Universidade de São Paulo

Instituto de Física

Estado fundamental e excitações coletivas de condensados de Bose-Einstein espinoriais

Dimas Rodrigues Romano

Orientador: Prof. Dr. Emerson José Veloso de Passos

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

Comissão Examinadora:

Prof. Dr. Emerson José Veloso de Passos - IFUSP

Prof. Dr. Antonio F. R. Toledo Piza - IFUSP

Prof. Dr. Mahir S. Hussein - IFUSP

Prof. Dr. Frederico F. Souza Cruz - UFSC

Prof. Dr. Vanderlei Bagnato - IFSC - USP

São Paulo

2007

Resumo

No contexto da teoria de Bogoliubov determinamos as configurações de equilíbrio e as excitações coletivas de um condensado de Bose-Einstein espinorial homogêneo com spin hiperfino $S = 1$, na presença e na ausência de um campo magnético externo. Na tese mapeamos as configurações de equilíbrio em função dos parâmetros $\frac{q}{|c_2\rho|}$ e m, onde q está relacionado com a intensidade do termo quadrático da energia de Zeeman, c_2 é a intensidade do termo da interação átomo-átomo dependente do spin, ρ é a densidade do condensado e m é a magnetização por partícula. Pelo exame do comportamento dos ramos de energia das excitações coletivas como função do momento determinamos as configurações de equilíbrio estáveis e mostramos que é possível classificá-las pela miscibilidade das componentes $\alpha = 0$ e $\alpha = \pm 1$, que é uma consequência direta da simetria axial no espaço de spin. O exame do diagrama de fase do sistema indica que ele depende crucialmente do caráter antiferromagnético ou ferromagnético dos átomos. No limite antiferromagnético o estado fundamental é imiscível e de fase indeterminada. Por outro lado no limite ferromagnético o estado fundamental pode ser miscível e de fase determinada. Em contrapartida verificamos a dominância do termo quadrático da energia de Zeeman em ambos os casos, no limite antiferromagnético quando $\frac{q}{|c_2\rho|} > 0$ e no limite ferromagnético quando $\frac{q}{|c_2\rho|} > 2$. Fenômenos tais como o colpaso do condensado e transições de fase são também possíveis. Este trabalho se diferencia dos demais pelo fato de levar em conta explicitamente a conservação da magnetização do sistema, que nos permitiu fazer um estudo sistemático das configurações de equilíbrio, o que pode servir de guia para futuros estudos de efeitos que ocorrem tanto nas regiões estáveis quanto nas instáveis.

.

Abstract

In the framework of the Bogoliubov theory, we determined the equilibrium configurations and the collective excitations of a homogeneous Bose-Einstein $S = 1$ spinor condensate, in the presence and absence of an external magnetic field. In this thesis we found the equilibrium configurations as function of the parameters $\frac{q}{|c_2\rho|}$ and m, where q is the intensity of the quadratic term of the Zeeman energy, c_2 is the intensity of the spin dependent atom-atom interaction term, ρ is the condensate density and m the magnetization per particle. By the study of the behaviour of the collective excitation energies as function of the moment, we found the stable equilibrium configurations and we show that they can be classified by the miscibility of the components $\alpha = 0$ and $\alpha \pm 1$, which is a direct consequence of the axial symmetry in the spin space. Examining the phase diagram, we see that it depends on the antiferromagnetic or ferromagnetic character of the atoms. In the antiferromagnetic limit, the ground state is imiscible and with an undetermined phase. However in the ferromagnetic limit the ground state can be miscible and with a fixed phase. On the other hand, we see in both cases the dominance of the quadratic term of the Zeeman energy, when $\frac{q}{|c_2\rho|} > 0$ in the antiferromagnetic limit and when $\frac{q}{|c_2\rho|} > 2$ in the ferromagnetic limit. Phenomena such as condensate collapse and phase transition is also possible. This work differs from others by taking explicitly into account the conservation of the magnetization of the system, which allowed us to perform a sistematic study of the equilibrium configurations, that can be a guide to future studies of effects that occur not only at the stable as also in the unstable regions.

.

.

Dedico aos meus pais, Antônio e Gleide.

.

Agradecimentos

Agradeço primeiramente ao prof. Emerson José Veloso de Passos pela orientação durante a realização deste trabalho.

Agradeço aos amigos com quem convivi diretamente e que sempre estiveram dispostos a ajudar em qualquer situação. Thiago, Milton e Sérgio, com quem dividi uma sala no departamento de física matemática. Ivan, Ronaldo, Fábio, Leonardo, Marcelo, Alencar, João, Rodrigo e Mário, amigos do departamento ou não mas que sempre estiveram por perto. Julian, Pedro e Sandro, amigos que conheço desde os tempos de UNICAMP. E não poderia me esquecer dos amigos com quem dividi uma república durante todo este período, Joelson e Paulo.

Agradeço aos meus pais, Antônio e Gleide, e a meus avós, Thomaz (*in memorian*) e Gregória e Aldo e Iracema (*in memorian*), pelo apoio que sempre me deram, desde o dia em que resolvi começar a estudar física.

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

.

Sumário

Lista de Figuras

Lista de Tabelas

.

Capítulo 1

Introdução

Em 1925, um trabalho de Albert Einstein propôs a existência de uma transição de fase na teoria de um gás quântico ideal, onde as partículas obedecem a uma estatística, hoje conhecida como estatística de Bose-Einstein, que ocorre quando o comprimento de onda térmico característico, $\lambda_{dB} = (2\pi\hbar^2/mk_BT)^{1/2}$, se torna comparável à separação média entre as partículas, $d = \rho^{-1/3}$. Quando esta condição é atingida o estado de menor energia do sistema adquire uma população macroscópica, mesmo que a temperatura seja suficiente para que outros estados sejam populados. Esta mudança abrupta nas propriedades físicas do sistema caracteriza a transição de fase, e este efeito é conhecido como condensação de Bose-Einstein, só observado experimentalmente no ano de 1995, quando grupos experimentais produziram condensados a partir de gases de átomos alcalinos extremamente diluídos, aprisionados em uma armadilha magnética.

O procedimento para se produzir um condensado de Bose-Einstein, que será chamado daqui para frente de CBE, exige alcançar temperaturas extremamente baixas da ordem de centenas de nK. Na maioria dos casos o que vemos são transições de fase familiares como as que levam a sólidos, e devido a este fato, a condensação de Bose-Einstein em gases atômicos bosônicos só pode ser conseguida em gases extremamente diluídos de modo que o tempo de formação de moléculas por colisões de três corpos seja aumentado para segundos ou minutos. Sendo o tempo de termalização por colisões binárias tipicamente de $10ms$, o condensado é conseguido em uma fase gasosa metaestável [1].

A condensação de Bose-Einstein foi primeiramente demonstrada pelo grupo de Boulder

usando ^{87}Rb (junho de 1995), pelo grupo do MIT usando ^{23}Na (setembro de 1995) e pelo grupo da Rice University usando ^{7}Li (evidência indireta em julho de 1995) [2, 3, 4]. A maioria dos experimentos alcançam a degenerescência quântica em temperaturas entre $500nK$ e $2\mu K$. Densidades típicas ρ na temperatura de transição são da ordem de $10^{14}cm^{-3}$.

Para se ver o condensado é usado um método de medidas do tempo de vôo. Deixa-se os átomos expandirem desligando a armadilha confinante e são feitas imagens através de métodos ópticos. Um pico pronunciado na distribuição de velocidades é então observado quando o sistema está a uma temperatura abaixo de uma certa temperatura crítica, o que é uma assinatura clara da condensação. A figura (1.1) mostra uma das primeiras "fotos" de nuvens atômicas de rubídio, onde vemos o aparecimento do pico pronunciado da distribuição de velocidades no gráfico quando a temperatura é de $100nK$.

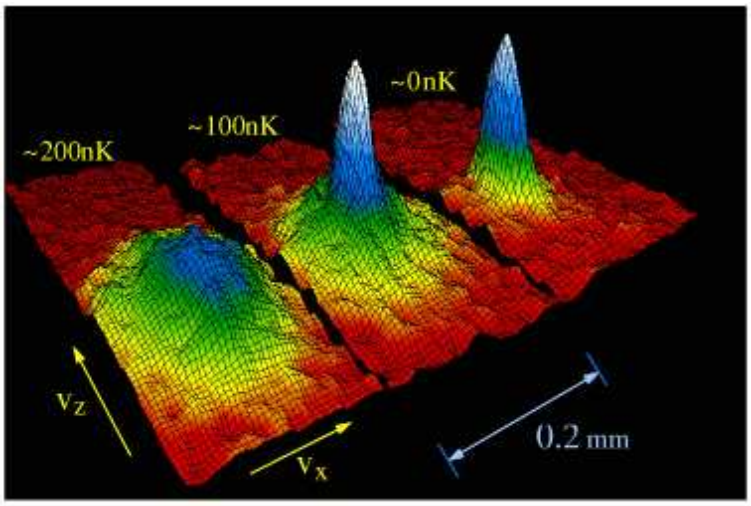

Figura 1.1: Distribuição de velocidades em 2-D para átomos de rubídio.

Nestas experiências o condensado está confinado numa armadilha magnética e consequentemente os graus de liberdade de spin estão inertes, isto é, todos os átomos estão no mesmo estado hiperfino, que é chamado de "low-field seeker" e são estados atraídos para o ponto de mínimo do campo magnético [5]. Por exemplo, nas experiências com ^{87}Rb e ^{23}Na os átomos estão no estado $|1, -1\rangle$. A figura (1.2) mostra as energias de diferentes estados hiperfinos de Zeeman como função do campo magnético.

Novos caminhos no estudo de gases atômicos ultra frios e diluídos se abriram quando em 1998 o grupo do MIT [6] e mais recentemente o grupo do Instituto Tecnológico da Geórgia

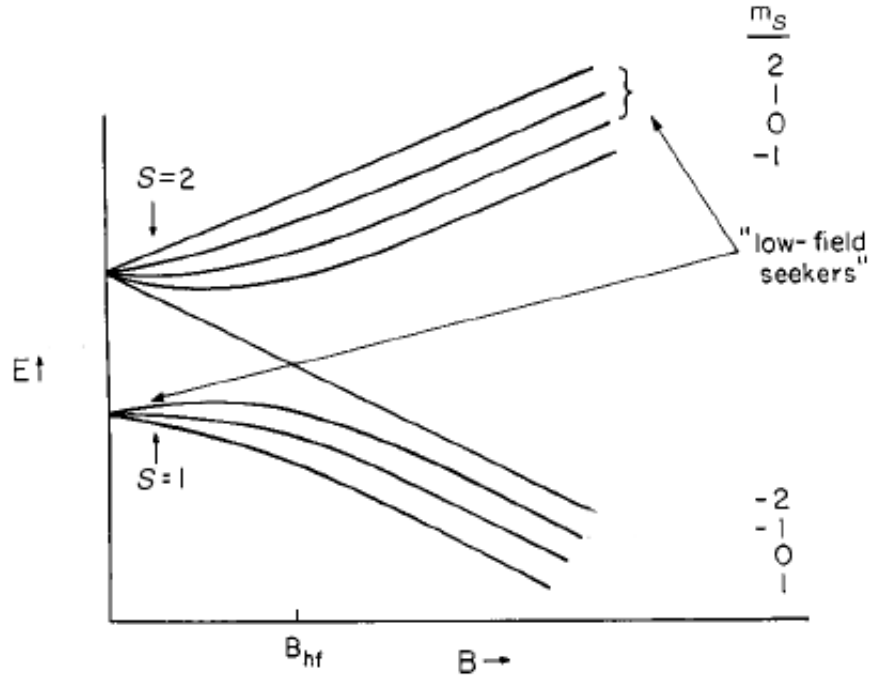

Figura 1.2: Energias de diferentes estados hiperfinos de Zeeman em função do campo magnético para $S = 1$ e $S = 2$.

[7] conseguiram aprisionar átomos de ^{23}Na e ^{87}Rb, respectivamente, por meios puramente ópticos.

Nesse caso, os graus de liberdade de spin estão ativos, os átomos podem se encontrar em qualquer subnível de um dado momento angular hiperfino, S, e os condensados devem ser descritos por um espinor de $(2S + 1)$ componentes. O mesmo método de medidas do tempo de vôo, usado na observação dos CBE escalares é utilizado para os CBE espinoriais, só que agora os átomos passam por um dispositivo de Stern-Gerlach para que as diversas projeções de spin se separem de modo que as quantidades observadas são as populações em cada subnível magnético.

Na grande maioria das experiências com ^{23}Na e ^{87}Rb, os átomos estão no estado hiperfino $S = 1$. No limite de baixas energias o termo de interação átomo-átomo é rotacionalmente invariante no espaço de spin e depende de dois parâmetros que são os comprimentos de espalhamento de onda **s** nos canais de spin total $F = 0$ e $F = 2$, denotados por a_0 e a_2.

Esse potencial de interação pode ser escrito como uma combinação de um termo independente do spin de intensidade $c_0 = \frac{(g_0+2g_2)}{3}$ e de um termo dependente do spin de intensidade

$c_2 = \frac{(g_2 - g_0)}{3}$, onde $g_i = \frac{4\pi\hbar^2 a_i}{M_A}$.

Como nas armadilhas ópticas o grau de liberdade de spin está liberado vários experimentos [8, 9, 10, 11, 12, 13] investigaram as propriedades dos condensados espinoriais na presença de um campo magnético uniforme. Nesse caso precisamos introduzir dois parâmetros importantes na hamiltoniana do sistema, que são as intensidades dos termos linear e quadrático da energia de Zeeman, usualmente denotados por p_z e q. A dependência desses parâmetros com a intensidade do campo magnético externo é:

$$p_Z = \frac{|\mu_B| B}{2} \text{ e } q = \frac{|\mu|_B^2 B^2}{4E_{HFS}}$$

onde $|\mu_B|$ é o magneton de Bohr e E_{HFS} é a diferença de energia entre os estados hiperfinos $S = 2$ e $S = 1$ na ausência do campo magnético. Os valores experimentais dos parâmetros a_0, a_2, c_0, c_2 e E_{HFS} para o ^{23}Na e ^{87}Rb são mostrados na tabela (**1.1**), encontrados na referência [14].

	^{87}Rb	^{23}Na
a_0	$5,5 \times 10^{-9} m$	$2,7 \times 10^{-9} m$
a_2	$5,4 \times 10^{-9} m$	$3 \times 10^{-9} m$
c_0	$7,8 \times 10^{-18} Hz.m^3$	$1,5 \times 10^{-17} Hz.m^3$
c_2	$-3,5 \times 10^{-20} Hz.m^3$	$4,8 \times 10^{-19} Hz.m^3$
E_{HFS}	$6,8 GHz$	$1,8 GHz$

Tabela 1.1: Valores típicos de parâmetros experimentais para os átomos de ^{87}Rb e ^{23}Na.

As propriedades dos condensados espinoriais dependem crucialmente das características magnéticas do sistema, ou seja, se o sistema é antiferromagnético, $c_2 > 0$, ou ferromagnético, $c_2 < 0$. Pela tabela (1.1) vemos que o ^{87}Rb é ferromagnético e o ^{23}Na é antiferromagnético, para $S = 1$. Os estados de menor energia em condensados ferromagnéticos têm seus spins todos alinhados de modo que a magnetização total do sistema é máxima. Já nos condensados antiferromagnéticos a configuração dos spins dos átomos é tal que a magnetização total do sistema é nula.

O avanço experimental que culminou na descoberta de condensados espinoriais abriu a oportunidade inédita de estudos experimentais e teóricos de condensados de multi-componentes. Do lado da experiência, o mesmo grupo do MIT que primeiramente os criou, demonstrou a formação de domínios de spin e o tunelamento quântico através destes domínios [13]. A

dinâmica com trocas de projeções de spin foi recentemente observada em CBE com $S = 1$ [10]. Começando com condensados ocupando dois subníveis hiperfinos, um condensado no terceiro subnível é criado, num processo coerente e reversível das colisões atômicas.

A dinâmica com trocas de projeções de spin foi recentemente observada tanto em CBE com $S = 1$ quanto com $S = 2$ para átomos de ^{87}Rb em [9] onde o tempo de equilíbrio para a mistura de spins foi determinado e oscilações das populações de spin foram observadas. Durante todo o processo de mistura das componentes do spin $S = 1$, observa-se que a magnetização permanece constante, igual a zero. Nesta referência mediu-se a relaxação de n_0 para o seu valor no estado de equilíbrio como função do campo magnético externo, os dados sendo compatíveis com o comportamento ferromagnético.

O tema relacionado com domínios de spin é investigado nas referências [8, 15]. Na referência [8] são observados os estados de equilíbrio num condensado espinorial com $S = 1$ do ^{23}Na na presença de um campo magnético externo. Verifica-se a formação de domínios de spin onde as diferentes orientações do spin podem ser miscíveis ou imiscíveis. A referência [15] sugere que modos instáveis de um sistema dinamicamente instável crescem exponencialmente e eventualmente isso leva ao aparecimento de domínios espaciais que sobrevivem por um longo tempo.

Efeitos relacionados com a dominância do termo quadrático da energia de Zeeman são observados na referência [11], tais como a supressão da dinâmica de spin e "dephasing".

Experimentos em condensados com $S = 2$ também foram realizados como na referência [12] que investiga a dinâmica de condensados de ^{87}Rb com $S = 2$ e observa um comportamento antiferromagnético para seu estado fundamental.

O mecanismo por trás de todos estes fenômenos observados experimentalmente é a interação coerente entre dois átomos que altera as projeções dos spins individuais destas partículas em colisão, preservando a magnetização total.

Do lado da teoria vários autores investigaram teoricamente as propriedades dos condensados espinoriais. Num condensado de uma componente os átomos ocupam o mesmo estado $\Psi(\vec{r}, t)$, a função de onda do condensado. Numa teoria de campo médio os estados de equilíbrio são determinados pela equação de Gross-Pitaevskii e as excitações coletivas pela

linearização da equação de Gross-Pitaevskii dependente do tempo na vizinhança dos estados de equilíbrio. No limite homogêneo, a equação de Gross-Pitaevskii para os estados de equilíbrio se reduz às equações de Bogoliubov e a linearização da equação de Gross-Pitaevskii dependente do tempo à equação de Bogoliubov-de Gennes.

Num condensado espinorial com $S = 1$ os átomos podem ocupar qualquer subnível hiperfino. Nesse caso, o estado do sistema é descrito por um espinor de três componentes, as funções de onda do condensado para cada subnível hiperfino, $\Psi_\alpha(\vec{r}, t)$ com $\alpha = 0, \pm 1$. Do mesmo modo que para uma componente, os estados de equilíbrio são determinados pelas equações de Gross-Pitaevskii, que são três equações acopladas, e as excitações coletivas pela linearização das equações de Gross-Pitaevskii dependentes do tempo, na vizinhança de uma configuração de equilíbrio. Do mesmo modo que para condensados de uma componente, no limite homogêneo, temos as mesmas correspondências com a teoria de Bogoliubov.

Os trabalhos pioneiros na análise dos estados de equilíbrio e das excitações coletivas dos condensados espinoriais são os das referências [16] e [17]. Os dois trabalhos usam teorias de campo médio (MFT) e, no limite homogêneo, a teoria de Bogoliubov, para determinar os estados de equilíbrio e as excitações coletivas na ausência de campo magnético no caso de [16] e na presença de campo magnético restrito ao termo linear no caso de [17]. Trabalhos recentes sobre esse tema são [14, 18, 19, 20].

Teorias puramente quânticas para descrever a dinâmica do spin foram desenvolvidas por Bigelow e colaboradores [21, 22] na chamada “Single Mode Approximation", SMA, onde se impõe que os átomos em diferentes estados hiperfinos têm a mesma função de onda espacial. Qualitativamente podemos supor que a dinâmica espacial e a de spin estão desacopladas se o "spin healing length", $\frac{h}{\sqrt{2m|c_2\rho|}}$, é maior que as dimensões do condensado.

