao mesmo estado $(i, 1)$, definimos as constantes $|T_{m,1}^i|^2$ ($\sum_m |T_{m,1}^i|^2 = 1$) como fatores de normalização de $\phi_{(i,1),m}$. Assim, denotamos daqui em diante:

$$\begin{cases} a_{(i,1),m} \rightarrow a_{i,1} = b_{i,1}, \\ T_{m,1}^i \phi_{(i,1),m} \rightarrow \phi_{(i,1),m}. \end{cases} \quad (10.72)$$

O operador de campo $\hat{\gamma}_{i,1}$ nessa nova notação fica:

$$\hat{\gamma}_{i,1} = \begin{pmatrix} \phi_{(i,1),1} \\ \phi_{(i,1),0} \\ \phi_{(i,1),-1} \end{pmatrix} a_{i,1} = g_{i,1}(r, z) e^{i\tau\varphi} e^{-i\alpha\mathbf{f}_z} e^{-i\beta\mathbf{f}_y} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} a_{i,1}, \quad (10.73)$$

para a normalização $\int dx \sum_m |\phi_{(i,1),m}|^2 = 1$. Além dessas considerações estruturais, é notável que, fisicamente, o operador de campo $\hat{\gamma}_{i,1}$ representa um estado *ferromagnético positivo* e os operadores $\hat{\gamma}_{i,0}$ e $\hat{\gamma}_{i,-1}$ (encontrados de maneira análoga) representam os estados *polar* e *ferromagnético negativo*. Nesse sentido, mesmo que um condensado esteja em um estado específico (ferromagnético positivo, por exemplo), flutuações no sistema eventualmente são capazes de excitar algumas das suas partículas em estados de natureza distinta (nesse caso, polar e ferromagnético negativo).

Revisitando o caso $\alpha = \beta = 0$ (Eq. 10.54), podemos concluir que, devido ao fato do parâmetro de ordem escolhido ter sido tão simples, as propriedades espinoriais emergentes de $\hat{\gamma}_i$ ficaram escondidas (dado que $\mathbf{V}_i$ é diagonal). Contudo, nesse caso é bem simples mostrar que:

$$\hat{\gamma}_i = \hat{\gamma}_{i,1} + \hat{\gamma}_{i,0} + \hat{\gamma}_{i,-1}, \quad (10.74)$$

com cada *espinor* correspondendo a uma coluna da matriz diagonal $\mathbf{V}_i$ ($\alpha = \beta = 0$).

10.3.2 Caso com Bombeamento ($\mathbf{H}_1 \neq 0$)

Agora, discutiremos o processo de compatibilização das soluções de $\hat{\gamma}$ no caso em que a interação de bombeamento não é nula (análogo completo da teoria de Bogoliubov). Felizmente, boa parte dos conceitos vistos anteriormente para o caso $\mathbf{H}_1 = 0$ continuam válidos.

Para o parâmetro de ordem do estado ferromagnético com textura de spin trivial ($\boldsymbol{\psi} = \sqrt{n(x)}(1, 0, 0)^T$), podemos encontrar os operadores matriciais $\mathbf{H}_0$ (Eq. 10.53) e $\mathbf{H}_1$:

$$\mathbf{H}_1 = (c_0 + c_1)n(x) \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (10.75)$$

Da estrutura diagonal de $\mathbf{H}_0$ e $\mathbf{H}_1$, é possível mostrar que as soluções $\mathbf{V}_i$ e $\mathbf{U}_i$ são

simplesmente as matrizes diagonais abaixo:

$$\mathbf{V}_i(x) = \begin{pmatrix} f_{i,1}(x) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} & f_{i,0}(x) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} & f_{i,-1}(x) \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \end{pmatrix}, \quad (10.76)$$

$$\mathbf{U}_i(x) = \begin{pmatrix} g_{i,1}(x) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} & g_{i,0}(x) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} & g_{i,-1}(x) \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \end{pmatrix}. \quad (10.77)$$

Portanto, ao aplicar esse tipo de solução na transformação do parâmetro de ordem $\hat{\gamma}_i$ (Eq. 10.28), podemos encontrar:

$$\begin{cases} f_{i,m}(x) = c_{i,m} \phi_{i,m}(x), \\ g_{p(i),m}(x) = d_{p(i),m} \phi_{i,m}(x), \\ a_{i,m} = c_{i,m} b_{i,m} + d_{p(i),m} b_{p(i),m}^\dagger, \\ |c_{i,m}|^2 - |d_{p(i),m}|^2 = 1, \end{cases} \quad (10.78)$$

resolvendo completamente os estados excitados quânticos se uma função acoplamento $p(i)$ apropriada existir.

Agora, ao considerar o parâmetro de ordem do estado ferromagnético com textura de spin *não trivial* da Eq. 10.55, a situação *diagonal* acima se altera. Primeiramente, ao alterar a dependência espacial do hamiltoniano, é conveniente definirmos a mudança de base para os vetores

$$\begin{cases} \mathbf{v}_{i,m} = \mathbf{R} \mathbf{t}_{i,m}, \\ \mathbf{u}_{i,m} = \mathbf{R} \mathbf{s}_{i,m}, \end{cases} \quad (10.79)$$

com $\mathbf{R}$ dada pela Eq. 10.57. A Eq. 10.31 em termos de $\mathbf{t}_{i,m}$ e $\mathbf{s}_{i,m}$ fica:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{R}^\dagger \mathbf{H}_0 \mathbf{R} & \mathbf{R}^\dagger \mathbf{H}_1 \mathbf{R}^* \\ \mathbf{R}^T \mathbf{H}_1^* \mathbf{R} & \mathbf{R}^T \mathbf{H}_0^* \mathbf{R}^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{t}_{i,m} \\ \mathbf{s}_{i,m}^* \end{pmatrix} = E_{i,m} \begin{pmatrix} \mathbf{t}_{i,m} \\ -\mathbf{s}_{i,m}^* \end{pmatrix}. \quad (10.80)$$

Analogamente ao abordado no caso $\mathbf{H}_1 = 0$, a equação acima não se resolve facilmente devido a estrutura intrincada de $\mathbf{R}^\dagger \mathbf{H}_0 \mathbf{R}$ (Eq. 10.59) e $\mathbf{R}^\dagger \mathbf{H}_1 \mathbf{R}^*$:

$$\mathbf{R}^\dagger \mathbf{H}_1 \mathbf{R}^* = c_0 n(r, z) \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + c_1 e^{i\beta \mathbf{f}_y} e^{i\alpha \mathbf{f}_z} \vec{\mathbf{f}} \boldsymbol{\psi}(x) \cdot \boldsymbol{\psi}^T(x) \vec{\mathbf{f}}^* e^{i\alpha \mathbf{f}_z} e^{-i\beta \mathbf{f}_y}. \quad (10.81)$$

Utilizando o mesmo tipo de método aproximativo realizado para $\mathbf{R}^\dagger \mathbf{H}_0 \mathbf{R}$ na Eq. 10.61, podemos encontrar que:

$$(\mathbf{R}^\dagger \mathbf{H}_1 \mathbf{R}^*)_{\text{ef}} = (c_0 + c_1)n(r, z) \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (10.82)$$

Da estrutura diagonal de $(\mathbf{R}^\dagger \mathbf{H}_0 \mathbf{R})_{\text{ef}}$ e $(\mathbf{R}^\dagger \mathbf{H}_1 \mathbf{R}^*)_{\text{ef}}$, seria natural esperar que as matrizes $\mathbf{V}_i$ e $\mathbf{U}_i$ adquirissem a seguinte *estrutura incorreta*:

$$\mathbf{V}_i(x) = \begin{pmatrix} h_{i,1}(x)\mathbf{R} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} & h_{i,0}(x)\mathbf{R} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} & h_{i,-1}(x)\mathbf{R} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \end{pmatrix}, \quad (10.83)$$

$$\mathbf{U}_i(x) = \begin{pmatrix} j_{i,1}(x)\mathbf{R} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} & j_{i,0}(x)\mathbf{R} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} & j_{i,-1}(x)\mathbf{R} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \end{pmatrix}, \quad (10.84)$$

juntamente com a relação de comutação $[a_{i,m}, a_{i,m'}^\dagger] = \delta_{m,m'}$. Contudo, por um procedimento completamente análogo ao realizado anteriormente (Eqs. 10.62-10.73), é possível mostrar que $\hat{\gamma}_i$ apresenta-se como uma solução do tipo *espinor*. Ou seja, se $[a_{i,m}, a_{i,m'}^\dagger] = \delta_{m,m'}$ fosse uma relação de comutação válida, a estrutura da transformação de $\hat{\gamma}_i$ (Eq. 10.28) retornaria:

$$\mathbf{V}_i \mathbf{V}_i^\dagger - \mathbf{U}_{p(i)}^* \mathbf{U}_{p(i)}^T = \text{diag}(|\phi_{i,1}|^2, |\phi_{i,0}|^2, |\phi_{i,-1}|^2). \quad (10.85)$$

Mas, ao calcular $\mathbf{V}_i \mathbf{V}_i^\dagger - \mathbf{U}_{p(i)}^* \mathbf{U}_{p(i)}^T$ com as estruturas das Eqs. 10.83 e 10.84, encontraríamos uma matriz diagonal apenas se:

$$\begin{cases} |h_{i,1}|^2 \equiv |h_{i,0}|^2 \equiv |h_{i,-1}|^2, \\ |j_{p(i),1}|^2 \equiv |j_{p(i),0}|^2 \equiv |j_{p(i),-1}|^2, \end{cases} \quad (10.86)$$

o que não é sempre verdade. Aqui, introduzimos a estrutura genérica das matrizes:

$$\mathbf{V}_i(x) = \phi_i(x) \mathbf{T}_i, \quad (10.87)$$

$$\mathbf{U}_{p(i)}(x) = \phi_i(x) \mathbf{S}_{p(i)}, \quad (10.88)$$

pois a transformação do operador de campo $\hat{\gamma}_i$ é dada por:

$$\hat{\gamma}_i(x) = \phi_i(x) \mathbf{a}_i = \mathbf{V}_i(x) \mathbf{b}_i + \mathbf{U}_{p(i)}(x) \mathbf{b}_{p(i)}^\dagger, \quad (10.89)$$

e a dos operadores aniquilação $\mathbf{a}_i$ por:

$$\mathbf{a}_i = \mathbf{T}_i \mathbf{b}_i + \mathbf{S}_{p(i)} \mathbf{b}_{p(i)}^\dagger. \quad (10.90)$$

Pela forma expandida das matrizes $\mathbf{V}_i(x)$ e $\mathbf{U}_{p(i)}(x)$:

$$\mathbf{V}_i = \begin{pmatrix} \phi_{i,1} T_{1,1}^i & \phi_{i,1} T_{1,0}^i & \phi_{i,1} T_{1,-1}^i \\ \phi_{i,0} T_{0,1}^i & \phi_{i,0} T_{0,0}^i & \phi_{i,0} T_{0,-1}^i \\ \phi_{i,-1} T_{-1,1}^i & \phi_{i,-1} T_{-1,0}^i & \phi_{i,-1} T_{-1,-1}^i \end{pmatrix}, \quad (10.91)$$

$$\mathbf{U}_{p(i)} = \begin{pmatrix} \phi_{i,1} S_{1,1}^{p(i)} & \phi_{i,1} S_{1,0}^{p(i)} & \phi_{i,1} S_{1,-1}^{p(i)} \\ \phi_{i,0} S_{0,1}^{p(i)} & \phi_{i,0} S_{0,0}^{p(i)} & \phi_{i,0} S_{0,-1}^{p(i)} \\ \phi_{i,-1} S_{-1,1}^{p(i)} & \phi_{i,-1} S_{-1,0}^{p(i)} & \phi_{i,-1} S_{-1,-1}^{p(i)} \end{pmatrix}, \quad (10.92)$$

a mesma discussão do caso $\mathbf{H}_1 = 0$ acerca da conciliação entre as estruturas das Eqs. 10.83 e 10.84 e as matrizes acima pode ser feita. Desse modo, cada conjunto de números quânticos i gera três estados quânticos (i, m) , para $m = 1, 0, -1$, representados nas matrizes e no operador de campo:

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{V}_i \rightarrow \mathbf{V}_{i,m}, \\ \mathbf{U}_{p(i)} \rightarrow \mathbf{U}_{p(i,m)}, \\ \hat{\gamma}_i \rightarrow \hat{\gamma}_{i,m}, \end{array} \right. \quad (10.93)$$

Por exemplo, tomando um estado ferromagnético $(i, 1)$, obtemos:

$$\hat{\gamma}_{i,1} = \begin{pmatrix} \phi_{(i,1),1} a_{(i,1),1} \\ \phi_{(i,1),0} a_{(i,1),0} \\ \phi_{(i,1),-1} a_{(i,1),-1} \end{pmatrix} = h_{i,1}(r, z) \mathbf{R} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} b_{i,1} + j_{p(i,1)}(r, z) \mathbf{R} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} b_{p(i,1)}^\dagger. \quad (10.94)$$

