

Universidade de São Paulo
Instituto de Física
Departamento de Física-Matemática

Coexistência de Condensados
de Bose-Einstein
Atômico e Molecular

Leonardo Sioufi Fagundes dos Santos

Dissertação submetida ao
IFUSP para a obtenção do
título de Mestre em Ciências.

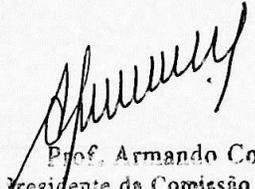
Banca Examinadora

Prof. Dr. A. F. R. de Toledo Piza (IFUSP) - Orientador

Prof. Dr. Emerson J. V. Passos (IFUSP)

Prof. Dr. Vanderlei S. Bagnato (IFSC/USP)

São Paulo, novembro de 2001


Prof. Armando Corbani Ferraz
Presidente da Comissão de Pós Graduação

INSTITUTO DE FÍSICA

Serviço de Biblioteca e Informação

Tombo: 3.610

ex. 2

def. 14/11/01

S237C

M

ex. 2

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

Santos, Leonardo Sioufi Fagundes dos

Coexistência de Condensados de Bose-Einstein
Atômico e Molecular. São Paulo 2001.

Dissertação (Mestrado) - Universidade de São Paulo
Instituto de Física - Departamento de Física Matemática

Orientador: Prof. Dr. António F. R. de Toledo Piza
Área de Concentração: Física

Unitermos: 1. Condensados de Bose-Einstein;
2. Átomos Ultra-frios;
3. Condensado Atômico-molecular;
4. Soluções Estacionárias;
5. Aproximação de Thomas-fermi.

USP/IF/SBI-068/2001

Agradecimentos

- Agradeço à Deus pela força e pelo apoio.
- Agradeço à minha mãe Ivone e à minha irmã Renata pela colaboração.
- Agradeço à minha namorada Maria de Fátima pelo incentivo constante.
- Agradeço ao meu orientador A. F. R. de Toledo-Piza pela dedicação.
- Agradeço meu amigo Marcelo O. da Costa Pires por ter me ensinado tudo sobre o editor de texto LATEX
- Agradeço à todos os amigos do Departamento de Física Matemática pela ajuda e pela companhia.
- Agradeço à FAPESP pelo apoio financeiro que possibilitou a realização desse trabalho.

Resumo

Este trabalho consiste em um estudo teórico da coexistência de condensados de Bose-Einstein atômicos e moleculares. Leva-se em conta a formação de moléculas (que neste trabalho serão diatômicas) e a destruição delas através de um termo de acoplamento apropriado na hamiltoniana do sistema, tratando a fase molecular como um campo independente. Todos os cálculos serão feitos supondo um condensado puramente coerente com a aproximação de Thomas-Fermi, que consiste em não levar em conta a energia cinética do sistema.

Um dos parâmetros naturais dos experimentos envolvendo os condensados de Bose-Einstein atômicos e moleculares é o número de partículas. Porém, neste trabalho é adotado um tratamento em termos do potencial químico. Tal abordagem mostra-se vantajosa para a construção de diagramas que caracterizam as condições de existência das diversas soluções estacionárias.

São apresentados muitos resultados analíticos. Por exemplo, o condensado é fortemente influenciado pela diferença de energia entre átomos e moléculas. Outro resultado importante é que um condensado pode ter uma solução para cada região espacial, mantendo contudo a continuidade da distribuição das densidades atômica e molecular. Além disso, são apresentados resultados numéricos incluindo condições próximas às experimentais. As diversas soluções estacionárias são analisadas pormenorizadamente.

Abstract

This work consists of a theoretical study of the coexistence of atomic and molecular Bose-Einstein condensates. It takes into account the formation of molecules (in this work they are diatomic molecules) and destruction of molecules through an appropriate coupling term in the system hamiltonian, treating the molecular phase as an independent field. All calculations are done within the Thomas-Fermi approximation, which consists in not taking into account the kinetic energy of the system.

An important natural parameter in experiments involving atomic and molecular Bose-Einstein condensates is the number of particles. However, in this work it is replaced a chemical potential. This approach is advantatageous for the construction os diagrams that characterize the conditions of existance of the various stationary solutions.

Many analitic results are given as well as numerical results including situations close to experimentaly realizable conditions. The several stationary solution are studied carefully.

Sumário

1	Introdução.	3
2	Estudo dos condensados de Bose-Einstein atômicos e moleculares.	8
2.1	Estudo de um condensado Bose-Einstein atômico	8
2.2	Coexistência de condensado atômico e molecular	11
2.3	Estados estacionários de um condensado atômico-molecular . .	14
2.4	Solução particular para condensado atômico-molecular ($\lambda_a = \lambda_b = \lambda$)	18
2.4.1	1ª restrição para a existência do condensado atômico-molecular	20
2.4.2	2ª restrição para a existência do condensado atômico-molecular	23
2.4.3	3ª restrição para a existência do condensado atômico-molecular	26
2.5	Resultados numéricos das experiências.	30
2.6	Simetria e descontinuidades do gráfico $\nu \times \epsilon$	31
3	Condensados Bose-Einstein atômicos e moleculares uniformes.	35
3.1	Condensados uniformes.	35
3.2	Estabilidade da solução molecular.	35
3.3	Estabilidade da solução atômico-molecular.	36
3.4	Energia das soluções atômico-moleculares	43
3.5	Energia da solução molecular	56
3.6	Pressão da solução molecular.	56

3.7	Pressão da solução atômico-molecular.	58
3.8	Resultados numéricos.	58
3.9	Análise das soluções uniformes.	60
4	Condensados de Bose-Einstein atômico-moleculares não uniformes.	63
4.1	Condensado Bose-Einstein não uniforme.	63
4.2	Anulamento das soluções	64
4.3	Solução I.	70
4.4	Solução II.	71
4.5	Solução III.	73
4.6	Solução IV.	76
4.7	Simulações numéricas.	77
4.8	Análise das soluções não uniformes.	79
5	Conclusão	95

Capítulo 1

Introdução.

A Mecânica Quântica foi o ramo da Física que mais contribuiu na compreensão dos sistemas microscópicos como o núcleo atômico, o átomo e as moléculas. Porém, até pouco tempo atrás, as evidências de que sistemas macroscópicos obedecessem as leis da Mecânica Quântica estavam limitadas a efeitos decorrentes da quantização da energia dos fótons ou do spin do elétron. Por exemplo, a Mecânica Quântica descrevia bem o fenômeno do paramagnetismo, o comportamento térmico de materiais a baixas temperaturas e a tecnologia usada na criação do laser. Ou melhor, não havia nenhum sistema macroscópico cujo o comportamento só podia ser explicado fazendo com que os átomos como um todo (não só seus elétrons) assumissem um comportamento quântico.

Na primeira metade do século *XX*, os físicos Satyendranath Bose e Albert Einstein identificaram uma transição de fase na teoria estatística para um gás ideal quântico de partículas que obedece a estatística de Bose-Einstein [1]. Em tal teoria, observa-se que para um certo número de partículas, há uma temperatura crítica abaixo da qual o estado fundamental adquire uma população macroscópica de partículas, hoje em dia denominada condensado de Bose-Einstein.

Se um condensado de Bose-Einstein fosse formado em laboratório, haveria um sistema macroscópico de átomos comportando-se segundo as previsões da Mecânica Quântica. Primeiramente, foram feitas experiências envolvendo hélio em estado de superfluido. Segundo os resultados teóricos e trabalhos experimentais, aproximadamente dez por cento dos átomos formariam um condensado de Bose-Einstein. Porém, devido à alta densidade, tais partículas estão tão correlacionadas que a análise microscópica torna-se muito complexa

[2]. A formação de um condensado de Bose-Einstein atômico ocorreu no final do século XX, pois nesta época já havia a tecnologia necessária para tal realização [3]. As experiências consistiram em resfriar e confinar milhões de átomos em um poço de potencial, bem aproximado por um potencial harmônico (podendo ou não ser isotrópico) gerado através de armadilhas magnéticas ou óticas (usando laser). Os átomos usados eram metais alcalinos com spin inteiro [4, 5, 6], em estado gasoso e com baixa densidade. Como tais gases são bastantes diluídos, pode-se considerar que as funções de onda associadas às partículas do condensado são independentes. Assim é possível desenvolver uma teoria de campo médio onde cada átomo está em um estado de partícula independente. Apesar disso, a contribuição da interação entre as partículas para o campo médio é muito importante. Essa interação é tratada em termos de um potencial de contato efetivo. Assim, o hamiltoniano obtido é:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}(\Psi^*(r)\nabla^2\Psi(r)) + \int (V(r)|\Psi(r)|^2 + \frac{\lambda}{2}|\Psi(r)|^4)d^3r \quad (1.1)$$

onde $V(r)$ é o potencial de confinamento, e $\frac{\lambda}{2}$ é um termo associado à interação entre as partículas.

As condições em que um condensado de Bose-Einstein existe (baixa temperatura, baixa densidade, interações interatômicas efetivas repulsivas dando origem a condensados de dimensões maiores que as do estado fundamental da armadilha) permite fazer a aproximação de Thomas-Fermi para calcular a função de onda associada ao sistema. Esta aproximação consiste em tratar o hamiltoniano sem o termo que corresponde ao operador energia cinética ($-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2$). Usando a aproximação de Thomas-Fermi e definindo uma densidade de hamiltoniano \mathcal{H} como $H = \int \mathcal{H}d^3r$, obtem-se:

$$\mathcal{H} = V|\Psi|^2 + \frac{\lambda}{2}|\Psi|^4 \quad (1.2)$$

É possível que dois condensados de Bose-Einstein coexistam em uma mesma região do espaço. Tal tipo de condensado é denominado híbrido. Há algumas situações em que isso ocorre: dois elementos químicos; um mesmo átomo em dois estados quânticos; moléculas formando-se em um condensado atômico, constituindo-se em duas fases distintas.

No caso de dois elementos químicos coexistindo em um condensado híbrido é necessário levar em conta os hamiltonianos dos dois condensados. Além dis-

so, é necessário adicionar no hamiltoniano as interações entre as espécies de átomos diferentes. Utilizando o índice a para um tipo de átomo e b para o outro. O hamiltoniano fica:

$$\mathcal{H} = V_a |\Psi_a|^2 + \frac{\lambda_a}{2} |\Psi_a|^4 + V_b |\Psi_b|^2 + \frac{\lambda_b}{2} |\Psi_b|^4 + \lambda |\Psi_a|^2 |\Psi_b|^2 \quad (1.3)$$

onde o termo λ está associado à interação dos diferentes tipos de átomo.

Há um trabalho muito interessante a respeito de um condensado de dupla espécie de Tin-Lun e V. B. Shenoy [7]. A aproximação de Thomas-Fermi é usada de modo que a hamiltoniana do trabalho é a mesma acima. O número de cada átomo de cada espécie é conservado de modo que há dois vínculos. Utilizando a cálculo variacional encontram-se dois multiplicadores de Lagrange: os potenciais químicos. Dois eixos cartesianos correspondendo cada um ao potencial químico de um condensado formam um plano. Os potenciais químicos determinam as funções de onda de cada condensado. Assim, em cada ponto do plano encontra-se determinadas as funções de onda correspondentes aos condensados. Há outros experimentos envolvendo condensados de dois elementos, porém não usam a mesma abordagem do anterior para analisar o sistema físico [8, 9, 10, 11].

Para um condensado híbrido de uma única espécie atômica em dois estados internos distintos, haverão dois condensados, cada um deles sendo formado pelos átomos em um dos dois estados. Ao contrário do condensado de dois elementos, o número de partículas de cada condensado não é necessariamente fixo, pois pode haver um mecanismo que garanta as transições $a \rightarrow b$ e $b \rightarrow a$. Quando um átomo de um condensado muda seu estado, ele passa a fazer parte do outro condensado. Para descrever isso é necessário introduzir um coeficiente denominado "coeficiente de Josephson" α que corresponde à taxa de conversão dos átomos de um estado em outro, ou seja, às transições eletromagnéticas induzidas representadas efetivamente por um termo adicional. Denota-se a função de onda de um condensado pelo índice a o outro pelo índice b . A conversão de a para b corresponde à $\Psi_a^* \Psi_b$ sendo que o inverso corresponde à $\Psi_a \Psi_b^*$. Assim, o hamiltoniano fica:

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & V_a |\Psi_a|^2 + \varepsilon_a |\Psi_a|^2 + \frac{\lambda_a}{2} |\Psi_a|^4 + V_b |\Psi_b|^2 + \varepsilon_b |\Psi_b|^2 + \frac{\lambda_b}{2} |\Psi_b|^4 + \lambda |\Psi_a|^2 |\Psi_b|^2 + \\ & + \alpha (\Psi_a^* \Psi_b + \Psi_a \Psi_b^*) \end{aligned} \quad (1.4)$$

onde ε_a e ε_b são respectivamente as energias dos estados atômico e molecular.

O que é realmente relevante é a diferença de energia destes estados. Assim, faz-se $\varepsilon_a = 0$ e $\varepsilon_b = \varepsilon$. Deste modo, ε fica sendo a diferença de energia entre os estados e a hamiltoniana fica escrita como:

$$\mathcal{H} = V_a |\Psi_a|^2 + \frac{\lambda_a}{2} |\Psi_a|^4 + V_b |\Psi_b|^2 + \varepsilon |\Psi_b|^2 + \frac{\lambda_b}{2} |\Psi_b|^4 + \lambda |\Psi_a|^2 |\Psi_b|^2 + \alpha (\Psi_a^* \Psi_b + \Psi_a \Psi_b^*) \quad (1.5)$$

Há trabalhos em que um laser com a frequência correspondente à diferença de energia entre os dois estados estimula as transições já citadas. A intensidade do laser determina a taxa de conversão dos átomos de um estado em outro (α).

Há experimentos engenhosos onde a transição de estados é garantida pela transição Raman [14, 15]. Esta consiste em fazer uma transição proibida através de duas transições intermediárias permitidas. Dois lasers com as respectivas frequências das transições são acionados. Controlando as intensidades dos lasers é possível controlar a taxa de conversão dos átomos de um estado em outro (α). As frequências dos lasers determinam a dessintonia (ε).