Outro tema de estudos relacionado com condensados espinoriais é o da instabilidade dinâmica e formação de domínios em um CBE de spin 1, fundamentado na idéia da conservação da projeção do spin do sistema. Em um destes estudos [23] é considerado um CBE ferromagnético com spin 1 e inicialmente todos os átomos são preparados no subnível magnético $m = 0$. Devido à interação ferromagnética, espera-se que a magnetização cresça espontaneamente. Entretanto uma magnetização global é proibida já que a magnetização total se

conserva e deve permanecer nula. O que ocorre então é que o sistema desenvolve domínios magnéticos locais de vários tipos, que dependem da geometria do potencial confinante. Eles mostram que um CBE alongado no subnível magnético $m = 0$ é dinamicamente instável pela formação de domínios magnéticos nos quais as direções do spin em domínios adjacentes são opostas, de modo que a magnetização total continua zero.

Na tese realizamos um estudo sistemático das propriedades dos estados de equilíbrio, sua estabilidade e energias de excitação dos condensados espinoriais homogêneos com $S = 1$, na presença de um campo magnético uniforme, no contexto da teoria de Bogoliubov.

Em ambos os limites, ferromagnético e antiferromagnético mapeamos os estados de equilíbrio no plano $\frac{q}{|c_2\rho|} \times m$. Como função dessas duas grandezas determinamos o estado fundamental do condensado espinorial e a miscibilidade ou imiscibilidade das componentes do spin hiperfino dos átomos.

O nosso trabalho se diferencia dos demais [14, 16, 17] pelo fato de nós considerarmos explicitamente a conservação da magnetização e por isto podemos fazer um estudo detalhado das propriedades dos estados de equilíbrio que incorpora e extende trabalhos anteriores.

Um estudo sistemático das propriedades dos estados de equilíbrio é muito importante para entender vários fenômenos presentes em condensados espinoriais que dependem crucialmente do caráter ferromagnético ou antiferromagnético do sistema. Como exemplo podemos mencionar o estudo da coerência da dinâmica dos spins [24] e a formação de domínios [15, 23], entre outros. Além disso o exame do diagrama de fases do sistema sugere a ocorrência de transições de fase e colapso do condensado quando variamos $\frac{q}{|c_2\rho|}$ para uma magnetização fixa.

A tese está organizada do seguinte modo. No capítulo 2 discutimos a forma da hamiltoniana para um condensado espinorial homogêneo de spin hiperfino $S = 1$, na presença de um campo magnético uniforme. Dada a hamiltoniana deduzimos as equações de Gross-Pitaevskii que determinam o espinor dos estados de equilíbrio cujas componentes são as funções de onda do condensado para cada projeção do spin hiperfino.

Para cada estado de equilíbrio, achamos as equações de Bogoliubov-de Gennes para as excitações coletivas. Finalizamos este capítulo mostrando que como consequência da

conservação de número e da simetria axial no espaço de spin, sem perda de generalidade, podemos supor que o espinor dos estados de equilíbrio depende apenas de uma fase. No capítulo 3, resolvemos as equações de Gross-Pitaevskii e achamos os estados de equilíbrio para um dado valor do número de átomos e da magnetização. Examinamos a dependência dos estados de equilíbrio no parâmetro $\frac{q}{|c_2\rho|}$ para um dado valor da magnetização, m. No capítulo 4 calculamos o espectro das energias de excitação para cada estado de equilíbrio e analisamos sua estabilidade como função dos parâmetros $\frac{q}{|c_2\rho|}$ e m. Para um dado valor desses parâmetros verificamos que existe apenas um estado de equilíbrio que corresponde ao estado do sistema de menor energia para um valor fixo da magnetização e são classificados em diferentes fases de acordo com a miscibilidade das componentes $\alpha = 0$ e $\alpha = \pm 1$. Concluímos esse capítulo exibindo o diagrama de fases do sistema no plano $\frac{q}{|c_2\rho|} \times m$, no limite antiferromagnético e ferromagnético. As conclusões do trabalho são apresentadas no capítulo 5.

Capítulo 2

Condensado espinorial na presença de um campo magnético externo

2.1 Hamiltoniana na ausência de um campo magnético externo

A hamiltoniana de um condensado espinorial com $S = 1$, homogêneo, na ausência de um campo magnético externo é:

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \sum_{\alpha,\vec{k}} \epsilon_{\vec{k}} a^{\dagger}_{\alpha,\vec{k}} a_{\alpha,\vec{k}} + \frac{c_0}{2V} \sum_{\substack{\vec{k}_1,\vec{k}_2 \\ \vec{q},\alpha,\beta}} a^{\dagger}_{\alpha,\vec{k}_1+\vec{q}} a^{\dagger}_{\beta,\vec{k}_2-\vec{q}} a_{\beta,\vec{k}_2} a_{\alpha,\vec{k}_1} \\ &+ \frac{c_2}{2V} \sum_{\substack{\vec{k}_1,\vec{k}_2 \\ \vec{q},\alpha,\beta \\ \alpha',\beta'}} \langle\alpha|\vec{S}|\alpha'\rangle \cdot \langle\beta|\vec{S}|\beta'\rangle a^{\dagger}_{\alpha,\vec{k}_1+\vec{q}} a^{\dagger}_{\beta,\vec{k}_2-\vec{q}} a_{\beta',\vec{k}_2} a_{\alpha',\vec{k}_1} \end{aligned} \tag{2.1}$$

O operador $a^{\dagger}_{\alpha,\vec{k}}$ cria um átomo com momento $\vec{k}$ no estado hiperfino α onde $\alpha = -1, 0, 1$, e $\epsilon_{\vec{k}} = \frac{\hbar^2\vec{k}^2}{2m}$. O potencial de interação dos átomos está escrito na base de auto-estados do operador momento e da projeção do spin, S_z, $|\vec{k},\alpha\rangle = |\vec{k}\rangle \otimes |\alpha\rangle$, satisfazendo condições de contorno periódicas num cubo de lado L.

O termo do potencial está separado em uma parte independente do spin e outra de-

pendente do spin dos átomos. Para chegar a este ponto partimos da interação para um condensado espinorial com $S = 1$ que é:

$$\begin{aligned}
\hat{V}(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) &= \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \sum_{F=0,2} g_F P_F \\
g_F &= \frac{4\pi\hbar^2 a_F}{M_A}
\end{aligned}$$

onde M_A é a massa do átomo, P_F é o operador de projeção que projeta o par 1 e 2 no estado de spin hiperfino total F e a_F é o comprimento de espalhamento de onda s do canal de spin total F.

Este termo representa uma interação efetiva, de contato, que só pode ser usada em um gás frio e diluído, pois nesse limite não ocorre recombinação e as colisões binárias a energias baixas são caracterizadas por apenas um parâmetro, o comprimento de espalhamento de onda s, independentemente dos detalhes do potencial de dois corpos.

Este potencial pode então ser escrito como:

$$V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) = \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)(g_2 P_2 + g_0 P_0)$$

Os operadores de projeção podem ser escritos em termos dos momentos angulares hiperfinos dos átomos do par usando as relações (2.2) [16], lembrando que S_i está definido em unidades de $\hbar$:

$$\begin{aligned}
\vec{S}(1) \cdot \vec{S}(2) &= \sum_{F=0}^{2f} \lambda_F P_F \\
\lambda_F &= \frac{1}{2}\left[F(F+1) - 2f(f+1)\right]
\end{aligned} \tag{2.2}$$

que nos leva a

$$\vec{S}(1)\cdot\vec{S}(2) \;=\; P_2 - P_1 - 2P_0$$

mais a relação de completeza [16]

$$\hat{1} \;=\; P_0 + P_1 + P_2$$

de modo que o potencial é dado por:

$$V(1,2) \;=\; \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)(c_0 + c_2\vec{S}(1)\cdot\vec{S}(2))$$

pois o termo que depende de P_1 não contribui para o elemento de matriz pois o estado com $F = 1$ é antisimétrico. Assim os termos c_0 e c_2 são:

$$\begin{aligned} c_0 &= \frac{g_0 + 2g_2}{3} \\ c_2 &= \frac{g_2 - g_0}{3} \end{aligned}$$

E dessa forma chegamos na hamiltoniana como escrita em (2.1).

2.2 Hamiltoniana na presença de um campo magnético externo

Vamos incluir agora um campo externo que vai quebrar a degenerescência dos níveis hiperfinos [8]:

$$\hat{U}_{ext} = \sum_i E_+ P_+(i) + E_- P_-(i) + E_0 P_0(i) \tag{2.3}$$

Escrevendo os projetores em termos do operador $\hat{S}_z$:

$$\begin{aligned} P_- &= \frac{\hat{S}_z^2 - \hat{S}_z}{2} \\ P_+ &= \frac{\hat{S}_z^2 + \hat{S}_z}{2} \end{aligned} \tag{2.4}$$

Deixando o campo externo escrito apenas em função dos projetores P_+ e P_-, pois $P_+ + P_- + P_0 = 1$:

$$\hat{U}_{ext} = E_0 \hat{1} + \sum_i (E_+ - E_0) P_+(i) + (E_- - E_0) P_-(i) \tag{2.5}$$

Finalmente, em função do operador $\hat{S}_z$:

$$\hat{U}_{ext} = E_0 \hat{1} - p_Z \sum_i \hat{S}_z(i) + q \sum_i \hat{S}_z^2(i) \tag{2.6}$$

onde [8]:

$$\begin{aligned} p_Z &= \frac{E_- - E_+}{2} \\ q &= \frac{E_+ + E_- - 2E_0}{2} \end{aligned} \tag{2.7}$$

A hamiltoniana na presença de um campo magnético fica portanto:

$$
\begin{aligned}
\hat{H} &= \sum_{\alpha,\vec{k}} \epsilon_{\vec{k}} a^{\dagger}_{\alpha,\vec{k}} a_{\alpha,\vec{k}} - p_Z \sum_{\alpha,\vec{k}} \langle\alpha|\hat{S}_z|\alpha\rangle a^{\dagger}_{\alpha,\vec{k}} a_{\alpha,\vec{k}} + q \sum_{\alpha,\vec{k}} \langle\alpha|\hat{S}_z^2|\alpha\rangle a^{\dagger}_{\alpha,\vec{k}} a_{\alpha,\vec{k}} \\
&+ \frac{c_0}{2V} \sum_{\substack{\vec{k}_1,\vec{k}_2 \\ \vec{q},\alpha,\beta}} a^{\dagger}_{\alpha,\vec{k}_1+\vec{q}} a^{\dagger}_{\beta,\vec{k}_2-\vec{q}} a_{\beta,\vec{k}_2} a_{\alpha,\vec{k}_1} \\
&+ \frac{c_2}{2V} \sum_{\substack{\vec{k}_1,\vec{k}_2 \\ \vec{q},\alpha,\beta \\ \alpha',\beta'}} \langle\alpha|\vec{S}|\alpha'\rangle \cdot \langle\beta|\vec{S}|\beta'\rangle a^{\dagger}_{\alpha,\vec{k}_1+\vec{q}} a^{\dagger}_{\beta,\vec{k}_2-\vec{q}} a_{\beta',\vec{k}_2} a_{\alpha',\vec{k}_1}
\end{aligned} \tag{2.8}
$$

2.3 Teoria de Bogoliubov

Na teoria de Bogoliubov, para encontrarmos os estados de equilíbrio fazemos um deslocamento dos operadores $a_{\alpha,\vec{k}}$ e $a^{\dagger}_{\alpha,\vec{k}}$ da seguinte maneira:

$$
a_{\alpha,\vec{k}} = z_\alpha \delta_{\vec{k},0} + c_{\alpha,\vec{k}} \tag{2.9}
$$

$$
a^{\dagger}_{\alpha,\vec{k}} = z^*_\alpha \delta_{\vec{k},0} + c^{\dagger}_{\alpha,\vec{k}} \tag{2.10}
$$

Neste deslocamento z_α representa a função de onda do condensado, ou seja, a função de onda dos átomos que estão com momento zero e no estado hiperfino α, e o segundo termo leva em conta os átomos fora do condensado.

Ao substituirmos estes operadores deslocados na hamiltoniana do sistema podemos escrevê-la separando-a em um termo independente dos operadores $c^{\dagger}_{\alpha,\vec{k}}$ e $c_{\alpha,\vec{k}}$, um termo linear nestes operadores, um termo quadrático, um cúbico e um quártico nestes mesmos operadores.

A aproximação de Bogoliubov viola a conservação do número de átomos e a conservação de $\hat{S}_z$. Precisamos então usar dois parâmetros de vínculo μ e p_L para manter fixos o número de partículas e a magnetização, respectivamente, magnetização esta que é dada pelo valor médio de $\hat{S}_z$. A hamiltoniana fica escrita como:

$$
\hat{h} = \hat{H} - \mu\hat{N} - p_L\hat{S}_z = \hat{H}_0 + \hat{H}_1 + \hat{H}_2 + \hat{H}_3 + \hat{H}_4
$$

onde termos do lado direito da equação estão escritos em ordem normal e seus índices representam a dependência destes termos no número de operadores $c_{\alpha,\vec{k}}$ e $c^{\dagger}_{\alpha,\vec{k}}$. Na teoria de Bogoliubov o estado fundamental é o vácuo dos operadores deslocados. Então, no cálculo do valor médio o único termo que contribui é o termo independente dos operadores deslocados, H_0. Nestas configurações de equilíbrio o termo linearmente dependente dos operadores $c^{\dagger}_{\alpha,\vec{k}}$ e $c_{\alpha,\vec{k}}$ é nulo, e o termo quadrático diagonalizado, nos dará as energias de excitação do sistema para cada solução de equilíbrio.

2.4 Configurações de Equilíbrio

A componente da hamiltoniana, $\hat{H}_0$, independente dos operadores $c^{\dagger}_{\alpha,\vec{k}}$ e $c_{\alpha,\vec{k}}$ é:

$$\begin{aligned}\hat{H}_0 &= -\sum_{\alpha}\mu|z_\alpha|^2 - p\sum_{\alpha}\langle\alpha|\hat{S}_z|\alpha\rangle|z_\alpha|^2 + q\sum_{\alpha}\langle\alpha|\hat{S}_z^2|\alpha\rangle|z_\alpha|^2 \\ &+ \frac{c_0}{2V}\sum_{\alpha,\beta}|z_\alpha|^2|z_\beta|^2 + \frac{c_2}{2V}\sum_{\substack{\alpha,\alpha'\\ \beta,\beta'}}\langle\alpha|\vec{S}|\alpha'\rangle\cdot\langle\beta|\vec{S}|\beta'\rangle z^*_\alpha z^*_\beta z_{\beta'} z_{\alpha'}\end{aligned} \tag{2.11}$$

onde $p = p_L + p_Z$.

Com isso, escrevendo explicitamente $\hat{H}_0$ em termos das funções de onda do condensado z_0, z_1 e z_{-1}, teremos:

$$\begin{aligned}\hat{H}_0 &= -\mu\left(|z_1|^2 + |z_0|^2| + |z_{-1}|^2\right) - p\left(|z_1|^2 - |z_{-1}|^2\right) + q\left(|z_1|^2 + |z_{-1}|^2\right) \\ &+ \frac{c_0}{2V}\left(|z_1|^2 + |z_0|^2 + |z_{-1}|^2\right)^2 + \frac{c_2}{2V}\Big[\left(|z_1|^2 - |z_{-1}|^2\right)^2 \\ &+ 2(z_0^*)^2 z_{-1}z_1 + 2z_1^* z_{-1}^*(z_0)^2 + 2|z_0|^2|z_{-1}|^2 + 2|z_0|^2|z_1|^2\Big]\end{aligned} \tag{2.12}$$

Como $\hat{S}_z$ se conserva, na colisão binária a projeção do spin total no estado inicial e no estado final são iguais. Como consequência desta conservação os únicos termos que misturam a população dos níveis hiperfinos envolvem a colisão de dois átomos com projeções iguais a $m_1 = 0$ e $m_2 = 0$, resultando num par de estados com projeções $m_1 = 1$ e $m_2 = -1$, e

vice-versa. Na equação (2.12) este mecanismo está representado pelos termos $2(z_0^*)^2 z_{-1} z_1$ e seu complexo conjugado. A figura (2.1) mostra estas colisões.

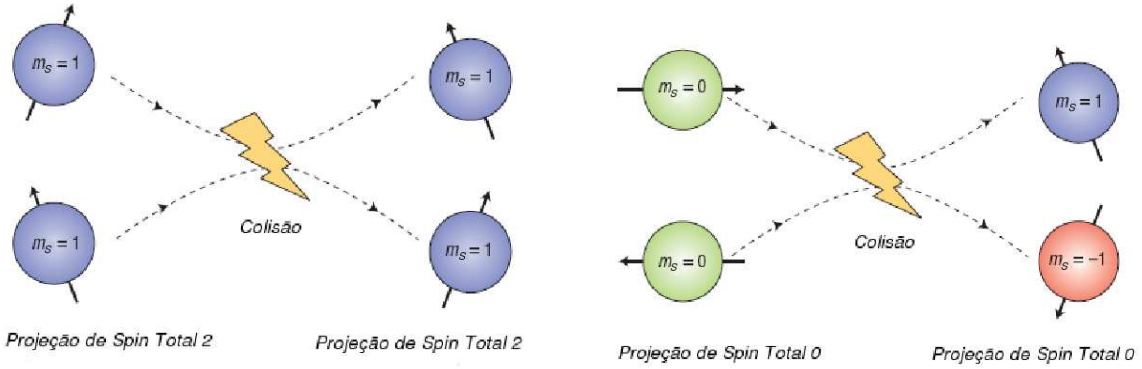

Figura 2.1: Interações dependentes do spin que ocorrem no condensado. Note que apenas a da direita mistura a população dos níveis hiperfinos.

Os estados de equilíbrio são estados onde $\hat{H}_0$ é estacionária. Fazendo as derivadas em relação aos z_α teremos as seguintes equações que nos darão as configurações de equilíbrio:

$$\begin{aligned} & -\mu z_0^* + \tfrac{c_0}{V} z_0^* \left(|z_1|^2 + |z_0|^2 + |z_{-1}|^2\right) + \\ + \quad & \tfrac{c_2}{V} \left(2 z_1^* z_{-1}^* z_0 + z_0^* |z_{-1}|^2 + z_0^* |z_1|^2\right) \qquad = 0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & -\mu z_1^* + (q-p)\, z_1^* + \tfrac{c_0}{V} z_1^* \left(|z_1|^2 + |z_0|^2 + |z_{-1}|^2\right) + \\ + \quad & \tfrac{c_2}{V} \left[z_1^* \left(|z_1|^2 - |z_{-1}|^2\right) + |z_0|^2 z_1^* + z_{-1} (z_0^*)^2\right] \qquad = 0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & -\mu z_{-1}^* + (q+p)\, z_{-1}^* + \tfrac{c_0}{V} z_{-1}^* \left(|z_1|^2 + |z_0|^2 + |z_{-1}|^2\right) + \\ + \quad & \tfrac{c_2}{V} \left[z_{-1}^* \left(|z_{-1}|^2 - |z_1|^2\right) + |z_0|^2 z_{-1}^* + z_1 (z_0^*)^2\right] \qquad = 0 \end{aligned} \tag{2.13}$$

e mais as condições subsidiárias:

$$|z_0|^2 + |z_1|^2 + |z_{-1}|^2 = N \tag{2.14}$$

$$|z_1|^2 - |z_{-1}|^2 = M \tag{2.15}$$

onde M é a magnetização do condensado.