Diferentemente do caso $\mathbf{H}_1 = 0$, em que a função $g_{i,m}$ (Eq. 10.73) não precisava satisfazer nenhuma condição extra (além da normalização), no caso $\mathbf{H}_1 \neq 0$ as funções $h_{i,1}(r, z)$ e

$j_{p(i,1)}(r, z)$ devem satisfazer algumas relações particulares. Primeiramente, como a relação entre $\mathbf{a}_i$, $\mathbf{b}_i$ e $\mathbf{b}_{p(i)}^\dagger$ não depende da posição, as funções $h_{i,1}(r, z)$ e $j_{p(i,1)}(r, z)$ devem ser proporcionais entre si. Ou seja:

$$\begin{cases} h_{i,1}(r, z) = c_{i,1} f_{i,1}(r, z), \\ j_{p(i,1)}(r, z) = d_{p(i,1)} f_{i,1}(r, z), \\ \int |f_{i,1}(r, z)|^2 dx = 1. \end{cases} \quad (10.95)$$

Escrevendo a Eq. 10.94 em termos das matrizes $\mathbf{T}_{i,1}$ e $\mathbf{S}_{p(i,1)}$

$$\hat{\gamma}_{i,1} = \begin{pmatrix} \phi_{(i,1),1} T_{1,1}^{(i,1)} \\ \phi_{(i,1),0} T_{0,1}^{(i,1)} \\ \phi_{(i,1),-1} T_{-1,1}^{(i,1)} \end{pmatrix} b_{i,1} + \begin{pmatrix} \phi_{(i,1),1} S_{1,1}^{p(i,1)} \\ \phi_{(i,1),0} S_{0,1}^{p(i,1)} \\ \phi_{(i,1),-1} S_{-1,1}^{p(i,1)} \end{pmatrix} b_{p(i,1)}^\dagger, \quad (10.96)$$

podemos encontrar que

$$(T_{1,1}^{(i,1)}, T_{0,1}^{(i,1)}, T_{-1,1}^{(i,1)})^T \propto (S_{1,1}^{p(i,1)}, S_{0,1}^{p(i,1)}, S_{-1,1}^{p(i,1)})^T, \quad (10.97)$$

assim como

$$a_{(i,1),m} = T_{m,1}^{(i,1)} b_{i,1} + S_{m,1}^{p(i,1)} b_{p(i,m)}^\dagger, \quad (10.98)$$

implicando em $[a_{(i,1),m}, a_{(i,1),m'}^\dagger] \neq \delta_{m,m'}$. Ao escrever as matrizes coluna da Eq. 10.97 em termos do vetor normalizado $\boldsymbol{\zeta}_{i,1} = (\zeta_{1,1}^{(i,1)}, \zeta_{0,1}^{(i,1)}, \zeta_{-1,1}^{(i,1)})^T$, somos capazes de redefinir:

$$\begin{cases} \zeta_{m,1}^{(i,1)} \phi_{(i,1),m} \rightarrow \phi_{(i,1),m} \\ a_{(i,1),m} \rightarrow a_{i,1} = c_{i,1} b_{i,1} + d_{p(i,1)} b_{p(i,1)}^\dagger \end{cases} \quad (10.99)$$

e, finalmente, podemos mostrar que $\hat{\gamma}_{i,m}$ representa uma solução do tipo espinor:

$$\hat{\gamma}_{i,1} = f_{i,1}(r, z) \mathbf{R} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} (c_{i,1} b_{i,1} + d_{p(i,1)} b_{p(i,1)}^\dagger). \quad (10.100)$$

Entretanto, da maneira com que foram definidas até agora, as constantes $c_{i,1}$ e $d_{p(i,1)}$ ainda podem ser números complexos quaisquer — o que é capaz de gerar soluções incoerentes para o operador de campo. Por exemplo, se $[a_{i,1}, a_{i,1}^\dagger] = |c_{i,1}|^2 - |d_{p(i,1)}|^2 < 0$, podemos concluir que o operador destruição $a_{i,1}$ atua, na verdade, como um operador

criação. Portanto, uma situação como essa nunca pode ser considerada uma solução física válida da diagonalização dos estados excitados quânticos.

Apesar desse possível problema, encontramos a propriedade natural da transformação de $a_{i,1}$ ao analisar o caso do *auto-acoplamento*: $p(i, m) = (i, m)$. Nesse caso, em particular, temos $[a_{i,1}, a_{i,1}^\dagger] = 1$ devido à condição de normalização $(\mathbf{p}_a, \mathbf{p}_a) = 1$. Estendendo essa propriedade para os casos $p(i, m) \neq (i, m)$, podemos concluir que o operador $a_{i,1} = c_{i,1}b_{i,1} + d_{p(i,1)}b_{p(i,1)}^\dagger$ deve definir uma *transformação de Bogoliubov*:

$$|c_{i,1}|^2 - |d_{p(i,1)}|^2 = 1. \quad (10.101)$$

É notável que, independente do fato de que consideramos $b_{i,m}$ um operador bosônico desde o início, essa é a primeira vez que precisamos impor que $a_{i,m}$ satisfizesse uma transformação de Bogoliubov. Tal fato é um tanto curioso, haja vista as teorias como as das Refs. (4,5), em que esse tipo de transformação é *imposto a priori*.

A partir das considerações acima e da normalização $(\mathbf{p}_a, \mathbf{p}_a) = 1$, é possível mostrar que as amplitudes $|c_{i,1}|^2$ e $|d_{p(i,1)}|^2$ são invariantes pela ação de p (ou de p^{-1}). Ou seja, elas são invariantes em cada *órbita* p existente:

$$\begin{cases} |c_{i,1}|^2 = |c_{p(i,1)}|^2, \\ |d_{p(i,1)}|^2 = |d_{i,1}|^2. \end{cases} \quad (10.102)$$

10.3.3 Encontrando a Função Acoplamento $p(i)$

Em todo processo de diagonalização de $\Delta\hat{H}_B$ visto neste capítulo, partimos do princípio que *existe* uma função acoplamento $p(i, m)$ apropriada para a transformação do operador de campo $\hat{\gamma}_{i,m}$ (Eq. 10.28) de modo a sermos capazes de determiná-la *a posteriori* (i.e., após a obtenção da solução da Eq. 10.31). Aqui, apresentamos o método de determinar a função acoplamento $p(i, m)$ com base nas propriedades das funções $h_{i,1}(r, z)$ e $j_{p(i,1)}(r, z)$, obtidas ao resolver a Eq. 10.31 e ao compatibilizar fisicamente a estrutura de $\hat{\gamma}_{i,m}$ em termos de $a_{i,m}$ e $b_{i,m}$.

Para um estado genérico $a = (i, m)$, a solução $\mathbf{p}_a$ é dada por:

$$\mathbf{p}_a = \begin{pmatrix} h_{i,m}(r, z)\mathbf{R}\zeta_m^0 \\ j_{i,m}^*(r, z)\mathbf{R}^*\zeta_m^{0*} \end{pmatrix} \quad (10.103)$$

em que ζ_m^0 é um dos auto-estados de $\mathbf{f}_z$. Para determinar o estado $p(i, m)$, devemos buscar

outros estados $a' = (i', m)^\dagger$ que satisfaçam:

$$\begin{cases} j_{i',m} \propto h_{i,m}, \\ \int |j_{i',m}|^2 dx = \int |j_{i,m}|^2 dx, \\ \int |h_{i',m}|^2 dx = \int |h_{i,m}|^2 dx. \end{cases} \quad (10.104)$$

Essas propriedades referem-se à proporcionalidade entre as funções $h_{i,1}(r, z)$ e $j_{p(i,1)}(r, z)$, assim como a invariância das amplitudes $|c_{i,1}|^2$ e $|d_{i,1}|^2$ perante a ação da função acoplamento p . Portanto, se ao menos um estado a' existir, podemos definir:

$$p(a) = a', \quad (10.105)$$

com m invariante pela ação de p . Com essa definição, há *três* situações que devemos discutir.

A **primeira** é o caso em que cada estado a se acopla com apenas um a' (bijeção) e, portanto, p e p^{-1} são funções bem definidas.

A **segunda** situação acontece quando a pode se acoplar com mais de um estado a' . Nesse caso, a função p pode admitir vários ramos bijetivos L , denotados por p_L (e p_L^{-1}), tal que cada ramo define uma *representação física* das excitações topológicas quânticas.

A **terceira** situação, que representa a *falha* do processo de compatibilização, acontece quando p não é capaz de definir nenhum ramo bijetivo ou uma função *sobrejetora* e, portanto, é incapaz de descrever completamente o operador de campo $\hat{\psi}$.

Assim, de acordo com essas observações, o método de *compatibilização* não é universal, como poderíamos ter imaginado durante o estudo do sistema no caso $\mathbf{H}_1 = 0$. Contudo, mesmo que a compatibilização falhe, esse não é o fim do processo de diagonalização de $\Delta\hat{H}_B$ — dado o tratamento aproximativo discutido a seguir.

10.4 Procedimento Quando a Compatibilização Falha

Suponha que o método de compatibilização do caso $\mathbf{H}_1 \neq 0$ falhe (i.e., a Eq. 10.31 não tem solução ou não existe função p apropriada para descrever $\hat{\psi}$) ou seja muito difícil de se tratar (i.e., a solução da Eq. 10.31 é difícil de se encontrar, assim como a função p). Dessa forma, os procedimentos discutidos anteriormente não são úteis para descrever tal sistema físico. Contudo, felizmente, existe um outro método aproximativo para a compatibilização do caso $\mathbf{H}_1 \neq 0$.

Esse método parte do fato de que a compatibilização para o caso $\mathbf{H}_1 = 0$ é *muito mais simples*: não é necessário impor uma *transformação de Bogoliubov*, nem a

[†] O valor de m é fixo porque é necessário que o vetor $\mathbf{R}\zeta_m^0$ apareça nos dois estados.

proporcionalidade das funções $h_{i,1}(r, z)$ e $j_{p(i,1)}(r, z)$ ou até mesmo sermos capazes de encontrar o acoplamento $p(i, m)$. Além disso, como as soluções encontradas para $\hat{\gamma}_i$ no caso $\mathbf{H}_1 = 0$ formam um conjunto completo e ortonormal que descreve o *espaço de Hilbert* do sistema físico, sempre é possível expandir $\hat{\gamma}$ para $\mathbf{H}_1 \neq 0$ em termos desses estados — mesmo que eles não diagonalizem $\Delta\hat{H}_B$.

Tomando explicitamente a expansão de $\hat{\gamma} = \sum_{i \neq 0} \hat{\gamma}_i$:

$$\begin{cases} \hat{\gamma}_i = \gamma_i a_i, \\ \mathbf{H}_0 \gamma_i = E_i \gamma_i, \\ \int \gamma_i^\dagger \gamma_{i'} dx = \delta_{i,i'}, \end{cases} \quad (10.106)$$

no caso especialmente não degenerado, encontramos a expansão do operador $\hat{M}$:

$$\begin{aligned} \hat{M} = & \frac{1}{2} \sum_i \begin{pmatrix} a_i^\dagger & a_i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_i & \Delta_{i,i} \\ \Delta_{i,i}^* & E_i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_i \\ a_i^\dagger \end{pmatrix} + \\ & + \frac{1}{2} \sum_{i \neq i'} \begin{pmatrix} a_i^\dagger & a_i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \Delta_{i,i'} \\ \Delta_{i,i'}^* & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{i'} \\ a_{i'}^\dagger \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (10.107)$$

formada basicamente por um hamiltoniano de uma teoria de Bogoliubov tradicional (similar à abordada no Cap. 6 e que pode ser resolvido facilmente) com a adição de uma interação de bombeamento extra entre estados distintos. As constantes de bombeamento $\Delta_{i,i'}$ são definidas a partir de $\mathbf{H}_1$:

$$\Delta_{i,i'} = \int \gamma_i^\dagger \mathbf{H}_1 \gamma_{i'}^* dx. \quad (10.108)$$

Assim, ao diagonalizar a parte de $\hat{M}$ relativa à teoria de Bogoliubov, a parte relativa ao bombeamento extra pode ser tratada por algum método aproximativo. Aqui, consideramos a aproximação por *onda girante* (do inglês, *rotating wave approximation* ou, simplesmente, RWA).