O terceiro caso é o condensado atômico-molecular. Nele os átomos formam moléculas diatômicas, havendo um condensado de átomos e outro de moléculas. A hamiltoniana é análoga à anterior. Porém, para cada molécula “criada”, dois átomos “desaparecem”. Logicamente, para cada molécula que “desaparece”, dois átomos são “criados”. Denota-se as átomos pelo índice a e as moléculas pelo índice b . A criação de moléculas é correspondente à $\Psi_a^* \Psi_b$ e a dissolução à $\Psi_a^2 \Psi_b^*$. A hamiltoniana fica:

$$\mathcal{H} = V_a |\Psi_a|^2 + \frac{\lambda_a}{2} |\Psi_a|^4 + V_b |\Psi_b|^2 + \varepsilon |\Psi_b|^2 + \frac{\lambda_b}{2} |\Psi_b|^4 + \lambda |\Psi_a|^2 |\Psi_b|^2 + \alpha (\Psi_a^* \Psi_b + \Psi_a^2 \Psi_b^*) \quad (1.6)$$

onde ε é a diferença entre a energia de uma molécula e a de dois átomos desacoplados.

Para que um átomo possa integrar uma molécula é necessário que seu estado interno sofra transições através de interação hiperfina. Um dos métodos para formar moléculas em um condensado é utilizar a ressonância de Feshbach. Tal ressonância corresponde à condição em que a diferença de energia (ε) é próxima de zero. A diferença de energia (ε) é denominada “dessintonia”.

Há um trabalho que discute em detalhes tal fenômeno [12]. Em alguns experimentos um condensado foi confinado por armadilha ótica e foi colocado em uma região do espaço onde há um campo magnético uniforme que varia com uma frequência correspondente à dessintonia [13]. Assim a dessintonia pôde ser calibrada. Então diversos condensados foram formados e observados em diversos valores da dessintonia. Tal método pode não ser o ideal pois ele limita fortemente os estados moleculares relevantes.

Há experimentos engenhosos onde a formação de moléculas é garantida pela transição Raman [14, 15]. Este experimento é o melhor para estudar um condensado de Bose-Einstein atômico-molecular.

Nesta dissertação, o estudo do condensado atômico-molecular é inspirado no trabalho citado anteriormente de um condensado de dois elementos [7]. Para fazer um diagrama análogo ao anterior há a dificuldade de que o número de átomos livres e o de moléculas pode não ser conservado. O único vínculo que existe é o número total de partículas (número de átomos somado ao dobro do número de moléculas). Então só há um potencial químico. A outra variável que deve acompanhar o potencial químico deve determinar junto com esta as funções do condensado atômico e do molecular. A variável que sobrou é a dessintonia.

No capítulo 2 deste trabalho são exibidas as diversas soluções estacionárias no plano que tem como abcissa a dessintonia e ordenada o potencial químico. Estuda-se detalhadamente um caso particular em que as soluções são analíticas. As soluções que estiverem associadas a densidades negativas ou mesmo não reais são excluídas e as regiões onde isso ocorre é determinada. No capítulo 3 faz-se um estudo dos condensados uniformes. Já no capítulo 4 é feito um estudo dos condensados não uniformes, com todas as possíveis soluções sendo detalhadamente estudadas. Enfim, no capítulo 5 está a conclusão.

Capítulo 2

Estudo dos condensados de Bose-Einstein atômicos e moleculares.

2.1 Estudo de um condensado Bose-Einstein atômico

A energia H de um condensado de Bose-Einstein pode ser escrita como:

$$H = \int \mathcal{H} d^3r \quad (2.1)$$

onde a densidade de hamiltoniano \mathcal{H} é dada pela equação abaixo. $V(r)$ é um potencial externo sendo $r = 0$ o ponto onde o potencial é nulo, λ é um coeficiente ligado a interação átomo-átomo e $\Psi(r)$ é a função de onda. Na aproximação de Thomas-Fermi, despreza-se a energia cinética. Assim:

$$\mathcal{H} = V|\Psi(r)|^2 + \frac{\lambda}{2}|\Psi(r)|^4 \quad (2.2)$$

O estado fundamental do sistema pode ser aproximado pelo mínimo de H . Para calcular este mínimo, basta usar um conhecido multiplicador de Lagrange: o potencial químico μ . O vínculo é o número de partículas N . O sistema estudado fica sob tal condição que o número de partículas não se altera. Define-se uma densidade de partículas ρ tal que $N = \int \rho d^3r$. Mas também é verdade que $N = \int |\Psi(r)|^2 d^3r$. Assim, $\rho(r) = |\Psi(r)|^2$.

Então, usando o método dos multiplicadores de Lagrange, deve-se minimizar $H - \mu N$. Omitindo a dependência em r obtem-se :

$$H - \mu N = \int \mathcal{H} d^3r - \mu \int \rho d^3r = \int (\mathcal{H} - \mu \rho) d^3r \quad (2.3)$$

Para $H - \mu N$ ser mínimo, o integrando $(\mathcal{H} - \mu \rho)$ deve ser tal que qualquer variação deste não altere o termo $(\mathcal{H} - \mu \rho)$ em primeira ordem. Assim:

$$H - \mu N \rightarrow H - \mu N + \delta(H - \mu N) \quad (2.4)$$

$$\int (\mathcal{H} - \mu \rho) d^3r \rightarrow \int (\mathcal{H} - \mu \rho) d^3r + \int \delta(\mathcal{H} - \mu \rho) d^3r \quad (2.5)$$

$$\mathcal{H} - \mu \rho \rightarrow (\mathcal{H} - \mu \rho) + \delta(\mathcal{H} - \mu \rho) \quad (2.6)$$

Sendo que

$$\mathcal{H} - \mu \rho = V|\Psi|^2 + \frac{\lambda}{2}|\Psi|^4 - \mu|\Psi|^2 = (V - \mu)|\Psi|^2 + \frac{\lambda}{2}|\Psi|^4 \quad (2.7)$$

Definindo $\nu = \mu - V$ obtem-se

$$\mathcal{H} - \mu \rho = -\nu|\Psi|^2 + \frac{\lambda}{2}|\Psi|^4 \quad (2.8)$$

Como o parâmetro de variação na função $(\mathcal{H} - \mu \rho)$ é Ψ , então para calcular $\delta(\mathcal{H} - \mu \rho)$ da 2.6 deve-se fazer $\Psi \rightarrow \Psi + \delta\Psi$. Assim:

$$|\Psi|^2 = \Psi^* \Psi \rightarrow \Psi^*(\Psi + \delta\Psi) = |\Psi|^2 + \Psi^* \delta\Psi \quad (2.9)$$

$$|\Psi|^2 \rightarrow |\Psi|^2 + \Psi^* \delta\Psi \quad (2.10)$$

$$|\Psi|^4 = (|\Psi|^2)^2 \rightarrow (|\Psi|^2 + \Psi^* \delta\Psi)^2 = |\Psi|^4 + 2|\Psi|^2 \Psi^* \delta\Psi + (\Psi^* \delta\Psi)^2 \quad (2.11)$$

Desprezando os termos de variação de segunda ordem, obtem-se:

$$|\Psi|^4 \rightarrow |\Psi|^4 + 2|\Psi|^2 \Psi^* \delta\Psi \quad (2.12)$$

Substituindo tudo isso nas eqs. 2.6 e 2.8 chega-se à:

$$(\mathcal{H} - \mu\rho) + \delta(\mathcal{H} - \mu\rho) = -\nu(|\Psi|^2 + \Psi^*\delta\Psi) + \frac{\lambda}{2}(|\Psi|^4 + 2|\Psi|^2\Psi^*\delta\Psi) \quad (2.13)$$

Fazendo a 2.13 - 2.8 obtem-se:

$$\delta(\mathcal{H} - \mu\rho) = -\nu\Psi^*\delta\Psi + \frac{\lambda}{2}2|\Psi|^2\Psi^*\delta\Psi = \Psi^*(-\nu + \lambda|\Psi|^2)\delta\Psi \quad (2.14)$$

Fazendo $\delta(\mathcal{H} - \mu\rho) = 0$ e olhando para a 2.14, conclui-se que um dos fatores é zero. Como $\delta\Psi$ é arbitrário, somente os outros dois fatores podem ser iguais à zero. Então a 2.14 tem duas soluções: o primeiro fator é zero ou o segundo fator é que é nulo. O que resulta: $-\nu + \lambda|\Psi|^2 = 0 \Rightarrow |\Psi|^2 = -\frac{\nu}{\lambda}$

Assim:

Solução trivial:

$$\Psi = 0 \quad (2.15)$$

Solução não trivial:

$$|\Psi|^2 = \frac{\nu}{\lambda} \quad (2.16)$$

A primeira solução exige que haja vácuo, pois se $\Psi = 0 \Rightarrow N = \int \rho d^3r = \int |\Psi|^2 d^3r = 0$. Assim, tal solução só é válida quando a segunda não o for.

Já a segunda solução não exige vácuo. Porém, ela só é válida para $|\Psi|^2 > 0$. Assim, $|\Psi|^2 > 0 \Rightarrow -\frac{\nu}{\lambda} > 0 \Rightarrow \nu < 0$ pois λ é positivo. Então:

$$\nu \geq 0 \Rightarrow |\Psi|^2 = \frac{\nu}{\lambda} \quad (2.17)$$

$$\nu \leq 0 \Rightarrow \Psi = 0 \quad (2.18)$$

No limite $\nu \rightarrow 0$, tanto pela direita como pela esquerda, ocorre $|\Psi|^2 = 0$. Logo a função $|\Psi|^2$ é contínua. Assim, a transição do condensado atômico para o vácuo não é abrupta. Pode-se dizer que $\nu = 0$ é a borda do condensado atômico. Para visualizar tal situação basta olhar para o gráfico abaixo onde é exibida a densidade $|\Psi|^2$ em função de ν (figura 2.1). Note que como $V = V(r)$ (supondo um potencial isotrópico) e nos experimentos V cresce com o raio, então ν tem como valor máximo μ . Assim, conhecendo μ e sabendo que ν diminui até o valor zero é possível saber a distribuição espacial do condensado. Como o condensado é limitado pela condição $\nu = 0$ o raio deste será àquele que satisfaz a equação $V(r) = \mu$.

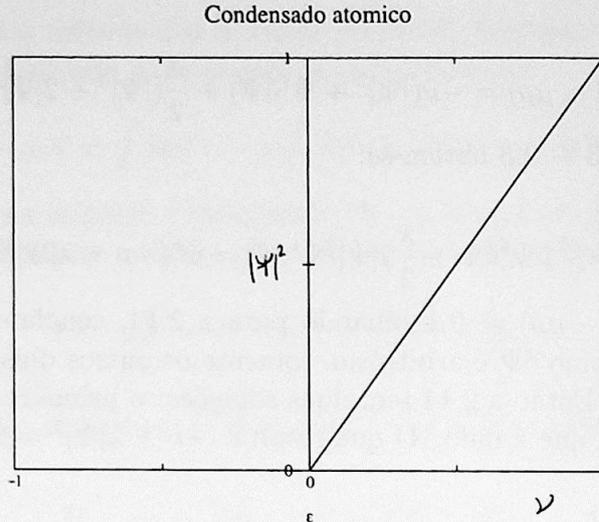


Figura 2.1: Gráfico de um condensado de Bose-Einstein atômico. A abscissa corresponde ao potencial químico efetivo ν e a ordenada à densidade $|\Psi|^2$.

2.2 Coexistência de condensado atômico e molecular

Agora os cálculos serão modificados de modo a levar em conta a formação de moléculas a partir de átomos do próprio condensado. Representa-se as funções de onda de átomos e moléculas respectivamente por Ψ_a e Ψ_b . Para escrever a densidade de energia correspondente a tal situação, basta modificar a densidade de energia de modo a incluir a presença de moléculas: além da interação átomo-átomo (índice λ_a), haverá interação molécula-molécula (índice λ_b) e interação átomo-molécula (índice λ). Acrescido à isso, a energia dos átomos separados (ϵ_a) é diferente da dos átomos unidos (ϵ_b). Haverão dois potenciais: um a que estão sujeitos os átomos V_a e outro a que estão sujeitas as moléculas V_b . Além disso, há um coeficiente α que caracteriza a taxa da conversão de átomos em moléculas (representada como a função $\Psi_b \Psi_a^{*2}$) e vice-versa (representada como a função $\Psi_b^* \Psi_a^2$, que é o complexo conjugado da primeira função). Usando a aproximação de Thomas-Fermi, serão desprezados os termos de energia cinética dos átomos e das moléculas.

$$H = \int \mathcal{H} d^3r \quad (2.19)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & V_a |\Psi_a|^2 + \frac{\lambda_a}{2} |\Psi|^4 + \varepsilon_a |\Psi_a|^2 + V_b |\Psi_b|^2 + \frac{\lambda_b}{2} |\Psi_b|^4 + \varepsilon_b |\Psi_b|^2 + \\ & + \lambda |\Psi_a|^2 |\Psi_b|^2 + \alpha (\Psi_a^2 \Psi_b^* + \Psi_b \Psi_a^{*2}) \end{aligned} \quad (2.20)$$

Tal equação pode ser simplificada. Primeiramente, o que interessa nas energias atômica e molecular não são seus valores e sim a diferença entre eles. Então, define-se $\varepsilon_a = 0$ e $\varepsilon_b = \varepsilon$.