Escrevendo as funções de onda do condensado como:

$$z_\alpha = \sqrt{N_\alpha} e^{-i\theta_\alpha} = \sqrt{N n_\alpha} e^{-i\theta_\alpha} \tag{2.16}$$

onde n_α é a fração de átomos no estado hiperfino α, e substituindo estas funções de onda nas equações (2.13) que agora serão escritas, com as partes real e imagiária separadas, como:

$$\begin{aligned} -\mu\sqrt{n_0} + c_0\rho\sqrt{n_0} + & \\ +c_2\rho\sqrt{n_0}\,[2\sqrt{n_1 n_{-1}} cos(2\theta_0 - \theta_1 - \theta_{-1}) + n_{-1} + n_1] &= 0 \\ \sqrt{n_0 n_1 n_{-1}} sen(2\theta_0 - \theta_1 - \theta_{-1}) &= 0 \end{aligned} \tag{2.17}$$

$$\begin{aligned} -\mu\sqrt{n_1} + (q-p)\sqrt{n_1} + c_0\rho\sqrt{n_1} + & \\ +c_2\rho\,[\sqrt{n_1}(n_1 - n_{-1} + n_0) + n_0\sqrt{n_{-1}} cos(2\theta_0 - \theta_1 - \theta_{-1})] &= 0 \\ n_0\sqrt{n_{-1}} sen(2\theta_0 - \theta_1 - \theta_{-1}) &= 0 \end{aligned} \tag{2.18}$$

$$\begin{aligned} -\mu\sqrt{n_{-1}} + (q+p)\sqrt{n_{-1}} + c_0\rho\sqrt{n_{-1}} + & \\ +c_2\rho\,[\sqrt{n_{-1}}(n_{-1} - n_1 + n_0) + n_0\sqrt{n_1} cos(2\theta_0 - \theta_1 - \theta_{-1})] &= 0 \\ n_0\sqrt{n_1} sen(2\theta_0 - \theta_1 - \theta_{-1}) &= 0 \end{aligned} \tag{2.19}$$

$$n_0 + n_1 + n_{-1} = 1 \tag{2.20}$$

$$n_1 - n_{-1} = m \tag{2.21}$$

onde $\rho = \frac{N}{V}$ e $n_\alpha = \frac{N_\alpha}{N}$ são respectivamente a densidade do condensado e as frações dos átomos em cada estado hiperfino e m é a magnetização por átomo do condensado.

As soluções destas equações determinam as configurações de equilíbrio para um dado número de átomos e magnetização.

2.5 Espectro de energias de excitação

Para encontrarmos os espectros de excitação das configurações de equilíbrio é preciso diagonalizar o termo $\hat{H}_2$ que é da seguinte forma:

$$\begin{aligned}
\hat{H}_2 &= \sum_{\alpha,\beta,\vec{k}} \Bigg\{ \left[\epsilon_{\vec{k}} - \mu + q\langle\alpha|\hat{S}_z^2|\alpha\rangle - p\langle\alpha|\hat{S}_z|\alpha\rangle + \frac{c_0}{V}\sum_{\eta}|z_\eta|^2 \right] \delta_{\alpha\beta} + \frac{c_0}{V} z_\alpha z_\beta^* + \\
&+ \frac{c_2}{V}\sum_{\eta,\eta'} \left[\langle\eta|\vec{S}|\beta\rangle \cdot \langle\alpha|\vec{S}|\eta'\rangle z_\eta^* z_{\eta'} + \langle\eta|\vec{S}|\eta'\rangle \cdot \langle\alpha|\vec{S}|\beta\rangle z_\eta^* z_{\eta'} \right] \Bigg\} c^\dagger_{\alpha,\vec{k}} c_{\beta,\vec{k}} + \\
&+ \frac{1}{2}\sum_{\alpha.\beta,\vec{k}} \left[\frac{c_0}{V} z_\alpha z_\beta + \frac{c_2}{V}\sum_{\eta,\eta'} \langle\alpha|\vec{S}|\eta\rangle \cdot \langle\beta|\vec{S}|\eta'\rangle z_\eta z_{\eta'} \right] c^\dagger_{\alpha,\vec{k}} c^\dagger_{\beta,-\vec{k}} + \\
&+ \frac{1}{2}\sum_{\alpha.\beta,\vec{k}} \left[\frac{c_0}{V} z_\alpha^* z_\beta^* + \frac{c_2}{V}\sum_{\eta,\eta'} \langle\eta|\vec{S}|\alpha\rangle \cdot \langle\eta'|\vec{S}|\beta\rangle z_\eta^* z_{\eta'}^* \right] c_{\alpha,\vec{k}} c_{\beta,-\vec{k}}
\end{aligned}$$

E pode ser escrito como:

$$\begin{aligned}
\hat{H}_2 &= \sum_{\alpha,\beta,\vec{k}} h_{\alpha\beta}(\vec{k}) c^\dagger_{\alpha,\vec{k}} c_{\beta,\vec{k}} + \frac{1}{2}\sum_{\alpha,\beta,\vec{k}} \Delta_{\alpha\beta}(\vec{k}) c^\dagger_{\alpha,\vec{k}} c^\dagger_{\beta,-\vec{k}} \\
&+ \frac{1}{2}\sum_{\alpha,\beta,\vec{k}} \Delta^*_{\alpha\beta}(\vec{k}) c_{\alpha,\vec{k}} c_{\beta,-\vec{k}}
\end{aligned}$$

onde os índices $\alpha, \beta = 1, 0, -1$, referem-se às projeções do spin hiperfino $S = 1$.

A matriz $h_{\alpha\beta}$ é hermitiana e $\Delta_{\alpha\beta}$ é simétrica. Seus elementos são dados por:

$$
\begin{aligned}
h_{11} &= \epsilon_k - \mu + q - p + \frac{c_0}{V}\left(2|z_1|^2 + |z_0|^2 + |z_{-1}|^2\right) + \frac{c_2}{V}\left(2|z_1|^2 - |z_{-1}|^2 + |z_0|^2\right) \\
h_{10} = h_{01}^* &= \frac{c_0}{V} z_0^* z_1 + \frac{c_2}{V}\left(2 z_{-1}^* z_0 + z_1 z_0^*\right) \\
h_{1-1} = h_{-11}^* &= z_{-1}^* z_1 \frac{(c_0 - c_2)}{V} \\
h_{00} &= \epsilon_k - \mu + \frac{c_0}{V}\left(2|z_0|^2 + |z_1|^2 + |z_{-1}|^2\right) + \frac{c_2}{V}\left(|z_1|^2 + |z_{-1}|^2\right) \\
h_{0-1} = h_{-10}^* &= \frac{c_0}{V} z_0 z_{-1}^* + \frac{c_2}{V}\left(2 z_0^* z_1 + z_{-1}^* z_0\right) \\
h_{-1-1} &= \epsilon_k - \mu + q + p + \frac{c_0}{V}\left(2|z_{-1}|^2 + |z_0|^2 + |z_{+1}|^2\right) + \frac{c_2}{V}\left(2|z_{-1}|^2 - |z_1|^2 + |z_0|^2\right)
\end{aligned}
$$

e os $\Delta_{\alpha\beta}$ são dados por:

$$
\begin{aligned}
\Delta_{11} &= (z_1)^2 \frac{(c_0 + c_2)}{V} \\
\Delta_{10} = \Delta_{01} &= z_0 z_1 \frac{(c_0 + c_2)}{V} \\
\Delta_{1-1} = \Delta_{-11} &= \frac{c_0}{V} z_1 z_{-1} + \frac{c_2}{V}\left((z_0)^2 - z_1 z_{-1}\right) \\
\Delta_{00} &= \frac{c_0}{V}(z_0)^2 + 2\frac{c_2}{V} z_1 z_{-1} \\
\Delta_{0-1} = \Delta_{-10} &= z_0 z_{-1} \frac{(c_0 + c_2)}{V} \\
\Delta_{-1-1} &= (z_{-1})^2 \frac{(c_0 + c_2)}{V}
\end{aligned}
$$

As excitações do sistema são determinadas pela diagonalização de $\hat{H}_2$ que faremos através da seguinte transformação de Bogoliubov

$$
c_{\alpha,\vec{k}} = \sum_{\lambda} u_{\alpha\lambda} b_{\lambda,\vec{k}} + v_{\alpha\lambda}^* b_{\lambda,-\vec{k}}^{\dagger}
$$

Impondo que essa transformação diagonaliza H_2 chegamos às equações de Bogoliubov-de Gennes para as energias e as componentes das excitações coletivas

$$
\begin{aligned}
\sum_{\beta} h_{\alpha\beta} u_{\beta\lambda} + \Delta_{\alpha\beta} v_{\beta\lambda} &= E_{\lambda} u_{\alpha\lambda} \\
\sum_{\beta} \Delta^{*}_{\alpha\beta} u_{\beta\lambda} + h^{*}_{\alpha\beta} v_{\beta\lambda} &= -E_{\lambda} v_{\alpha\lambda}
\end{aligned}
\tag{2.22}
$$

que, escritas na forma matricial, são:

$$
\begin{pmatrix} h & \Delta \\ \Delta^{*} & h^{*} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = E\eta \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}
\tag{2.23}
$$

onde os blocos h e Δ são 3x3, definidos acima, e a matriz η é:

$$
\eta = \begin{pmatrix} \mathbb{I} & 0 \\ 0 & -\mathbb{I} \end{pmatrix}
\tag{2.24}
$$

sendo $\mathbb{I}$ a matriz identidade 3x3.

2.6 Invariâncias das equações de Bogoliubov e de Bogoliubov-de Gennes

A hamiltoniana (2.12) conserva o número de átomos e é axialmente simétrica no espaço de spin, por consequência as equações de Bogoliubov para as excitações (2.22) assim como as equações para os estados de equilíbrio (2.13) são invariantes por transformações de *"gauge"*, U(1), e por rotações na direção axial, identificada com a direção do campo magnético, no espaço de spin, SO(2). Com isso podemos mostrar que os estados dependem apenas de uma particular combinação das fases e assim, sem perda de generalidade, simplificar nosso problema.

2.6.1 Invariância por uma fase global

A transformação:

$$z_\alpha = e^{-i\Theta}\bar{z}_\alpha$$

deixa as equações (2.13) invariantes. Por sua vez $h_{\alpha\beta}$ e $\Delta_{\alpha\beta}$ se transformam simultaneamente como :

$$\begin{aligned} h_{\alpha\beta}(\mathbf{z},\mathbf{z}^*) &= h_{\alpha\beta}(\bar{\mathbf{z}},\bar{\mathbf{z}}^*) \\ \Delta_{\alpha\beta}(\mathbf{z},\mathbf{z}^*) &= e^{-2i\Theta}\Delta_{\alpha\beta}(\bar{\mathbf{z}},\bar{\mathbf{z}}^*) \end{aligned}$$

o que nos mostra que as equações (2.22), frente a esta transformação, também permanecem covariantes se os u e v se transformarem como:

$$\begin{aligned} \bar{u}_{\beta\lambda} &= e^{i\Theta}u_{\beta\lambda} \\ \bar{v}_{\beta\lambda} &= e^{-i\Theta}v_{\beta\lambda} \end{aligned}$$

Ou seja, as equações de Bogoliubov são invariantes pela seguinte transformação:

$$U = \begin{pmatrix} e^{i\Theta}\mathbb{I} & 0 \\ 0 & e^{-i\Theta}\mathbb{I} \end{pmatrix}$$

Mostramos isto aplicando esta transformação nas equações (2.23) e (2.24) e notando que U comuta com a matriz η encontramos:

$$U \begin{pmatrix} h(\mathbf{z},\mathbf{z}^*) & \Delta(\mathbf{z},\mathbf{z}^*) \\ \Delta^*(\mathbf{z},\mathbf{z}^*) & h^*(\mathbf{z},\mathbf{z}^*) \end{pmatrix} U^\dagger U \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = E\eta U \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}$$

que é igual a:

$$\begin{pmatrix} h(\bar{\mathbf{z}},\bar{\mathbf{z}}^*) & \Delta(\bar{\mathbf{z}},\bar{\mathbf{z}}^*) \\ \Delta^*(\bar{\mathbf{z}},\bar{\mathbf{z}}^*) & h^*(\bar{\mathbf{z}},\bar{\mathbf{z}}^*) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \bar{u} \\ \bar{v} \end{pmatrix} = E\eta \begin{pmatrix} \bar{u} \\ \bar{v} \end{pmatrix}$$

2.6.2 Invariância pela transformação SO(2) no espaço de spin

Fazendo a seguinte transformação:

$$z_\alpha = e^{-i\alpha\chi}\bar{z}_\alpha$$

Vemos que as equações (2.13) permanecem invariantes frente a esta transformação e através das equações (2.22):

$$\begin{aligned} h_{\alpha\beta}(\mathbf{z},\mathbf{z}^*) &= e^{-i(\alpha-\beta)\chi} h_{\alpha\beta}(\bar{\mathbf{z}},\bar{\mathbf{z}}^*) \\ \Delta_{\alpha\beta}(\mathbf{z},\mathbf{z}^*) &= e^{-i(\alpha+\beta)\chi} \Delta_{\alpha\beta}(\bar{\mathbf{z}},\bar{\mathbf{z}}^*) \end{aligned}$$

Novamente, as equações de Bogoliubov (2.22), permanecem invariantes se u e v se transformamarem como:

$$\begin{aligned} \bar{u}_{\beta\lambda} &= e^{i\beta\chi} u_{\beta\lambda} \\ \bar{v}_{\beta\lambda} &= e^{-i\beta\chi} v_{\beta\lambda} \end{aligned}$$

Ou seja, as equações de Bogoliubov permanecem invariantes pela seguinte transformação:

$$U = \begin{pmatrix} e^{i\chi} & 0 & 0 & & & \\ 0 & 1 & 0 & & 0 & \\ 0 & 0 & e^{-i\chi} & & & \\ & & & e^{-i\chi} & 0 & 0 \\ & 0 & & 0 & 1 & 0 \\ & & & 0 & 0 & e^{i\chi} \end{pmatrix}$$

Aplicando a transformação nas equações originais e notando que U comuta com a matriz η, valem as mesmas relações mostradas no item anterior. Com isso podemos eliminar mais uma fase do problema.

2.7 Estrutura do spinor das funções de onda do condensado

Levando em consideração as conservações de número e da magnetização discutidas anteriormente podemos mostrar que o spinor das funções de onda do condensado depende apenas de uma fase.

O spinor das funções de onda do condensado com $S = 1$ é:

$$\chi(\mathbf{z}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \begin{pmatrix} z_1 \\ z_0 \\ z_{-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{-i\theta_1}\sqrt{n_1} \\ e^{-i\theta_0}\sqrt{n_0} \\ e^{-i\theta_{-1}}\sqrt{n_{-1}} \end{pmatrix}$$

Podemos reescrever o spinor como:

$$\frac{1}{\sqrt{N}}\begin{pmatrix} z_1 \\ z_0 \\ z_{-1} \end{pmatrix} = e^{-i\left(\frac{\theta_1+\theta_{-1}}{2}\right)}\begin{pmatrix} e^{-i\left(\frac{\theta_1-\theta_{-1}}{2}\right)}\sqrt{n_1} \\ e^{-i\left[\theta_0-\left(\frac{\theta_1+\theta_{-1}}{2}\right)\right]}\sqrt{n_0} \\ e^{i\left(\frac{\theta_1-\theta_{-1}}{2}\right)}\sqrt{n_{-1}} \end{pmatrix}$$

Vemos que fazendo $\Theta = \left(\frac{\theta_1+\theta_{-1}}{2}\right)$ e $\chi = \left(\frac{\theta_1-\theta_{-1}}{2}\right)$ o spinor pode ser escrito como função apenas da fase $\bar{\theta}_2 = \theta_0 - \frac{(\theta_1+\theta_{-1})}{2}$ e portanto concluímos que, sem perda de generalidade, podemos escrever o spinor como:

$$\chi(\mathbf{z}) = \frac{1}{\sqrt{N}}\begin{pmatrix} z_1 \\ z_0 \\ z_{-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sqrt{n_1} \\ e^{-i\bar{\theta}_2}\sqrt{n_0} \\ \sqrt{n_{-1}} \end{pmatrix}$$

2.8 Modo de energia zero

Nesta seção vamos mostrar no caso específico da tese como surge a relação entre a quebra de uma simetria contínua e a existência de um modo de energia zero.

Seja $\hat{U}(\lambda)$ uma transformação unitária que depende de um parâmetro contínuo, λ, que deixa a hamiltoniana grand-canônica, $\hat{h}$, invariante,

$$\hat{U}^\dagger(\lambda)\hat{h}\hat{U}(\lambda) = \hat{h}$$

e tal que

$$\hat{U}(\lambda)|\vec{z}\rangle = e^{i\phi(\vec{z},\lambda)}|\vec{\eta}(\vec{z},\lambda)\rangle, \text{ com } \vec{\eta}(\vec{z},0) = \vec{z}$$

onde $|\vec{z}\rangle$ é o estado coerente,

$$|\vec{z}\rangle = e^{\sum_\lambda z_\lambda a^\dagger_{\lambda 0} - z^*_\lambda a_{\lambda 0}}|0\rangle.$$

Nesse caso a quebra de simetria contínua está no fato dos estados coerentes, $|\vec{z}\rangle$ e $|\vec{\eta}(\vec{z},\lambda)\rangle$ serem estados diferentes.

Dadas as propriedades acima mostra-se facilmente que o funcional $\epsilon(\vec{z},\vec{z}^*)$,

$$\epsilon(\vec{z},\vec{z}^*) \quad = \quad \langle\vec{z}|\hat{h}|\vec{z}^*\rangle$$

é invariante por esta transformação

$$\epsilon(\vec{z},\vec{z}^*) \quad = \quad \epsilon(\vec{\eta}(\vec{z},\lambda),\vec{\eta}^*(\vec{z},\lambda))$$

pois

$$\langle\vec{z}|\hat{h}|\vec{z}\rangle = \langle\vec{z}|\hat{U}^\dagger(\lambda)\hat{h}\hat{U}(\lambda)|\vec{z}\rangle = \langle\vec{\eta}(\vec{z},\lambda)|\hat{h}|\vec{\eta}(\vec{z},\lambda)\rangle$$

Como consequência dessa invariância, se $\vec{z}_0$ é um ponto estacionário do funcional $\epsilon(\vec{z},\vec{z}^*)$ então $\left(\frac{\partial\eta_1(\vec{z}_0,0)}{\partial\lambda},\frac{\partial\eta_0(\vec{z}_0,0)}{\partial\lambda},\frac{\partial\eta_{-1}(\vec{z}_0,0)}{\partial\lambda},\frac{\partial\eta_1^*(\vec{z}_0,0)}{\partial\lambda},\frac{\partial\eta_0^*(\vec{z}_0,0)}{\partial\lambda},\frac{\partial\eta_{-1}^*(\vec{z}_0,0)}{\partial\lambda}\right)^T$ é um autovetor de (2.22) com autovalor nulo.

No nosso caso as invariâncias quebradas são a conservação do número de átomos e da projeção do spin total na direção axial, $S_z = \sum_i S_z(i)$.

No caso da conservação do número de átomos,

$$U(\theta) \quad = \quad e^{-i\theta\hat{N}}$$

e sua ação no estado coerente resulta na transformação

$$\eta_\alpha = e^{-i\theta}z_\alpha \ , \ \alpha = 1, 0, -1.$$

Desse modo $(z_{01}, z_{00}, z_{0-1}, -z_{01}^*, -z_{00}^*, -z_{0-1}^*)^T$ é um autovetor (2.22) com autovalor nulo.

Já no caso da simetria axial, o operador é

$$\hat{U}(\theta) \quad = \quad e^{-i\theta\hat{S}_z}$$

e sua ação no estado coerente resulta na transformação

$$\eta_\alpha \quad = \quad e^{-i\alpha\theta} z_\alpha$$

e consequentemente o vetor $(z_{01}, 0, -z_{0-1}, -z_{01}^*, 0, z_{0-1}^*)^T$ é um autovetor com autovalor nulo.