A diagonalização do hamiltoniano de Bogoliubov em $\hat{M}$ é dada pela transformação de Bogoliubov:

$$a_i = v_i b_i + u_i b_i^\dagger \quad (10.109)$$

que satisfaz:

$$\begin{pmatrix} E_i & \Delta_{i,i} \\ \Delta_{i,i}^* & E_i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_i \\ u_i^* \end{pmatrix} = A_i \begin{pmatrix} v_i \\ -u_i^* \end{pmatrix}. \quad (10.110)$$

Acima, $A_i = \pm\sqrt{E_i^2 - |\Delta_{i,i}|^2} \in \mathbb{R}$ é a energia dos estados que contribuem para o hamiltoniano de Bogoliubov em $\hat{M}$. Em particular, o sinal de A_i é escolhido de modo que $|v_i|^2 - |u_i|^2 > 0$. Caso contrário, não haveria como a Eq. 10.109 ser uma transformação de Bogoliubov. Ao escrever $\hat{M}$ em termos dos operadores b_i , encontramos:

$$\begin{aligned}\hat{M} &= \sum_i A_i \left(b_i^\dagger b_i + \frac{1}{2} \right) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq i'} g_{i,i'} b_i^\dagger b_{i'} + g_{i,i'}^* b_i b_{i'}^\dagger \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{i \neq i'} w_{i,i'} b_i^\dagger b_{i'}^\dagger + w_{i,i'}^* b_i b_{i'},\end{aligned}\quad (10.111)$$

para $g_{i,i'}$ e $h_{i,i'}$ expressos da seguinte forma:

$$\begin{cases} g_{i,i'} = v_i^* \Delta_{i,i'} u_{i'}^* + v_i \Delta_{i,i'}^* u_{i'} \\ w_{i,i'} = v_i^* \Delta_{i,i'} v_{i'}^* + u_i \Delta_{i,i'}^* u_{i'} \end{cases} \quad (10.112)$$

Se as constantes de interação entre os diferentes estados $|\Delta_{i,i'}|$ é bem menor do que $|\Delta_{i,i}|$ e $|A_i|$, podemos supor que as contribuições de $|g_{i,i'}|$ e $|w_{i,i'}|$ em $\hat{M}$ são bem menores que as de $|A_i|$. Essa é a chave para a utilização da aproximação de onde girante (RWA). Ao escrever $\hat{M}$ na *representação de interação*:

$$\hat{M}_I = \exp \left[i \frac{t}{\hbar} \sum_i A_i \left(b_i^\dagger b_i + \frac{1}{2} \right) \right] \hat{M} \exp \left[-i \frac{t}{\hbar} \sum_i A_i \left(b_i^\dagger b_i + \frac{1}{2} \right) \right], \quad (10.113)$$

os operadores b_i são expressos por b_i^I :

$$\begin{cases} b_i^I = e^{-i \frac{A_i}{\hbar} t} b_i, \\ b_i^{I\dagger} = e^{i \frac{A_i}{\hbar} t} b_i^\dagger. \end{cases} \quad (10.114)$$

Aplicando essas *fases temporais* no operador $\hat{M}$, a *aproximação de onda girante* diz que os termos que mais contribuem n o hamiltoniano são aqueles cuja *frequência* resultante é próxima de zero. Ou seja, tomando $A_i > 0$ por simplicidade (o que também garante a estabilidade do parâmetro de ordem ψ , dada a ausência de instabilidades de Landau), os termos que mais contribuem com o operador $\hat{M}$ são:

$$\hat{M}_{\text{RWA}} = \sum_i A_i \left(b_i^\dagger b_i + \frac{1}{2} \right) + \frac{1}{2} \sum_{\substack{A_i \simeq A_{i'} \\ i \neq i'}} g_{i,i'} b_i^\dagger b_{i'} + g_{i,i'}^* b_i b_{i'}^\dagger. \quad (10.115)$$

Portanto, podemos concluir que o operador $\hat{M}$ é, segundo a aproximação de onda girante,

essencialmente o hamiltoniano de *Jaynes-Cummings* para um campo clássico (nesse caso, o parâmetro de ordem) e é capaz de gerar *oscilações de Rabi*. Além disso, se o espectro $\{A_i\}$ for não degenerado, os termos $g_{i,i'}$ estarão sempre *fora de ressonância* e, por isso, eles não são considerados pela RWA. Isso implica que, nessa situação, $\Delta\hat{H}_B$ pode ser diagonalizado (aproximadamente) pela transformação de Bogoliubov dada pela Eq. 10.109.

Em suma, apesar da teoria das ETQs não ser infalível em um caso genérico, ela representa um avanço para tratar as excitações quânticas de condensados com propriedades topológicas não triviais — tanto que a usamos para mostrar, de maneira robusta e indo além da teoria de campo médio (representada pela EGP), que a estrutura *natural* das ETQs é a de espinor (o que não pode ser obtido pela teoria de Bogoliubov no Cap. 6). Contudo (e felizmente), muito trabalho ainda deve ser feito e podemos explorar inúmeras aplicações das ETQs. No próximo capítulo, concluímos esta dissertação citando alguns desses tópicos que estão em aberto e que surgem como perguntas naturais ao fim das nossas discussões.

11 CONCLUSÃO E ESTUDOS FUTUROS

Após uma *longa* dissertação como essa, é importante *destacar* as principais contribuições e como elas encaminham novas perguntas e novos trabalhos. Nesta dissertação, descrevemos diversos conceitos relacionados aos condensados de Bose-Einstein espinoriais e mostramos, revisitando trabalhos da literatura e desenvolvendo nossos próprios estudos, que eles vão muito além da *equação de Gross-Pitaevskii*. Na realidade, os CBEs espinoriais formam uma classe de sistemas peculiar e muito interessante, na qual é possível explorar propriedades provenientes de várias áreas da física. Uma das mais notáveis, sem dúvida, é a capacidade de comportar estados com propriedades simétricas e topológicas não triviais, tanto no parâmetro de ordem quanto nos estados excitados quânticos.

Para ilustrar isso, podemos partir do fato de que o sistema quântico bosônico completo (“condensado” + “estados excitados”) tratado nesta dissertação é bem descrito pelo formalismo de *campos quânticos* (Cap. 3). Desse modo, devemos enfatizar que a equação de Gross-Pitaevskii (e toda teoria de campo médio relacionada) é uma *aproximação* (muito boa em grande parte dos casos) para descrever a fase condensada do sistema. Em particular, é importante destacar que aqui introduzimos a teoria de Gross-Pitaevskii para os espinores $f = 1$ de maneira *não convencional*.

Tradicionalmente, a EGP pode ser derivada a partir da equação de Heisenberg para os *operadores de campo* ou o *operador densidade*. Alternativamente, é comum derivar a EGP a partir de argumentos variacionais. Aqui, como foi discutido no Cap. 4 e nos posteriores, escolhemos estabelecer uma analogia clara entre a *aproximação de campo médio* e o formalismo da *teoria clássica de campos* (i.e., determinando a dinâmica do parâmetro de ordem a partir do princípio de Hamilton). Apesar de provavelmente não ser a escolha mais óbvia, ela gera um “atalho” para a introdução do estudo da simetria dos espinores, a partir da análise da simetria da *ação S* do parâmetro de ordem (Cap. 7). Também é importante destacar que a maneira que descrevemos a *simetria* de um espinor é um pouco distinta do que é tratado na Ref. (4). Enquanto descrevemos todas as propriedades simétricas dos espinores em termos da ação S , a Ref. (4) descreve isso em termos da energia da fase condensada. Apesar da distinção, ambos tratamentos são equivalentes (ao menos nos casos tratados nesta dissertação).

Além do estudo da fase condensada do sistema, tanto do ponto de vista simétrico ou topológico, discutimos também a importância da análise dos estados excitados quânticos dos espinores. Esses estados, juntamente com as propriedades topológicas do parâmetro de ordem, são a chave para entender a estabilidade da fase condensada (i.e., análise das instabilidades de Landau). Em especial, introduzimos um *método original* para a diagonalização dos estados excitados quânticos provenientes de excitações topológicas

do parâmetro de ordem (as *excitações topológicas quânticas*), generalizando a teoria de Bogoliubov para um condensado não uniforme (Cap. 10, que sintetiza dois trabalhos em vias de serem submetidos para publicação). Com essa teoria, conseguimos mostrar de maneira robusta que as propriedades simétricas da fase condensada (especificamente, a rotação $\mathbf{R}$) são efetivamente replicadas nos estados excitados quânticos (condição $\beta \ll 1$) e que a estrutura do *operador de campo* desses estados se torna *espinorial*.

Para os leitores mais experientes, a segunda propriedade pode parecer *trivial*, dado que existem maneiras de encontrar flutuações do *parâmetro de ordem*, do tipo:

$$\psi = \psi_0 + \delta\psi, \quad (11.1)$$

que geram equações para $\delta\psi$ similares à Eq. 10.31 e que explicitam de maneira simples o caráter espinorial dessas flutuações (i.e., $\delta\psi$ é uma matriz como o parâmetro de ordem). Contudo, apesar da simplicidade do argumento, esse tipo de tratamento é restrito à aproximação de campo médio (clássico) para as flutuações. Na nossa teoria, apesar de tomarmos a aproximação de campo médio para a fase condensada, tratamos os estados excitados quânticos como campos quânticos (à maneira da teoria de Bogoliubov) e as propriedades de espinor dos estados excitados quânticos são encontradas a partir dos operadores criação e destruição.

Ainda relacionado ao nosso estudo original, acerca das *excitações topológicas quânticas*, podemos ser críticos em alguns de seus pontos, de modo a sermos capazes de desenvolvê-la ainda mais e expandir a contribuição que ela gera. Por exemplo, no estudo das ETQs, consideramos por simplicidade que o parâmetro $\beta(r)$ (da matriz $\mathbf{R}$) fosse muito pequeno. Ou seja, tratamos de excitações quânticas “próximas” do caso “diagonal”, em que a aplicação da teoria de Bogoliubov tradicional seria suficiente. Dessa maneira, apesar de mostrarmos *robustamente* que a estrutura das ETQs é espinorial, ainda não somos capazes de prever o seu comportamento para $\beta(r)$ qualquer.

Outro ponto de discussão acerca das ETQs está relacionado a *estabilidade* do parâmetro de ordem. Nesse sentido, uma pergunta interessante é: “*Podemos, de alguma maneira, identificar no espectro dessas excitações quânticas instabilidades de Landau que expressem as propriedades da estabilidade (ou instabilidade) topológica do parâmetro de ordem?*”. Ainda não temos resposta para essa pergunta e, para isso, estudos futuros acerca do espectro das ETQs são necessários.

Além dessas duas facetas acerca das ETQs, podemos ir além e expandir a teoria por completo. Como foi discutido, as ETQs representam as *flutuações* de um condensado. Logo, é natural perguntar também quais os efeitos do acoplamento desses estados com um *reservatório térmico quântico*. Desse modo, é possível tratar os condensados sob a visão

da emergente área da *termodinâmica quântica* (26–28), que busca descrever os sistemas quânticos *reais*, fora da situação ideal $T = 0$ K. Esse é um tema que temos bastante interesse e que pretendemos explorar no futuro.

Finalmente, é importante destacar que a área de estudo dos CBEs espinoriais ainda é jovem e em evolução, com uma comunidade relativamente pequena de pesquisadores, mesmo ao redor do mundo. Porém, a cada dia mais pesquisadores se interessam e se juntam a essa comunidade. Muito já se avançou no âmbito da descrição física desse tipo de sistema (o que é evidente na Ref. (4)), contudo, ainda existem muitas perguntas em aberto (como a nossa teoria, discutida no Cap. 10). Assim, além de contribuir com a descrição das ETQs, o trabalho de mestrado apresentado nesta dissertação é relevante por ser um dos primeiros no Brasil a explorar mais a fundo as propriedades simétricas e topológicas dos CBEs espinoriais, e por compilar (numa tentativa didática) os conceitos-chave dessa área de estudo ainda pouco explorada em nosso país.

REFERÊNCIAS

- 1 EINSTEIN, A. Quantentheorie des einatomigen idealen gases. **Sitzungsberichte der Preussischen Akademie der Wissenschaften**, 1924.
- 2 BOSE, S. N. Planck's law and the light quantum hypothesis. **Journal of Astrophysics and Astronomy**, v. 15, p. 3–7, 1994. Disponível em: <http://articles.adsabs.harvard.edu/pdf/1994JApA...15....3B>. Acesso em: 25 mar. 2021.
- 3 EINSTEIN, A. Quantentheorie des einatomigen idealen gases. zweite abhandlung. **Sitzungsberichte der Preussischen Akademie der Wissenschaften**, 1925.
- 4 KAWAGUCHI, Y.; UEDA, M. Spinor Bose–Einstein condensates. **Physics Reports**, v. 520, n. 5, p. 253–381, 2012.
- 5 BOGOLIUBOV, N. On the theory of superfluidity. **Journal of Physics**, v. 11, n. 1, 1947. DOI:10.1142/9789814612524_0001.
- 6 KAWAGUCHI, Y.; NITTA, M.; UEDA, M. Knots in a spinor Bose-Einstein condensate. **Physical Review Letters**, American Physical Society, v. 100, n. 18, p. 180403, 2008.
- 7 ANDERSON, M. H. *et al.* Observation of Bose-Einstein condensation in a dilute atomic vapor. **Science**, American Association for the Advancement of Science, v. 269, n. 5221, p. 198–201, 1995.
- 8 DAVIS, K. B. *et al.* Bose-Einstein condensation in a gas of sodium atoms. **Physical Review Letters**, American Physical Society, v. 75, n. 22, p. 3969–3973, Nov 1995.
- 9 DALFOVO, F. *et al.* Theory of Bose-Einstein condensation in trapped gases. **Reviews of Modern Physics**, American Physical Society, v. 71, n. 3, p. 463–512, Abr 1999.
- 10 GAUNT, A. L.; HADZIBABIC, Z. Robust digital holography for ultracold atom trapping. **Science Reports**, v. 2, p. 721, Out 2012. DOI: 10.1038/srep00721.
- 11 MANDL, F.; SHAW, G. **Quantum field theory**. Hoboken: Wiley, 2010. ISBN 9780471496830.
- 12 FETTER, A. L.; WALECKA, J. D. **Quantum theory of many-particle systems**. Boston: McGraw-Hill, 1971.
- 13 SALINAS, S. **Introdução a física estatística**. São Paulo: EDUSP, 1997. (Acadêmica, v.9).
- 14 FERREIRA, L. A. **Lecture notes on Lie algebras and Lie groups**. 2018. Disponível em: http://www.ifsc.usp.br/~laf/algebra_2018/notes.pdf. Acesso em: 24 mar. 2021.
- 15 PETHICK, C.; SMITH, H. **Bose–Einstein condensation in dilute gases**. Cambridge: Cambridge University Press, 2008. ISBN 9781139811088.
- 16 GOLDSTEIN, H. **Classical mechanics**. New York: Addison-Wesley, 1980.