Em segundo lugar, tal estudo será restringido a potenciais isotrópicos harmônicos. Assim é possível aproximar os potenciais V_a e V_b por osciladores harmônicos simples. $V_a = m \frac{\omega^2 r^2}{2}$ e $V_b = M \frac{\omega^2 r^2}{2}$, onde m e M são respectivamente a massa de um átomo e a massa de uma molécula, e r é a distância à origem do potencial. Considerando o caso de moléculas diatômicas, faz-se $M = 2m$. Então, com todas estas considerações $V_b = 2V_a$. Logo:

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & V_a |\Psi_a|^2 + \frac{\lambda_a}{2} |\Psi|^4 + (2V_a + \varepsilon) |\Psi_b|^2 + \frac{\lambda_b}{2} |\Psi_b|^4 + \lambda |\Psi_a|^2 |\Psi_b|^2 + \\ & + \alpha (\Psi_a^2 \Psi_b^* + \Psi_b \Psi_a^{*2}) \end{aligned} \quad (2.21)$$

Analogamente ao caso atômico, no condensado atômico-molecular o número de partículas ficará constante. Porém, desta vez, parte dos átomos estará na forma atômica enquanto outra estará sob a forma molecular. Lembrando que cada molécula tem dois átomos e definindo N_a o número de átomos isolados e N_b o de moléculas, o número total dos átomos é $N = N_a + 2N_b$. Também pode ser definido ρ_a , ρ_b e ρ tal que $N_a = \int \rho_a d^3r$, $N_b = \int \rho_b d^3r$ e $N = \int \rho d^3r$. Analogamente ao caso atômico, $\rho_a = |\Psi_a|^2$ e $\rho_b = |\Psi_b|^2$, onde $\rho = \rho_a + 2\rho_b$.

A energia deve ser minimizada. Assim como no caso anterior, será usado o multiplicador de Lagrange μ . O vínculo será o número total de átomos N . Serão achados os mínimos da quantidade $(H - \mu N)$.

$$\begin{aligned} H - \mu N &= \int \mathcal{H} d^3r - \mu \int \rho d^3r = \int \mathcal{H} d^3r - \mu \int (\rho_a + 2\rho_b) d^3r = \\ &= \int (\mathcal{H} - \mu(\rho_a + 2\rho_b)) d^3r \end{aligned} \quad (2.22)$$

Seguindo um procedimento totalmente análogo ao da seção anterior, para minimizar $(H - \mu N)$, basta minimizar o integrando $(\mathcal{H} - \mu\rho)$. Seu valor é determinado pela subtração da 2.21 por $\mu\rho = \mu(\rho_a + 2\rho_b) = \mu(|\Psi_a|^2 + 2|\Psi_b|^2)$:

$$\begin{aligned} \mathcal{H} - \mu\rho = & (V_a - \mu)|\Psi_a|^2 + \frac{\lambda_a}{2}|\Psi|^4 + (2V_a + \varepsilon - 2\mu)|\Psi_b|^2 + \frac{\lambda_b}{2}|\Psi_b|^4 + \\ & + \lambda|\Psi_a|^2|\Psi_b|^2 + \alpha(\Psi_a^2\Psi_b^* + \Psi_b\Psi_a^{*2}) \end{aligned} \quad (2.23)$$

Analogamente ao caso atômico, define-se $\nu = \mu - V_a$. Substituindo na eq.2.23.

$$\begin{aligned} \mathcal{H} - \mu\rho = & (-\nu)|\Psi_a|^2 + \frac{\lambda_a}{2}|\Psi|^4 + (\varepsilon - 2\nu)|\Psi_b|^2 + \frac{\lambda_b}{2}|\Psi_b|^4 + \\ & + \lambda|\Psi_a|^2|\Psi_b|^2 + \alpha(\Psi_a^2\Psi_b^* + \Psi_b\Psi_a^{*2}) \end{aligned} \quad (2.24)$$

Tal como no caso atômico, deve-se verificar se uma variação em $(\mathcal{H} - \mu\rho)$ é nula. Novamente, em analogia com o caso atômico, os parâmetros a serem variados são Ψ_a e Ψ_b . De acordo com a eq.2.10 e 2.12.

$$|\Psi_a|^2 \rightarrow |\Psi_a|^2 + \Psi_a^*\delta\Psi_a \quad (2.25)$$

$$|\Psi_b|^2 \rightarrow |\Psi_b|^2 + \Psi_b^*\delta\Psi_b \quad (2.26)$$

$$|\Psi_a|^4 \rightarrow |\Psi_a|^4 + 2|\Psi_a|^2\Psi_a^*\delta\Psi_a \quad (2.27)$$

$$|\Psi_b|^4 \rightarrow |\Psi_b|^4 + 2|\Psi_b|^2\Psi_b^*\delta\Psi_b \quad (2.28)$$

Usando as eq.2.24 e 2.25, e desprezando termos de segunda ordem:

$$|\Psi_a|^2|\Psi_b|^2 \rightarrow (|\Psi_a|^2 + \Psi_a^*\delta\Psi_a)(|\Psi_b|^2 + \Psi_b^*\delta\Psi_b) \quad (2.29)$$

Assim:

$$|\Psi_a|^2|\Psi_b|^2 \rightarrow |\Psi_a|^2|\Psi_b|^2 + |\Psi_a|^2\Psi_b^*\delta\Psi_b + \Psi_a^*\delta\Psi_a|\Psi_b|^2 \quad (2.30)$$

Continuando com os mesmos raciocínios:

$$\Psi_a^{*2}\Psi_b \rightarrow \Psi_a^{*2}(\Psi_b + \delta\Psi_b) \Rightarrow \Psi_a^{*2}\Psi_b \rightarrow \Psi_a^{*2}\Psi_b + \Psi_a^{*2}\delta\Psi_b \quad (2.31)$$

$$\Psi_b^*\Psi_a^2 \rightarrow \Psi_b^*(\Psi_a + \delta\Psi_a)^2 \Rightarrow \Psi_b^*\Psi_a^2 \rightarrow \Psi_b^*\Psi_a^2 + 2\Psi_b^*\Psi_a\delta\Psi_a \quad (2.32)$$

Então, da eq.2.24 até 2.32 obtém-se uma expressão análoga à eq.2.13:

$$\begin{aligned}
\mathcal{H} - \mu\rho + \delta(\mathcal{H} - \mu\rho) \cong & (-\nu)(|\Psi_a|^2 + \Psi_a^* \delta\Psi_a) + \\
& + \frac{\lambda_a}{2}(|\Psi_a|^4 + 2|\Psi_a|^2 \Psi_a^* \delta\Psi_a) + \\
& + (\varepsilon - 2\nu)(|\Psi_b|^2 + \Psi_b^* \delta\Psi_b) + \\
& + \frac{\lambda_b}{2}(|\Psi_b|^4 + 2|\Psi_b|^2 \Psi_b^* \delta\Psi_b) + \\
& + \lambda(|\Psi_a|^2 |\Psi_b|^2 + |\Psi_a|^2 \Psi_b^* \delta\Psi_b + \Psi_a^* \delta\Psi_a |\Psi_b|^2) + \\
& + \alpha(\Psi_a^{*2} \Psi_b + \Psi_a^{*2} \delta\Psi_b + \Psi_b^* \Psi_a^2 + 2\Psi_b^* \Psi_a \delta\Psi_a) \quad (2.33)
\end{aligned}$$

Fazendo a eq.2.33 – eq.2.24 obtém-se:

$$\begin{aligned}
\delta(\mathcal{H} - \mu\rho) = & \delta\Psi_a(-\nu\Psi_a^* + \lambda_a\Psi_a^*|\Psi_a|^2 + \lambda\Psi_a^*|\Psi_b|^2 + \\
& + 2\alpha\Psi_b^*\Psi_a) + \delta\Psi_b((-2\nu + \varepsilon)\Psi_b^* + \lambda_b\Psi_b^*|\Psi_b|^2 + \\
& + \lambda|\Psi_a|^2\Psi_b^* + \alpha\Psi_a^{*2}) \quad (2.34)
\end{aligned}$$

Tal acréscimo deve ser nulo, pois o ponto é de mínimo (ou máximo). Como $\delta\Psi_a$ e $\delta\Psi_b$ são arbitrários, faz-se com que aquilo que multiplica tais fatores seja nulo ! Assim, obtém-se duas equações:

$$\Psi_a^*(-\nu + \lambda_a|\Psi_a|^2 + \lambda|\Psi_b|^2) + 2\alpha\Psi_b^*\Psi_a = 0 \quad (2.35)$$

$$\Psi_b^*(-2\nu + \varepsilon + \lambda_b|\Psi_b|^2 + \lambda|\Psi_a|^2) + \alpha\Psi_a^{*2} = 0 \quad (2.36)$$

As soluções de tais equações são os estados estacionários do condensado de Bose-Einstein e são análogas à eq.2.14. Há quatro soluções para elas, havendo somente três válidas fisicamente.

2.3 Estados estacionários de um condensado atômico-molecular

A primeira solução para o condensado atômico-molecular é $\Psi_a = 0$ e $\Psi_b = 0$. Esta é a solução trivial. Tais valores de funções de onda implicam em $|\Psi_a|^2 = 0$ e $|\Psi_b|^2 = 0$. Logo não há átomos nem moléculas: é o vácuo. Não

há nenhuma restrição a tal solução. Porém sempre que houverem partículas no sistema haverá uma região no espaço onde não pode haver vácuo. Assim, tal solução só válida onde outras soluções mostram-se impossíveis.

Já a segunda solução estacionária é $\Psi_a = 0$ e $\Psi_b \neq 0$. Tal solução é um condensado exclusivamente molecular, pois não há átomos ($|\Psi_a|^2 = 0$), mas há moléculas ($|\Psi_b|^2 \neq 0$). Substituindo $\Psi_a = 0$ na eq.2.36, obtem-se uma expressão do tipo $0 = 0$, ou seja Ψ_b pode assumir qualquer valor. Porém, tomando a mesma solução na eq.2.36 chega-se a expressão:

$$\Psi_b^*(-2\nu + \varepsilon + \lambda_b|\Psi_b|^2) = 0 \quad (2.37)$$

Como nesta solução já foi imposto que $\Psi_b \neq 0$ resta apenas:

$$-2\nu + \varepsilon + \lambda_b|\Psi_b|^2 = 0 \quad (2.38)$$

Cuja solução é:

$$|\Psi_b|^2 = \frac{2\nu - \varepsilon}{\lambda_b} \quad (2.39)$$

Tal solução, ao contrário da primeira, nem sempre é válida. Como $|\Psi_b|^2 \geq 0 \Rightarrow \nu \geq \frac{\varepsilon}{2}$. Esta condição está associada ao fato de "ε" ser a quantidade de energia necessária para dois átomos formarem uma molécula.

É interessante notar que no limite $\nu \rightarrow \frac{\varepsilon}{2} \Rightarrow |\Psi_b|^2 = 0$. Para $\nu = \frac{\varepsilon}{2}$ a primeira e a segunda solução coincidem. Assim, não existe uma transição abrupta do condensado molecular para o vácuo. Isto é análogo ao que acontece na solução atômica (ver 2.17 e 2.18). Neste caso o potencial químico efetivo de uma molécula é 2ν (pois tem dois átomos). Como a dissociação de moléculas é proibida faz-se $\varepsilon = 0$. Fazendo as substituições $2\nu \rightarrow \nu$ e $\varepsilon \rightarrow 0$ as 2.17 e 2.39 ficam iguais.

Outra solução a ser testada é $\Psi_a \neq 0$ e $\Psi_b = 0$. Substituindo nas eqs.2.35 e 2.36 obtem-se:

$$\Psi_a^*(-\nu + \lambda_a|\Psi_a|^2) = 0 \quad (2.40)$$

$$\alpha\Psi_a^* = 0 \quad (2.41)$$

Olhando para a eq.2.41, $\alpha \neq 0 \Rightarrow \Psi_a = 0$, o que torna a condição $\Psi_a \neq 0$ e $\Psi_b = 0$ não estacionária. A condição $\Psi_a \neq 0$ e $\Psi_b = 0$ indica que o condensado é exclusivamente atômico, pois há átomos ($|\Psi_a|^2 \neq 0$) e

não há moléculas ($|\Psi_b|^2 = 0$). Assim, havendo átomos haverá a formação de moléculas. O contrário não é válido. Como α está associada à formação e dissolução de moléculas, pode-se interpretar um condensado exclusivamente atômico como tendo $\alpha \rightarrow 0$. Pela eq.2.41, neste limite Ψ_a pode ser diferente de zero. Neste limite particular, pela eq.2.40, $|\Psi_a|^2 = \frac{\nu}{\lambda_a}$ (o que corresponde a eq.2.17 que é um condensado atômico). Há a restrição $\nu \geq 0$. Porém α exatamente zero não tem como soluções as eqs.2.35 e 2.36. Assim, a solução que seria terceira não será estudada.