Capítulo 3

Configurações de equilíbrio

As configurações de equilíbrio para o sistema homogêneo de átomos com $s = 1$ serão determinadas pelas soluções das equações (2.17-2.21) deduzidas no capítulo anterior. A notação utilizada na apresentação das configurações de equilíbrio segue a seguinte convenção. Soluções com magnetização diferente de zero são identificadas pela letra **a** enquanto que as soluções com magnetização igual a zero são identificadas pela letra **b**. Os índices **1** e **2** denotam as soluções com fases determinadas $cos2\bar{\theta}_2 = 1$ e $cos2\bar{\theta}_2 = -1$ respectivamente, e os índices **3** e **4** denotam as soluções que não dependem da fase.

Mostraremos agora as soluções das equações (2.13) do capítulo anterior com suas ocupações, parâmetros de vínculo e região de existência.

3.1 Configurações de equilíbrio sem campo magnético externo, $q = 0$ e $p_Z = 0$.

3.1.1 Configurações de equilíbrio com $m = 0$.

- **Configuração de equilíbrio b1, dependente da fase,** $cos2\bar{\theta}_2 = 1$:

$$n_0 = \frac{1}{2} \; ; \; n_1 = n_{-1} = \frac{1}{4} \; ; \; \mu = c_0\rho + c_2\rho \; ; \; p_L = 0$$

- **Configuração de equilíbrio b2, dependente da fase,** $cos2\bar{\theta}_2 = -1$:

$$0 \leq n_0 \leq 1 \; ; \; n_1 = n_{-1} = \frac{1-n_0}{2} \; ; \; \mu = c_0\rho \; ; \; p_L = 0$$

Neste caso temos uma família de estados de equilíbrio degenerados.

- **Configuração de equilíbrio b3, independente da fase**:

$$n_0 = 0 \ ; \ n_1 = n_{-1} = \tfrac{1}{2} \ ; \ \mu = c_0\rho \ ; \ p_L = 0$$

Em especial, para $cos2\bar{\theta}_2 = -1$, esta configuração de equilíbrio coincide com um dos membros da família de estados degenerados da configuração de equilíbrio **b2**, que é o estado com $n_0 = 0$.

- **Configuração de equilíbrio b4, independente da fase**:

$$n_0 = 1 \ ; \ n_1 = n_{-1} = 0 \ ; \ \mu = c_0\rho \ ; \ p_L \text{ indeterminado}$$

Em especial, para $cos2\bar{\theta}_2 = -1$, esta configuração de equilíbrio coincide com um dos membros da família de estados degenerados da configuração de equilíbrio **b2**, que é o estado com $n_0 = 1$. Na nossa interpretação p_L indeterminado significa que o vínculo não é necessário, pois o espinor de equilíbrio é um auto-estado de $\hat{S}_z$, e desse modo podemos tomá-lo igual a zero.

3.1.2 Configurações de equilíbrio com $m \neq 0$.

- **Configuração de equilíbrio a1, dependente da fase,** $cos2\bar{\theta}_2 = 1$:

$$n_0 = \tfrac{1}{2}\left[1 - (m)^2\right] \ ; \ n_1 = \tfrac{1}{4}\left(1 + m\right)^2 \ ; \ n_{-1} = \tfrac{1}{4}\left(1 - m\right)^2 \ ; \ \mu = c_0\rho + c_2\rho \ ; \ p_L = 0$$

- **Configuração de equilíbrio a3, independente da fase**:

$$n_0 = 0 \ ; \ n_1 = \tfrac{1}{2}\left(1 + m\right) \ ; \ n_{-1} = \tfrac{1}{2}\left(1 - m\right) \ ; \ \mu = c_0\rho \ ; \ p_L = c_2\rho m$$

3.2 Configurações de equilíbrio com campo magnético externo.

3.2.1 Configurações de equilíbrio com $m = 0$.

- **Configuração de equilíbrio b1, dependente da fase,** $cos2\bar{\theta}_2 = 1$, existente para $-1 \leq \frac{q}{2c_2\rho} \leq 1$:

$$n_0 = \frac{1}{2}\left(1 - \frac{q}{2c_2\rho}\right) \; ; \; n_1 = n_{-1} = \frac{1}{4}\left(1 + \frac{q}{2c_2\rho}\right) \; ; \; \mu = c_0\rho + c_2\rho + \frac{q}{2} \; ; \; p = 0$$

- **Configuração de equilíbrio b3, independente da fase**, existente para qualquer valor de q:

$$n_0 = 0 \; ; \; n_1 = n_{-1} = \frac{1}{2} \; ; \; \mu = q + c_0\rho \; ; \; p = 0$$

- **Configuração de equilíbrio b4, independente da fase**, existente para qualquer valor de q:

$$n_0 = 1 \; ; \; n_1 = n_{-1} = 0 \; ; \; \mu = c_0\rho \; ; \text{ com } p \text{ indeterminado.}$$

Novamente, como esta solução é um auto-estado do operador $\hat{S}_z$ e portanto uma solução com projeção de momento angular hiperfino bem definido, o parâmetro de vínculo se torna supérfluo e tomamos p_L igual a zero. Note que as ocupações dos estados de equilíbrio **b3** e **b4** não dependem de q.

3.2.2 Configurações de equilíbrio com $m \neq 0$.

- **Configuração de equilíbrio a1, dependente da fase,** $cos2\bar{\theta}_2 = 1$:

Esta configuração de equilíbrio existe no intervalo $-\infty < \frac{q}{c_2\rho} \leq 1 + \sqrt{1 - m^2}$ e as ocupações dos três estados hiperfinos são dadas por:

$$n_1 = \frac{1 - n_0 + m}{2} \; ; \; n_{-1} = \frac{1 - n_0 - m}{2}$$

$$0 \leq n_0 \leq 1 - |m|$$

onde n_0 satizfaz a equação:

$$\sqrt{(1 - n_0)^2 - m^2}\left(\frac{q}{c_2\rho} + (2n_0 - 1)\right) + (1 - n_0)(2n_0 - 1) + m^2 \;\; = \;\; 0$$

Os parâmetros de vínculo μ e p para esta configuração de equilíbrio são:

$$\mu = c_0\rho + c_2\rho\left[1 - n_0 + \sqrt{(1 - n_0)^2 - m^2}\right]$$

$$\left(\sqrt{1+m-n_0}+\sqrt{1-m-n_0}\right)p=\left(\sqrt{1+m-n_0}-\sqrt{1-m-n_0}\right)q$$

- **Configuração de equilíbrio a2, dependente da fase,** $cos2\bar{\theta}_2=-1$:

Esta configuração de equilíbrio existe no intervalo $\frac{q}{c_2\rho}\geq 1-\sqrt{1-m^2}$ e a equação que determina n_0 é dada por:

$$\sqrt{(1-n_0)^2-m^2}\left(\frac{q}{c_2\rho}+(2n_0-1)\right)-\left[(1-n_0)(2n_0-1)+m^2\right] \quad = \quad 0$$

Os parâmetros μ e p para esta configuração de equilíbrio são:

$$\mu=c_0\rho+c_2\rho\left[1-n_0-\sqrt{(1-n_0)^2-m^2}\right]$$

$$\left(\sqrt{1+m-n_0}-\sqrt{1-m-n_0}\right)p=\left(\sqrt{1+m-n_0}+\sqrt{1-m-n_0}\right)q$$

- **Configuração de equilíbrio a3, independente da fase**, existente para qualquer valor de q:

$$n_0=0\ ;\ n_1=\tfrac{1}{2}\left(1+m\right)\ ;\ n_{-1}=\tfrac{1}{2}\left(1-m\right)\ ;\ \mu=q+c_0\rho\ ;\ p=c_2\rho m$$

Um resumo das soluções de equilíbrio pode ser visto na tabela seguinte:

	$m=0$	$m\neq 0$
$q=0$	b1, b2, b3, b4	a1, a3
$q\neq 0$	b1, $-1\leq\frac{q}{2c_2\rho}\leq 1$ b3, $-\infty<q<\infty$ b4, $-\infty<q<\infty$	a1, $-\infty<\frac{q}{c_2\rho}\leq 1+\sqrt{1-m^2}$ a2, $\frac{q}{c_2\rho}\geq 1-\sqrt{1-m^2}$ a3, $-\infty<q<\infty$

Tabela 3.1: Resumo das soluções de equilíbrio em função de q, $c_2\rho$ e m.

Na ausência de campo magnético os estados **b2**, **b3**, **b4** são os estados polares e **a1**, **b1** os estados ferromagnéticos da referência [16]. Por sua vez o estado de equilíbrio **a3** não é identificado nesta referência.

As figuras a seguir mostram as configurações de equilíbrio em um gráfico de $n_0\times\frac{q}{|c_2\rho|}$ para m fixo, como discutido na referência [25]. Dado n_0 as equações de vínculo determinam n_1 e

n_{-1}. Por sua vez n_0 em função de $\frac{q}{|c_2\rho|}$ e para m fixo (c_0 fixo) nos mostra as configurações de equilíbrio no plano $m \times \frac{q}{|c_2\rho|}$. As figuras (3.1) e (3.2) mostram as configurações de equilíbrio para magnetização nula. As figuras (3.3) e (3.4) mostram as configurações de equilíbrio para magnetização diferente de zero, $m = \frac{1}{2}$.

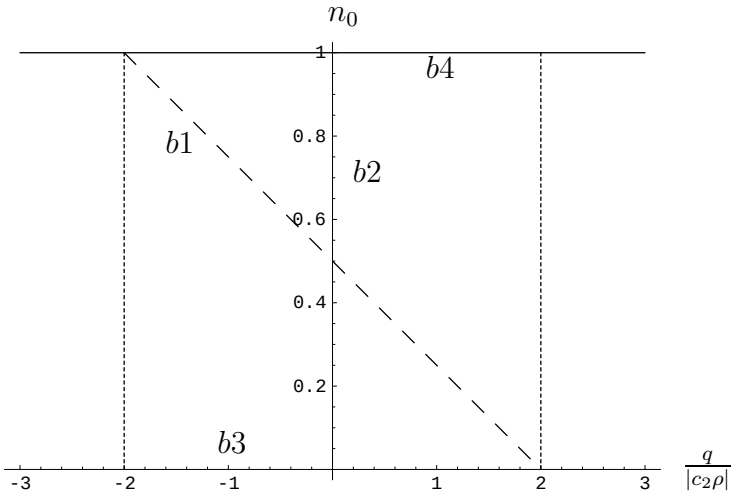

Figura 3.1: Configurações de equilíbrio no limite antiferromagnético, $c_2\rho > 0$, e magnetização nula, $m = 0$. As linhas horizontais são os limites dos valores de n_0, $0 \leq n_0 \leq 1$. As linhas verticais mostram os limites da configuração de equilíbrio **b1**. No limite inferior temos a configuração de equilíbrio **b3** e no limite superior temos a configuração de equilíbrio **b4** sendo que ambas existem para qualquer valor de $\frac{q}{|c_2\rho|}$. A linha vertical em $\frac{q}{|c_2\rho|} = 0$ é a configuração de equilíbrio **b2**. A linha tracejada é a configuração de equilíbrio **b1**.

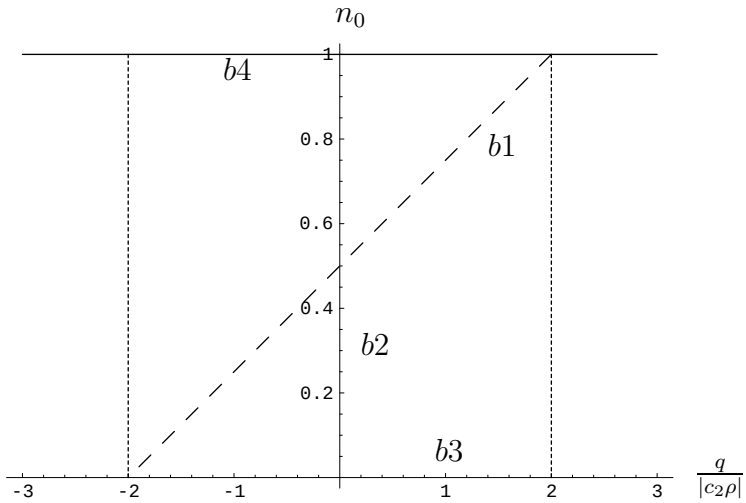

Figura 3.2: Configurações de equilíbrio no limite ferromagnético, $c_2\rho < 0$, e magnetização nula, $m = 0$. As linhas horizontais são os limites dos valores de n_0, $0 \leq n_0 \leq 1$. As linhas verticais mostram os limites da configuração de equilíbrio **b1**. No limite inferior temos a configuração de equilíbrio **b3** e no limite superior temos a configuração de equilíbrio **b4**. A linha vertical em $\frac{q}{|c_2\rho|} = 0$ é a configuração de equilíbrio **b2**. A linha tracejada é a configuração de equilíbrio **b1**.

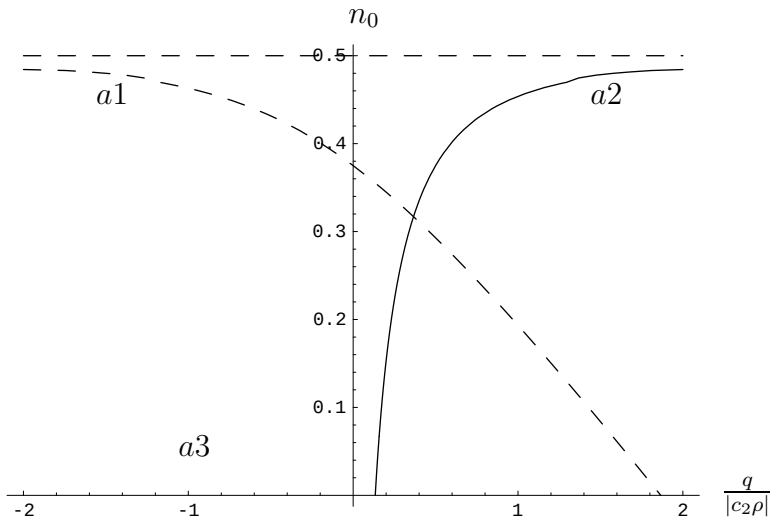

Figura 3.3: Configurações de equilíbrio no limite antiferromagnético, $c_2\rho > 0$ e com magnetização $m = \frac{1}{2}$. As linhas horizontais são os limites dos valores de n_0, limite inferior em $n_0 = 0$ e limite superior $n_0 = 1 - |m| = \frac{1}{2}$. No limite inferior temos a configuração de equilíbrio **a3.** A linha tracejada é a configuração de equilíbrio **a1**, que se aproxima assintoticamente do limte superior $n_0 = \frac{1}{2}$ quando $\frac{q}{|c_2\rho|} \to -\infty$ e que desaparece quando atinge o limite inferior no ponto $\frac{q}{|c_2\rho|} = 1 + \sqrt{1 - m^2}$. A linha cheia é a configuração de equilíbrio **a2**, que aparece a partir do limite inferior no ponto $\frac{q}{|c_2\rho|} = 1 - \sqrt{1 - m^2}$ e que se aproxima assintoticamente de $n_0 = \frac{1}{2}$ quando $\frac{q}{|c_2\rho|} \to \infty$.

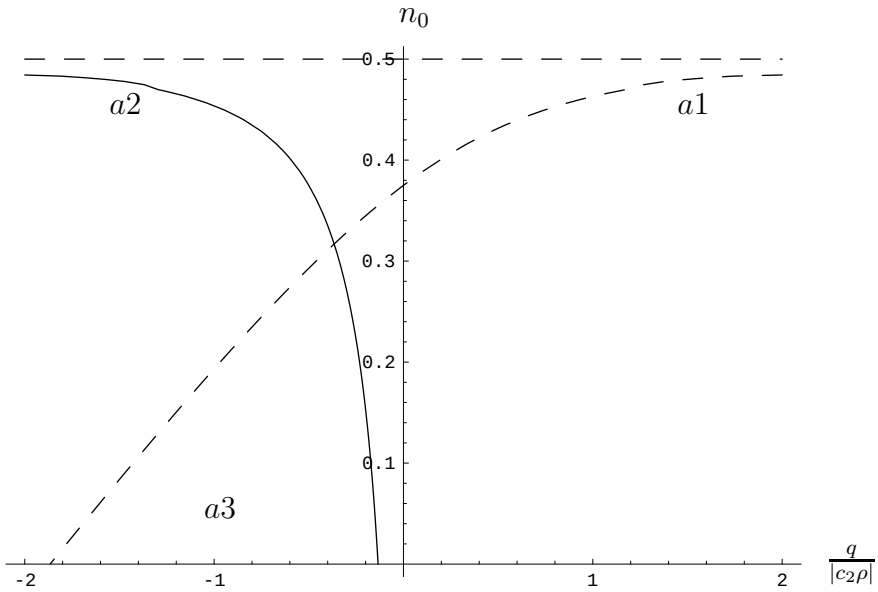

Figura 3.4: Configurações de equilíbrio no limite ferromagnético, $c_2\rho < 0$ e com magnetização $m = \frac{1}{2}$. As linhas horizontais são os limites dos valores de n_0, limite inferior em $n_0 = 0$ e limite superior $n_0 = 1 - |m| = \frac{1}{2}$. No limite inferior temos a configuração de equilíbrio **a3**. A linha tracejada é a configuração de equilíbrio **a1**, que aparece a partir do limite inferior no ponto $\frac{q}{|c_2\rho|} = -\left(1 + \sqrt{1 - m^2}\right)$ e que se aproxima assintoticamente do limite superior $n_0 = \frac{1}{2}$ quando $\frac{q}{|c_2\rho|} \to \infty$. A linha cheia é a configuração de equilíbrio **a2**, que se aproxima assintoticamente do limite superior $n_0 = \frac{1}{2}$ quando $\frac{q}{|c_2\rho|} \to -\infty$ e que desaparece quando atinge o limite inferior no ponto $\frac{q}{|c_2\rho|} = -\left(1 - \sqrt{1 - m^2}\right)$.

Capítulo 4

Estudo da estabilidade para um condensado espinorial com $S = 1$.

Neste capítulo vamos investigar a estabilidade das configurações de equilíbrio. Na teoria de Bogoliubov a estabilidade destas configurações é determinada através das propriedades do espectro das energias de excitação. Consideramos dois tipos de estabilidade, estabilidade dinâmica e estabilidade termodinâmica [26].

Dizemos que uma configuração de equilíbrio é dinamicamente estável se as energias de excitação associadas a ela são reais para qualquer valor de $\epsilon_k > 0$. Em nosso caso temos três ramos de energia pois temos três graus de liberdade intrínsecos, e a configuração de equilíbrio será dinamicamente estável se os três ramos de energia o forem.

Uma configuração de equilíbrio termodinamicamente instável não é um mínimo da superfície de energia. Porém pequenas perturbações não afastam o sistema da configuração de equilíbrio, na ausência de dissipação. Por outro lado, na presença de dissipação, o sistema não mais permanece nas vizinhanças da configuração de equilíbrio e decai para um estado estável termodinamicamente.

No contexto da teoria de Bogoliubov uma configuração de equilíbrio termodinamicamente instável tem as energias de excitação reais e é caracterizada pela existência de energias negativas com norma positiva. Isto ocorre quando as energias de um par se anulam para um $\epsilon_k > 0$.

A estabilidade dinâmica não implica na estabilidade termodinâmica, mas o inverso é verdade, a estabilidade termodinâmica implica na estabilidade dinâmica. Na análise da estabilidade, se uma configuração de equilíbrio é estável dinamicamente e termodinamicamente, a chamaremos simplesmente de estável.