- 17 MURATA, K.; SAITO, H.; UEDA, M. Broken-axisymmetry phase of a spin-1 ferromagnetic Bose-Einstein condensate. **Physical Review A**, American Physical Society, v. 75, n. 1, p. 013607, Jan 2007.
- 18 ZHANG, W.; YI, S.; YOU, L. Mean field ground state of a spin-1 condensate in a magnetic field. **New Journal of Physics**, IOP Publishing, v. 5, p. 77–77, jun 2003.
- 19 LIU, Y. *et al.* Quantum phase transitions and continuous observation of spinor dynamics in an antiferromagnetic condensate. **Physical Review Letters**, American Physical Society, v. 102, n. 12, p. 125301, Mar 2009.
- 20 BARDEEN, J.; COOPER, L. N.; SCHRIEFFER, J. R. Theory of superconductivity. **Physical Review**, American Physical Society, v. 108, p. 1175–1204, Dec 1957.
- 21 TINKHAM, M. **Introduction to superconductivity**. Mineola: Dover Publications, 2004. (Dover books on physics series). ISBN 9780486134727.
- 22 MICHEL, L. Points critiques des fonctions invariantes sur une g-variété. **Comptes Rendus de l'Académie des Sciences Paris**, v. 272, p. 433–436, Fev 1971.
- 23 NAKAHARA, M. **Geometry, topology and physics**. 2nd ed. Routledge: Taylor & Francis, 2003. (Graduate student series in physics). ISBN 9780750306065.
- 24 SADLER, L. E. *et al.* Spontaneous symmetry breaking in a quenched ferromagnetic spinor Bose–Einstein condensate. **Nature**, Springer Science and Business Media LLC, v. 443, n. 7109, p. 312–315, Sept 2006.
- 25 FADDEEV, L.; NIEMI, A. J. Stable knot-like structures in classical field theory. **Nature**, Springer Science and Business Media LLC, v. 387, n. 6628, p. 58–61, May 1997.
- 26 DEFFNER, S.; CAMPBELL, S. **Quantum thermodynamics: an introduction to the thermodynamics of quantum information**. San Rafael: Morgan & Claypool Publishers, 2019.
- 27 VINJANAMPATHY, S.; ANDERS, J. Quantum thermodynamics. **Contemporary Physics**, Taylor & Francis, v. 57, n. 4, p. 545–579, 2016.
- 28 KOSLOFF, R. Quantum thermodynamics: a dynamical viewpoint. **Entropy**, Multidisciplinary Digital Publishing Institute, v. 15, n. 6, p. 2100–2128, 2013.
- 29 PENROSE, O.; ONSAGER, L. Bose-Einstein condensation and liquid helium. **Physical Review**, American Physical Society, v. 104, n. 3, p. 576–584, Nov 1956.
- 30 AHARONOV, Y.; BOHM, D. Significance of electromagnetic potentials in the quantum theory. **Physical Review**, American Physical Society, v. 115, n. 3, p. 485–491, Aug 1959.
- 31 ANANDAN, J.; CHRISTIAN, J.; WANELIK, K. Resource letter gpp-1: geometric phases in physics. **American Journal of Physics**, American Association of Physics Teachers (AAPT), v. 65, n. 3, p. 180–185, Mar 1997.

Apêndices

APÊNDICE A – CRITÉRIO DE PENROSE-ONSAGER PARA A CONDENSAÇÃO DE BOSE-EINSTEIN

A condensação de Bose-Einstein do ponto de vista de um gás ideal (proveniente do modelo de Einstein (1,3)) tem uma interpretação simples. Como visto no Cap. 3, abaixo de uma temperatura crítica T_0 (tipicamente próxima do zero absoluto), a fração média de partículas no estado fundamental N_0/N deixa de ser infinitesimal. Em outras palavras, N_0 deve ser comparável a N no limite termodinâmico (regime assintótico $N \rightarrow \infty$). Esse fato define um **critério** para dizer se nesse sistema ocorre ou não a condensação de Bose-Einstein. Contudo, esse critério é válido apenas no caso de um gás ideal (i.e., partículas não interagentes), pois ele parte do princípio de que cada uma das partículas do sistema tem um **único espectro de energia** e que ele não é alterado pela distribuição das partículas nos diferentes estados. (29) Essas propriedades, em geral, podem ser obtidas a partir de um hamiltoniano de um sistema de partículas idênticas não interagentes:

$$\mathcal{H}(x_1, \dots, x_N) = \sum_{i=1}^N H(x_i), \text{ tal que } [H(x_i), H(x_j)] = 0, \forall i, j. \quad (\text{A.1})$$

Nesse sentido, o **espectro** para cada partícula é definido pelo conjunto dos autovalores de $H(x)$ e o *estado fundamental*, que define N_0 , é aquele associado ao menor autovalor do conjunto, denotado por ϵ_0 :

$$H(x) \phi_0(x) = \epsilon_0 \phi_0(x). \quad (\text{A.2})$$

Dessa forma, a introdução de termos de interação entre partículas em $\mathcal{H}$:

$$\mathcal{H}(x_1, \dots, x_N) = \sum_i H(x_i) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V(x_i, x_j), \quad (\text{A.3})$$

faz com que o “espectro de energia” para cada partícula dependa das configurações do restante do sistema, o que, de fato, inviabiliza o critério para a condensação de Bose-Einstein em termos de N_0 no caso interagente.

Tendo em vista aplicações em sistemas mais gerais (como o estudo do hélio superfluido), em 1956, os físicos Oliver Penrose e Lars Onsager elaboraram um critério para determinar se um sistema quântico de muitas partículas arbitrário admite ou não a condensação de Bose-Einstein. (29) Esse critério (que aqui denominaremos por *critério de Penrose-Onsager* ou CPO) é escrito em termos do formalismo quântico de John von Neumann (*matriz densidade*), que é importante ao ser capaz de descrever sistemas

quânticos abertos (como qualquer CBE é na prática). A seguir, introduzimos brevemente esse formalismo e, em seguida, discutiremos o CPO e o uso do parâmetro de ordem para descrever um condensado.

A.1 Construção do operador de Densidade

Como bem sabemos, a função de onda é o objeto matemático que descreve um sistema quântico. Em um sistema genérico (e possivelmente complicado), a função de onda deve levar em conta os estados quânticos possíveis de todos os seus contribuintes. Por exemplo, imaginemos o caso de um experimento envolvendo o estudo das propriedades da interação entre a radiação e a matéria. Evidentemente, a função de onda deve levar em conta os estados quânticos da radiação e da matéria, mas isso não é tudo. Podemos, por exemplo, supor que diversos lasers sejam utilizados na montagem experimental e, por consequência, estejam ligados à rede elétrica e/ou um computador. Dessa forma, por mais que o sistema experimental seja “isolado”, ele sempre estará sujeito a flutuações externas que não podemos controlar/medir (como flutuações da rede elétrica, do sinal que o computador envia para o laser, temperatura do laser/sistema, etc.). Sistemas desse tipo são chamados de **sistemas quânticos abertos**.

Assim, podemos considerar que a função de onda de um sistema aberto terá contribuição de termos que conhecemos (que podemos controlar/medir) e de outros que não são acessíveis (por limitações do aparato experimental, por exemplo). Sem perda de generalidade, podemos supor que existem duas bases de estados ortonormais no sistema: $\{|m\rangle\}$, a base dos estados quânticos que temos acesso; e $\{|r\rangle\}$, a base dos estados quânticos da parte do sistema que não temos controle. Ao supor a independência entre essas duas bases (i.e., $\langle m|r\rangle = 0$ para $\forall m, r$), a função de onda do sistema pode ser escrita como:

$$|\Psi\rangle = \sum_{m,r} C_{m,r} |m\rangle \otimes |r\rangle, \quad (\text{A.4})$$

em que $\sum_{m,r} |C_{m,r}|^2 = 1$. Para uma grandeza $\hat{A}$, relacionada aos estados que temos controle $\{|m\rangle\}$ (i.e., $\hat{A} \equiv \hat{A} \otimes 1$), encontramos que:

$$\langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle = \sum_{m,m',r,r'} C_{m,r}^* C_{m',r'} \langle m | \hat{A} | m' \rangle \langle r | r' \rangle. \quad (\text{A.5})$$

Como $\langle r | r' \rangle = \delta_{r,r'}$, temos:

$$\langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle = \sum_r \left(\sum_{m,m'} C_{m,r}^* C_{m',r} \langle m | \hat{A} | m' \rangle \right). \quad (\text{A.6})$$

Definindo:

$$|\psi_r\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{p_r}} \sum_m C_{m,r} |m\rangle, \quad (\text{A.7})$$

com $p_r \equiv \sum_m |C_{m,r}|^2$, encontramos finalmente:

$$\langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle = \sum_r p_r \langle \psi_r | \hat{A} | \psi_r \rangle. \quad (\text{A.8})$$

Como p_r pode ter interpretação de probabilidade (i.e., $\sum_r p_r = 1$), podemos interpretar $|\psi_r\rangle$ como um dos diferentes estados quânticos em que a parte acessível do sistema pode estar (com probabilidade p_r). Nesse sentido, os estados quânticos de um sistema aberto, em termos dos estados que temos controle/são acessíveis, nunca são completamente determinados, pois eles são sempre dados em termos de uma **mistura estatística** (*ensemble* definido por $\{(|\psi_r\rangle, p_r)\}$).

Em particular, para a base $\{|a\rangle\}$, que diagonaliza o operador $\hat{A} = \sum_a \lambda_a |a\rangle\langle a|$, é simples mostrar que a Eq. A.8 pode ser reescrita como:

$$\langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle = \sum_a \langle a | \left(\sum_r p_r |\psi_r\rangle \langle \psi_r | \hat{A} \right) | a \rangle = \text{Tr} \left(\sum_r p_r |\psi_r\rangle \langle \psi_r | \hat{A} \right). \quad (\text{A.9})$$

A partir do *traço* na última equação, o operador densidade $\hat{\rho}$ é definido:

$$\hat{\rho} \equiv \sum_r p_r |\psi_r\rangle \langle \psi_r| \quad (\text{A.10})$$

e é o objeto matemático mais importante ao descrever um sistema quântico aberto pois, como a estrutura da função de onda do sistema completo $|\Psi\rangle$ não é totalmente acessível, todos os valores esperados dos observáveis quânticos do sistema, para serem determinados, devem escritos em termos de $\hat{\rho}$, como em:

$$\langle \hat{A} \rangle = \text{Tr}(\hat{\rho} \hat{A}). \quad (\text{A.11})$$

Nessa situação, devemos destacar que, apesar de $\hat{\rho}$ ser gerada por $|\Psi\rangle$, a matriz densidade é uma grandeza acessível no sistema, dado que o *ensemble* $\{(|\psi_r\rangle, p_r)\}$ é o que determina o valor esperado dos seus diversos observáveis.

Como exemplo, podemos citar um resultado importante da mecânica estatística, em que um sistema quântico (aberto) em equilíbrio com um reservatório térmico (clássico) tem

a matriz de densidade $\hat{\rho}(\beta, \hat{H})$ escrita em termos da função de partição $\mathcal{Z} = \sum_{\sigma} e^{-\beta E_{\sigma}} = \text{Tr}(e^{-\beta \hat{H}})$ (13):

$$\hat{\rho}(\beta, \hat{H}) = \frac{e^{-\beta \hat{H}}}{\mathcal{Z}}. \quad (\text{A.12})$$

Com esse resultado, toda a mecânica estatística pode ser derivada.