A terceira solução é $\Psi_a \neq 0$ e $\Psi_b \neq 0$. Esta a solução é a mais interessante porque nela ocorre a coexistência dos condensados de Bose-Einstein atômico e molecular. Como Ψ_a e Ψ_b são funções complexas, pode-se representá-las na forma polar como $\Psi_a = |\Psi_a|e^{i\phi_a}$ e $\Psi_b = |\Psi_b|e^{i\phi_b}$. Assim, multiplicando a eq.2.35 por Ψ_a e a eq.2.36 por Ψ_b obtém-se:

$$|\Psi_a|^2(-\nu + \lambda_a|\Psi_a|^2 + \lambda|\Psi_b|^2) + 2\alpha\Psi_a^2\Psi_b^* = 0 \quad (2.42)$$

$$|\Psi_b|^2(-2\nu + \varepsilon + \lambda_b|\Psi_b|^2 + \lambda|\Psi_a|^2) + \alpha\Psi_a^*\Psi_b = 0 \quad (2.43)$$

Escrevendo $\Psi_a^2\Psi_b^*$ na forma polar obtém-se $(|\Psi_a|e^{i\phi_a})^2|\Psi_b|e^{-i\phi_b} = |\Psi_a|^2|\Psi_b|e^{i(2\phi_a - \phi_b)}$. Definindo $\phi = 2\phi_a - \phi_b \Rightarrow \Psi_a^2\Psi_b^* = |\Psi_a|^2|\Psi_b|e^{i\phi}$. Então, $\Psi_a^*\Psi_b = (\Psi_a^2\Psi_b^*)^* = |\Psi_a|^2|\Psi_b|e^{-i\phi}$. Substituindo tudo nas eqs.2.42 e 2.43 obtém-se:

$$|\Psi_a|^2(-\nu + \lambda_a|\Psi_a|^2 + \lambda|\Psi_b|^2) + 2\alpha|\Psi_a|^2|\Psi_b|e^{i\phi} = 0 \quad (2.44)$$

$$|\Psi_b|^2(-2\nu + \varepsilon + \lambda_b|\Psi_b|^2 + \lambda|\Psi_a|^2) + \alpha|\Psi_a|^2|\Psi_b|e^{-i\phi} = 0 \quad (2.45)$$

Como $\Psi_a \neq 0$ e $\Psi_b \neq 0 \Rightarrow |\Psi_a| \neq 0$ e $|\Psi_b| \neq 0$. Assim as eqs.2.44 e 2.45 ficam

$$-\nu + \lambda_a|\Psi_a|^2 + \lambda|\Psi_b|^2 + 2\alpha|\Psi_b|e^{i\phi} = 0 \quad (2.46)$$

$$|\Psi_b|(-2\nu + \varepsilon + \lambda_b|\Psi_b|^2 + \lambda|\Psi_a|^2) + \alpha|\Psi_a|^2e^{-i\phi} = 0 \quad (2.47)$$

As eqs.2.46 e 2.47 são homogêneas. Assim, tanto a parte real como a imaginária são nulas em cada uma delas. Os termos $(-\nu + \lambda_a|\Psi_a|^2 + \lambda|\Psi_b|^2)$ e $|\Psi_b|(-2\nu + \varepsilon + \lambda_b|\Psi_b|^2 + \lambda|\Psi_a|^2)$ são reais. Já os termos $2\alpha|\Psi_b|e^{i\phi}$ e $\alpha|\Psi_a|^2e^{-i\phi}$

A primeira solução, o vácuo, não será alterada pois não depende de λ_a , λ_b e nem de λ e é sempre válida.

Já a segunda solução, em termos de λ fica

$$|\Psi_a| = 0 \quad (2.60)$$

$$|\Psi_b| = \frac{(2\nu - \varepsilon)}{\lambda} \quad (2.61)$$

Das eqs. 2.52 e 2.53 da terceira solução obtém-se em termos de λ :

$$-\nu + \lambda|\Psi_a|^2 + \lambda|\Psi_b|^2 + 2\alpha|\Psi_b|\beta = 0 \quad (2.62)$$

$$|\Psi_b|(-2\nu + \varepsilon + \lambda|\Psi_b|^2 + \lambda|\Psi_a|^2) + \alpha|\Psi_a|^2\beta = 0 \quad (2.63)$$

Isolando $|\Psi_a|^2$ em 2.62 obtém-se

$$|\Psi_a|^2 = \frac{(\nu - 2\alpha\beta|\Psi_b|)}{\lambda} - |\Psi_b|^2 \quad (2.64)$$

Aplicando 2.64 em 2.63 obtém-se uma expressão independente de $|\Psi_a|$. Após manipulações algébricas e usando as propriedades 2.54 e 2.55 chega-se à:

$$\frac{1}{2}|\Psi_b|^2 - \beta \frac{(\lambda\varepsilon - \lambda\nu - 2\alpha^2)}{6\lambda\alpha} |\Psi_b| - \frac{\nu}{6\lambda} = 0 \quad (2.65)$$

Neste ponto é conveniente definir duas novas funções: B e C.

$$B = \frac{\lambda\varepsilon - \lambda\nu - 2\alpha^2}{6\alpha\lambda} \quad (2.66)$$

$$C = \frac{\nu}{3\lambda} \quad (2.67)$$

Escrevendo a eq. 2.65 com as definições de B e C tem-se:

$$\frac{1}{2}|\Psi_b|^2 - \beta B |\Psi_b| - \frac{C}{2} = 0 \quad (2.68)$$

A solução de tal equação é:

$$|\Psi_b| = \beta B \pm \sqrt{B^2 + C} \quad (2.69)$$

detuning X potencial quimico efetivo

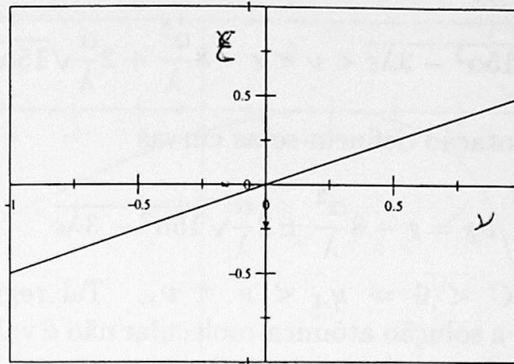


Figura 2.2: Tanto a abcissa (dessintonia) quanto a ordenada (potencial químico efetivo) estão com a escala de uma unidade para $\frac{\alpha^2}{\lambda}$. Em todos os diagramas $\nu \times \epsilon$ à seguir tal unidade será mantida. A reta que divide o plano é $\nu = \frac{\epsilon}{2}$. Acima da reta há a solução molecular e abaixo há vácuo.

Sabendo o valor de $|\Psi_b|$ e usando a rel. 2.64 chega-se ao valor de $|\Psi_a|^2$.

Há três condições para que a solução apresentada seja válida:

- * $|\Psi_b|$ deve ser real, logo $B^2 + C \geq 0$;
- * $|\Psi_b| \geq 0 \implies \beta B \pm \sqrt{B^2 + C} \geq 0$;
- * $|\Psi_a| \geq 0$.

Para que tudo fique claro, tais condições podem ser visualizadas num gráfico $\nu \times \epsilon$. Estes são os parâmetros de controle da experiência. Um exemplo da praticidade de tal método é representar neste gráfico a solução molecular. Como foi visto, pela 2.39, tal solução só pode ocorrer quando $\nu \geq \frac{\epsilon}{2}$. Graficamente isto é representado pela fig. 2.2.

2.4.1 1ª restrição para a existência do condensado atômico-molecular

Para provar a primeira condição, o teste será por absurdo. Ver-se-á onde a solução é válida em $B^2 + C < 0$. Das rels. 2.66 e 2.67:

$$\frac{(\lambda\epsilon - \lambda\nu - 2\alpha^2)^2}{(6\alpha\lambda)^2} + \frac{\nu}{3\lambda} < 0 \quad (2.70)$$

Após algumas manipulações algébricas onde ν é isolado:

$$\varepsilon - 8\frac{\alpha^2}{\lambda} - 2\frac{\alpha}{\lambda}\sqrt{15\alpha^2 - 3\lambda\varepsilon} < \nu < \varepsilon - 8\frac{\alpha^2}{\lambda} + 2\frac{\alpha}{\lambda}\sqrt{15\alpha^2 - 3\lambda\varepsilon} \quad (2.71)$$

Para facilitar a notação definem-se as curvas

$$\nu_{\pm} = \varepsilon - 8\frac{\alpha^2}{\lambda} \pm 2\frac{\alpha}{\lambda}\sqrt{15\alpha^2 - 3\lambda\varepsilon} \quad (2.72)$$

Assim, se $B^2 + C < 0 \Rightarrow \nu_- < \nu < \nu_+$. Tal região é denominada "zona proibida" pois a solução atômica-molecular não é válida nela. A região proibida não atinge valores infinitos de ν . Para que a curva ν_{\pm} exista, olhando a própria definição, 2.72 é necessário ter $(15\alpha^2 - 3\lambda\varepsilon) \geq 0$. Logo a curva ν_{\pm} não existe para $(15\alpha^2 - 3\lambda\varepsilon) < 0 \Rightarrow \varepsilon > 5\frac{\alpha^2}{\lambda}$.

Então a "região proibida" fica definida como *ZP*:

$$\nu_- < \nu < \nu_+ \quad (2.73)$$

Antes de prosseguir analisa-se as curvas ν_+ e ν_- .

Faz-se a hipótese $\nu_+ > 0$. Tomando a definição 2.72 e fazendo manipulações algébricas tem-se:

$$2\frac{\alpha}{\lambda}\sqrt{15\alpha^2 - 3\lambda\varepsilon} > 8\frac{\alpha^2}{\lambda} - \varepsilon \quad (2.74)$$

Claramente o 1.º membro da inequação é positivo. Tomando a definição 2.73, como $\nu \leq 5\frac{\alpha^2}{\lambda} \Rightarrow (8\frac{\alpha^2}{\lambda} - \varepsilon) \geq 0$. Como os dois membros da inequação são positivos, elevam-se os dois ao quadrado. Após manipulações algébricas chega-se à

$$0 > \left(\frac{2\alpha^2}{\lambda} - \varepsilon\right)^2 \quad (2.75)$$

O que constitui um absurdo, o quadrado de um número real nunca é negativo. Assim, é impossível $\nu_+ > 0$.

É interessante descobrir o ponto onde $\nu_+ = 0$. Faz-se $0 = \left(\frac{2\alpha^2}{\lambda} - \varepsilon\right)^2$ o que resulta:

$$\nu_+ = 0 \Rightarrow \varepsilon = 2\frac{\alpha^2}{\lambda} \quad (2.76)$$

É fácil ver que a hipótese $\nu_+ < 0$ não conduz a nenhum absurdo. Assim:

potencial químico efetivo X detuning

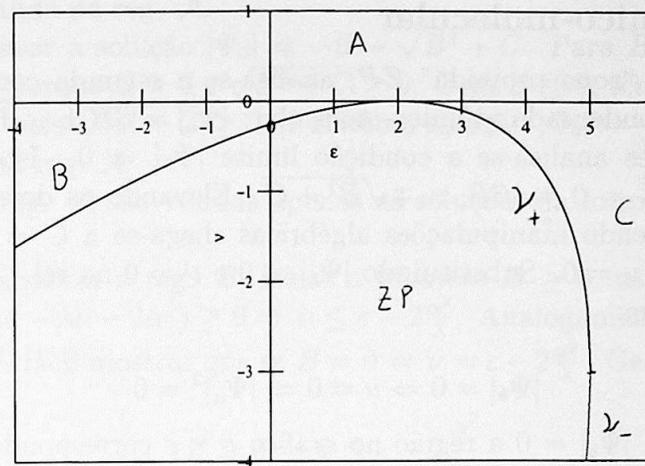


Figura 2.3: Plano $\nu \times \epsilon$. As curvas ν_+ e ν_- interceptam-se no ponto $\epsilon = 5\frac{\alpha^2}{\lambda}$ e $\nu = -3\frac{\alpha^2}{\lambda}$. A zona proibida ZP é àquela limitada pelas curvas.

$$\nu_+ \leq 0 \quad (2.77)$$

Levando em conta que $2\frac{\alpha}{\lambda}\sqrt{15\alpha^2 - 3\lambda\epsilon} \geq 0$, então $\nu_+ = \epsilon - 8\frac{\alpha^2}{\lambda} + 2\frac{\alpha}{\lambda}\sqrt{15\alpha^2 - 3\lambda\epsilon} \geq \epsilon - 8\frac{\alpha^2}{\lambda} - 2\frac{\alpha}{\lambda}\sqrt{15\alpha^2 - 3\lambda\epsilon} = \nu_-$. Logo, $\nu_+ > \nu_-$. Unindo tal informação com a eq. 2.77 tem-se:

$$0 \geq \nu_+ \geq \nu_- \quad (2.78)$$

No caso limite $\nu_+ = \nu_-$ obtem-se pela def. 2.72, $2\frac{\alpha}{\lambda}\sqrt{15\alpha^2 - 3\lambda\epsilon} = -2\frac{\alpha}{\lambda}\sqrt{15\alpha^2 - 3\lambda\epsilon} \Rightarrow 2\frac{\alpha}{\lambda}\sqrt{15\alpha^2 - 3\lambda\epsilon} = 0 \Rightarrow 15\alpha^2 - 3\lambda\epsilon = 0 \Rightarrow \epsilon = 5\frac{\alpha^2}{\lambda}$. Substituindo tal valor de ϵ em ν_+ obtem-se:

$$\nu_+ = \nu_- = -3\frac{\alpha^2}{\lambda} \Rightarrow \epsilon = 5\frac{\alpha^2}{\lambda} \quad (2.79)$$

Finalmente o esboço da figura está acima.

2.4.2 2ª restrição para a existência do condensado atômico-molecular

Já excluindo a “zona proibida” ZP , analisa-se a segunda condição para a existência do condensado atômico-molecular: $|\Psi_b| = \beta B \pm \sqrt{B^2 + C} \geq 0$.

Porém, antes analisa-se a condição limite $|\Psi_b| = 0$. Isto implica em $\beta B \pm \sqrt{B^2 + C} = 0 \Rightarrow \beta B = \mp \sqrt{B^2 + C}$. Elevando os dois membros ao quadrado e fazendo manipulações algébricas chega-se a $C = 0$. Pela def. 2.67, $C = 0 \Rightarrow \nu = 0$. Substituindo $|\Psi_b| = 0$ e $\nu = 0$ na rel. 2.64 obtém-se $|\Psi_a|^2 = 0$. Assim:

$$|\Psi_b| = 0 \Rightarrow \nu = 0 \Rightarrow |\Psi_a|^2 = 0 \quad (2.80)$$

Assim, para $|\Psi_b| = 0$ a região no gráfico $\nu \times \varepsilon$ correspondente é $\nu = 0$. Assim, divide-se o espaço $\nu \times \varepsilon$ em duas regiões cuja a “fronteira” é $\nu = 0$. Como a “zona proibida” ZP “toca” o eixo $\nu = 0$ em $\varepsilon = 2\frac{\alpha^2}{\lambda}$ então o plano fica dividido em três regiões definidas como:

- Região A $\nu \geq 0$;
- Região B $\nu_+ \leq \nu \leq 0$ para $\varepsilon \leq 2\frac{\alpha^2}{\lambda}$;
- Região C $\nu_+ \leq \nu \leq 0$ para $2\frac{\alpha^2}{\lambda} \leq \varepsilon \leq 5\frac{\alpha^2}{\lambda}$
e $\nu \leq \nu_-$ para $\varepsilon \leq 5\frac{\alpha^2}{\lambda}$
e $\nu \leq 0$ para $\varepsilon \geq 5\frac{\alpha^2}{\lambda}$.