No capítulo 3 vimos que existem configurações de equilíbrio com fase determinada, $cos2\bar{\theta}_2 = 1$ e $cos2\bar{\theta}_2 = -1$. No primeiro caso teremos $\bar{\theta}_2 = 0$ ou π e no segundo teremos $\bar{\theta}_2 = \frac{\pi}{2}$ ou $\frac{3\pi}{2}$. Podemos mostrar, com base nas invariâncias demonstradas no capítulo 2, que o espectro de energia é idêntico para qualquer uma das escolhas de $\bar{\theta}_2$, em ambos os casos.

Em todas as análises que seguem assumiremos $c_0 > 0$ e $c_0 + c_2 > 0$, de acordo com dados experimentais.

4.1 Estabilidade das configurações de equlíbrio sem campo magnético externo, $p_Z = 0$ e $q = 0$.

Examinaremos em primeiro lugar a estabilidade das configurações de equilíbrio para o sistema sem a presença de campo magnético externo, tanto para $m = 0$ quanto para $m \neq 0$.

Os nossos resultados, sempre que possível, serão comparados com trabalhos que tratam deste tipo de sistema.

4.1.1 Configurações de equilíbrio com magnetização nula.

Na ausência de campo magnético e para $m = 0$ temos quatro configurações de equilíbrio, que chamamos de **b1**, **b2**, **b3** e **b4.** Duas delas, **b1** e **b2,** são dependentes da fase e as outras duas, **b3** e **b4**, são independentes da fase. A análise da estabilidade destas soluções é mostrada a seguir.

4.1.1.1 Configuração de equilíbrio b1, dependente da fase, $cos2\bar{\theta}_2 = 1$.

As ocupações dos três estados hiperfinos e os parâmetros de vínculo μ e p_L para esta configuração de equilíbrio são:

$$n_0 = \frac{1}{2} \; ; \; n_1 = n_{-1} = \frac{1}{4} \; ; \; \mu = c_0\rho + c_2\rho \; ; \; p_L = 0$$

O espectro de energias de excitação para esta configuração de equilíbrio é:

$$w^2 = \epsilon_k^2 \tag{4.1}$$

$$w_-^2 = C - \sqrt{D} \tag{4.2}$$

$$w_+^2 = C + \sqrt{D} \tag{4.3}$$

Onde C e D são:

$$C = \epsilon_k^2 + (c_0 - c_2)\rho\epsilon_k + 2(c_2\rho)^2 \tag{4.4}$$

$$D = \left[\epsilon_k(c_0 + 3c_2\rho) - 2(c_2\rho)^2\right]^2 \tag{4.5}$$

Para que a configuração de equilíbrio seja dinamicamente estável todos os seus ramos de energia devem ter valores reais para $\epsilon_k > 0$.

Nesta situação vemos que o ramo (4.1) é estável. Para que os ramos (4.2) e (4.3) sejam estáveis as seguintes condições devem ser satisfeitas, para $\epsilon_k > 0$:

$$\begin{aligned} C &> 0 \\ D &\geq 0 \\ C &\geq \sqrt{D} \end{aligned} \tag{4.6}$$

Vemos imediatamente pelas equações (4.4) e (4.5) que as condições $C > 0$ e $D \geq 0$ são satisfeitas. Olhemos agora para a última condição, ou seja, $C \geq \sqrt{D}$, escrevendo:

$$C - \sqrt{D} = \epsilon_k^2 + (c_0 - c_2)\rho\epsilon_k + 2(c_2\rho)^2 - \left|\epsilon_k(c_0 + 3c_2)\rho - 2(c_2\rho)^2\right|$$

Temos que:

i) Se $\epsilon_k(c_0 + 3c_2)\rho - 2(c_2\rho)^2 > 0$, teremos:

$$C - \sqrt{D} \;=\; (\epsilon_k - 2c_2\rho)^2 \tag{4.7}$$

ii) Se $\epsilon_k(c_0 + 3c_2)\rho - 2(c_2\rho)^2 < 0$, teremos:

$$C - \sqrt{D} \;=\; \epsilon_k^2 + 2\,(c_0 + c_2)\,\rho\epsilon_k \tag{4.8}$$

Com isso vemos que $C \geq \sqrt{D}$ e consequentemente os ramos (4.2) e (4.3) são dinamicamente estáveis.

Se as condições de estabilidade são satisfeitas o sistema permanece dinamicamente estável mesmo no limite onde as desigualdades (4.6) se tornam igualdades. Em especial, se $C = \sqrt{D}$, para $\epsilon_k > 0$ ocorre um cruzamento entre um ramo de energia e seu par e posteriormente o ramo fica com energia real e negativa mas com norma positiva. Este tipo de cruzamento é importante para a estabilidade do sistema, já que, se ele ocorre, o sistema se torna termodinamicamente instável.

Para estudarmos a ocorrência ou não deste cruzamento de níveis escreveremos os ramos de energia (4.2) e (4.3) para esta configuração de equilíbrio considerando o sinal de $(c_0\rho + 3c_2\rho)$ que determina quando a equação (4.5) pode ser zero.

- Se $(c_0\rho + 3c_2\rho) < 0$

Neste caso vale a desigualdade **ii)**. Então $D > 0$ $C > \sqrt{D}$.

- Se $(c_0\rho + 3c_2\rho) > 0$

Neste caso as duas desigualdades **i)** e **ii)** podem ser satisfeitas e pode ocorrer $D = 0$ e também $C = \sqrt{D}$ para determinados valores de ϵ_k positivo. Isto nos mostra que esta configuração de equilíbrio pode apresentar instabilidade termodinâmica.

Nesta análise ainda não especificamos o sinal de $c_2\rho$. Faremos isso em seguida, considerando separadamente sistemas **antiferromagnéticos,** $c_2\rho > 0$**,** e **ferromagnéticos**, $c_2\rho < 0$.

- **Limite antiferromagnético,** $c_2\rho > 0$**:**

Neste limite só existe o caso em que $(c_0\rho + 3c_2\rho) > 0$. Como $C = \sqrt{D}$ quando $\epsilon_k = 2c_2\rho$, temos um cruzamento entre um ramo e seu par. Os ramos de energia para este caso são:

$$w_1 = \sqrt{\epsilon_k^2 + 2(c_0 + c_2)\rho\epsilon_k} \tag{4.9}$$

$$w_2 = \epsilon_k \tag{4.10}$$

$$w_3 = \epsilon_k - 2c_2\rho \tag{4.11}$$

onde impomos a continuidade dos níveis de energia, como critério para relacionar os níveis antes e após o cruzamento.

O gráfico dos ramos de energia em função de ϵ_k pode ser visto na Figura(4.1).

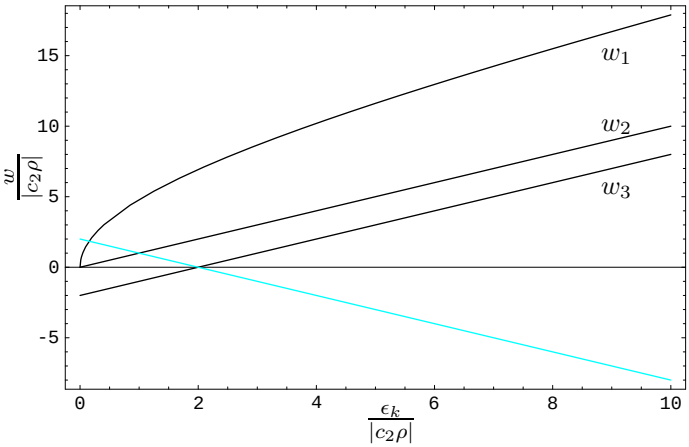

Figura 4.1: Ramos de energia da configuração de equilíbrio **b1** para $c_2\rho > 0$. Vemos que ocorre cruzamento de um ramo com seu par. Este é o sinal da instabilidade termodinâmica.

- **Limite ferromagnético,** $c_2\rho < 0$**:**

Neste limite temos duas possibilidades:

- Se $(c_0 + 3c_2\rho) < 0$, o que restringe $|c_2\rho|$ à região $\frac{c_0\rho}{3} < |c_2\rho| \leq c_0\rho$, vale a desigualdade **ii)**, e $C > \sqrt{D}$ pela equação (4.8).

- Se $(c_0+3c_2\rho) > 0$, o que restringe $|c_2\rho|$ à região $0 < |c_2\rho| < \frac{c_0\rho}{3}$, valem as desigualdades **i)** e **ii)**, e $C > \sqrt{D}$ pelas equações (4.7) e (4.8).

- O espectro de energias nos dois limites é o mesmo, isto é, $C > \sqrt{D}$ para $0 < c_2\rho \leq c_0\rho$, e temos:

$$\begin{aligned} w_1 &= \sqrt{\epsilon_k^2 + 2(c_0 - |c_2|)\rho\epsilon_k} \\ w_2 &= \epsilon_k \\ w_3 &= \epsilon_k + 2|c_2|\rho \end{aligned}$$

Confrontando as análises dos três ramos de energia, a estabilidade desta configuração de equilíbrio é:

- Limite **antiferromagnético**: dinamicamente estável mas termodinamicamente instável.

A instabilidade termodinâmica vem do fato de que a energia do ramo (4.11) e consequentemente a de seu par se anulam e o ramo com energia negativa agora tem norma positiva.

- Limite **ferromagnético**: estável dinamicamente e termodinamicamente, isto é, estável.

Comparando o nosso espectro de energias com o da referência [16] vemos que eles coincidem para a configuração de equilíbrio que a referência denomina ferromagnética.

4.1.1.2 Configuração de equilíbrio b2, dependente da fase, $cos2\bar{\theta}_2 = -1$.

As ocupações dos três estados hiperfinos e os parâmetros de vínculo μ e p_L para esta configuração de equilíbrio são:

$$n_1 = n_{-1} = \frac{1-n_0}{2} \ ; \ 0 < n_0 < 1 \ ; \ \mu = c_0\rho \ ; \ p_L = 0$$

Neste caso temos uma família de estados de equilíbrio degenerados. O espectro de energias de excitação para esta configuração de equilíbrio é:

$$w^2 = \epsilon_k(\epsilon_k + 2c_0\rho) \tag{4.12}$$

$$w^2 = \epsilon_k(\epsilon_k + 2c_2\rho) \tag{4.13}$$

onde o ramo (4.13) é duplamente degenerado.

O ramo de energia (4.12) é estável pois $c_0\rho$ é sempre positivo. Já os ramos de energia (4.13) são estáveis apenas para $c_2\rho > 0$.

Resumindo, a estabilidade para esta configuração de equilíbrio é:

- Limite **antiferromagnético**, $c_2\rho > 0$, será estável.
- Limite **ferromagnético**, $c_2\rho < 0$, será instável.

Comparando o nosso espectro de energias com o da referência [16] vemos que eles coincidem para a configuração de equilíbrio que a referência denomina polar.

4.1.1.3 Configuração de equilíbrio b3, independente da fase.

As ocupações dos três estados hiperfinos e os parâmetros de vínculo μ e p_L para esta configuração de equilíbrio são:

$$n_0 = 0 \; ; \; n_1 = n_{-1} = \tfrac{1}{2} \; ; \; \mu = c_0\rho \; ; \; p_L = 0$$

Para $cos2\bar{\theta}_2 = -1$, esta configuração de equilíbrio coincide com um dos membros da família de estados degenerados **b2**, localizado na fronteira inferior, $n_0 = 0$.

O espectro de energias de excitação para esta configuração de equilíbrio é o mesmo de **b2** e portanto, a estabilidade desta configuração de equilíbrio é:

- Limite **antiferromagnético**, $c_2\rho > 0$, será estável.
- Limite **ferromagnético**, $c_2\rho < 0$, será instável.

4.1.1.4 Configuração de equilíbrio b4, independente da fase.

As ocupações dos três estados hiperfinos e os parâmetros de vínculo μ e p_L para esta configuração de equilíbrio são:

$$n_0 = 1 \ ; \ n_1 = n_{-1} = 0 \ ; \ \mu = c_0\rho \ ; \ p_L \text{ indeterminado.}$$

Na nossa interpretação p_L indeterminado significa que não precisamos impor um vínculo, pois a configuração de equilíbrio tem simetria axial. Portanto podemos tomar $p_L = 0$.

Para $cos2\bar{\theta}_2 = -1$, esta configuração de equilíbrio coincide com um dos membros da família de estados degenerados **b2**, localizado na fronteira superior, $n_0 = 1$.

O espectro de excitação para esta configuração de equilíbrio é o mesmo de **b2** e portanto, a estabilidade desta configuração de equilíbrio é:

- Limite **antiferromagnético**, $c_2\rho > 0$, será estável.
- Limite **ferromagnético**, $c_2\rho < 0$, será instável.

4.1.2 Configurações de equilíbrio com magnetização diferente de zero.

Sem campo magnético externo, para $m \neq 0$, teremos duas configurações de equilíbrio que chamaremos de **a1** e **a3** sendo que uma delas é dependente da fase, **a1**, e a outra é independente da fase, **a3**. A análise da estabilidade destas soluções é mostrada a seguir.

4.1.2.1 Configuração de equilíbrio a1, dependente da fase, $cos2\bar{\theta}_2 = 1$.

As ocupações dos três estados hiperfinos e os parâmetros de vínculo μ e p_L para esta configuração de equilíbrio são:

$$n_0 = \tfrac{1}{2}\left[1 - m^2\right] \ ; \ n_1 = \tfrac{1}{4}\left(1 + m\right)^2 \ ; \ n_{-1} = \tfrac{1}{4}\left(1 - m\right)^2 \ ; \ \mu = c_0\rho + c_2\rho \ ; \ p_L = 0$$

O espectro de energias de excitação para esta configuração de equilíbrio é:

$$w_1 = \sqrt{\epsilon_k \left[\epsilon_k + 2(c_0 + c_2)\rho\right]} \tag{4.14}$$

$$w_2 = \epsilon_k \tag{4.15}$$

$$w_3 = \epsilon_k - 2c_2\rho \tag{4.16}$$

Notemos que mesmo sendo uma configuração de equilíbrio com magnetização diferente de zero, veja que as ocupações dependem de m, mas o espectro de energias de excitação é independente da magnetização e igual ao espectro da configuração de equilíbrio **b1**.

Resumindo a estabilidade para esta configuração de equilíbrio, temos:

- Limite **antiferromagnético**, $c_2\rho > 0$, a solução é dinamicamente estável mas termodinamicamente instável.
- Limite **ferromagnético**, $c_2\rho < 0$, a solução é estável.

Comparando o nosso espectro de energias com o da referência [16] vemos que eles coincidem para a configuração de equilíbrio que a referência denomina ferromagnética.

4.1.2.2 Configuração de equilíbrio a3, independente da fase.

As ocupações dos três estados hiperfinos e os parâmetros de vinculo μ e p_L para esta configuração de equilíbrio são:

$$n_0 = 0 \; ; \; n_1 = \tfrac{1}{2}\left(1 + m\right) \; ; \; n_{-1} = \tfrac{1}{2}\left(1 - m\right) \; ; \; \mu = c_0\rho \; ; \; p_L = c_2\rho m$$

O espectro de energias de excitação para esta configuração de equilíbrio é:

$$w^2 = \epsilon_k^2 + 2c_2\rho\epsilon_k + (c_2\rho)^2 m^2 \tag{4.17}$$

$$= \left(\epsilon_k + c_2\rho\right)^2 - (c_2\rho)^2\left(1 - m^2\right) \tag{4.18}$$

$$w_-^2 = C - \sqrt{D} \tag{4.19}$$

$$w_+^2 = C + \sqrt{D} \tag{4.20}$$

Onde:

$$
\begin{aligned}
C &= \epsilon_k(\epsilon_k + c_0\rho + c_2\rho) && (4.21)\\
D &= \epsilon_k^2\left[(c_0\rho - c_2\rho)^2 + 4c_0\rho c_2\rho m^2\right] = && (4.22)\\
&= \epsilon_k^2\left[(c_0\rho + c_2\rho)^2 - 4c_0\rho c_2\rho\left(1 - m^2\right)\right]
\end{aligned}
$$

Inicialmente vamos examinar a estabilidade do ramo (4.17). Um modo de determinar o sinal de w^2 é calculando as raízes de w^2 como função de ϵ_k. Neste caso elas são:

$$
\begin{aligned}
\epsilon_k^1 &= -c_2\rho + |c_2\rho|\sqrt{1 - m^2}\\
\epsilon_k^2 &= -c_2\rho - |c_2\rho|\sqrt{1 - m^2}
\end{aligned}
$$

Se $c_2\rho > 0$ este ramo será estável, já que as raízes serão sempre negativas para qualquer valor de m. Se $c_2\rho < 0$ o ramo será instável pois as raízes acima, ϵ_k^1 e ϵ_k^2, se tornam positivas.

Para que os ramos (4.19) e (4.20) sejam estáveis devemos testar novamente as condições (4.6).

Vemos pela equação (4.21) e (4.22) que tanto a primeira condição, $C > 0$, quanto a segunda, $D \geq 0$ são automaticamente satisfeitas.

Para estudarmos a terceira condição, $C > \sqrt{D}$, vemos que:

$$
C - \sqrt{D} = \epsilon_k\left(\epsilon_k + (c_0\rho + c_2\rho) - \sqrt{(c_0\rho + c_2\rho)^2 - 4c_0\rho c_2\rho(1 - m^2)}\right)
$$

O sinal de $C - \sqrt{D}$ depende do sinal do coeficiente do termo linear em ϵ_k. Portanto se $c_2\rho > 0$ esse termo é positivo e $C > \sqrt{D}$ de modo que o ramo de energia será estável. Se $c_2\rho < 0$ existe uma região com $\epsilon_k > 0$ para a qual $C - \sqrt{D} < 0$ e o ramo de energia será instável. O espectro de energias para esta configuração de equilíbrio é:

$$
\begin{aligned}
w &= \sqrt{\epsilon_k^2 + 2c_2\rho\epsilon_k + (c_2\rho)^2 m^2} \\
w_+ &= \sqrt{\epsilon_k \left(\epsilon_k + c_0\rho + c_2\rho + \sqrt{(c_0\rho + c_2\rho)^2 - 4c_0\rho c_2\rho(1-m^2)}\right)} \\
w_- &= \sqrt{\epsilon_k \left(\epsilon_k + c_0\rho + c_2\rho - \sqrt{(c_0\rho + c_2\rho)^2 - 4c_0\rho c_2\rho(1-m^2)}\right)}
\end{aligned}
$$

E a estabilidade desta configuração de equilíbrio é:

- Limite **antiferromagnético**, $c_2\rho > 0$, estável
- Limite **ferromagnético**, $c_2\rho < 0$, instável.

Este estado é considerado no estudo de instabilidades dinâmicas e formação de domínios do trabalho [15]. Esta configuração de equilíbrio também é mencionada na referência [17] .

A tabela (4.1) mostra um resumo da estabilidade das configurações de equilíbrio sem campo magnético externo aplicado.

		$m = 0$			$m \neq 0$	
		b1	**b2**	**b3, b4**	**a1**	**a3**
$c_2\rho > 0$	$cos2\theta_2 = 1$	**D.E. - T.I.**			**D.E. - T.I.**	
	$cos2\theta_2 = -1$		Estável			
	F.I.			Estável		Estável
$c_2\rho < 0$	$cos2\bar{\theta}_2 = 1$	Estável			Estável	
	$cos2\theta_2 = -1$		Instável			
	F.I.			Instável		Instável

Tabela 4.1: Estabilidade das configurações de equilíbrio sem campo magnético externo. **D.E.** - Dinamicamente estável. **T.I.** - Termodinamicamente instável. **F.I.** - Fase Indeterminada. As configurações de equilíbrio **b3** e **b4** quando $m = 0$ e **a3** para $m \neq 0$ não dependem da fase.