A.2 CPO e a Expansão Assintótica da Matriz Densidade

Do ponto de vista da condensação de Bose-Einstein em sistemas interagentes e não uniformes, o critério de Penrose-Onsager aparece como um substituto do critério discutido para o caso de um gás ideal. De maneira esquemática, podemos resumir o último em termos de N_0 (no limite termodinâmico) como (29):

$$\begin{cases} N_0/N \text{ não é infinitesimal} \Leftrightarrow \text{formação de CBE,} \\ N_0/N \text{ é infinitesimal} \Leftrightarrow \text{sem formação de CBE.} \end{cases} \quad (\text{A.13})$$

Para estender esse critério, Penrose e Onsager partiram da definição da *operador densidade reduzida* $\hat{\rho}_1$ como:

$$\hat{\rho}_1 \equiv \text{Tr}_{2,3,\dots,N}(\hat{\rho}), \quad (\text{A.14})$$

em que $\text{Tr}_{2,3,\dots,N}$ significa traço em relação aos estados de $N - 1$ partículas do sistema, exceto da partícula 1 (supondo que $|m\rangle = \bigotimes_{i=1}^N |m_i\rangle$, para N partículas). A partir dessa definição, os pesquisadores observaram que, para o caso de um **gás ideal** em equilíbrio (situação análoga à Eq. A.12 com $\hat{H}$ referente ao hamiltoniano da Eq. A.1), os *autoestados* de $N\hat{\rho}_1$ são os **estados estacionários de uma partícula** (análogo às autofunções do operador $H(x)$ da Eq. A.1), e os *autovalores* correspondentes são os **números médios de partículas** nesses estados. (29)

Desse paralelo, o critério para a condensação de Bose-Einstein em um gás ideal pode ser reescrito em termos dos autovalores de $N\hat{\rho}_1$ no limite termodinâmico (29):

$$\begin{cases} \eta_M/N \text{ não é infinitesimal} \Leftrightarrow \text{formação de CBE,} \\ \eta_M/N \text{ é infinitesimal} \Leftrightarrow \text{sem formação de CBE,} \end{cases} \quad (\text{A.15})$$

em que η_M é o **maior autovalor** de $N\hat{\rho}_1$. É importante salientar que, diferentemente do critério escrito em termos de N_0 , a formulação acima tem sentido também para sistemas de partículas interagentes e não uniformes, uma vez que $\hat{\rho}_1$ é definido independentemente

de tais características. Dessa forma, a Eq. A.15 pode ser entendida como uma extensão do critério para a condensação de Bose-Einstein em sistemas mais gerais, robusta quanto a mudanças da modelagem da interação das partículas. (29) Na literatura, a Eq. A.15 é comumente chamada de **critério de Penrose-Onsager** (CPO) para a condensação de Bose-Einstein.

Uma vez introduzido o CPO, com base no que foi abordado ao decorrer da dissertação, é muito natural buscar compreender como o **parâmetro de ordem** de um condensado se relaciona com esse critério. Para isso, podemos escrever o operador densidade reduzido $\hat{\rho}_1$ em termos de seus autoestados $\{|\phi_i\rangle\}$ e autovalores $\{\eta_i/N\}$:

$$\hat{\rho}_1 = \frac{\eta_M}{N} |\phi_M\rangle\langle\phi_M| + \sum_{i \neq M} \frac{\eta_i}{N} |\phi_i\rangle\langle\phi_i|, \quad (\text{A.16})$$

e observamos que, quando a condensação de Bose-Einstein ocorre, o termo de $|\phi_M\rangle$ tende a ser o dominante. Contudo, é necessário analisar também se, combinados, os termos restantes,

$$\hat{\rho}_R \equiv \sum_{i \neq M} \frac{\eta_i}{N} |\phi_i\rangle\langle\phi_i|, \quad (\text{A.17})$$

podem ser relevantes na descrição dos observáveis do sistema. Em particular, o operador $N\hat{\rho}_1$ na representação da posição (levando em conta partículas com spin $f \neq 0$) pode ser escrito como:

$$\langle \vec{r} | \hat{\rho}_1 | \vec{q} \rangle = \eta_M \phi_M(\vec{r}) \phi_M^\dagger(\vec{q}) + N \langle \vec{r} | \hat{\rho}_R | \vec{q} \rangle. \quad (\text{A.18})$$

Supondo (sem perda de generalidade) que

$$\phi_i(\vec{r}) = (|\phi_{i,f}(\vec{r})|e^{ig_{i,f}(\vec{r})}, \dots, |\phi_{i,-f}(\vec{r})|e^{ig_{i,-f}(\vec{r})})^T, \quad (\text{A.19})$$

podemos observar que, na representação da posição, a contribuição de $\hat{\rho}_R$ pode ser decomposta nas entradas de uma matriz (no espaço dos estados de spin):

$$[\langle \vec{r} | \hat{\rho}_R | \vec{q} \rangle]_{m,m'} = \sum_{i \neq M} \frac{\eta_i}{N} |\phi_{i,m}(\vec{r}) \phi_{i,m'}(\vec{q})| e^{i(g_{i,m}(\vec{r}) - g_{i,m'}(\vec{q}))}, \quad (\text{A.20})$$

em que está explicitada a dependência da diferença de fase $g_{i,m}(\vec{r}) - g_{i,m'}(\vec{q})$. Como a contribuição dos diferentes $\eta_i |\phi_{i,m}(\vec{r}) \phi_{i,m'}(\vec{q})|/N$ é tipicamente a mesma (em ordem de grandeza), é esperado que $\langle \vec{r} | \hat{\rho}_R | \vec{q} \rangle$ vá a zero a medida $|\vec{r} - \vec{q}| \rightarrow \infty$ pois, nessa situação,

é razoável afirmar que $g_{i,m}(\vec{r}) - g_{i,m'}(\vec{q}) \neq g_{i',m}(\vec{r}) - g_{i',m'}(\vec{q})$ para $\forall i, i'$ (i.e., imposição da **decoerência** entre os estados que não formam a fase condensada), de modo que o somatório da Eq. A.20 seja efetivamente nulo*.

Da discussão acima, portanto, é possível afirmar que a formação de um CBE em um sistema está intimamente relacionada à emergência de **coerência** espontânea entre partículas na fase condensada, uma vez que, de maneira assintótica, podemos aproximar:

$$\begin{cases} \langle \vec{r} | N \hat{\rho}_1 | \vec{q} \rangle \rightarrow \psi(\vec{r}) \psi^\dagger(\vec{q}), \text{ para } |\vec{r} - \vec{q}| \rightarrow \infty \text{ (CBE)}, \\ \langle \vec{r} | N \hat{\rho}_1 | \vec{q} \rangle \rightarrow 0, \text{ para } |\vec{r} - \vec{q}| \rightarrow \infty \text{ (sem CBE)}, \end{cases} \quad (\text{A.21})$$

em que $\psi(\vec{r}) \psi^\dagger(\vec{q}) \rightarrow \eta_M \phi_M(\vec{r}) \phi_M^\dagger(\vec{q})$, para $|\vec{r} - \vec{q}| \rightarrow \infty$. Da maneira descrita na Ref. (29), a expansão assintótica do operador densidade pode ser representada na seguinte desigualdade:

$$\left| \left[\langle \vec{r} | N \hat{\rho}_1 | \vec{q} \rangle - \psi(\vec{r}) \psi^\dagger(\vec{q}) \right]_{m,m'} \right| \leq \frac{N}{V} \gamma_{m,m'}(|\vec{r} - \vec{q}|), \quad (\text{A.22})$$

em que $\gamma_{m,m'}(x) \rightarrow 0$ quando $x \rightarrow \infty$. Dessa formulação, é possível mostrar que, para volumes V arbitrariamente grandes (i.e., limite termodinâmico), a expressão abaixo é verdadeira (veja detalhes na Ref. (29)):

$$\frac{1}{NV} \int \left| \left[\langle \vec{r} | N \hat{\rho}_1 | \vec{q} \rangle - \psi(\vec{r}) \psi^\dagger(\vec{q}) \right]_{m,m'} \right| d^3 \vec{r} d^3 \vec{q} \approx 0. \quad (\text{A.23})$$

Definindo a normalização da função ψ como:

$$\int d^3 \vec{r} \psi^\dagger(\vec{r}) \psi(\vec{r}) = \eta_\psi, \quad (\text{A.24})$$

a Eq. A.23 nos informa que ψ é uma boa aproximação para uma autofunção de $N \hat{\rho}_1$, pois:

$$\int \langle \vec{r} | N \hat{\rho}_1 | \vec{q} \rangle \psi(\vec{q}) d^3 \vec{q} \approx \int \psi(\vec{r}) \psi^\dagger(\vec{q}) \psi(\vec{q}) d^3 \vec{q} = \eta_\psi \psi(\vec{r}). \quad (\text{A.25})$$

Para encontrarmos uma interpretação para η_ψ , analisaremos o funcional $f[\phi]$, definido por (29):

* Isso é equivalente a uma soma de fases $\sum_j e^{i\theta_j}$, em que $\{\theta_j\}$ é (em aproximação) um conjunto uniformemente distribuído no intervalo $[0, 2\pi)$. Dessa forma, $\sum_j e^{i\theta_j} \approx 0$

$$f[\phi] = \frac{1}{N} \int \phi^\dagger(\vec{r}) \langle \vec{r} | N \hat{\rho}_1 | \vec{q} \rangle \phi(\vec{q}) d^3\vec{r} d^3\vec{q} \approx \frac{|(\phi, \psi)|^2}{N}, \quad (\text{A.26})$$

em que $(\phi, \psi) = \int \phi^\dagger(\vec{r}) \psi(\vec{r}) d^3\vec{r}$. Escolhendo $(\phi, \phi) = 1$ e sabendo que o maior autovalor de $N \hat{\rho}_1$ é η_M , é possível mostrar que o maior valor que $f[\phi]$ pode ter é η_M/N . Sem perda de generalidade, ao escrever (29):

$$\phi = \frac{1}{\sqrt{\eta_\psi}}(a\psi + b\Phi), \quad (\text{A.27})$$

para $(\Phi, \psi) = 0$, $(\Phi, \Phi) = \eta_\psi$ e $|a|^2 + |b|^2 = 1$, o funcional $f[\phi]$ se resume a:

$$f[\phi] \approx \frac{\eta_\psi}{N} |a|^2. \quad (\text{A.28})$$

Dessa expressão, é notável que f é máximo quando $|a|^2 = 1$ (i.e., $\phi = \psi$), de modo que η_ψ pode ser tomado como uma boa aproximação para η_M (29), o que finalmente caracteriza:

$$\psi(\vec{r}) \psi^\dagger(\vec{q}) \approx \eta_M \phi_M(\vec{r}) \phi_M^\dagger(\vec{q}). \quad (\text{A.29})$$

Tendo em vista esses resultados, nas palavras de Penrose e Onsager (29), podemos interpretar a função ψ como a “função de onda” de um condensado de Bose-Einstein. Contudo, no contexto desta dissertação, em que destacamos conceitualmente as diferenças entre teoria quântica e aproximação de campo médio, o mais correto a se dizer é que ψ tem interpretação de **parâmetro de ordem** de um condensado de Bose-Einstein (espinorial).

APÊNDICE B – INTERPRETAÇÕES DA INTEGRAL $I(\hat{s})$

B.1 Princípio de *Gauge*

O princípio de *gauge* (11), em linguagem simples, diz que, se uma partícula quântica eletricamente carregada e sem spin está na presença de um campo eletromagnético não nulo, devemos adicionar a ela a fase *não integrável* (i.e., que depende do caminho Γ tomado no espaço-tempo)*:

$$\psi_0 \rightarrow \psi_{\text{EM}} = \psi e^{-i\frac{q}{\hbar} \int_{\Gamma} A_{\mu} dx^{\mu}} = \psi e^{-i\frac{q}{\hbar} \int_{\Gamma} \vec{A} \cdot d\vec{l} - \Phi dt}. \quad (\text{B.1})$$

De maneira geral, essa fase adicional é o que introduz a *interação eletromagnética* das partículas quânticas. Ou seja, se ψ_0 satisfaz a equação de Schrödinger na ausência de campos eletromagnéticos:

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \nabla^2 \psi_0 + V(x) \psi_0 = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_0, \quad (\text{B.2})$$

então, quando os campos forem não nulos, ψ_{EM} é a função de onda que satisfaz a Eq. B.2. A ação dos operadores diferenciais sobre ψ_{EM} é dada por:

$$\vec{\nabla} \psi_{\text{EM}} = e^{-i\frac{q}{\hbar} \int_{\Gamma} \vec{A} \cdot d\vec{l} - \Phi dt} \left(\vec{\nabla} - i\frac{q}{\hbar} \vec{A} \right) \psi, \quad (\text{B.3})$$

$$\partial_t \psi_{\text{EM}} = e^{-i\frac{q}{\hbar} \int_{\Gamma} \vec{A} \cdot d\vec{l} - \Phi dt} \left(\partial_t + i\frac{q}{\hbar} \Phi \right) \psi. \quad (\text{B.4})$$

Logo, ψ satisfaz:

$$\frac{1}{2M} \left(-i\hbar \vec{\nabla} - q\vec{A} \right)^2 \psi + (V(x) + q\Phi) \psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi, \quad (\text{B.5})$$

que é a *equação de Schrödinger* para uma partícula carregada em uma região de campo eletromagnético não nulo. Pela estrutura da equação acima, é notável que conseguiríamos obtê-la apenas redefinindo os operadores diferenciais, como na seção 7.1:

$$\vec{\nabla} \rightarrow \vec{\nabla} - i\frac{q}{\hbar} \vec{A}, \quad (\text{B.6})$$

$$\partial_t \rightarrow \partial_t + i\frac{q}{\hbar} \Phi. \quad (\text{B.7})$$

* Explicitamente, a integral $\int_{\Gamma} A_{\mu} dx^{\mu} = \int_{\Gamma} \vec{A} \cdot d\vec{l} - \Phi dt$ é uma *integral de linha* no espaço-tempo.