Tais regiões estão representadas na fig.2.3.

Agora procede-se a análise das regiões. Começa-se pela reg. A . Nela $\nu \geq 0$, que pela def. 2.67 implica em $C \geq 0 \Rightarrow \sqrt{B^2 + C} \geq |B|$. Define-se também $A = -B$ onde neste caso $\sqrt{A^2 + C} \geq |A|$. Para a solução $|\Psi_b| = B + \sqrt{B^2 + C}$ ($\beta = +1$ e sinal “+”), tem-se $|\Psi_b| \geq 0$ porque $B \geq 0$ e $\sqrt{B^2 + C} \geq 0$. Já para $B \leq 0$ faz-se $A \geq 0 \Rightarrow |\Psi_b| = -A + \sqrt{A^2 + C} \geq 0$ pois $\sqrt{A^2 + C} \geq |A|$. Assim $|\Psi_b| = B + \sqrt{B^2 + C}$ é solução aceitável na reg. A .

Já a solução $|\Psi_b| = B - \sqrt{B^2 + C}$ com $B \geq 0$, tem-se $|\Psi_b| \leq 0$ pois $\sqrt{B^2 + C} \geq |B|$. Com $B \leq 0 \Rightarrow |\Psi_b| = -A - \sqrt{A^2 + C} \leq 0$. Assim, $|\Psi_b| \leq 0$ tornando a solução $|\Psi_b| = B - \sqrt{B^2 + C}$ inválida na reg. A .

E a solução $|\Psi_b| = -B + \sqrt{B^2 + C}$, para $B \geq 0$ é válida porque $\sqrt{B^2 + C} \geq |B| \Rightarrow |\Psi_b| = -B + \sqrt{B^2 + C} \geq 0$. Com $B \leq 0$, obtém-se $|\Psi_b| = A +$

$\sqrt{A^2 + C} \geq 0$ pois $A \geq 0$ e $A^2 + C \geq 0$. Assim a solução $|\Psi_b| = -B + \sqrt{B^2 + C}$ é válida na reg. \mathcal{A} .

Resta analisar a solução $|\Psi_b| = -B - \sqrt{B^2 + C}$. Para $B \geq 0 \Rightarrow -B - \sqrt{B^2 + C} \leq 0$ porque $B \geq 0$ e $\sqrt{B^2 + C} \geq 0$. Com $B \leq 0$, tem-se $|\Psi_b| = A - \sqrt{A^2 + C} \leq 0$ pois $\sqrt{A^2 + C} \geq |A|$. Então a solução $|\Psi_b| = -B - \sqrt{B^2 + C}$ não é válida na reg. \mathcal{A} .

Então na reg. \mathcal{A} são válidas apenas as soluções da forma $|\Psi_b| = \beta B + \sqrt{B^2 + C}$.

Antes de analisar a reg. \mathcal{B} , faz-se a hipótese $B \geq 0$, usando a def. 67 implica em $(\lambda\varepsilon - \lambda\nu - 2\alpha^2) \geq 0 \Rightarrow \nu \leq \varepsilon - 2\frac{\alpha^2}{\lambda}$. Analogamente, se $B \leq 0 \Rightarrow \nu \geq \varepsilon - 2\frac{\alpha^2}{\lambda}$. É fácil mostrar que se $B = 0 \Leftrightarrow \nu = \varepsilon - 2\frac{\alpha^2}{\lambda}$. Geometricamente:

$$B \geq 0 \Rightarrow \nu \leq \varepsilon - 2\frac{\alpha^2}{\lambda} \quad (2.81)$$

$$B \leq 0 \Rightarrow \nu \geq \varepsilon - 2\frac{\alpha^2}{\lambda} \quad (2.82)$$

A reta $\nu = \varepsilon - 2\frac{\alpha^2}{\lambda}$ intercepta o eixo ε no ponto $\nu = 0 \Rightarrow \varepsilon = 2\frac{\alpha^2}{\lambda}$. Tal ponto é o mesmo onde a curva ν_+ cruza o eixo ε . Assim, resta saber se a curva $\nu = \varepsilon - 2\frac{\alpha^2}{\lambda}$ intercepta outros pontos da curva ν_+ .

Hipótese: $\nu_+ \geq \varepsilon - 2\frac{\alpha^2}{\lambda}$. Após manipulações algébricas e usando a def. 2.72 obtém-se $\sqrt{15\alpha^2 - 3\lambda\varepsilon} \geq 3\alpha$. Como para $\varepsilon \leq 5\frac{\alpha^2}{\lambda}$, ambos os lados são positivos elevam-se os dois membros da inequação ao quadrado. Com outras operações algébricas obtém-se $\varepsilon \leq 2\frac{\alpha^2}{\lambda}$. Assim a hipótese $\nu_+ \geq \varepsilon - 2\frac{\alpha^2}{\lambda}$ só é válida para $\varepsilon \leq 2\frac{\alpha^2}{\lambda}$.

Como a reg. \mathcal{B} inclui $\nu_+ \leq \nu \leq 0$ para $\varepsilon \leq 2\frac{\alpha^2}{\lambda}$ então, usando as eq. 2.82 $\nu \geq \nu_+ \geq \varepsilon - 2\frac{\alpha^2}{\lambda} \Rightarrow \nu \geq \varepsilon - 2\frac{\alpha^2}{\lambda} \Rightarrow B \leq 0$. Assim, na reg. \mathcal{B} , $B \leq 0$. Para facilitar os cálculos, testa-se as quatro soluções usando $A = -B$, onde A deve ser maior que zero. Na reg. \mathcal{B} , $\nu \leq 0 \Rightarrow C \leq 0 \Rightarrow \sqrt{B^2 + C} \leq |B| \Rightarrow \sqrt{A^2 + C} \leq |A| = A$. Usando todas as informações acima testa-se as quatro soluções de $|\Psi_b|$:

- $|\Psi_b| = B + \sqrt{B^2 + C} = -A + \sqrt{A^2 + C} \leq 0$ pois $\sqrt{A^2 + C} \leq |A|$;
- $|\Psi_b| = B - \sqrt{B^2 + C} = -A - \sqrt{A^2 + C} \leq 0$ pois $\sqrt{A^2 + C} \geq 0$ e $A \geq 0$;
- $|\Psi_b| = -B + \sqrt{B^2 + C} = A + \sqrt{A^2 + C} \geq 0$ pois $\sqrt{A^2 + C} \geq 0$ e $A \geq 0$;

- $|\Psi_b| = -B - \sqrt{B^2 + C} = A - \sqrt{A^2 + C} \geq 0$ pois $\sqrt{A^2 + C} \leq |A|$;

Logo, as soluções válidas na reg. B são do tipo $|\Psi_b| = -B \pm \sqrt{B^2 + C}$.

Fazendo a hipótese $\nu_+ \leq \varepsilon - 2\frac{\alpha^2}{\lambda}$ obtem-se por trabalho algébrico $\sqrt{15\alpha^2 - 3\lambda\varepsilon} \leq 3\alpha$. Como $\varepsilon \leq 5\frac{\alpha^2}{\lambda}$, os dois lados da inequação anterior podem ser elevados ao quadrado resultando $15\alpha^2 - 3\alpha\varepsilon \leq 9\alpha^2 \Rightarrow \varepsilon \geq 2\frac{\alpha^2}{\lambda}$. Mas como $\varepsilon \leq 5\frac{\alpha^2}{\lambda}$ então $\nu_+ \leq \varepsilon - 2\frac{\alpha^2}{\lambda}$ para $2\frac{\alpha^2}{\lambda} \leq \varepsilon \leq 5\frac{\alpha^2}{\lambda}$.

Faz-se a hipótese $\nu_- \geq \varepsilon - 2\frac{\alpha^2}{\lambda}$. Pela rel. 2.72 isto implica em $-2\frac{\alpha^2}{\lambda}\sqrt{15\alpha^2 - 3\lambda\varepsilon} > 6\frac{\alpha^2}{\lambda}$. O primeiro membro é menor que zero sendo que é igual a este para $\varepsilon = 5\frac{\alpha^2}{\lambda}$. Já o segundo membro é extritamente maior que zero. Vê-se um número extritamente positivo ser menor que um número negativo. Assim tal inequação não tem solução: a hipótese $\nu_- \geq \varepsilon - 2\frac{\alpha^2}{\lambda}$ leva a um absurdo. Assim, resta apenas:

$$\nu_- \leq \varepsilon - 2\frac{\alpha^2}{\lambda} \quad (2.83)$$

Na reg. C , para $2\frac{\alpha^2}{\lambda} \leq \varepsilon \leq 5\frac{\alpha^2}{\lambda}$ tem-se $\nu_+ \leq \nu \leq 0$. Lembrando da rel. 2.80 e 2.81, como para $2\frac{\alpha^2}{\lambda} \leq \varepsilon \leq 5\frac{\alpha^2}{\lambda} \Rightarrow 0 \leq \varepsilon - 2\frac{\alpha^2}{\lambda} \leq 3\frac{\alpha^2}{\lambda} \Rightarrow \nu \leq 0 \leq \varepsilon - 2\frac{\alpha^2}{\lambda} \Rightarrow \nu \leq \varepsilon - 2\frac{\alpha^2}{\lambda} \Rightarrow B \geq 0$. Na reg. C $\nu \leq \nu_-$ mas $\nu_- < \varepsilon - 2\frac{\alpha^2}{\lambda}$. Pela rel. 2.81 que isto implica $B > 0$. Na reg. C (a parte restante), para $\varepsilon \geq 5\frac{\alpha^2}{\lambda}$ tem-se $\nu \leq 0$. Se $\varepsilon \geq 5\frac{\alpha^2}{\lambda} \Rightarrow \varepsilon - 2\frac{\alpha^2}{\lambda} \geq 3\frac{\alpha^2}{\lambda} \geq 0 \geq \nu \Rightarrow \nu \leq \varepsilon - 2\frac{\alpha^2}{\lambda}$ o que implica $B \geq 0$. Assim na reg. C , $B \geq 0$.

Mas na reg. C , $\nu \leq 0 \Rightarrow C \leq 0 \Rightarrow \sqrt{B^2 + C} \leq |B|$. Mas como $B \geq 0 \Rightarrow \sqrt{B^2 + C} \leq B$. Testando as quatro soluções:

- * $|\Psi_b| = B + \sqrt{B^2 + C} \geq 0$ por razões claras;
- * $|\Psi_b| = B - \sqrt{B^2 + C} \geq 0$ pois $B \geq \sqrt{B^2 + C}$;
- * $|\Psi_b| = -B + \sqrt{B^2 + C} \leq 0$ pois $B \geq \sqrt{B^2 + C}$;
- * $|\Psi_b| = -B - \sqrt{B^2 + C} \leq 0$ por razões claras.

Assim, na reg. C vale apenas $|\Psi_b| = B \pm \sqrt{B^2 + C}$.

Há um modo alternativo de verificar se $|\Psi_b| \geq 0$. Basta verificar se um ponto no interior da reg. A resulta em $|\Psi_b| \geq 0$. Caso isto ocorra neste ponto, toda a reg. A terá $|\Psi_b| \geq 0$, pois $|\Psi_b| = 0$ ocorre somente em $\nu = 0$. Caso $|\Psi_b| \leq 0$ neste ponto, toda a região A terá $|\Psi_b| \leq 0$. O mesmo procedimento se aplica nas regs. B e C .

Para analisar a terceira condição de existência do condensado atômico-molecular, $|\Psi_a|^2 \geq 0$, será usado este procedimento.

2.4.3 3ª restrição para a existência do condensado atômico-molecular

Primeiramente acha-se a curva $|\Psi_a|^2 = 0$. A rel. 2.80 mostra que para $|\Psi_b| = 0$ tal condição é satisfeita. Além disso, tal curva é determinada através da relação entre os coeficientes da eq. 2.59. Tomando o caso particular $\lambda_b = \lambda$ a eq. 2.59 fica:

$$\frac{2\alpha^2 - 2\alpha\sqrt{\alpha^2 + \lambda\nu} + \lambda\nu}{\lambda} = 2\nu - \varepsilon \quad (2.84)$$

Resolvendo para ν , e chamando as soluções de ν'_\pm obtém-se:

$$\nu'_\pm = \varepsilon + 4\frac{\alpha^2}{\lambda} \pm \frac{2\alpha}{\lambda}\sqrt{\lambda\varepsilon + 4\alpha^2} \quad (2.85)$$

Assim se $|\Psi_a|^2 = 0 \Rightarrow \nu = \nu'_\pm$.

As curvas ν'_+ e ν'_- são válidas apenas para $(\lambda\varepsilon + 4\alpha^2) \geq 0 \Rightarrow \varepsilon \geq -4\frac{\alpha^2}{\lambda}$.

É importante salientar que nas regiões $\nu = 0$, ν'_+ ou ν'_- , $|\Psi_a|^2$ pode ser igual à zero: nem sempre o é. Isto porque já se partiu da hipótese $|\Psi_a|^2 = 0$ e foi visto quais valores de $|\Psi_b|$ possíveis para tal. Por exemplo, foi visto que $|\Psi_b| = -\frac{\alpha}{\lambda} - \sqrt{\frac{\alpha^2}{\lambda^2} + \nu\lambda}$ não é solução aceitável, pois neste caso $|\Psi_b| \leq 0$. Outro exemplo é que para $\nu = 0 \Rightarrow |\Psi_b| = \beta B \pm |B|$. Nem sempre a expressão $\beta B \pm |B|$ é nula. Porém isto não atrapalha em nada. O que é preciso saber é onde $|\Psi_a|^2$ pode ser zero. Nem sempre $|\Psi_a|^2 = 0$ ocorre em $\nu = 0$, ν'_+ ou ν'_- porém é impossível que isto ocorra fora destas três curvas. $|\Psi_a|^2 = 0$ é uma premissa e não uma consequência. Assim, só pode ocorrer uma mudança de sinal em $|\Psi_a|^2$ nas regiões que incluem $\nu = 0$, ν'_+ ou ν'_- .