As figuras a seguir mostram as configurações de equilíbrio estáveis como função de m, sem a presença de um campo magnético externo. Figura(4.2) para o limite **antiferromagnético** e Figura(4.3) para o limite **ferromagnético**.

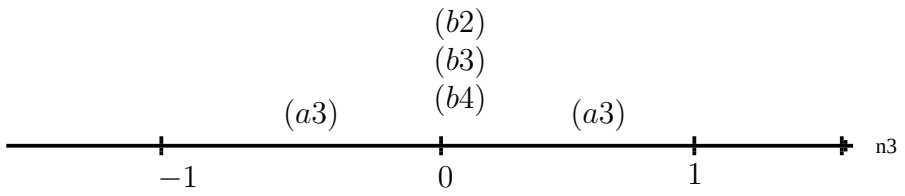

Figura 4.2: Configurações de equilíbrio estáveis como função de m, sem a presença de campo magnético externo, para o limite antiferromagnético. Neste limite todas as configurações de equilíbrio estáveis são independentes da fase exceto quando $m = 0$, pois **b2** tem fase definida igual a $cos2\bar{\theta}_2 = -1$. As configurações de equilíbrio com todos os spins alinhados, representam os limites de **a3** quando $m = \pm 1$.

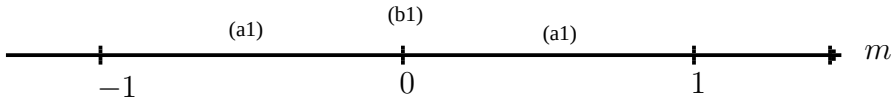

Figura 4.3: Configurações de equilíbrio estáveis como função de m, sem a presença de campo magnético externo, para o limite ferromagnético. Neste limite todas as configurações de equilíbrio estáveis têm fase definida $cos2\bar{\theta}_2 = 1$. As configurações de equilíbrio com todos os spins alinhados, representam os limites de **a1** quando $m = \pm 1$.

4.2 Estabilidade das configurações de equilíbrio com campo magnético externo, $q \neq 0$ e $p_Z \neq 0$.

4.2.1 Configurações de equilíbrio com magnetização nula.

Se o sistema é submetido a um campo magnético externo e com $m = 0$ teremos três configurações de equilíbrio que são **b1**, **b3** e **b4.** Uma delas é dependente da fase **b1**, e as outras duas são independentes da fase, **b3** e **b4**. A análise da estabilidade destas soluções será mostrada a seguir.

4.2.1.1 Configuração de equilíbrio b1, dependente da fase, $cos2\bar{\theta}_2 = 1$.

Esta configuração de equilíbrio existe no intervalo $-1 < \frac{q}{2c_2\rho} < 1$ e as ocupações dos três estados hiperfinos e os parâmetros de vínculo são:

$$n_0 = \frac{1}{2}\left(1 - \frac{q}{2c_2\rho}\right) \; ; \; n_1 = n_{-1} = \frac{1}{4}\left(1 + \frac{q}{2c_2\rho}\right) \; ; \; \mu = c_0\rho + c_2\rho + \frac{q}{2} \; ; \; p = 0$$

O espectro de energias de excitação para esta configuração de equilíbrio é:

$$
\begin{aligned}
w^2 &= \epsilon_k(\epsilon_k + q) && (4.23)\\
w_-^2 &= C - \sqrt{D} && (4.24)\\
w_+^2 &= C + \sqrt{D} && (4.25)
\end{aligned}
$$

Onde C e D, escritos como polinômios de ϵ_k, são:

$$
\begin{aligned}
C &= \epsilon_k^2 + \epsilon_k(c_0 - c_2)\rho + \frac{1}{2}\left[(2c_2\rho)^2 - q^2\right] && (4.26)\\
D &= \epsilon_k^2\left[(c_0\rho + 3c_2\rho)^2 - 4c_2\rho(c_0\rho + 2c_2\rho)\frac{q^2}{(2c_2\rho)^2}\right] - \\
&- \epsilon_k(c_0\rho + 3c_2\rho)((2c_2\rho)^2 - q^2) + \frac{1}{4}((2c_2\rho)^2 - q^2)^2 && (4.27)
\end{aligned}
$$

Analisando os ramos de energia vemos que o ramo (4.23) será estável para valores de $q > 0$. Para os ramos (4.24) e (4.25) teremos que testar as condições (4.6).

A primeira condição, ou seja, $C > 0$ é sempre satisfeita pois $(c_0\rho - c_2\rho) > 0$ e $((2c_2\rho)^2 - q^2) > 0$.

Vamos examinar a segunda condição, $D > 0$, determinando as raízes de $D = 0$, que são:

$$
\begin{aligned}
\epsilon_k^1 &= \frac{[(2c_2\rho)^2 - q^2]}{2A}\cdot\left[(c_0\rho + 3c_2\rho) + \sqrt{4c_2\rho(c_0\rho + 2c_2\rho)\frac{q^2}{(2c_2\rho)^2}}\right]\\
\epsilon_k^2 &= \frac{[(2c_2\rho)^2 - q^2]}{2A}\cdot\left[(c_0\rho + 3c_2\rho) - \sqrt{4c_2\rho(c_0\rho + 2c_2\rho)\frac{q^2}{(2c_2\rho)^2}}\right] && (4.28)
\end{aligned}
$$

onde:

$$
A = (c_0\rho + 3c_2\rho)^2 - 4c_2\rho(c_0 + 2c_2\rho)\frac{q^2}{(2c_2\rho)^2}
$$

é uma quantidade sempre positiva, pois $(c_0\rho + 3c_2\rho)^2 > 4c_2\rho(c_0\rho + 2c_2\rho)$.

Das equações (4.28) vemos que:

- Se $c_2\rho(c_0\rho + 2c_2\rho) < 0$, $D > 0$, pois não teremos raízes reais.
- Se $c_2\rho(c_0\rho + 2c_2\rho) > 0$, teremos duas raízes reais, e como:

$$|(c_0\rho + 3c_2\rho)| \quad > \quad \sqrt{4c_2\rho(c_0\rho + 2c_2\rho)\frac{q^2}{(2c_2\rho)^2}}$$

os sinais das raízes depende das seguintes condições:

- Se $(c_0\rho + 3c_2\rho) > 0$, as raízes serão reais e positivas, D assume valores negativos para $\epsilon_k > 0$, e o ramo é instável.
- Se $(c_0\rho + 3c_2\rho) < 0$, as raízes serão reais e negativas, e D assume valores positivos para $\epsilon_k > 0$, e o ramo é estável.

Em resumo, $D > 0$ ocorrerá somente quando:

- $c_2\rho(c_0\rho + 2c_2\rho) < 0$. Esta restrição é satisfeita somente se $c_2\rho < 0$ e $0 < |c_2\rho| < \frac{c_0\rho}{2}$.
- $c_2\rho(c_0\rho + 2c_2\rho) > 0$ e $(c_0\rho + 3c_2\rho) < 0$. Esta restrição é satisfeita somente se $c_2\rho < 0$ e $\frac{c_0\rho}{2} < |c_2\rho| < c_0\rho$.

Concluindo, $D > 0$ somente para $c_2\rho < 0$.

Uma maneira de analisar a condição $C > \sqrt{D}$ é através das raízes da equação $C^2 - D = 0$, onde:

$$\begin{aligned} C^2 - D &= \epsilon_k^4 + 2(c_0\rho - c_2\rho)\epsilon_k^3 - \left\{4c_0\rho c_2\rho + \frac{(c_0\rho + c_2\rho)}{c_2\rho}\left[(2c_2\rho)^2 - q^2\right]\right\}\epsilon_k^2 + \\ &+ 2(c_0\rho + c_2\rho)\left[(2c_2\rho)^2 - q^2\right]\epsilon_k \end{aligned} \tag{4.29}$$

que são:

$$\epsilon_k = 0; \quad \epsilon_k = 2c_2\rho; \quad \epsilon_k = \frac{-c_0\rho c_2\rho \pm \sqrt{(c_0\rho c_2\rho)^2 + \{c_2\rho(c_0\rho + c_2\rho)\left[(2c_2\rho)^2 - q^2\right]\}}}{c_2\rho}$$

Separando a raiz nula vemos que se $c_2\rho > 0$ teremos duas raízes positivas e uma negativa e portanto a configuração de equilíbrio será instável. Se $c_2\rho < 0$ teremos três raízes negativas e portanto a configuração de equilíbrio será estável.

Confrontando a análise da estabilidade para os três ramos de energia, temos que a estabilidade da configuração de equilíbrio **b1** será:

- No limite **antiferromagnético**, $c_2\rho > 0$, será instável.
- No limite **ferromagnético**, $c_2\rho < 0$, será estável para $0 \leq q \leq 2|c_2\rho|$, já que esta configuração de equilíbrio só existe para $-1 < \frac{q}{2c_2\rho} < 1$.

Este estado é usado no estudo da dinâmica coerente de mistura de spins feita no artigo [24].

4.2.1.2 Configuração de equilíbrio b3, independente da fase.

Esta configuração de equilíbrio existe no intervalo $-\infty < q < \infty$ e as ocupações dos três estados hiperfinos e os parâmetros de vínculo μ e p são:

$$n_0 = 0 \ ; \ n_1 = n_{-1} = \tfrac{1}{2} \ ; \ \mu = q + c_0\rho \ ; \ p = 0$$

O espectro de energias de excitação para esta solução é:

$$w^2 = (\epsilon_k - q)(\epsilon_k - q + 2c_2\rho) \tag{4.30}$$

$$w^2 = \epsilon_k\,(\epsilon_k + 2c_0\rho) \tag{4.31}$$

$$w^2 = \epsilon_k\,(\epsilon_k + 2c_2\rho) \tag{4.32}$$

O ramo 4.30 será estável se: $q < 0$ e $q - 2c_2\rho < 0$. O ramo 4.31 será sempre estável pois $c_0\rho > 0$ e o ramo 4.32 será estável se: $c_2\rho > 0$.

Confrontando estas regiões de estabilidade, a estabilidade da configuração de equilíbrio será:

- No limite **antiferromagnético**, $c_2\rho > 0$, será estável para $q \leq 0$;
- No limite **ferromagnético**, $c_2\rho < 0$, será instável.

4.2.1.3 Configuração de equilíbrio b4, independente da fase.

Esta configuração de equilíbrio existe no intervalo $-\infty < q < \infty$ e as ocupações dos três estados hiperfinos e os parâmetros de vínculo μ e p são:

$$n_0 = 1 \ ; \ n_1 = n_{-1} = 0 \ ; \ \mu = c_0\rho \ ; \text{ com p indeterminado.}$$

Na nossa interpretação, como a configuração de equilíbrio é um autoestado de S_z, o vínculo não impõe nenhuma restrição e portanto podemos tomar $p_L = 0$. Temos então que $p = p_Z$.

O espectro de energias de excitação para esta configuração de equilíbrio é:

$$(w + p_Z)^2 = (\epsilon_k + q)(\epsilon_k + q + 2c_2\rho) \tag{4.33}$$

$$(w - p_Z)^2 = (\epsilon_k + q)(\epsilon_k + q + 2c_2\rho) \tag{4.34}$$

$$w^2 = \epsilon_k\,(\epsilon_k + 2c_0\rho) \tag{4.35}$$

Os ramos 4.33 e 4.34 serão estáveis se: $q > 0$ e $q + 2c_2\rho > 0$. Já o ramo 4.35 será sempre estável pois $c_0\rho > 0$.

Esta configuração de equilíbrio é dinamicamente estável nas seguintes regiões:

- Limite **antiferromagnético**, $c_2\rho > 0$, dinamicamente estável para $q \geq 0$.
- Limite **ferromagnético**, $c_2\rho < 0$, dinamicamente estável para $q \geq 2|c_2\rho|$.

Examinando as equações (4.33) e (4.34) vemos que é possível w se anular para um ϵ_k positivo. Nesse caso o sistema é **dinamicamente estável** e **termodinamicamente instável**.

Para investigar isto, note que as energias dos ramos (4.33) e (4.34) são:

$$w_1 = -p_Z + \sqrt{(e_k + q)(e_k + q + 2c_2\rho)}$$

$$w_2 = p_Z + \sqrt{(e_k + q)(e_k + q + 2c_2\rho)}$$

A condição para que a energia não fique negativa é:

$$\sqrt{(e_k+q)(e_k+q+2c_2\rho)} \geq |p_Z|$$

Se a desigualdade não é satisfeita temos que o ramo w_1 tem energia negativa se $p_Z > 0$ enquanto que o ramo w_2 tem energia negativa se $p_Z < 0$.

No nosso caso existe uma relação entre p_Z e q, $p_z^2 = E_{HFS} \cdot q$.

Como $q \geq 0$, $q+2c_2\rho \geq 0$ e $\epsilon_k > 0$, a condição para que exista estabilidade termodinâmica é:

$$\sqrt{q(q+2c_2\rho)} \quad \geq \quad \sqrt{E_{HFS}q}$$

No caso antiferromagnético essa desigualdade é satisfeita se $q > q_A$, com $q_A = E_{HFS} - 2c_2\rho$ e no caso ferromagnético se $q > q_F$ com $q_F = E_{HFS} + 2|c_2\rho|$.

Se estas condições são satisfeitas o sistema é **dinamicamente** e **termodinamicamente** estável.

Em resumo, a estabilidade desta configuração de equilíbrio é:

- Limite **antiferromagnético**, $c_2\rho > 0$,

termodinamicamente instável para $0 \leq q < q_A$,
estável para $q \geq q_A$ onde $q_A = E_{HFS} - 2c_2\rho$.

- Limite **ferromagnético**, $c_2\rho < 0$,

termodinamicamente instável para $2|c_2\rho| \leq q < q_F$,
estável para $q \geq q_F$ onde $q_F = E_{HFS} + 2|c_2\rho|$.

Este estado é considerado em um estudo sobre a formação de domínios ferromagnéticos em um condensado fora do equilíbrio [23].

4.2.2 Configurações de equilíbrio com magnetização diferente de zero.

Se o sistema é submetido a um campo magnético externo e para $m \neq 0$ teremos três soluções de equilíbrio que denominaremos de **a1**, **a2** e **a3**. Duas delas são dependentes da fase, **a1** e

a2, enquanto que **a3** é independente da fase. A análise da estabilidade destas soluções será mostrada a seguir.

Para as configurações de equilíbrio **a1** e **a2** não foi possível obter expressões analíticas para as ocupações e energias de excitação. Nesses casos a análise foi feita numericamente. Determinamos as ocupações dos estados hiperfinos resolvendo numericamente as equações (4.36) e (4.37). Dadas as ocupações resolvemos a equação de Bogoliubov no intuito de analisarmos o comportamento das energias de excitação como função de $\frac{q}{c_2\rho}$, m e ϵ_k.

As regiões de estabilidade dinâmica foram encontradas quando todos os autovalores provenientes da análise numérica se mostraram reais. Regiões onde surgiram autovalores imaginários são as regiões onde o sistema é instável. Para ilustrar as regiões instáveis de cada configuração de equilíbrio exibimos gráficos mostrando as partes imaginárias dos ramos de energia responsáveis pela instabilidade.

Em nenhuma região de parâmetros apareceram instabilidades termodinâmicas já que não encontramos cruzamentos de um nível com seu par, e variações do parâmetro m dentro de sua região de existência não mostraram mudanças no comportamento do sistema com relação a estabilidade.

4.2.2.1 Configuração de equilíbrio a1, dependente da fase, $cos2\bar{\theta}_2 = 1$.

Esta configuração de equilíbrio existe no intervalo $-\infty < \frac{q}{c_2\rho} < 1 + \sqrt{1-m^2}$ e as ocupações dos três estados hiperfinos são dadas pelas raízes da equação:

$$\sqrt{(1-n_0)^2 - m^2}\left(\frac{q}{c_2\rho} + (2n_0 - 1)\right) + (1-n_0)(2n_0-1) + m^2 \quad = \quad 0 \qquad (4.36)$$

onde $n_1 = \frac{1-n_0+m}{2}$, $n_{-1} = \frac{1-n_0-m}{2}$ e $0 \leq n_0 \leq 1 - |m|$.

Os parâmetros de vínculo μ e p para esta configuração de equilíbrio são:

$$\mu = c_0\rho + c_2\rho\left[1 - n_0 + \sqrt{(1-n_0)^2 - m^2}\right]$$

$$\left(\sqrt{1+m-n_0} + \sqrt{1-m-n_0}\right)p = \left(\sqrt{1+m-n_0} - \sqrt{1-m-n_0}\right)q$$

As regiões de estabilidade desta configuração de equilíbrio de acordo com nosso procedimento são:

- Limite **antiferromagnético**, $c_2\rho > 0$, a solução é instável. Gráficos mostrando o comportamento do espectro de energia nesta região são mostrados na Figura (4.4) e Figura(4.5).

- Limite **ferromagnético**, $c_2\rho < 0$, a solução é estável se $q \geq 0$. Gráficos mostrando o comportamento do espectro de energia nesta região são mostrados na Figura (4.6).

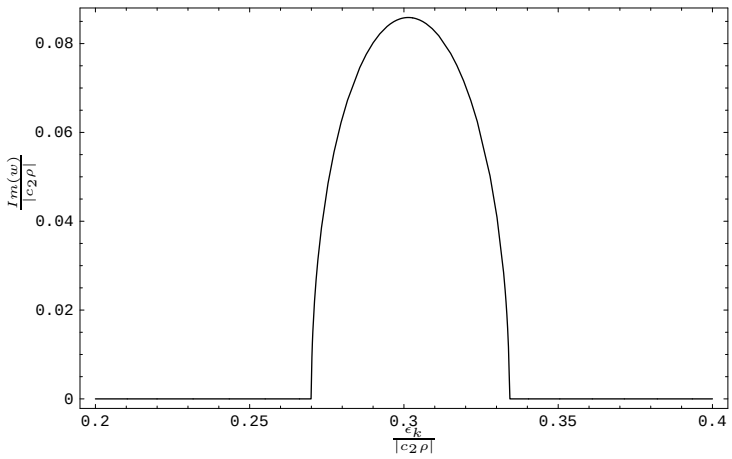

Figura 4.4: Parte imaginária de um dos ramos de energia da configuração de equilíbrio **a1** para $c_2\rho > 0$, $\frac{q}{|c_2\rho|} = -1$ e $m = \frac{1}{2}$. Varrendo m, a natureza da estabilidade dessa configuração de equilíbrio não se altera.

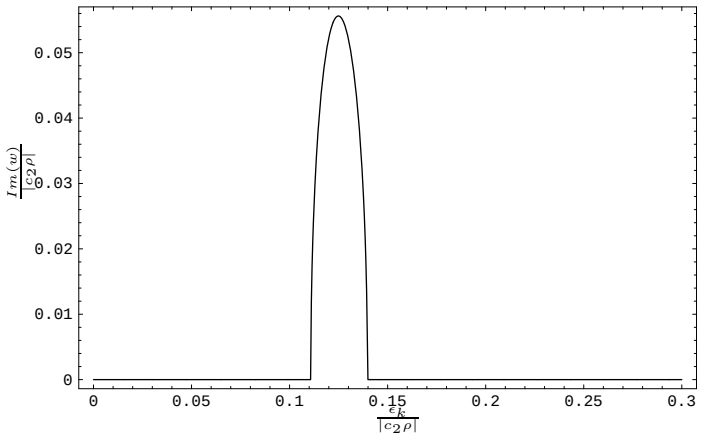

Figura 4.5: Parte imaginária de um dos três ramos de energia da configuração de equilíbrio **a1** para $c_2\rho > 0$, $\frac{q}{|c_2\rho|} = 0.5$ e $m = \frac{1}{2}$. Varrendo m, a natureza da estabilidade dessa configuração de equilíbrio não se altera.