A redefinição dos operadores diferenciais acima (que é equivalente à redefinição da *energia* e do *momento linear* da partícula) é comumente chamada de *acoplamento mínimo* na literatura. (11)

Do ponto de vista da simetria do sistema, o princípio de *gauge* para o campo eletromagnético é uma manifestação da simetria de fase local $U(1)$ no sistema. Ou seja, ψ_{EM} possui o mesmo módulo do ψ , mesmo que a primeira satisfaça a Eq. B.2 e a segunda, a Eq. B.5. Logo, nesse âmbito, o campo eletromagnético não é capaz de alterar o perfil da densidade de probabilidade.

No contexto dos potenciais eletromagnéticos artificiais $\mathbb{U}_\nu$, vistos no Cap. 7, a parte espinorial e escalar do parâmetro de ordem se transformam, segundo o princípio de *gauge*, como:

$$\psi \rightarrow \psi e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{\Gamma} \mathbb{U}_\nu dx^\nu}, \quad (\text{B.8})$$

$$\zeta \rightarrow \zeta e^{\frac{i}{\hbar} \int_{\Gamma} \mathbb{U}_\nu dx^\nu}, \quad (\text{B.9})$$

$$\psi \rightarrow \psi. \quad (\text{B.10})$$

B.2 Efeito Aharonov-Bohm

Apesar do princípio de *gauge* preservar o módulo da função de onda ($|\psi_{\text{EM}}| = |\psi|$), em geral, encontramos $|\psi_0| \neq |\psi_{\text{EM}}|$, mesmo que ambas funções satisfaçam a Eq. B.2. Isso acontece, pois o campo eletromagnético altera as *condições de contorno* do sistema e o *efeito Aharonov-Bohm* (30), por exemplo, é uma consequência direta de tal fato. Para visualizarmos fisicamente esse efeito, consideremos uma variação do experimento da dupla

Figura 11 – Esquemática do experimento da dupla fenda modificado, que ilustra o efeito Aharonov-Bohm.

Fonte: Elaborada pelo autor.

fenda para elétrons (Fig. 11), em que a região entre as duas fendas é preenchido com campo magnético $\vec{B}$ de intensidade ajustável. Para $\vec{B} = 0$, a função de onda é representada por ψ_0 e o padrão de interferência no anteparo é dado apenas pela diferença de “caminho óptico” entre Γ_1 e Γ_2 na Fig. 11. Contudo, para $\vec{B} \neq 0$, a função de onda é representada por ψ_{EM} e, além da diferença de “caminho óptico”, o padrão de interferência é determinado também pela diferença das fases geradas pelo princípio de *gauge* ao tomar os caminhos Γ_1 e Γ_2 . Ou seja, em cada ponto do anteparo, surge uma diferença de fase extra Δ :

$$\Delta = -\frac{q}{\hbar} \left(\int_{\Gamma_1} \vec{A} \cdot d\vec{l} - \int_{\Gamma_2} \vec{A} \cdot d\vec{l} \right) = -\frac{q}{\hbar} \oint_{\mathcal{C}} \vec{A} \cdot d\vec{l} = -\frac{q}{\hbar} \iint_{\mathcal{S}} \vec{B} \cdot d\vec{S} = -\frac{q}{\hbar} \Phi_B, \quad (\text{B.11})$$

que é proporcional ao *fluxo magnético* e é independente dos caminhos considerados (i.e., qualquer curva fechada $\mathcal{C}$ contorna completamente a região de campo magnético). Em particular, é sempre possível escolher $\vec{B}$ de modo que $\Delta = \pi$. Nessa situação, os pontos do anteparo que anteriormente eram de interferência construtiva passam a ser de destrutiva (e vice-versa), o que mostra que, de fato, $|\psi_0| \neq |\psi_{\text{EM}}|$. Mas, matematicamente, por que essa distinção ocorre? A resposta para isso está contida nas *condições de contorno* da fase da função de onda. Seja $\psi_0 = f_1(x)e^{i\theta_1(x)}$ e $\psi_{\text{EM}} = f_2(x)e^{i\theta_2(x)}$. A circulação da fase de ψ_0 é

$$\oint_{\mathcal{C}} \vec{\nabla} \theta_1 \cdot d\vec{l} = 2\pi n, \quad n \in \mathbb{Z}, \quad (\text{B.12})$$

pois ψ_0 é definida univocamente em um caminho fechado $\mathcal{C}$ qualquer (ou seja, ψ_0 não possui singularidade de fase). Já a circulação da fase de ψ_{EM} (supondo ψ definida univocamente em $\mathcal{C}$) é

$$\oint_{\mathcal{C}} \vec{\nabla} \theta_2 \cdot d\vec{l} = 2\pi n - \frac{q}{\hbar} \Phi_B, \quad n \in \mathbb{Z} \quad (\text{B.13})$$

o que mostra que ψ_{EM} não é definida univocamente (ou seja, a cada “volta” no caminho $\mathcal{C}$, ψ_{EM} é multiplicada por $\exp(-iq\Phi_B/\hbar) \neq 1$). Logo, a condição de contorno da fase (Eq. B.12) deixa de valer para ψ_{EM} na presença de um campo eletromagnético.

No contexto dos campos eletromagnéticos artificiais, a integral $I(\hat{s})$ (Eq. 7.58) pode ser interpretada como o *fluxo magnético* (artificial) que influencia na *circulação de massa* ($\sim$ circulação de fase) em um CBE espinorial. Mais especificamente, $I(\hat{s})$ é definida pela circulação do potencial vetor artificial $\vec{A}'$, que é $\vec{A}$ escrito no calibre $\gamma = -\alpha$:

$$I(\hat{s}) = -\oint_{\mathcal{C}} \vec{A}' \cdot d\vec{l} = -\frac{1}{\hbar} \iint_{\mathcal{S}} \vec{B}' \cdot d\vec{S}. \quad (\text{B.14})$$

Acima, diferenciamos $\vec{\nabla} \times \hbar \vec{A} = \vec{\mathcal{B}}$ de $\vec{\nabla} \times \hbar \vec{A}' = \vec{\mathcal{B}}'$, pois a escolha do calibre pode alterar a possível *parte singular* existente no campo, de modo que os fluxos $\Phi_{\vec{\mathcal{B}}}$ e $\Phi_{\vec{\mathcal{B}}'}$ sejam distintos.

B.3 Fase de Berry

Até agora, vimos que $I(\hat{s})$ é uma grandeza proporcional ao fluxo magnético artificial sobre uma superfície delimitada pelo caminho $\mathcal{C}$, utilizado para calcular a circulação de massa. Contudo, existe uma segunda interpretação para $I(\hat{s})$ que fornece informações acerca das propriedades *geométricas* de um CBE espinorial (veja Cap. 9) e está relacionada ao conceito de *fase de Berry*, ou *fase geométrica*. (31)

Geralmente, o estudo da fase geométrica é introduzido em mecânica quântica num contexto um pouco diferente do que foi abordado até aqui, tratando das evoluções *adiabáticas* de parâmetros que influenciam um sistema (como a intensidade e direção do campo magnético aplicado num sistema de spins, os parâmetros de um potencial externo etc.), mas sua construção devolve um significado análogo claro para $I(\hat{s})$.

Seja $H(\mathbf{P})$ o hamiltoniano de um sistema quântico que depende de N_P parâmetros P_j ($j = 1, 2, \dots, N_P$), codificados na matriz coluna $\mathbf{P}$. Pela equação de Schrödinger independente do tempo

$$H(\mathbf{P})|n; \mathbf{P}\rangle = E_n(\mathbf{P})|n; \mathbf{P}\rangle, \quad (\text{B.15})$$

fica claro que os autoestados desse hamiltoniano e suas energias também dependem de $\mathbf{P}$. Uma transformação adiabática dos parâmetros $\mathbf{P}$, denotada por $\mathbf{P}(t)$, é definida como aquela que preserva o estado quântico do sistema. Ou seja, se inicialmente o sistema é representado pelo número quântico n (em $|n; \mathbf{P}\rangle$), a evolução de $\mathbf{P}(t)$ mantém o sistema nesse estado. Nesse sentido, a evolução temporal do estado quântico $|n; \mathbf{P}\rangle$ é dada por:

$$|\psi_n(t)\rangle = e^{-i\theta(t)}|n; \mathbf{P}(t)\rangle, \quad (\text{B.16})$$

de modo que $|\psi_n(t)\rangle$ também seja autoestado de $H(\mathbf{P}(t))$. Da equação de Schrödinger:

$$H(\mathbf{P}(t))|\psi_n(t)\rangle = i\hbar \frac{d}{dt}|\psi_n(t)\rangle, \quad (\text{B.17})$$

obtemos a relação para a fase $\theta(t)$:

$$E_n(t) = \hbar \dot{\theta} + i\hbar \left\langle n; \mathbf{P}(t) \left| \frac{d}{dt} \right| n; \mathbf{P}(t) \right\rangle, \quad (\text{B.18})$$

que implica:

$$\theta(t) = \frac{1}{\hbar} \int_0^t E_n(t') dt' - i \int_0^t \left\langle n; \mathbf{P}(t') \left| \frac{d}{dt'} \right| n; \mathbf{P}(t') \right\rangle dt'. \quad (\text{B.19})$$

Em particular, a fase $\gamma_n(t)$, definida por:

$$\gamma_n(t) = -i \int_0^t \left\langle n; \mathbf{P}(t') \left| \frac{d}{dt'} \right| n; \mathbf{P}(t') \right\rangle dt', \quad (\text{B.20})$$

é chamada de *fase de Berry* ou *fase geométrica*. Como $i(d/dt)$ é um operador hermitiano, $\gamma_n(t)$ é uma função real. Além disso, essa fase pode ser representada como uma integral de linha, dada a regra da cadeia $d/dt = d\mathbf{P}/dt \cdot \nabla_{\mathbf{P}}$:

$$\gamma_n(t) = -i \int_{\Gamma_t} \langle n; \mathbf{P} | \nabla_{\mathbf{P}} | n; \mathbf{P} \rangle \cdot d\mathbf{P}. \quad (\text{B.21})$$

A grandeza $\mathbf{A}$, definida como:

$$\mathbf{A} = -i \langle n; \mathbf{P} | \nabla_{\mathbf{P}} | n; \mathbf{P} \rangle, \quad (\text{B.22})$$

é chamada de *conexão de Berry* e é o objeto matemático base para a análise geométrica do espaço dos parâmetros $\mathbf{P}$: $M(\mathbf{P})$. É notável que, quando $\mathbf{P}$ perfaz um caminho fechado (*loop*), a fase de Berry associada pode ser escrita em termos do teorema de Stokes na sua versão N_p -dimensional. Ou seja,

$$\gamma_n(t) = \oint_{\Gamma_t} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{P} = \iint_{\Sigma_t} \text{rot}_{\mathbf{P}}(\mathbf{A}) \cdot d\mathbf{S} = \iint_{\Sigma_t} \mathbf{B} \cdot d\mathbf{S}, \quad (\text{B.23})$$

em que $\mathbf{B}$ é chamada de *curvatura de Berry*. Dada a expressão acima, a analogia entre $\gamma_n(t)$ e a integral $I(\hat{s})$, do ponto de vista do efeito Aharonov-Bohm, é tão evidente que $I(\hat{s})$ é referida constantemente como fase de Berry na Ref. (4).

Em particular, tomando o caso dos campos eletromagnéticos artificiais, a estrutura dos potenciais vetor artificial $\vec{A} = i\zeta^\dagger \vec{\nabla} \zeta$ e escalar artificial $\Phi = -i\zeta^\dagger \partial_t \zeta$ é similar à da conexão de Berry $\mathbf{A}$, bastando identificar:

$$|n; \mathbf{P}\rangle \rightarrow \zeta(x, t), \quad (\text{B.24})$$

$$\mathbf{P} \rightarrow (x, t), \quad (\text{B.25})$$

$$\nabla_{\mathbf{P}} \rightarrow -\vec{\nabla} \text{ ou } \partial_t. \quad (\text{B.26})$$

A diferença de sinal entre as definições de $\vec{A}$ e $\mathbf{A}$ é dada pelo fato de que, enquanto $\vec{A}$ é definida por derivadas *espaciais* (componentes da métrica $\eta_{11} = \eta_{22} = \eta_{33} = 1$), a contribuição “energética” de $\mathbf{A}$ surge de uma *derivada temporal* (vide Eqs. B.18 e B.20) e, logo, ela compartilha a mesma definição de sinal que o potencial escalar Φ ($\eta_{00} = -1$).