Como $\frac{2\alpha}{\lambda}\sqrt{\lambda\varepsilon + 4\alpha^2} \geq 0 \Rightarrow \nu'_+ = \varepsilon + 4\frac{\alpha^2}{\lambda} + \frac{2\alpha}{\lambda}\sqrt{\lambda\varepsilon + 4\alpha^2} \geq \varepsilon + 4\frac{\alpha^2}{\lambda} - \frac{2\alpha}{\lambda}\sqrt{\lambda\varepsilon + 4\alpha^2} = \nu'_-$. Assim:

$$\nu'_+ \geq \nu'_- \quad (2.86)$$

No caso particular $\nu'_+ = \nu'_-$ usando a def. 2.85 tem-se $\frac{2\alpha}{\lambda}\sqrt{\lambda\varepsilon + 4\alpha^2} = -\frac{2\alpha}{\lambda}\sqrt{\lambda\varepsilon + 4\alpha^2} \Rightarrow \frac{2\alpha}{\lambda}\sqrt{\lambda\varepsilon + 4\alpha^2} = 0 \Rightarrow \lambda\varepsilon + 4\alpha^2 = 0 \Rightarrow \varepsilon = -4\frac{\alpha^2}{\lambda}$. Assim:

$$\nu'_+ = \nu'_- \Rightarrow \varepsilon = -4\frac{\alpha^2}{\lambda} \quad (2.87)$$

Faz-se a hipótese $\nu'_+ < 0$. Usando a def. 2.87 e algum trabalho algébrico chega-se à $(2\frac{\alpha^2}{\lambda}\sqrt{4\alpha^2 + \lambda\varepsilon}) < -\varepsilon - 4\frac{\alpha^2}{\lambda}$. O 1.º membro da inequação é positivo

enquanto o 2.º é negativo. Isto indica que a inequação não tem solução pois um número positivo nunca é menor do que um negativo. Logo a hipótese $\nu'_+ < 0$ não é válida.

Usando a def. 2.85, resolve-se $\nu'_+ = 0$. Isto resulta em $(2\frac{\alpha^2}{\lambda}\sqrt{4\alpha^2 + \lambda\varepsilon}) = -\varepsilon - 4\frac{\alpha^2}{\lambda}$. O lado esquerdo da equação é positivo enquanto o esquerdo é negativo. Assim, ambos devem iguais a zero. $(2\frac{\alpha^2}{\lambda}\sqrt{4\alpha^2 + \lambda\varepsilon}) = 0 \Rightarrow \varepsilon = -4\frac{\alpha^2}{\lambda}$. Logo:

$$\nu'_+ = 0 \Rightarrow \varepsilon = -4\frac{\alpha^2}{\lambda} \quad (2.88)$$

Conclui-se que:

$$\nu'_+ \geq 0 \Rightarrow \varepsilon \geq -4\frac{\alpha^2}{\lambda} \quad (2.89)$$

Fazendo a hipótese $\nu'_- = 0$ e usando a rel. 2.85 obtém-se $\varepsilon = 0$ ou $\varepsilon = -4\frac{\alpha^2}{\lambda}$. Assim em $-4\frac{\alpha^2}{\lambda} < \varepsilon < 0$ ou $\nu'_- < 0$ ou $\nu'_- > 0$. Para $\varepsilon = -3\frac{\alpha^2}{\lambda}$ obtém-se $\nu'_- = -\frac{\alpha^2}{\lambda}$. Assim, $\nu'_- < 0$. Para $\varepsilon > 0$, também $\nu'_- < 0$ ou $\nu'_- > 0$. Tomando $\varepsilon = \frac{\alpha^2}{\lambda}$ vê-se que $\nu'_- > 0$. Logo:

$$-4\frac{\alpha^2}{\lambda} \leq \varepsilon \leq 0 \Rightarrow \nu'_- \leq 0 \quad (2.90)$$

$$\varepsilon \geq 0 \Rightarrow \nu'_- \geq 0 \quad (2.91)$$

Hipótese: $\nu'_- = \nu_+$. Usando as defs. 2.85 e 2.72 obtém-se

$$\nu'_- = \nu_+ \Rightarrow \varepsilon = -\frac{7\alpha^2}{4\lambda} \quad (2.92)$$

Testando a hipótese $\nu'_- < \nu_+$, usando as defs. 2.87 e 2.72 e muitas manipulações algébricas chega-se à $(4\varepsilon + 7\alpha^2)^2 < 0$. Logo a hipótese é absurda. Conclui-se que

$$\nu'_- \geq \nu_+ \quad (2.93)$$

Por último testa-se $\nu'_- < -\frac{\alpha^2}{\lambda}$. Pela def. 2.85 e um pouco de álgebra vê-se que isto implica em $(\varepsilon + 3\frac{\alpha^2}{\lambda})^2 < 0$. Como tal inequação não tem solução, $\nu'_- < -\frac{\alpha^2}{\lambda}$ é absurdo, logo:

$$\nu'_- \geq -\frac{\alpha^2}{\lambda} \quad (2.94)$$

Agora basta dividir tudo em regiões cuja "fronteira" é dada por $\nu = 0$, ν'_+ e ν'_- , sem esquecer a "ZP". Como o plano $\nu \times \varepsilon$ já estava dividido e cada região tinha apenas 2 " $|\Psi_b|$ " possíveis, então serão subdivididas tais regiões. A reg. \mathcal{A} é cortada por ν'_- e ν'_+ ficando três regiões denominadas $\mathcal{A}1$, $\mathcal{A}2$ e $\mathcal{A}3$. A reg. \mathcal{B} ficou dividida em três regiões pois além de ser cortada por ν'_- em dois pontos a curva ν'_- intercepta ν_+ . A reg. \mathcal{C} não foi dividida pois $\nu = 0$ já é sua "fronteira natural" e ν'_- e ν'_+ não interceptam tal espaço.

A divisão ficou:

- Reg. $\mathcal{A}1$ $\nu \geq 0$, para $\varepsilon \leq -4\frac{\alpha^2}{\lambda}$; $\nu \geq \nu'_+$, para $\varepsilon \geq -4\frac{\alpha^2}{\lambda}$;
- Reg. $\mathcal{A}2$ $0 \leq \nu \leq \nu'_+$ para $-4\frac{\alpha^2}{\lambda} \leq \varepsilon \leq 0$; $\nu'_- \leq \nu \leq \nu'_+$ para $\varepsilon \geq 0$;
- Reg. $\mathcal{A}3$ $0 \leq \nu \leq \nu'_-$ para $\varepsilon \geq 0$;
- Reg. $\mathcal{B}1$ $\nu_+ \leq \nu \leq 0$ para $\varepsilon \leq -4\frac{\alpha^2}{\lambda}$; $\nu_+ \leq \nu \leq \nu'_-$ para $-4\frac{\alpha^2}{\lambda} \leq \varepsilon \leq -\frac{7\alpha^2}{4\lambda}$;
- Reg. $\mathcal{B}2$ $\nu'_- \leq \nu \leq 0$ para $-4\frac{\alpha^2}{\lambda} \leq \varepsilon \leq 0$;
- Reg. $\mathcal{B}3$ $\nu_+ \leq \nu \leq \nu'_-$ para $-\frac{7\alpha^2}{4\lambda} \leq \varepsilon \leq 0$; $\nu_+ \leq \nu \leq 0$ para $0 \leq \varepsilon \leq 2\frac{\alpha^2}{\lambda}$;
- Reg. \mathcal{C} $\nu_+ \leq \nu \leq 0$ para $2\frac{\alpha^2}{\lambda} \leq \varepsilon \leq 5\frac{\alpha^2}{\lambda}$; $\nu \leq \nu_-$ para $\varepsilon \leq 5\frac{\alpha^2}{\lambda}$; $\nu \leq 0$ para $\varepsilon \geq 5\frac{\alpha^2}{\lambda}$.

Isto está representado a seguir.

Basta analisar um ponto contido nas regiões e verificar se $|\Psi_a|^2 > 0$ ou $|\Psi_a|^2 < 0$. Para facilitar, vê-se somente as possíveis soluções de $|\Psi_b|$, não tomando as soluções inválidas de $|\Psi_b|$.

Começando pela reg. $\mathcal{A}1$. Nela só são válidas $|\Psi_b| = \beta B + \sqrt{B^2 + C}$. Tomando o ponto do espaço $\nu \times \varepsilon$ contido em $\mathcal{A}1$ $\nu = 5\frac{\alpha^2}{\lambda}$ e $\varepsilon = -5\frac{\alpha^2}{\lambda}$ substituindo tais valores nas expressões 2.66, 2.67, 2.69 e 2.64 obtém-se $|\Psi_a| = 2\frac{\alpha^2}{\lambda}(-0.67 + 2.38\beta)$. Para $\beta = 1 \Rightarrow |\Psi_a| > 0$. Já para $\beta = -1 \Rightarrow |\Psi_a| < 0$. Assim, na reg. $\mathcal{A}1$ só a solução $|\Psi_b| = B + \sqrt{B^2 + C}$ com seu respectivo $|\Psi_a|^2$ é válida.

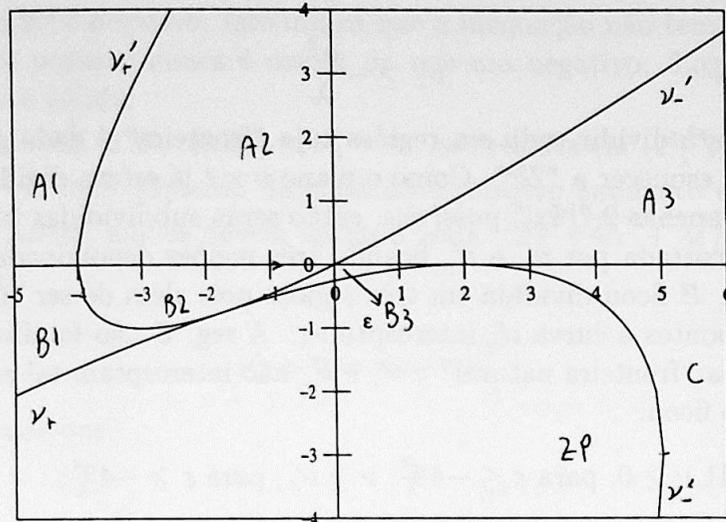


Figura 2.4: Regiões do plano $\nu \times \epsilon$ divididas pelas curvas ν_+ , ν_- , ν'_+ , ν'_- e $\nu = 0$.

Tomando procedimento análogo, faz-se um gráfico das soluções correspondente às regiões. Obtem-se:

- Reg. $A1$ $\nu \geq 0$, para $\epsilon \leq -4\frac{\alpha^2}{\lambda}$ $\nu \geq \nu'_+$, para $\epsilon \geq -4\frac{\alpha^2}{\lambda}$ vale $|\Psi_b| = B + \sqrt{B^2 + C}$
- Reg. $A2$ $0 \leq \nu \leq \nu'_+$ para $-4\frac{\alpha^2}{\lambda} \leq \epsilon \leq 0$ $\nu'_- \leq \nu \leq \nu'_+$ para $\epsilon \geq 0$ vale $|\Psi_b| = \beta B + \sqrt{B^2 + C}$
- Reg. $A3$ $0 \leq \nu \leq \nu'_-$ para $\epsilon \geq 0$ vale $|\Psi_b| = -B + \sqrt{B^2 + C}$
- Reg. $B1$ $\nu_+ \leq \nu \leq 0$ para $\epsilon \leq -4\frac{\alpha^2}{\lambda}$ $\nu_+ \leq \nu \leq \nu'_-$ para $-4\frac{\alpha^2}{\lambda} \leq \epsilon \leq -\frac{7\alpha^2}{4\lambda}$ não há solução
- Reg. $B2$ $\nu'_- \leq \nu \leq 0$ para $-4\frac{\alpha^2}{\lambda} \leq \epsilon \leq 0$ vale $|\Psi_b| = -B + \sqrt{B^2 + C}$
- Reg. $B3$ $\nu_+ \leq \nu \leq \nu'_-$ para $-\frac{7\alpha^2}{4\lambda} \leq \epsilon \leq 0$ $\nu_+ \leq \nu \leq 0$ para $0 \leq \epsilon \leq 2\frac{\alpha^2}{\lambda}$ vale $|\Psi_b| = -B \pm \sqrt{B^2 + C}$
- Reg. C $\nu_+ \leq \nu \leq 0$ para $2\frac{\alpha^2}{\lambda} \leq \epsilon \leq 5\frac{\alpha^2}{\lambda}$; $\nu \leq \nu_-$ para $\epsilon \leq 5\frac{\alpha^2}{\lambda}$; $\nu \leq 0$ para $\epsilon \geq 5\frac{\alpha^2}{\lambda}$ não há solução.

Ver fig. 2.4.

Ficam descartadas as regs. $B1$ e C . Além disso, já foi descartada a “zona proibida” ZP . Olhando para a representação geométrica, as três regiões estudadas se interceptam. Então define-se a região proibida $\mathcal{D} = ZP \cup B1 \cup C$. com esta redefinição obtém-se:

- Reg. $A1$ $\nu \geq 0$, para $\varepsilon \leq -4\frac{\alpha^2}{\lambda}$ $\nu \geq \nu'_+$, para $\varepsilon \geq -4\frac{\alpha^2}{\lambda}$ vale $|\Psi_b| = B + \sqrt{B^2 + C}$
- Reg. $A2$ $0 \leq \nu \leq \nu'_+$ para $-4\frac{\alpha^2}{\lambda} \leq \varepsilon \leq 0$ $\nu'_- \leq \nu \leq \nu'_+$ para $\varepsilon \geq 0$ vale $|\Psi_b| = \beta B + \sqrt{B^2 + C}$
- Reg. $A3$ $0 \leq \nu \leq \nu'_-$ para $\varepsilon \geq 0$ vale $|\Psi_b| = -B + \sqrt{B^2 + C}$
- Reg. $B2$ $\nu'_- \leq \nu \leq 0$ para $-4\frac{\alpha^2}{\lambda} \leq \varepsilon \leq 0$ vale $|\Psi_b| = -B + \sqrt{B^2 + C}$
- Reg. $B3$ $\nu_+ \leq \nu \leq \nu'_-$ para $-\frac{7\alpha^2}{4\lambda} \leq \varepsilon \leq 0$ $\nu_+ \leq \nu \leq 0$ para $0 \leq \varepsilon \leq 2\frac{\alpha^2}{\lambda}$ vale $|\Psi_b| = -B \pm \sqrt{B^2 + C}$
- Reg. \mathcal{D} $\nu \leq 0$ para $\varepsilon - 4\frac{\alpha^2}{\lambda}$ $\nu \leq \nu'_-$ para $-4\frac{\alpha^2}{\lambda} \leq \varepsilon \leq (-\frac{7}{4})\frac{\alpha^2}{\lambda}$ $\nu < \nu_+$ para $(-\frac{7}{4})\frac{\alpha^2}{\lambda} \leq \varepsilon \leq 2\alpha^2\lambda$ $\nu \leq 0$ para $\varepsilon \geq 2\frac{\alpha^2}{\lambda}$.