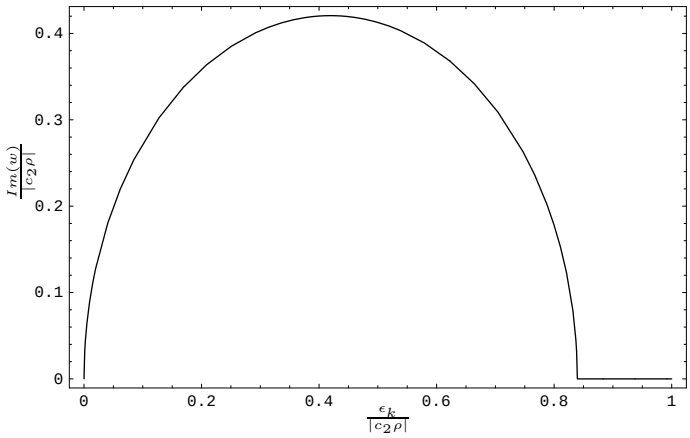

Figura 4.6: Parte imaginária de um dos três ramos de energia da configuração de equilíbrio **a1** para $c_2\rho < 0$, $\frac{q}{|c_2\rho|} = -1$ e $m = \frac{1}{2}$. Varrendo m, a natureza da estabilidade dessa configuração de equilíbrio não se altera.

4.2.2.2 Configuração de equilíbrio a2, dependente da fase, $cos2\bar{\theta}_2 = -1$.

Esta configuração de equilíbrio existe no intervalo $\frac{q}{c_2\rho} > 1 - \sqrt{1-m^2}$ e as ocupações dos três estados hiperfinos são dadas pelas raízes da equação:

$$\sqrt{(1-n_0)^2 - m^2}\left(\frac{q}{c_2\rho} + (2n_0 - 1)\right) - \left[(1-n_0)(2n_0-1) + m^2\right] = 0 \qquad (4.37)$$

onde $n_1 = \frac{1-n_0+m}{2}$, $n_{-1} = \frac{1-n_0-m}{2}$ e $0 \leq n_0 \leq 1 - |m|$.

Os parâmetros μ e p para esta configuração de equilíbrio são:

$$\begin{aligned} \mu &= c_0\rho + c_2\rho\left[1 - n_0 - \sqrt{(1-n_0)^2 - m^2}\right] \\ \sqrt{1+m-n_0} - \sqrt{1-m-n_0}p &= \sqrt{1+m-n_0} + \sqrt{1-m-n_0}q \end{aligned}$$

A análise de estabilidade foi feita da mesma maneira que para a solução anterior e o resumo da estabilidade é o seguinte:

- Limite **antiferromagnético**, $c_2\rho > 0$, a solução instável. Gráficos mostrando o comportamento do espectro de energia nesta região são mostrados na Figura (4.7).

- Limite **ferromagnético**, $c_2\rho < 0$, a solução é instável. Gráfico mostrando o compor-

tamento do espectro de energia nesta região é mostrado na Figura (4.8).

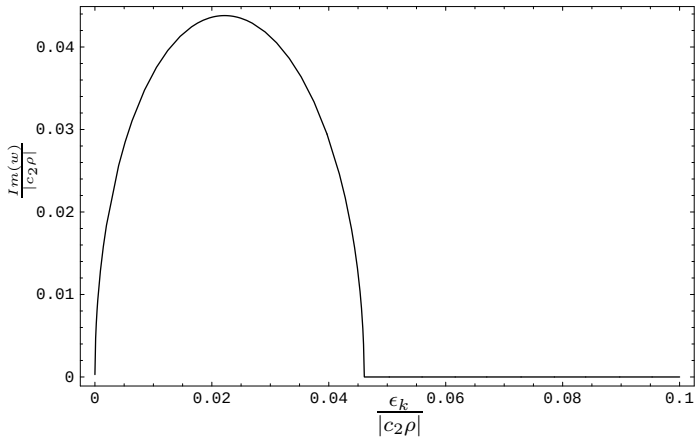

Figura 4.7: Parte imaginária do ramo de energia responsável pela instabilidade da configuração de equilíbrio **a2**. A região de parâmetros é, $\frac{c_0\rho}{|c_2\rho|} = 10$, $c_2\rho > 0$ e $m = \frac{1}{2}$. O gráfico foi feito para $\frac{q}{|c_2\rho|} = 0.134 > 1 - \sqrt{1-m^2}$.

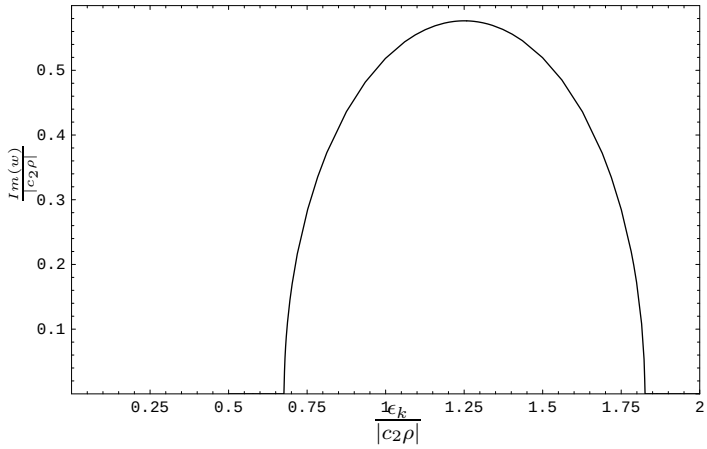

Figura 4.8: Parte imaginária do ramo responsável pel instabilidade da configuração de equilíbrio **a2** na região onde $\frac{c_0\rho}{|c_2\rho|} = 10$, $c_2\rho < 0$ e $m = \frac{1}{2}$. O gráfico foi feito para $\frac{q}{|c_2\rho|} = -1 < -\left(1 - \sqrt{1-m^2}\right)$.

Estudamos como variações de m e também de $\frac{q}{|c_2\rho|}$ poderiam alterar a estabilidade da solução. Encontramos que nem m nem a razão $\frac{q}{|c_2\rho|}$ alteram a estabilidade da configuração de equilíbrio.

4.2.2.3 Configuração de equilíbrio a3, independente da fase.

Esta configuração de equilíbrio existe no intervalo $-\infty < q < \infty$ e as ocupações dos três estados hiperfinos e os parâmetros de vínculo μ e p são:

$$n_0 = 0 \ ; \ n_1 = \tfrac{1}{2}\left(1+m\right) \ ; \ n_{-1} = \tfrac{1}{2}\left(1-m\right) \ ; \ \mu = q + c_0\rho \ ; \ p = c_2\rho m$$

Os ramos de energia para esta configuração de equilíbrio são:

$$\begin{aligned} w^2 &= (c_2\rho)^2 m^2 + 2c_2\rho(\epsilon_k - q) + (\epsilon_k - q)^2 && (4.38) \\ w_-^2 &= C - \sqrt{D} && (4.39) \\ w_+^2 &= C + \sqrt{D} && (4.40) \end{aligned}$$

onde:

$$\begin{aligned} C &= \epsilon_k(c_0\rho + c_2\rho + \epsilon_k) && (4.41) \\ D &= \epsilon_k^2\left[(c_0\rho - c_2\rho)^2 + 4c_0\rho c_2\rho m^2\right] && (4.42) \\ &= \epsilon_k^2\left[(c_0\rho + c_2\rho)^2 - 4c_0\rho c_2\rho\left(1-m^2\right)\right] \end{aligned}$$

Para o ramo (4.38), as raízes de $w^2 = 0$ são:

$$\begin{aligned} \epsilon_k^1 &= q - c_2\rho + |c_2\rho|\sqrt{1-m^2} \\ \epsilon_k^2 &= q - c_2\rho - |c_2\rho|\sqrt{1-m^2} \end{aligned}$$

Portanto temos dois casos:

Se $c_2\rho > 0$ a estabilidade ocorre para valores de q tais que:

$$\frac{q}{|c_2\rho|} \leq 1 - \sqrt{1-m^2}$$

Se $c_2\rho < 0$ a estabilidade ocorre para valores de q tais que:

$$\frac{q}{|c_2\rho|} \leq -\left[1+\sqrt{1-m^2}\right]$$

Analisando agora o que acontece com os ramos (4.39) e (4.40) temos que verificar em que condições as desigualdades (4.6) são satisfeitas.

Vemos pela equação (4.41) que a primeira condição, $C > 0$, é sempre satisfeita.

A condição $D \geq 0$ também é satisfeita para qualquer sinal de $c_2\rho$.

Para testarmos a terceira condição vamos calcular $C - \sqrt{D}$:

$$C - \sqrt{D} = \epsilon_k \left(\epsilon_k + c_0\rho + c_2\rho - \sqrt{\left(c_0\rho + c_2\rho\right)^2 - 4c_0\rho c_2\rho\left(1-m^2\right)}\right)$$

Veja que o sinal do termo linear em ϵ_k determina a direção da desigualdade. Então se $c_2\rho > 0$ esse termo é positivo, $C > \sqrt{D}$ e o ramo será estável. Já para $c_2\rho < 0$ esse termo é negativo e o ramo será instável, pois $C < \sqrt{D}$ para $\epsilon_k > 0$.

O espectro de excitação para esta configuração de equilíbrio é:

$$\begin{aligned}
w &= \sqrt{(\epsilon_k - q)^2 + 2c_2\rho(\epsilon_k - q) + m^2(c_2\rho)^2} \\
w_+ &= \sqrt{\epsilon_k\left(\epsilon_k + c_0\rho + c_2\rho + \sqrt{(c_0\rho + c_2\rho)^2 - 4c_0\rho c_2\rho(1-m^2)}\right)} \\
w_- &= \sqrt{\epsilon_k\left(\epsilon_k + c_0\rho + c_2\rho - \sqrt{(c_0\rho + c_2\rho)^2 - 4c_0\rho c_2\rho(1-m^2)}\right)}
\end{aligned}$$

E a estabilidade desta configuração de equilíbrio é:

- Limite **antiferromagnético**, $c_2\rho > 0$, é estável para $\frac{q}{|c_2\rho|} \leq 1 - \sqrt{1-m^2}$.
- Limite **ferromagnético**, $c_2\rho < 0$, sempre instável.

A tabela (4.3) mostra um resumo da estabilidade das configurações de equilíbrio com campo magnético externo aplicado.

$m = 0$		**b1** $-1 \leq \frac{q}{2c_2\rho} \leq 1$	**b3** $-\infty < q < \infty$	**b4** $-\infty < q < \infty$
$c_2\rho > 0$	$cos\Theta = 1$	Instável		
	$cos\Theta = -1$			
	F.I.		Estável $q \leq 0$	**D.E./T.I** $0 \leq q \leq q_A$ **D.E./T.E.** $q > q_A$
$c_2\rho < 0$	$cos\Theta = 1$	Estável $0 \leq q \leq 2\|c_2\rho\|$		
	$cos\Theta = -1$			
	F.I.		Instável	**D.E./T.I** $2\|c_2\rho\| \leq q \leq q_F$ **D.E./T.E.** $q > q_F$

$m \neq 0$		**a1** $-\infty < \frac{q}{c_2\rho} < 1 + \sqrt{1-m^2}$	**a2** $\frac{q}{c_2\rho} > 1 - \sqrt{1-m^2}$	**a3** $-\infty < q < \infty$
$c_2\rho > 0$	$cos2\bar{\theta}_2 = 1$	Instável		
	$cos2\theta_2 = -1$		Instável	
	F.I.			Estável $\frac{q}{\|c_2\rho\|} \leq 1 - \sqrt{1-m^2}$
$c_2\rho < 0$	$cos2\bar{\theta}_2 = 1$	Estável $q \geq 0$		
	$cos2\theta_2 = -1$		Instável	
	F.I.			Instável

Tabela 4.3: Estabilidade das configurações de equilíbrio com campo magnético externo. **F.I.**-Fase Indeterminada. **D.E.**- Dinamicamente estável. **T.E.**- Termodinamicamente estável. **T.I.**- Termodinamicamente instável. $q_A = E_{HFS} - 2c_2\rho$ e $q_F = E_{HFS} + 2\,|c_2\rho|$.

As figuras a seguir, figuras (4.9) a (4.12), mostram as configurações de equilíbrio estáveis que ocorrem tanto para $m = 0$ quanto para $m \neq 0$, na presença de um campo magnético externo.

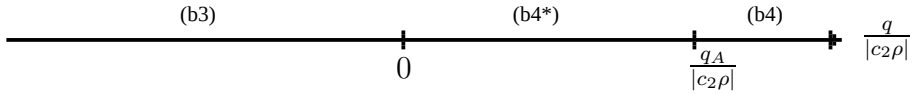

Figura 4.9: Configurações de equilíbrio estáveis como função de $\frac{q}{|c_2\rho|}$, na presença de campo magnético externo e com magnetização nula, no limite antiferromagnético. No ponto $\frac{q}{|c_2\rho|} = 0$ os estados de equilíbrio são a família de estados degenerados **b2**, **b3** e **b4**. Os pontos marcados no gráfico indicam onde ocorre mudança do estado de equilíbrio. Quando cruzamos o ponto $\frac{q_A}{|c_2\rho|} = E_{HFS} - 2c_2\rho$ o estado de equilíbrio **b4** passa de termodinamicamente instável, **b4***, para estável, **b4**.

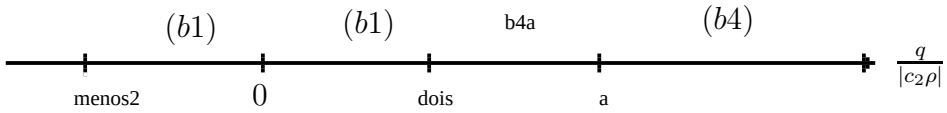

Figura 4.10: Configurações de equilíbrio estáveis como função de $\frac{q}{|c_2\rho|}$, com a presença de campo magnético externo e com magnetização nula, no limite ferromagnético. Os pontos marcados no gráfico indicam onde ocorre mudança do estado de equilíbrio. Quando cruzamos o ponto $\frac{q_F}{|c_2\rho|} = E_{HFS} + 2|c_2\rho|$ o estado de equilíbrio **b4** passa de termodinamicamente instável, **b4***, para estável, **b4**. No limite ferromagnético não existe configuração de equilíbrio para $\frac{q}{|c_2\rho|} < 0$.

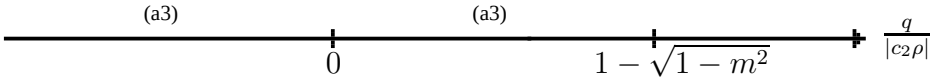

Figura 4.11: Configurações de equilíbrio estáveis como função de $\frac{q}{|c_2\rho|}$ para um valor fixo de $m \neq 0$, no limite antiferromagnético. Note que só existe estado de equilíbrio para $\frac{q}{|c_2\rho|} < 1 - \sqrt{1 - m^2}$.

4.3 O estado alinhado

Para as fronteiras $m = \pm 1$ a configuração de equilíbrio tem todos os átomos no estado de projeção do spin hiperfino $\alpha = \pm 1$ respectivamente, que é o estado de magnetização máxima.

Se $m = 1$, resolvendo as equações para os estados de equilíbrio, achamos que as ocupações e parâmetros de vínculo são:

$$n_0 = 0 \ ; \ n_1 = 1 \ ; \ n_{-1} = 0 \ ; \ \mu = q - p + (c_0 + c_2)\rho$$

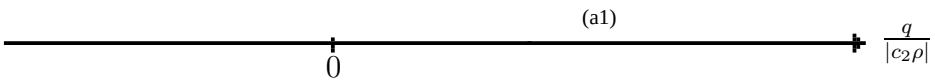

Figura 4.12: Configurações de equilíbrio estáveis como função de $\frac{q}{|c_2\rho|}$ para um valor fixo de $m \neq 0$, no limite ferromagnético. Note que só existe configuração de equilíbrio estável para $\frac{q}{|c_2\rho|} > 0$.

e as energias de excitação são:

$$
\begin{aligned}
w_1 &= \sqrt{\epsilon_k\left[\epsilon_k + 2(c_0 + c_2)\rho\right]} \\
w_2 &= \epsilon_k + p - q \\
w_3 &= \epsilon_k + 2p - 2c_2\rho
\end{aligned}
$$

a) Estado alinhado antiferromagnético

Pelo gráfico (4.13) vemos que o estado alinhado é o limite $m \to 1$ da configuração de equilíbrio **a3**. Este limite tem os seguintes parâmetros de vínculo e energias de excitação:

$$\mu = q + c_0\rho \ ; \ p = c_2\rho$$

$$
\begin{aligned}
w_1 &= \sqrt{\epsilon_k\left[\epsilon_k + 2(c_0 + c_2)\rho\right]} \\
w_2 &= \epsilon_k \\
w_3 &= \epsilon_k + c_2\rho(1 - \frac{q}{c_2\rho})
\end{aligned}
$$

Como $\frac{q}{c_2\rho} < 1$ o estado alinhado é estável.

b) Estado alinhado ferromagnético

Pelo gráfico (4.14) vemos que o estado alinhado é o limite $m \to 1$ da configuração de equilíbrio **a1**. Este limite tem os seguintes parâmetros de vínculo e energias de excitação:

$$q = p \ ; \ \mu = (c_0 + c_2)\rho$$

$$
\begin{aligned}
w_1 &= \sqrt{\epsilon_k\left[\epsilon_k + 2(c_0 + c_2)\rho\right]} \\
w_2 &= \epsilon_k \\
w_3 &= \epsilon_k + 2q - 2c_2\rho
\end{aligned}
$$

Como $q \geq 0$ e $c_2\rho < 0$, o estado alinhado ferromagnético é estável.

A determinação dos estados na fronteira inferior $m = -1$ é análogo ao que fizemos para a fronteira superior.

4.4 Diagrama de fase do sistema

Examinando as configurações de equilíbrio vemos que é possível classificá-las pela miscibilidade das componentes $\alpha = 0$ e $\alpha \pm 1$ [8]. Veja que existe uma fase miscível onde os três subníveis do spin hiperfino estão populados e duas fases imiscíveis onde o subnível $\alpha = 0$ está vazio ou com população máxima.

As configurações de equilíbrio miscíveis são **a1**, **a2**, **b1** e **b2**. As configurações de equilíbrio imiscíveis são, com $n_0 = 0$, **a3** e **b3**, e com $n_0 = 1$, **b4**.

Essa classificação das configurações de equilíbrio é uma consequência direta da conservação de S_z, que impõe a existência de um único processo que mistura a população dos subníveis hiperfinos $(0, 0) \rightleftharpoons (1, -1)$. Note que as configurações de equilíbrio miscíveis têm a fase da função de onda do condensado determinada, ao passo que a mesma é indeterminada nas configurações de equilíbrio imiscíveis.

Podemos examinar as propriedades das configurações de equilíbrio (que correspondem ao estado fundamental do sistema para um valor fixo de m) com respeito à quebra das simetrias U(1) e SO(2) associadas respectivamente a conservação do número de átomos e a simetria axial no espaço de spin [18].

Os estados miscíveis e o imiscível com $n_0 = 0$ quebram U(1) e SO(2), ao passo que o estado imiscível com $n_0 = 1$ quebra apenas U(1) pois é axialmente simétrica.

Nas figuras (4.13) e (4.14) apresentamos os gráficos do estado fundamental do sistema,

que corresponde aos estados de equilíbrio estáveis, no plano $m \times \frac{q}{|c_2\rho|}$.