Uma outra propriedade importante que $\mathbf{A}$ e $\mathbf{B}$ satisfazem (e que pode ser guardada como uma valiosa motivação na discussão acerca dos *monopolos* no Cap. 9) aparece naturalmente ao tomarmos *loops* em $M(\mathbf{P})$. Seja Γ_t um caminho fechado e Γ_t^R o seu caminho reverso. Como $M(\mathbf{P})$ é, *a priori*, um espaço genérico, é possível que existam *singularidades* em $\mathbf{A}$ de modo que

$$\gamma_n(t) = \oint_{\Gamma_t} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{P} \neq - \oint_{\Gamma_t^R} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{P} = -\gamma_n^R(t). \quad (\text{B.27})$$

Contudo, existe a consideração física de que a evolução adiabática em um *loop reverso* gera uma *contribuição de fase inversa* à do *loop original*. Ou seja:

$$e^{i\gamma_n(t)} = e^{-i\gamma_n^R(t)} \Rightarrow \gamma_n(t) + \gamma_n^R(t) = 2\pi N_C, \quad N_C \in \mathbb{Z}. \quad (\text{B.28})$$

A soma $\gamma_n(t) + \gamma_n^R(t)$, por outro lado, pode ser representada em termos do Teorema de Stokes:

$$\gamma_n(t) + \gamma_n^R(t) = \oint_{\Gamma_t} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{P} + \oint_{\Gamma_t^R} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{P} = \iint_{\Sigma_t} \mathbf{B} \cdot d\mathbf{S} + \iint_{\Sigma_t^R} \mathbf{B} \cdot d\mathbf{S}. \quad (\text{B.29})$$

Como as superfícies Σ_t e Σ_t^R possuem orientações distintas e fronteiras iguais, a união delas devolve uma *superfície fechada*: Σ_t^F . Supondo que Σ_t^F seja positivamente orientada, encontramos:

$$\iint_{\Sigma_t^F} \mathbf{B} \cdot d\mathbf{S} = 2\pi N_C \quad (\text{B.30})$$

e N_C , chamado de número de Chern, pode ser interpretado como o *número de monopolos* existentes no interior de Σ_t^F (i.e., lei de Gauss).

No âmbito dos CBEs espinorais, uma expressão “quantizando” os monopolos magnéticos artificiais, análoga à acima, nem sempre é possível, pois ela surge da evolução temporal adiabática dos parâmetros $\mathbf{P}$, e não de uma curva fechada (*a priori*, qualquer) no espaço físico $\mathcal{C} : x(\lambda) \in \mathbb{R}^3$. Contudo, os casos em que essa quantização existe serão abordados no Cap. 9.

APÊNDICE C – TEOREMAS DE MICHEL E A EXTREMIZAÇÃO DA AÇÃO DE UM ESPINOR

No Cap. 8, abordamos as classificações da simetria dos diferentes estados do parâmetro de ordem de um CBE espinorial a partir do estudo das *variedades* $\mathcal{R}$ que ele define em cada caso. É importante notar que, nos exemplos dos estados polar e ferromagnéticos vistos anteriormente, partimos do princípio de que seus estados uniformes ζ_0 extremizam a ação S (com base no que foi visto no Cap. 5). Contudo, existe um *tratamento matemático* (o qual abordaremos conceitualmente neste apêndice) que permite encontrar estados provenientes da quebra espontânea da simetria do sistema unicamente pela análise da simetria da ação S . (22) Para introduzir esse método primeiro precisamos definir dois conjuntos.

O primeiro deles, denotado por $\mathcal{M}_{\mathcal{H}}$, é o conjunto de todos os parâmetros de ordem ζ que possuem $\mathcal{H} \subset \mathcal{G}$ como seu grupo de isotropia (4):

$$\mathcal{M}_{\mathcal{H}} = \{\zeta \in \mathcal{M} \mid \mathcal{H}\zeta = \zeta\}. \quad (\text{C.1})$$

É importante notar que não necessariamente todos os elementos de $\mathcal{M}_{\mathcal{H}}$ pertencem a uma mesma órbita. Contudo, as órbitas de cada um dos elementos do conjunto (por possuírem o mesmo grupo de isotropia) serão do *mesmo tipo*: $\mathcal{R} = \mathcal{G}/\mathcal{H}$.

O segundo conjunto necessário para introduzir o método é chamado na literatura de *estrato* $\mathcal{M}_S(\zeta)$ e é definido pela *união* de todas as órbitas dos elementos do conjunto $\mathcal{M}_{\mathcal{H}}$ (4):

$$\mathcal{M}_S(\zeta) = \bigcup_{\zeta' \in \mathcal{M}_{\mathcal{H}}} \mathcal{M}_o(\zeta'). \quad (\text{C.2})$$

O estrato $\mathcal{M}_S(\zeta)$ também é definido na literatura como o conjunto de todas as órbitas $\mathcal{M}_o(\zeta')$ do mesmo tipo que a órbita $\mathcal{M}_o(\zeta)$, fixado ζ . (4)

Da definição desses dois conjuntos, podemos classificar uma órbita arbitrária $\mathcal{M}_o(\zeta')$ do estrato $\mathcal{M}_S(\zeta)$ em duas categorias: *órbita isolada* ou *órbita não isolada*. A órbita $\mathcal{M}_o(\zeta')$ é isolada no estrato, se, para alguma de suas vizinhanças arbitrárias $V \supset \mathcal{M}_o(\zeta')$, a relação abaixo é satisfeita:

$$V \cap \mathcal{M}_S(\zeta) = \mathcal{M}_o(\zeta'). \quad (\text{C.3})$$

Ou seja, uma órbita *isolada*, em termos pouco rigorosos, não faz parte das *vizinhanças mais próximas* das outras órbitas do estrato.

O método para encontrar as órbitas que extremizam um funcional, a partir unicamente da análise da sua simetria, foi formulado pelo físico francês Louis Michel em 1971. (22) Em seu trabalho, Michel lança mão de diversos conceitos avançados acerca da *geometria de variedades*, de modo que sua leitura, infelizmente, é *pouco acessível* para a maioria da comunidade de físicos. Contudo, felizmente, os *dois teoremas* utilizados para justificar seu método possuem interpretação *razoavelmente simples* e exemplos bastante *elucidativos*.

C.1 Primeiro Teorema de Michel

O *primeiro teorema* de Michel (4, 22) diz que, dado um funcional $S[\zeta] \in \mathbb{R}$ que seja invariante pela atuação de um grupo de Lie $\mathcal{G}$ (i.e., $S[\zeta] = S[g\zeta]$, $\forall g \in \mathcal{G}$), se uma órbita $\mathcal{M}_o(\zeta)$ é isolada no estrato $\mathcal{M}_S(\zeta)$, então $\mathcal{M}_o(\zeta)$ extremiza S .

Para provarmos *heurísticamente* esse teorema, primeiro precisamos compreender como podemos definir *direções* em uma variedade. Por simplicidade, podemos tomar o caso simples de uma variedade que seja representada por uma superfície bidimensional (Fig. 12). Podemos interpretar a atuação do grupo $\mathcal{G}$ num parâmetro de ordem ζ como uma curva na superfície. A direção do plano tangente à superfície no ponto ζ definida pela curva $\mathcal{G}\zeta \equiv \mathcal{M}_o(\zeta)$ é chamada de direção da simetria (ou direções da simetria, quando $\mathcal{G}$ é definido por um número arbitrário de parâmetros). Além da órbita $\mathcal{G}\zeta$, é possível definir

Figura 12 – Representação ilustrativa de uma variedade $\mathcal{M}$ como uma superfície bidimensional. Os objetos marcados na figura são: (a) o ponto ζ ; (b) a órbita $\mathcal{M}_o(\zeta)$; (c) a reta tangente a $\mathcal{M}_o(\zeta)$: $T_\zeta(\mathcal{M}_o(\zeta))$; (d) a curva $r^{-1}(\zeta)$; (e) a reta tangente à curva $r^{-1}(\zeta)$: $T_\zeta(r^{-1}(\zeta))$.

Fonte: Elaborada pelo autor.

outra curva, denotada por $r^{-1}(\zeta)$, como (22):

$$r^{-1}(\zeta) = \{\zeta' \in \mathcal{M} \mid \zeta \text{ seja o ponto da órbita } \mathcal{G}\zeta \text{ mais próximo de } \zeta'\}, \quad (\text{C.4})$$

pressupondo que haja uma métrica definida em $\mathcal{M}^*$. Dessa maneira, $r^{-1}(\zeta)$ define a *direção ortogonal* à direção da simetria (Fig. 12). Em notação matemática, podemos representar o plano tangente de $\mathcal{M}$ no ponto ζ , $T_\zeta(\mathcal{M})$, como a seguinte *soma direta* de dois espaços vetoriais (duas retas, no exemplo da Fig. 12):

$$T_\zeta(\mathcal{M}) = T_\zeta(\mathcal{M}_o(\zeta)) \oplus T_\zeta(r^{-1}(\zeta)). \quad (\text{C.5})$$

Supondo que o grupo $\mathcal{G}$ seja definido por N parâmetros ($g = g(\alpha_1, \dots, \alpha_N)$), é razoavelmente simples mostrar que o *gradiente* de S na direção da simetria (i.e. $\nabla_\alpha S = (\partial_{\alpha_1} S, \dots, \partial_{\alpha_N} S)$) é sempre nulo, pois:

$$\nabla_\alpha S[g(\alpha_1, \dots, \alpha_N)\zeta] = \nabla_\alpha S[\zeta] = 0. \quad (\text{C.6})$$

Logo, o gradiente de S na variedade $\mathcal{M}$, ∇S , é restrito ao espaço $T_\zeta(r^{-1}(\zeta))$, pois, para uma curva arbitrária Γ em $\mathcal{M}$ definida por

$$\Gamma = \{\zeta^c(t) = g(\alpha(t))\zeta^r(t) \in \mathcal{M} \mid \zeta^r(t) \in r^{-1}(\zeta), g(\alpha(0)) = 1 \text{ e } \zeta^r(0) = \zeta\}, \quad (\text{C.7})$$

a derivada $dS/dt(0)$ é:

$$\begin{aligned} \frac{dS}{dt}(0) = \nabla S[\zeta] \cdot \frac{d\zeta^c}{dt}(0) &= \nabla_\alpha S[\zeta] \cdot \frac{d\alpha}{dt}(0) + \nabla_{r^{-1}} S[\zeta] \cdot \frac{d\zeta^r}{dt}(0) \\ &= \nabla_{r^{-1}} S[\zeta] \cdot \frac{d\zeta^r}{dt}(0). \end{aligned} \quad (\text{C.8})$$

Assim, $\nabla S[\zeta] = \nabla_{r^{-1}} S[\zeta] \in T_\zeta(r^{-1}(\zeta))$. Além disso, $\nabla S[\zeta]$ é invariante pela atuação do grupo de isotopia $\mathcal{H}$ (i.e., tem estrutura de um elemento de $\mathcal{M}_\mathcal{H}$):

$$\mathcal{H}(\nabla S[\zeta]) \equiv \nabla S[\mathcal{H}\zeta] = \nabla S[\zeta]. \quad (\text{C.9})$$

* Mais do que isso, é pressuposto que a métrica seja invariante por $\mathcal{G}$, o que faz com que o plano tangente $T_\zeta(\mathcal{M})$ seja um espaço euclidiano e as considerações acerca do gradiente de S sejam válidas. (22)

Portanto, a direção do gradiente é restrita mais uma vez:

$$\nabla S[\zeta] \in T_\zeta(\mathcal{M}_\mathcal{H} \cap r^{-1}(\zeta)). \quad (\text{C.10})$$

É fundamental notar que, para uma vizinhança V_ζ arbitrariamente próxima de ζ (como a utilizada para definir os variados “planos” tangentes $T_\zeta(\cdot)$ acima), a seguinte relação

$$V_\zeta \cap (\mathcal{M}_\mathcal{H} \cap r^{-1}(\zeta)) = \{\zeta\} \quad (\text{C.11})$$

é verdadeira somente se a *órbita* $\mathcal{M}_o(\zeta)$ for **isolada**. Dessa maneira, $T_\zeta(\mathcal{M}_\mathcal{H} \cap r^{-1}(\zeta))$ é reduzido ao espaço vetorial trivial:

$$T_\zeta(\mathcal{M}_\mathcal{H} \cap r^{-1}(\zeta)) = \{0\}, \quad (\text{C.12})$$

e $\nabla S[\zeta] = 0$. Todos os passos anteriores são válidos também para qualquer elemento de $\mathcal{M}_o(\zeta)$, o que prova o *primeiro teorema de Michel*.