Tais regiões estão representadas na figura à seguir.

2.5 Resultados numéricos das experiências.

Nas experiências envolvendo os condensados de Bose-Einstein atômico-molecular, faz-se com que a “dessintonia” (ε) fique constante. Sabe-se também que μ é constante. São estas duas variáveis que determinam a configuração do condensado Bose-Einstein. Assim, o condensado distribui-se no espaço havendo uma variação no potencial químico efetivo (ν). Desta maneira, se fosse desenhado a distribuição de um condensado experimental em um gráfico $\nu \times \varepsilon$, este seria um segmento de reta vertical, pois ε é constante; a extremidade superior seria μ , porque $\nu = \mu - V \Rightarrow \nu_{max} = \mu$ devido à $V \geq 0$; a extremidade inferior corresponderia aos limites físicos do condensado atômico-molecular que ocorre quando este encontra o vácuo.

A escala natural do gráfico $\nu \times \varepsilon$ é $\frac{\alpha^2}{\lambda}$. Logo abaixo estão as simulações numéricas onde ε e ν estão em unidades naturais do sistema. Os pontos do gráfico estão anotados a seguir com suas respectivas regiões.

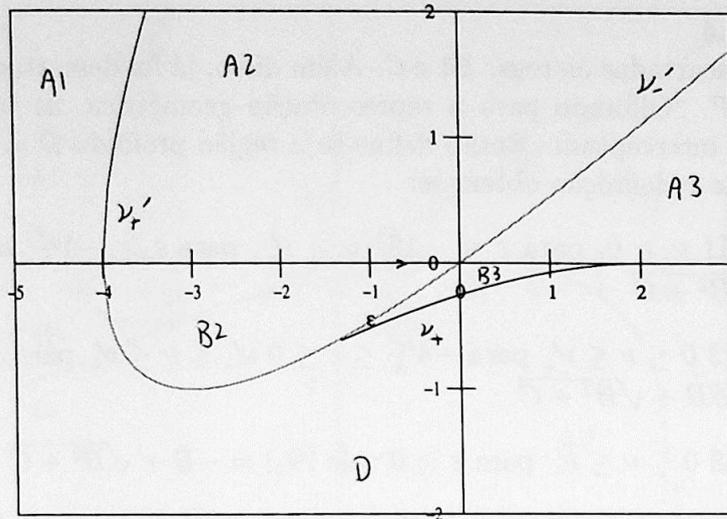


Figura 2.5: Regiões do plano $\nu \times \epsilon$.

Faz-se primeiramente a solução puramente molecular com $\mu = 8\frac{\alpha^2}{\lambda}$, $\epsilon = 2\frac{\alpha^2}{\lambda}$ no gráfico $\nu \times \epsilon$. Como há o limite $\nu \geq \frac{\epsilon}{2}$, o condensado está limitado a $\nu \geq 1\frac{\alpha^2}{\lambda}$. Assim, $1\frac{\alpha^2}{\lambda} \leq \nu \leq 8\frac{\alpha^2}{\lambda}$. A simulação está na fig. 2.6.

Outra solução interessante é àquela em que no condensado atômico molecular aparece a solução $|\Psi_b| = -B + \sqrt{B^2 + C}$. Toma-se $\epsilon = 6\frac{\alpha^2}{\lambda}$ e $\mu = 10\frac{\alpha^2}{\lambda}$ que pertence à região A3. Tal região é limitada pelo eixo ϵ . Porém a solução $|\Psi_b| = -B + \sqrt{B^2 + C}$ não é válida na reg. D. Assim, tal solução só será válida em $0 \leq \nu \leq 10\frac{\alpha^2}{\lambda}$. O gráfico de $|\Psi_b|^2$ e seu correspondente $|\Psi_a|^2$ estão na fig. 2.7.

Enfim, testa-se a solução atômico-molecular $|\Psi_b| = +B + \sqrt{B^2 + C}$ com $\epsilon = 0$ e $\mu = 4\frac{\alpha^2}{\lambda}$. Usando argumentos análogos aos anteriores, $0 \leq \nu \leq 4\frac{\alpha^2}{\lambda}$. O resultado está abaixo na fig. 2.8.

2.6 Simetria e descontinuidades do gráfico $\nu \times \epsilon$.

Os condensados Bose-Einstein atômico e molecular comportam-se de uma maneira surpreendente devido à assimetria das equações relativas à eles. Por exemplo, é possível existir um condensado exclusivamente molecular, mas

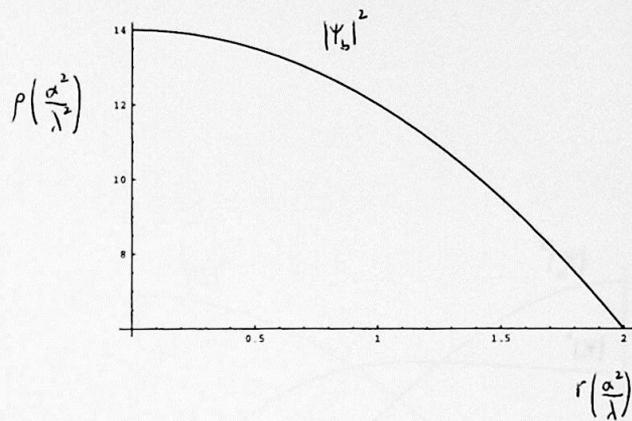


Figura 2.6: Gráfico da densidade molecular $|\Psi_b|^2$ (em unidade de $\frac{\alpha^2}{\lambda^2}$) em função do raio (em unidade de $\frac{\alpha^2}{\lambda}$).

não um exclusivamente atômico. O gráfico $\nu \times \varepsilon$ não tem nenhuma simetria. A intuição é bastante limitada na análise de tal sistema físico.

As descontinuidades no condensado atômico-molecular ocorridos na reg. B3 são devidos à aproximação de Thomas-Fermi, pois a energia cinética das partículas nunca pode ser totalmente nula.

Até agora, apenas descobriu-se que estados físicos os condensados não assumem. Por exemplo, sabe-se que nunca ocorrerá um condensado totalmente molecular para $\nu < \frac{\varepsilon}{2}$. Também é impossível a solução atômico molecular na reg. D. Ou ainda, a solução $|\Psi_b| = B - \sqrt{B^2 + C}$ em A2. Resta então saber quais estados os condensados assumirão. Certamente a minimização da energia é um critério a ser seguido.

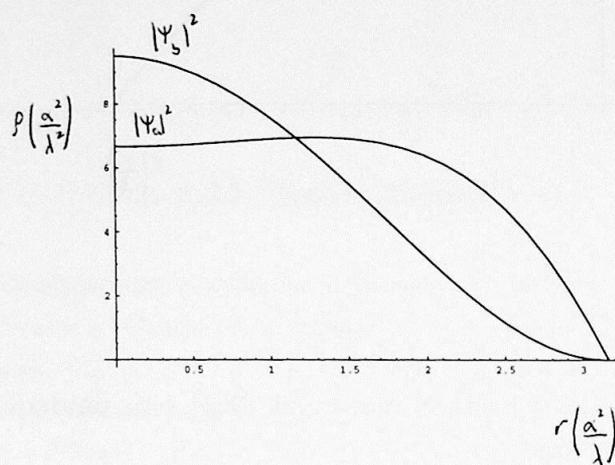


Figura 2.7: Gráfico da densidade atômica $|\Psi_a|^2$ e molecular $|\Psi_b|^2$ (em unidade de $\frac{\alpha^2}{\lambda^2}$) em função do raio (em unidade de $\frac{\alpha^2}{\lambda}$). Em $r = 0$ a densidade atômica é menor do que a molecular. A solução é do tipo $|\Psi_b| = -B + \sqrt{B^2 + C}$ sendo $\varepsilon = 6\frac{\alpha^2}{\lambda}$.

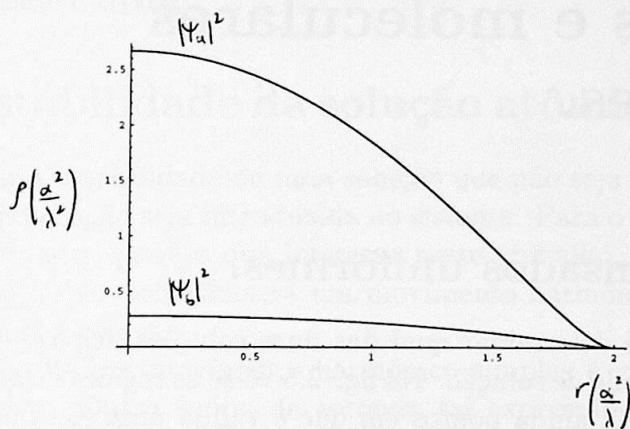


Figura 2.8: Gráfico da densidade atômica $|\Psi_a|^2$ e molecular $|\Psi_b|^2$ (em unidade de $\frac{\alpha^2}{\lambda^2}$) em função do raio (em unidade de $\frac{\alpha^2}{\lambda}$). Em $r = 0$ a densidade atômica é maior do que a molecular. A solução é do tipo $|\Psi_b| = B + \sqrt{B^2 + C}$ com $\varepsilon = 0$.

Capítulo 3

Condensados Bose-Einstein atômicos e moleculares uniformes.

3.1 Condensados uniformes.

Agora, o objetivo é determinar qual das duas soluções fica válida nas condições de ambiguidade de solução. Na fig. 2.5 vê-se as regiões de ambiguidade *reg.A2* e *reg.B3*. Há ainda pontos em que é válida uma (ou duas) solução atômica-molecular e a solução molecular. Como um tratamento analítico fica demasiado difícil, o único caso a ser analisado nesta parte do trabalho é o condensado uniforme. Este caracteriza-se por possuir potencial externo nulo ($V_a = V_b = 0$). Isto simplifica as equações e torna o potencial químico efetivo ν igual ao potencial químico propriamente dito μ .

Os critérios utilizados para analisar as soluções são: estabilidade, energia e pressão. As soluções instáveis serão excluídas. Haverão ainda regiões onde há duas soluções estáveis. Neste caso será mostrado que cada uma delas corresponde à um nível de energia.

3.2 Estabilidade da solução molecular.

A densidade da hamiltoniana usando a aproximação de Thomas-Fermi é dada na eq.2.21. Como o que interessa estudar é o condensado uniforme faz-se os potenciais externos $V_a = V_b = 0$. A equação final fica:

$$\mathcal{H} = \frac{\lambda_a}{2} |\Psi_b|^4 + \frac{\lambda_b}{2} |\Psi_b|^4 + \varepsilon |\Psi_b|^2 + \lambda |\Psi_a|^2 |\Psi_b|^2 + \alpha (\Psi_a^2 \Psi_b^* + \Psi_b \Psi_a^{*2}) \quad (3.1)$$

Na solução molecular $\Psi_a = 0$. Assim obtem-se da 3.1:

$$\mathcal{H} = \varepsilon |\Psi_b|^2 + \frac{\lambda_b}{2} |\Psi_b|^4 \quad (3.2)$$

Este hamiltoniano corresponde a um condensado de uma só espécie. Então sua estabilidade é trivial.

3.3 Estabilidade da solução atômico-molecular.

Para analisar a estabilidade de uma solução que não seja trivial é necessário que uma perturbação seja introduzida no sistema. Para o caso de apenas um grau de liberdade, que é o que interessa neste trabalho, se o ponto for um mínimo local, a perturbação será um movimento harmônico simples. Neste caso, o sistema é estável.

A equação de um movimento harmônico simples é $x(t) = x_0 e^{-i\omega t}$ com ω real positivo. Outra forma de escrever tal expressão é como a equação diferencial correspondente $\frac{d^2x}{dt^2} = -\omega^2 x$. Se $\omega^2 < 0$, ω não é real. Assim, o movimento não é harmônico simples e não há estabilidade.