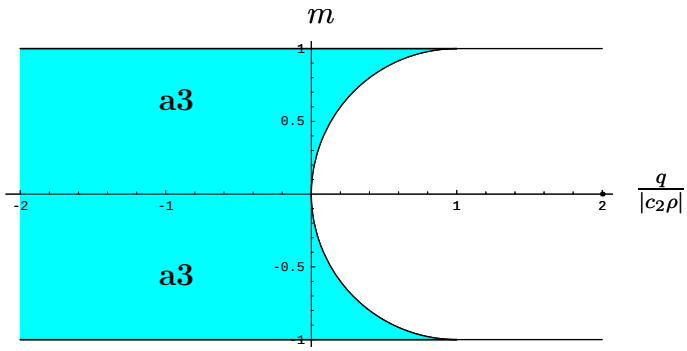

Figura 4.13: Fases de equilíbrio no plano $m \times \frac{q}{|c_2\rho|}$ no caso antiferromagnético. As configurações de equilíbrio estável no eixo $m = 0$ podem ser vistas na figura (4.2). Para $\frac{q}{|c_2\rho|} > 1 - \sqrt{1 - m^2}$ não existem configurações de equilíbrio estáveis ($m \neq 0$).

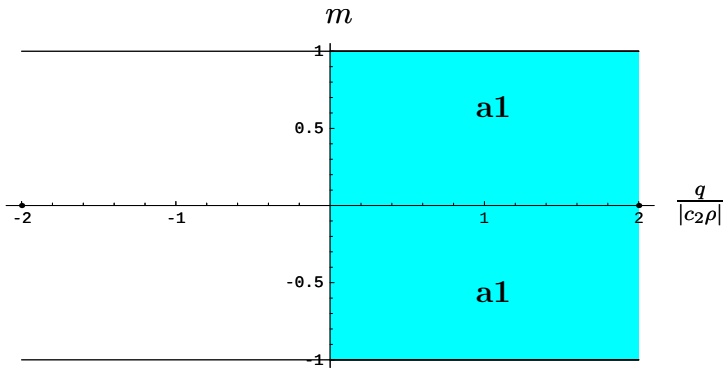

Figura 4.14: Fases de equilíbrio no plano $m \times \frac{q}{|c_2\rho|}$ no caso ferromagnético. As configurações de equilíbrio estável no eixo $m = 0$ podem ser vistas na figura (4.3). Para $\frac{q}{|c_2\rho|} < 0$ não existem configurações de equilíbrio estáveis ($m \neq 0$).

4.5 Características dos espectros de energia

Os espectros de energia encontrados para as configurações de equilíbrio deste trabalho podem apresentar os ramos sem lacuna do tipo Bogoliubov, com espectro característico de fônons, $w = \sqrt{\epsilon_k(\epsilon_k + 2M_A v_s^2)}$, onde v_s é a velocidade do som e também do tipo partícula livre, com espectro característico de magnons, $w = \epsilon_k$ [18].

De acordo com o teorema de Goldstone, existe um ramo sem lacuna quando uma simetria contínua é quebrada. No nosso caso as simetrias quebradas são U(1) e SO(2) relacionadas respectivamente com a conservação do número de átomos e com a simetria axial no espaço

de spin. Essa conexão será discutida adiante. A seguir vamos fazer um breve comentário sobre as características dos espectros de energias para as configurações de equilíbrio estáveis.

4.5.1 Configurações de equilíbrio estáveis sem campo magnético externo

1) Limite antiferromagnético

Neste limite as configurações de equilíbrio estáveis são **b2**, **b3**, e **b4** para $m = 0$ e **a3** para $m \neq 0$. **b2**, **b3** e **b4** têm o mesmo espectro, três ramos sem lacuna sendo um deles duplamente degenerado, do tipo Bogoliubov com velocidades do som iguais a

$$v_s = \sqrt{\frac{c_0\rho}{M_A}} \quad e \quad v_s = \sqrt{\frac{c_2\rho}{M_A}}$$

esta última referente ao ramo duplamente degenerado.

a3 tem dois ramos de energia sem lacuna, ambos do tipo Bogoliubov, com velocidades do som

$$v_s \;=\; \sqrt{\frac{c_0\rho + c_2\rho \pm \sqrt{(c_0\rho + c_2\rho)^2 - 4c_0\rho c_2\rho(1-m^2)}}{2M_A}}$$

e um ramo com lacuna igual a $g = |m|c_2\rho$.

2) Limite ferromagnético

Neste limite as configurações de equilíbrio estáveis são **b1** para $m = 0$ e **a1** para $m \neq 0$.

O espectro de **b1** tem dois ramos sem lacuna, um do tipo Bogoliubov com velocidade do som

$$v_s \;=\; \sqrt{\frac{c_0\rho - |c_2\rho|}{M_A}}$$

e outro do tipo partícula livre (magnon)

$$w = \epsilon_k$$

e um ramo com lacuna igual a $g = 2|c_2\rho|$.

O espectro de **a1** é idêntico ao de **b1**. Veja que as ocupações dependem de m mas o espectro de energias é independente de m.

4.6 Configurações de equilíbrio estável com campo magnético externo

1) Limite antiferromagnético

Neste limite as configurações de equilíbrio estáveis são, se $m = 0$, **b3** para $\frac{q}{|c_2\rho|} < 0$ e **b4** para $\frac{q}{|c_2\rho|} > \frac{q_A}{|c_2\rho|}$ e para $m \neq 0$ **a3** no intervalo $\frac{q}{|c_2\rho|} < 1 - \sqrt{1 - m^2}$.

O espectro de **b3** tem dois ramos sem lacuna do tipo Bogoliubov com velocidades do som

$$v_s = \sqrt{\frac{c_0\rho}{M_A}} \quad e \quad v_s = \sqrt{\frac{c_2\rho}{M_A}}$$

e um com lacuna igual a $g = \sqrt{q(q - c_2\rho)}$.

O espectro de **b4** tem dois ramos com lacuna iguais a $g = \sqrt{q(q + 2c_2\rho)} \pm p_Z$ e um ramo sem lacuna, do tipo Bogoliubov com velocidade do som

$$v_S = \sqrt{\frac{c_0\rho}{M_A}}$$

O espectro de **a3** tem dois ramos sem lacuna, do tipo Bogoliubov com velocidades do som

$$v_s = \sqrt{\frac{(c_0\rho + c_2\rho) \pm \sqrt{(c_0\rho + c_2\rho) - 4c_0\rho c_2\rho(1-m^2)}}{2M_A}}$$

independente do campo magnético e um ramo com lacuna igual a $g = \sqrt{(c_2\rho)^2 m^2 - 2c_2\rho + q^2}$.

2) Limite ferromagnético

Neste limite as configurações de equilíbrio estáveis são **b1** para $0 < \frac{q}{|c_2\rho|} \leq 2$ e **b4** para $\frac{q}{|c_2\rho|} \geq \frac{q_F}{|c_2\rho|}$, para $m = 0$ e **a1** para $m \neq 0$.

O espectro de **b1** tem dois ramos sem lacuna, um do tipo Bogoliubov com

$$v_s = \sqrt{\frac{q}{2M_A}}$$

e o outro tem comportamento tipo fônon para k pequeno com

$$v_s = \sqrt{\frac{(c_0\rho + c_2\rho)}{M_A}}$$

e um ramo com lacuna igual a $g = \sqrt{(2c_2\rho)^2 - q^2}$.

O espectro de **b4** tem dois ramos com lacuna igual a

$$g = \sqrt{q(q + 2c_2\rho)} \pm p_Z$$

e um ramo sem lacuna, do tipo Bogoliubov, com velocidade do som

$$v_s = \sqrt{\frac{c_0\rho}{M_A}}$$

No caso do espectro de **a1** tivemos que fazer a análise numericamente. Esta análise

aponta para a existência de dois ramos sem lacuna e um com lacuna como mostrado na figura (4.15).

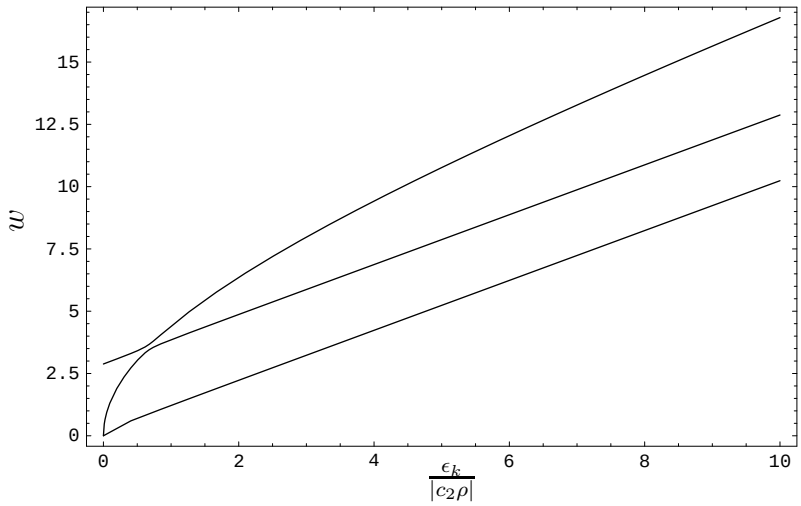

Figura 4.15: Espectro de excitação para a configuração de equilíbrio **a1** para os parâmetros seguintes: $\frac{c_0\rho}{|c_2\rho|} = 10$, $\frac{q}{|c_2\rho|} = -1$ e $m = \frac{1}{2}$.

O espectro mantém esta forma também em $q = 0$. Não temos expressões analíticas para a velocidade do som neste caso.

Pelo teorema de Goldstone existe uma relação entre os ramos sem lacuna e a quebra de simetrias contínuas. As simetrias quebradas são U(1) associada à conservação do número de átomos e SO(2) associada a invariância axial no espaço de spin.

Na presença de um campo magnético externo as configurações de equilíbrio quebram a simetria axial e a simetria de "gauge" e consequentemente têm dois ramos sem lacuna, exceto a configuração **b4** que é axialmente simétrica de modo que quebra apenas a simetria de calibre e consequentemente tem apenas um ramo sem lacuna.

Na ausência de campo magnético externo essa conexão permanece exceto para os estados com magnetização nula no limite antiferromagnético. Neste caso os três ramos de energia, um deles duplamente degenerado, são sem lacuna.

Capítulo 5

Conclusão

Nesta tese usamos a teoria de Bogoliubov para determinar as configurações de equilíbrio e as excitações coletivas de um condensado espinorial homogêneo com $S = 1$ na presença e na ausência de um campo magnético externo.

Num condensado espinorial com $S = 1$, o estado fundamental do sistema é caracterizado por um espinor de três componentes, uma para cada estado hiperfino. Essas componentes são denominadas na literatura de funções de onda do condensado e determinam a população e a fase dos átomos em cada subnível hiperfino.

Na teoria de Bogoliubov a configuração de equilíbrio é dada pelo vácuo das quasi-partículas que minimiza o valor médio de H com as condições de vínculo de que em média o sistema tenha um valor fixo do número de átomos e da magnetização. Para cada configuração de equilíbrio determinamos as excitações coletivas resolvendo as equações de Bogoliubov-de Gennes.

Examinando o comportamento dos ramos de energia das excitações coletivas determinamos as configurações de equilíbrio estáveis em função dos parâmetros do sistema $\frac{q}{|c_2\rho|}$ e m, onde q é a intensidade do termo quadrático da energia de Zeeman, c_2 é a intensidade da componente da interação átomo-átomo que depende do spin, ρ a densidade do condensado e m a magnetização por partícula.

Examinando o diagrama de fases do sistema vemos imediatamente que as propriedades do estado fundamental dependem crucialmente da natureza antiferromagnética, $c_2\rho > 0$, ou ferromagnética, $c_2\rho < 0$, dos átomos do gás.

Na discussão que segue vamos supor que o condensado está na presença de um campo magnético uniforme.

No limite antiferromagnético veremos que o estado fundamental é imiscível e de fase indeterminada.

Quando $m = 0$, o estado fundamental é **b3** onde $n_0 = 0$, para $\frac{q}{|c_2\rho|} < 0$ e é **b4** onde $n_0 = 1$, se $q > q_A$. Note que no intervalo $0 < q < q_A$ não existe uma configuração de equilíbrio estável. Nesse intervalo **b4** é termodinamicamente instável. A transição para um estado estável ocorre no ponto $q = q_A$. Na prática esse ponto não é acessível experimentalmente pois corresponde a $B = 2,5KG$ para o ^{23}Na.

Para $m \neq 0$ o estado fundamental é **a3** no intervalo $\frac{q}{|c_2\rho|} < 1 - \sqrt{1-m^2}$, imiscível, com $n_0 = 0$ e fase indeterminada. Examinando o diagrama de fases vemos que para um m fixo e variando $\frac{q}{|c_2\rho|}$ o sistema pode atingir a curva que delimita as regiões de estabilidade e instabilidade de **a3**, $\frac{q}{|c_2\rho|} = 1 - \sqrt{1-m^2}$. Quando isso acontece, como não existe uma configuração de equilíbrio estável quando q ultrapassa esse valor, fenômenos como o colapso do condensado podem ocorrer.

Na ausência de campo, $\frac{q}{|c_2\rho|} = 0$ e $m = 0$, temos a coexistência de três fases **b2**, **b3** e **b4** onde **b2** é um estado miscível e de fase determinada, $cos2\bar{\theta}_2 = -1$.

No limite ferromagnético, diferentemente do limite antiferromagnético, o estado fundamental pode ser miscível e de fase determinada.

Para $m = 0$ só existe configuração de equilíbrio estável se $\frac{q}{|c_2\rho|} > 0$. No intervalo $0 < \frac{q}{|c_2\rho|} \leq 2$, o estado fundamental é **b1**, miscível e de fase determinada $cos2\bar{\theta}_2 = 1$. Para $q > q_F$ o estado de equilíbrio é **b4** imiscível, de fase indeterminada e com $n_0 = 1$. Como no caso anterior, no intervalo $2|c_2\rho| \leq q < q_F$ **b4** é um estado de equilíbrio apenas dinamicamente estável. A transição para um estado estável ocorre no ponto $q = q_F$ que corresponde a $B = 9,7KG$ para o ^{87}Rb.

Quando $m \neq 0$ a configuração de equilíbrio estável é **a1** miscível e de fase determinada, $cos2\bar{\theta}_2 = 1$ e que existe apenas para $\frac{q}{|c_2\rho|} \geq 0$.

Para $m = 0$, o exame dos diagramas de fase mostra que para $\frac{q}{|c_2\rho|} \gg 1$ o estado fundamental é **b4**, independente da natureza antiferromagnética ou ferromagnética do sistema.

Essa propriedade é uma consequência do domínio do termo quadrático da energia de Zeeman e é responsável pelo fenômeno denominado na literatura de supressão da dinâmica de spins [11]. Esse efeito se reflete no diagrama de fase na transição **b1**→**b4** que ocorre para $\frac{q}{|c_2\rho|} = 2$ no limite ferromagnético, com a ressalva que essa transição é para um estado termodinamicamente instável. Já no limite antiferromagnético o reflexo desse efeito está na transição **b3**→**b4** para $\frac{q}{|c_2\rho|} = 0$. Considerando os dados da referência [9] a transição no ^{87}Rb ocorre para $B = 700mG$ que deve ser comparado com nossa previsão de $B = 600mG$. No limite ferromagnético o domínio do termo quadrático da energia de Zeeman é responsável pelo fenômeno conhecido como "dephasing" [11] para a mesma transição **b1**→**b4** pois **b1** é uma configuração de equilíbrio com fase fixa $cos2\bar{\theta}_2 = 1$ ao passo que **b4** é uma configuração de equilíbrio com fase indeterminada.

Examinando a natureza das transições mencionadas acima vemos que no limite ferromagnético e para $m = 0$ a transição **b1**→**b4** pode ser vista como uma transição de uma fase que quebra a simetria axial, **b1**, para uma que preserva essa simetria, **b4**. Do mesmo modo no limite antiferromagnético a transição **b3**→**b4** é uma transição entre uma fase que quebra a simetria, **b3**, para uma que preserva a simetria, **b4**. A diferença para o limite ferromagnético é que no ponto de transição $\frac{q}{|c_2\rho|} = 0$ temos a coexistência de três fases, **b2**, **b3** e **b4**. Por outro lado no limite ferromagnético, não existe coexistência de fases, a mudança é contínua da fase miscível com simetria quebrada para a fase imiscível simétrica.

Outra propriedade que segue da nossa descrição é a ausência de metaestabilidade no sistema no sentido de que não existem duas configurações de equilíbrio estáveis que coexistem na mesma região do espaço de parâmetros.

A ênfase do nosso trabalho está na identificação do estado fundamental do condensado que corresponde às configurações de equilíbrio estáveis. Para isto, identificamos não só as configurações de equilíbrio estáveis mas também as instáveis, o pode servir de guia para estudos sobre a formação de domínios de spin em condensados espinoriais. De acordo com [9, 15] a formação de domínios está relacionada com a evolução temporal de configurações de equilíbrio instáveis. Um modo de inicializar o sistema em uma configuração instável é colocá-lo em uma configuração estável para um dado campo magnético mas que se transforma em

uma configuração instável quando desligamos o campo. Acompanhando a evolução temporal do sistema observa-se a formação de domínios de spin.

Referências Bibliográficas

[1] W. Ketterle, Physics Today , 30 (December 1999).

[2] C. C. Bradley, C. A. Sackett, J. J. Tollett, and R. G. Hulet, Phys. Rev. Lett. **75**, 1687 (1995).

[3] K. B. Davis *et al.*, Phys. Rev. Lett. **75**, 3969 (1995).

[4] M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthews, C. E. Wieman, and E. A. Cornell, Science **269** (1995).

[5] A. J. Leggett, Rev. Mod. Phys. **73**, 307 (2001).

[6] D. M. Stamper-Kurn *et al.*, Phys. Rev. Lett. **80**, 2027 (1998).

[7] M. D. Barrett, J. A. Sauer, and M. S. Chapman, Phys. Rev. Lett. **87**, 010404 (2001).

[8] J. Stenger *et al.*, Nature (London) **396**, 345 (1998).

[9] M. S. Chang *et al.*, Phys. Rev. Lett. **92**, 140403 (2004).

[10] M. Chang, Q. Qin, W. Zhang, L. You, and M. S. Chapman, Nature Physics **1**, 111 (2005).

[11] H. Schmaljohann, M. Erhard, J. Kronjäger, K. Sengstock, and K. Bongs, Appl. Phys. B **79**, 1001 (2004).

[12] H. Schmaljohann *et al.*, Phys. Rev. Lett. **92**, 040402 (2004).

[13] D. M. Stamper-Kurn *et al.*, Phys. Rev. Lett. **83**, 661 (1999).

[14] S. Yi, L. You, and H. Pu, Phys. Rev. Lett. **93**, 040403 (2004).

[15] W. Zhang, D. L. Zhou, M. S. Chang, M. S. Chapman, and L. You, Phys. Rev. Lett. **95**, 180403 (2005).

[16] T. L. Ho, Phys. Rev. Lett. **81**, 742 (1998).

[17] T. Ohmi and K. Machida, J. Phys. Soc. Jpn. **67** (1998).

[18] K. Murata, H. Saito, and M. Ueda, Phys. Rev. A **75**, 013607 (2007).

[19] W. Zhang, S. Yip, and L. You, New. J. Phys **5** (2003).

[20] S. Yi, O. E. Müstecaplıoğlu, and L. You, Phys. Rev. A **68**, 013613 (2003).

[21] H. Pu, C. K. Law, S. Raghavan, J. H. Eberly, and N. P. Bigelow, Phys. Rev. A **60**, 1463 (1999).

[22] C. K. Law, H. Pu, and N. P. Bigelow, Phys. Rev. Lett. **81**, 5257 (1998).

[23] H. Saito and M. Ueda, Phys. Rev. A **72**, 023610 (2005).

[24] W. Zhang, D. L. Zhou, M. S. Chang, M. S. Chapman, and L. You, Phys. Rev. A **72**, 013602 (2005).

[25] D. R. Romano and E. J. V. de Passos, Phys. Rev. A **70**, 043614 (2004).

[26] A. A. Svidzinsky and A. L. Fetter, Phys. Rev. Lett. **84** (2000).