C.2 Segundo Teorema de Michel

O *segundo teorema* de Michel (4, 22) diz que, se a órbita $\mathcal{M}_o(\zeta)$ não for isolada, $\mathcal{M}_\mathcal{H}$ (definido pela isotropia $\mathcal{H}\zeta = \zeta$) define uma *subvariedade diferenciável* de modo que, se $\zeta' \in \mathcal{M}_\mathcal{H}$ extremiza o funcional S na subvariedade $\mathcal{M}_\mathcal{H}$, então $\mathcal{M}_o(\zeta')$ é uma órbita que extremiza S na variedade $\mathcal{M}$.

A prova desse teorema vem do fato de que, ao restringir o domínio de S para $\mathcal{M}_\mathcal{H} \subset \mathcal{M}$, as taxas de variação de S não se alteram. A partir da Eq. C.10, é claro que $S[\zeta]$ varia apenas devido às componentes da *diferencial* $d\zeta$ nas direções definidas por $T_\zeta(\mathcal{M}_\mathcal{H} \cap r^{-1}(\zeta)) \subset T_\zeta(\mathcal{M}_\mathcal{H})$. Portanto, restringir o domínio de S a $\mathcal{M}_\mathcal{H}$ (i.e., restringir $d\zeta \in T_\zeta(\mathcal{M}_\mathcal{H})$) não altera $\nabla S[\zeta] \cdot d\zeta$. Então, se $\nabla S[\zeta'] = 0$ para algum $\zeta' \in \mathcal{M}_\mathcal{H}$, o gradiente de S deve ser nulo na órbita correspondente $\nabla S[\mathcal{G}\zeta'] = 0$:

$$\begin{aligned} dS[\mathcal{G}\zeta, \mathcal{G}\zeta'] &= S[\mathcal{G}\zeta] - S[\mathcal{G}\zeta'] = S[\zeta] - S[\zeta'] = dS[\zeta, \zeta'] \Rightarrow \\ &\Rightarrow \nabla S[\mathcal{G}\zeta'] \cdot d(\mathcal{G}\zeta) = \nabla S[\zeta'] \cdot d\zeta = 0, \end{aligned} \quad (\text{C.13})$$

finalmente provando o *segundo teorema de Michel*.

C.3 Regras Gerais para a Aplicação do Método de Michel

Uma vez apresentados os teoremas de Michel, é possível sumarizar uma sequência de regras gerais para obtermos os parâmetros de ordem gerados pela quebra espontânea da simetria do sistema a partir unicamente da análise da simetria da ação S . (4)

O **primeiro passo** (que guarda um pouco de semelhança com o que já foi discutido nas seções anteriores com os estados polar e ferromagnéticos) é determinar $\mathcal{G}$, o grupo de simetria da ação S , todos os seus subgrupos $\mathcal{H}$ e classificá-los de acordo com as suas *classes de conjugação* (ou seja, para um subgrupo $\mathcal{H}'$, é o conjunto de todos os subgrupos $g\mathcal{H}'g^{-1}$, $g \in \mathcal{G}$).

O **segundo passo** é determinar, para cada subgrupo $\mathcal{H}$, todos os elementos $\zeta \in \mathcal{M}$ que sejam $\mathcal{H}$ -invariantes: $\mathcal{H}\zeta = \zeta$. Ou seja, nesse passo são determinados todos os conjuntos $\mathcal{M}_{\mathcal{H}}$.

O **terceiro passo** é analisar a estrutura dos conjuntos $\mathcal{M}_{\mathcal{H}}$. Ou seja, é verificado se $\mathcal{M}_{\mathcal{H}}$ é um conjunto discreto ($\{\zeta_i\}_{i=1,2,\dots}$), contínuo ($\{\zeta_\lambda \mid \lambda \in \mathbb{R}^N\}$) ou uma união desses dois tipos. Em uma visão operacional, se ζ é unicamente determinado (isto é, não existe nenhum parâmetro contínuo que o define), ele pertence a um (sub)conjunto discreto. Cada elemento da parte discreta de $\mathcal{M}_{\mathcal{H}}$ define uma órbita isolada e, pelo primeiro teorema de Michel, extremizam a ação S .

O **quarto passo** é buscar, nos (sub)conjuntos contínuos de $\mathcal{M}_{\mathcal{H}}$ (que formam uma variedade), elementos ζ_c que extremizam a ação S . Pelo segundo teorema de Michel, a órbita de cada um dos elementos ζ_c também extremizam a ação S .

O **quinto passo** é comparar as energias E de todas as orbitas que extremizam S e encontrar entre elas a menor. Em particular, o funcional da energia E para o parâmetro de ordem de um CBE espinorial (Eq. 4.6) também é invariante pelo grupo $\mathcal{G}$. Logo, comparar energias entre orbitas possui sentido físico claro, dado que cada uma delas possui uma única energia.

C.4 Simetria dos Condensados de Spin 1

A primeira aplicação simples do método de Michel é recuperar os parâmetros de ordem dos estados uniformes e estacionários discutidos no Cap. 5. Para isso, precisamos primeiro encontrar e classificar todos os subgrupos $\mathcal{H} \subset \mathcal{G}$, em que $\mathcal{G}$ é dado pela Eq. 8.2. Em particular, podemos considerar a situação em que o campo magnético aplicado no condensado é nulo: $\mathcal{G} = U(1)_\theta \times SO(3)_{\vec{f}}$.

Começamos analisando os *subgrupos contínuos* de $\mathcal{G}$. Segundo a teoria dos *grupos de Lie* (4), o único subgrupo contínuo de $SO(3)$ é o grupo $SO(2) \cong U(1)$, o qual, por sua vez, não possui nenhum subgrupo contínuo. Portanto, os subgrupos de simetria $\mathcal{H}$

contínuos podem ser escritos como:

$$\mathcal{H} = SO(2) \times (\text{Grupo Discreto}). \quad (\text{C.14})$$

Em particular, autovetores ζ^m ($m \neq 0$) do operador de spin $\mathbf{f}_z$ possuem $\mathcal{H} = SO(2)$ como de grupo de isotropia, pois:

$$e^{im\alpha} e^{-i\alpha \mathbf{f}_z} \zeta^m = \zeta^m, \quad \alpha \in [0, 2\pi). \quad (\text{C.15})$$

Contudo, quando $m = 0$, ζ^0 apresenta uma *isotropia discreta extra* $\mathbb{Z}_2$, dado que

$$(-1)^f e^{-i\pi \mathbf{f}_y} \zeta^0 = \zeta^0. \quad (\text{C.16})$$

Portanto, o grupo de isotropia de ζ^0 é $\mathcal{H} = SO(2) \star \mathbb{Z}_2 \cong D_\infty$, o grupo diedral.

Dadas as propriedades dos grupos de isotropia $SO(2)$ e D_∞ , vistos acima, podemos concluir que $\mathcal{M}_{SO(2)} = \{\zeta^m \mid m \neq 0\}$ e $\mathcal{M}_{D_\infty} = \{\zeta^0\}$ são discretos e, portanto, geram orbitas isoladas, extremizando a ação S . No caso de spin $f = 1$, isso faz com que recuperemos os dois estados ferromagnéticos e o estado polar encontrados no Cap. 5. Da seguinte maneira (4):

$$\zeta_0^{\text{ferro}+} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}^T : \mathcal{H}^{\text{ferro}+} = SO(2)_{\theta+\mathbf{f}_z} = \{e^{i\alpha} e^{-i\alpha \mathbf{f}_z} \mid \alpha \in [0, 2\pi)\}, \quad (\text{C.17})$$

$$\zeta_0^{\text{ferro}-} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}^T : \mathcal{H}^{\text{ferro}-} = SO(2)_{\theta-\mathbf{f}_z} = \{e^{-i\alpha} e^{-i\alpha \mathbf{f}_z} \mid \alpha \in [0, 2\pi)\}, \quad (\text{C.18})$$

$$\zeta_0^{\text{polar}} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}^T : \mathcal{H}^{\text{polar}} = (D_\infty)_{\theta, \mathbf{f}_z} = \{e^{-i\alpha \mathbf{f}_z}, e^{i\pi} U_2^\gamma \mid \alpha, \gamma \in [0, 2\pi)\}, \quad (\text{C.19})$$

onde $U_2^\gamma = e^{i\gamma \mathbf{f}_z} e^{-i\pi \mathbf{f}_x} e^{-i\gamma \mathbf{f}_z}$ é uma rotação de ângulo π sobre um eixo qualquer do plano $x - y$. É importante destacar que os grupos de isotropia expressos acima são também *subgrupos* de $\mathcal{G}$ nos casos em que o campo magnético é diferente de zero. Ou seja, os estados acima *extremizam* a ação S também quando o campo magnético *não for nulo*. (4)

Quanto aos **subgrupos discretos** de $\mathcal{G}$, podemos descrever seus geradores (sem perda de generalidade) por (4):

$$\mathcal{H} \ni h = e^{i\phi n} \mathbf{C}_{n, \Omega_x x + \Omega_y y + \Omega_z z} \equiv e^{i\phi n} \exp \left[-i \frac{\Omega_x \mathbf{f}_x + \Omega_y \mathbf{f}_y + \Omega_z \mathbf{f}_z}{\sqrt{\vec{\Omega}^2}} \frac{2\pi}{n} \right]. \quad (\text{C.20})$$

De maneira geral, fixado um eixo definido por $\vec{\Omega}$, $\mathbf{C}_{n, \Omega_x x + \Omega_y y + \Omega_z z}$ é o gerador do grupo cíclico C_n , o qual é definido por n rotações de ângulos $2\pi k/n$, com $k = 0, \dots, n-1$. Esse grupo também é isomorfo a $\mathbb{Z}_n$, o conjunto das raízes n -ésimas complexas de 1.

No caso de spin $f = 1$, a *dimensionalidade* do parâmetro de ordem permite que apenas C_2 seja um grupo de isotropia do parâmetro de ordem. (4) Dessa maneira, escolhendo $\vec{\Omega} = \hat{z}$, o gerador $\mathbf{C}_{2,z}$ em representação matricial é:

$$\mathbf{C}_{2,z} = \text{diag}(-1, 1, -1). \quad (\text{C.21})$$

Para que C_2 seja um grupo de isotropia do parâmetro de ordem ζ , basta que ele seja um *autovetor* do gerador desse grupo. Assim, não é difícil mostrar que os autovetores de $\mathbf{C}_{2,z}$ se dividem em *duas famílias*:

$$\mathcal{M}_{C_2} = \left\{ \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}^T \right\} \cup \left\{ \begin{pmatrix} \sqrt{1-\eta} & 0 & \sqrt{\eta} \end{pmatrix}^T \mid \eta \in (0, 1) \right\}. \quad (\text{C.22})$$

No caso, o estado polar contido em $\mathcal{M}_{C_2}$ pode ser *descartado* devido a ele já ter sido analisado em relação à isotropia $\mathcal{H} = D_\infty \supset C_2$. Quanto ao subconjunto contínuo de $\mathcal{M}_{C_2}$, o parâmetro η faz com que ele possua elementos de diferentes orbitas e defina uma variedade diferenciável. Logo, as orbitas dos elementos da parte contínua de $\mathcal{M}_{C_2}$ *não são isoladas*, de modo que é necessário buscar qual (quais) η faz (fazem) com que

$$\zeta^{C_2}(\eta) = \begin{pmatrix} \sqrt{1-\eta} & 0 & \sqrt{\eta} \end{pmatrix}^T \quad (\text{C.23})$$

satisfaça a equação de Gross-Pitaevskii (Eq. 5.2). Na ausência de campo magnético, é possível encontrar $\eta = 0, 1$ ou $1/2$, que representam, respectivamente, estados ferromagnéticos (positivo e negativo) e polar. Na presença de campo magnético, contudo, aparece uma solução não trivial (4)

$$\eta = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{p}{c_1 n} \right), \quad \left| \frac{p}{c_1 n} \right| < 1, \quad (\text{C.24})$$

que é referente ao estado *antiferromagnético*:

$$\zeta^{AF} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \sqrt{1 - \frac{p}{c_1 n}} & 0 & \sqrt{1 + \frac{p}{c_1 n}} \end{pmatrix}^T, \quad \left| \frac{p}{c_1 n} \right| < 1 : \mathcal{H}^{AF} = C_2 = \{1, e^{i\pi} \mathbf{C}_{2,z}\}. \quad (\text{C.25})$$

Até agora, quatro dos estados discutidos no Cap. 5 são encontrados pelo método de

Michel. Resta apenas o estado de quebra de simetria axial (QSA). Um fato notável acerca desse estado é que ele também tem grupo de isotropia $\mathcal{H} = C_2$ (4). Contudo, a isotropia C_2 do estado QSA é dada a partir de um direção $\vec{\Omega}$ distinta ao eixo de simetria do sistema (definido no Cap. 5 como o eixo z). Ou seja, $\mathcal{H} \not\subseteq \mathcal{G}$ (*assinatura* da quebra completa da simetria do sistema), o que mostra que não é possível encontrar o estado QSA a partir do método de Michel. (4)