O condensado analisado tem átomos e moléculas, logo usa-se 3.1 completa, com todos os termos. Porém, como foi dito, só será analisado o caso particular $\lambda_a = \lambda_b = \lambda$. Então fica apenas:

$$\mathcal{H} = \frac{\lambda}{2} |\Psi_b|^4 + \frac{\lambda}{2} |\Psi_b|^4 + \varepsilon |\Psi_b|^2 + \lambda |\Psi_a|^2 |\Psi_b|^2 + \alpha (\Psi_a^2 \Psi_b^* + \Psi_b \Psi_a^{*2}) \quad (3.3)$$

Como foi usado o princípio variacional dependente do tempo, há o vínculo $\int \delta [\mathcal{H} - i \frac{d\Psi_a}{dt} \Psi_a^* - i \frac{d\Psi_b}{dt} \Psi_b^*] d^3r = 0 \Rightarrow \delta \mathcal{H} = i \frac{d\Psi_a}{dt} \Psi_a^* + i \frac{d\Psi_b}{dt} \Psi_b^*$. Assim faz-se uma perturbação em Ψ_a e em Ψ_b . As perturbações resultantes para \mathcal{H} serão consideradas apenas em primeira ordem (os procedimentos são análogos aos das eqs. 2.25 e 2.32).

$$\Psi_a^* \longrightarrow \Psi_a^* + \delta\Psi_a^* \quad (3.4)$$

$$|\Psi_a|^2 \longrightarrow |\Psi_a|^2 + \Psi_a \delta\Psi_a^* \quad (3.5)$$

$$|\Psi_a|^4 \longrightarrow |\Psi_a|^4 + 2|\Psi_a|^2 \Psi_a \delta\Psi_a^* \quad (3.6)$$

Os cálculos relativos à Ψ_b são análogos aos relativos à Ψ_a . Usando as 3.4, 3.5 e 3.6 chega-se à:

$$\begin{aligned} |\Psi_a|^2 |\Psi_b|^2 &\longrightarrow (|\Psi_a|^2 + \Psi_a \delta\Psi_a^*) (|\Psi_b|^2 + \Psi_b \delta\Psi_b^*) = \\ &= |\Psi_a|^2 |\Psi_b|^2 + |\Psi_a|^2 \Psi_b \delta\Psi_b^* + |\Psi_b|^2 \Psi_a \delta\Psi_a^* \end{aligned} \quad (3.7)$$

$$\Psi_a^2 \Psi_b^* \longrightarrow \Psi_a^2 \Psi_b^* + \Psi_a^2 \delta\Psi_b^* \quad (3.8)$$

$$\begin{aligned} \Psi_a^{*2} \Psi_b &\longrightarrow (\Psi_a^{*2} \Psi_b + \delta\Psi_a^{*2} \Psi_b) \Psi_b = \\ &= (\Psi_a^{*2} + 2\Psi_a^* \delta\Psi_a^*) \Psi_b = \\ &= \Psi_a^{*2} \Psi_b + 2\Psi_a^* \Psi_b \delta\Psi_a^* \end{aligned} \quad (3.9)$$

Substituindo as 3.4, 3.5, 3.6, 3.7, 3.8 e 3.9 na 3.3.

$$\begin{aligned} \mathcal{H} + \delta\mathcal{H} &= \frac{\lambda}{2} (|\Psi_a|^4 + 2|\Psi_a|^2 \Psi_a \delta\Psi_a^*) + \\ &+ \varepsilon (|\Psi_b|^2 + \Psi_b \delta\Psi_b^*) + \\ &+ \frac{\lambda}{2} (|\Psi_b|^4 + 2|\Psi_b|^2 \Psi_b \delta\Psi_b^*) + \\ &\lambda (|\Psi_a|^2 |\Psi_b|^2 + |\Psi_a|^2 \Psi_b \delta\Psi_b^* + |\Psi_b|^2 \Psi_a \delta\Psi_a^*) + \\ &\alpha (\Psi_a^2 \Psi_b^* + \Psi_a^2 \delta\Psi_b^* + \Psi_a^{*2} \Psi_b + 2\Psi_a^* \Psi_b \delta\Psi_a^*) \end{aligned} \quad (3.10)$$

Fazendo a 3.10 – 3.3 chega-se à:

$$\begin{aligned} \delta\mathcal{H} &= \lambda |\Psi_a|^2 \Psi_a \delta\Psi_a^* + \\ &+ \varepsilon \Psi_b \delta\Psi_b^* + \lambda |\Psi_b|^2 \Psi_b \delta\Psi_b^* + \\ &\lambda (|\Psi_a|^2 \Psi_b \delta\Psi_b^* + |\Psi_b|^2 \Psi_a \delta\Psi_a^*) + \\ &\alpha (\Psi_a^2 \delta\Psi_b^* + 2\Psi_a^* \Psi_b \delta\Psi_a^*) \end{aligned} \quad (3.11)$$

Impondo o vínculo $\delta\mathcal{H} = i\frac{d\Psi_a}{dt}\delta\Psi_a^* + i\frac{d\Psi_b}{dt}\delta\Psi_b^*$ em 3.11 encontra-se as equações que regem a dinâmica do sistema:

$$i\frac{d\Psi_a}{dt} = \lambda|\Psi_a|^2\Psi_a + \lambda|\Psi_b|^2\Psi_a + 2\alpha\Psi_b\Psi_a^* \quad (3.12)$$

$$i\frac{d\Psi_b}{dt} = \varepsilon\Psi_b + \lambda|\Psi_a|^2\Psi_b + \lambda|\Psi_b|^2\Psi_b + \alpha\Psi_a^2 \quad (3.13)$$

As soluções a serem analisadas serão as estacionárias. Assim esta será do tipo $\Psi_a \rightarrow \Psi_a e^{-i\nu_a t}$ onde Ψ_a não depende do tempo. A perturbação será do tipo $\delta\Psi_a(t)$. Para simplificar as equações a perturbação será escrita como $\delta\Psi_a(t)e^{-i\nu_a t}$. Assim a solução estacionária acrescida de uma perturbação fica:

$$\Psi_a \rightarrow (\Psi_a + \delta\Psi_a(t))e^{-i\nu_a t} \quad (3.14)$$

Fazendo toda a perturbação até primeira ordem obtém-se:

$$\Psi_a^* \rightarrow (\Psi_a^* + \delta\Psi_a^*(t))e^{i\nu_a t} \quad (3.15)$$

$$\begin{aligned} |\Psi_a|^2 &\rightarrow (\Psi_a + \delta\Psi_a)(\Psi_a^* + \delta\Psi_a^*) = \\ &= |\Psi_a|^2 + \Psi_a^*\delta\Psi_a + \Psi_a\delta\Psi_a^* \end{aligned} \quad (3.16)$$

$$\begin{aligned} |\Psi_a|^2\Psi_a &\rightarrow (|\Psi_a|^2 + \Psi_a^*\delta\Psi_a + \Psi_a\delta\Psi_a^*)(\Psi_a + \delta\Psi_a)e^{-i\nu_a t} = \\ &= (|\Psi_a|^2\Psi_a + |\Psi_a|^2\delta\Psi_a + \Psi_a^2\delta\Psi_a^* + |\Psi_a|^2\delta\Psi_a)e^{-i\nu_a t} = \\ &= (|\Psi_a|^2\Psi_a + 2|\Psi_a|^2\delta\Psi_a + \Psi_a^2\delta\Psi_a^*)e^{-i\nu_a t} \end{aligned} \quad (3.17)$$

$$\frac{d\Psi_a}{dt} = -i\nu(\Psi_a + \delta\Psi_a)e^{-i\nu_a t} + \frac{d(\delta\Psi_a)}{dt}e^{-i\nu_a t} \quad (3.18)$$

A função Ψ_b é análoga. Faz-se $\Psi_b = (\Psi_b + \delta\Psi_b)e^{-i\nu_b t}$. Calculando tudo até primeira ordem obtém-se:

$$\Psi_b \rightarrow (\Psi_b + \delta\Psi_b)e^{-i\nu_b t} \quad (3.19)$$

$$\Psi_b^* \rightarrow (\Psi_b^* + \delta\Psi_b^*)e^{i\nu_b t} \quad (3.20)$$

Os cálculos envolvendo Ψ_b são análogos. Usando as 3.15 até 3.20.

$$\begin{aligned} |\Psi_b|^2 \Psi_a &\longrightarrow (|\Psi_b|^2 + \Psi_b \delta \Psi_b^* + \Psi_b^* \delta \Psi_b)(\Psi_a + \delta \Psi_a) e^{-i\nu_a t} = \\ &= (|\Psi_b|^2 \Psi_a + \Psi_a \Psi_b \delta \Psi_b^* + \Psi_a \Psi_b^* \delta \Psi_b + |\Psi_b|^2 \delta \Psi_a) e^{-i\nu_b t} \end{aligned} \quad (3.21)$$

$$\begin{aligned} \Psi_a^* \Psi_b &\longrightarrow (\Psi_a^* + \delta \Psi_a^*)(\Psi_b + \delta \Psi_b) e^{-i(\nu_b - \nu_a)t} = \\ &= (\Psi_a^* \Psi_b + \Psi_a^* \delta \Psi_b + \Psi_b \delta \Psi_a^*) e^{-i(\nu_b - \nu_a)t} \end{aligned} \quad (3.22)$$

Substituindo as eqs 3.14 até 3.22 na 3.12 analisa-se a primeira equação dinâmica.

$$\begin{aligned} \nu_a (\Psi_a + \delta \Psi_a) e^{-i\nu_a t} + \frac{d\delta \Psi_a}{dt} e^{-i\nu_a t} &= \\ = \lambda (|\Psi_a|^2 \Psi_a + 2|\Psi_a|^2 \delta \Psi_a + \Psi_a^2 \delta \Psi_a^*) e^{-i\nu_a t} + \\ + \lambda (|\Psi_b|^2 \Psi_a + \Psi_a \Psi_b \delta \Psi_b^* + \Psi_a \Psi_b^* \delta \Psi_b + |\Psi_b|^2 \delta \Psi_a) e^{-i\nu_a t} + \\ + 2\alpha (\Psi_a^* \Psi_b + \Psi_a^* \delta \Psi_b + \Psi_b \delta \Psi_a^*) e^{i(\nu_a - \nu_b)t} \end{aligned} \quad (3.23)$$

Separa-se a equação em duas partes: a equação de equilíbrio e aquela relativa às perturbações.

$$\nu_a \Psi_a = \lambda |\Psi_a|^2 \Psi_a + \lambda |\Psi_b|^2 \Psi_a + \alpha \Psi_a^* \Psi_b e^{-i(\nu_a - 2\nu_b)t} \quad (3.24)$$

Como o primeiro membro da equação não depende do tempo o segundo também não deve depender. Assim, $\nu_b = 2\nu_a$.

Escreve-se a função Ψ_a na forma polar: $\Psi_a = |\Psi_a| e^{i\phi_a}$. Um tratamento análogo é feito com Ψ_b : $\Psi_b = |\Psi_b| e^{i\phi_b}$. Substituindo tudo isso nas 3.24 e definindo $\beta = e^{-i(2\phi_a - \phi_b)}$:

$$\nu_a = \lambda |\Psi_a|^2 + \lambda |\Psi_b|^2 + 2\alpha \beta |\Psi_b| \quad (3.25)$$

Como já foi visto $\beta = \pm 1$. Se $\nu_a = \nu$ tal equação torna-se equivalente à estacionária. Usando o mesmo tratamento para a perturbação:

$$\begin{aligned} \nu_a \delta \Psi_a + \frac{d\delta \Psi_a}{dt} &= 2\lambda |\Psi_a|^2 \delta \Psi_a + \\ + \lambda \Psi_a^2 \delta \Psi_a^* + \lambda |\Psi_b|^2 \delta \Psi_a + \lambda \Psi_a \Psi_b \delta \Psi_b^* + \\ + \lambda \Psi_a \Psi_b^* \delta \Psi_b + 2\alpha \Psi_b \delta \Psi_a^* + 2\alpha \Psi_a^* \delta \Psi_b \end{aligned} \quad (3.26)$$

Redefine-se $\delta\Psi_a \longrightarrow \delta\Psi_a e^{-i\phi_a}$ e $\delta\Psi_b \longrightarrow \delta\Psi_b e^{i\phi_b}$.

$$\begin{aligned} \nu_a \delta\Psi_a + \frac{d\delta\Psi_a}{dt} &= 2\lambda|\Psi_a|^2 \delta\Psi_a + \\ &+ \lambda|\Psi_a|^2 \delta\Psi_a^* + \lambda|\Psi_b|^2 \delta\Psi_a + \lambda|\Psi_a||\Psi_b| \delta\Psi_b^* + \\ &+ \lambda|\Psi_a||\Psi_b| \delta\Psi_b + \\ &+ 2\alpha\beta|\Psi_b| \delta\Psi_a^* + 2\alpha\beta|\Psi_a| \delta\Psi_b \end{aligned} \quad (3.27)$$

De 3.27 – 3.25 multiplicada por $\delta\Psi_a$.

$$\begin{aligned} \frac{d\delta\Psi_a}{dt} &= \lambda|\Psi_a|^2 \delta\Psi_a + \lambda|\Psi_a|^2 \delta\Psi_a^* + \lambda|\Psi_a||\Psi_b| \delta\Psi_b^* + \\ &+ \lambda|\Psi_a||\Psi_b| \delta\Psi_b + 2\alpha\beta|\Psi_a| \delta\Psi_b + 2\alpha\beta|\Psi_a| (\delta\Psi_a^* - \delta\Psi_a) \end{aligned} \quad (3.28)$$

Definindo $Re(\delta\Psi_a) = R_a$ e $Im(\delta\Psi_a) = I_a$ de modo a $\delta\Psi_a = R_a + iI_a$.
Chega-se à

$$-\frac{dI_a}{dt} = 2\lambda|\Psi_a|^2 R_a + 2\lambda|\Psi_a||\Psi_b| R_b + 2\alpha\beta|\Psi_a| R_b \quad (3.29)$$

$$\frac{dR_a}{dt} = \alpha\beta(-4|\Psi_b| I_a + 2|\Psi_a| I_b) \quad (3.30)$$

Agora analisa-se a outra equação dinâmica 3.13 com a solução $\Psi_b = (\Psi_b + \delta\Psi_a) e^{-i\nu_b t} = (\Psi_b + \delta\Psi_a) e^{-2i\nu_a t}$. Seguindo analogias com 3.17, 3.18 e 3.21.

$$|\Psi_b|^2 \Psi_b \longrightarrow (|\Psi_b|^2 \Psi_b + 2|\Psi_b|^2 \delta\Psi_b + \Psi_b^2 \delta\Psi_b^*) e^{-2i\nu_a t} \quad (3.31)$$

$$\frac{d\Psi_b}{dt} = -2i\nu_a (\Psi_b + \delta\Psi_b) e^{-2i\nu_a t} + \frac{d(\delta\Psi_b)}{dt} e^{-2i\nu_a t} \quad (3.32)$$

$$|\Psi_a|^2 \Psi_b \longrightarrow (|\Psi_a|^2 \Psi_b + \Psi_b \Psi_a \delta\Psi_a^* + \Psi_b \Psi_a^* \delta\Psi_b + |\Psi_a|^2 \delta\Psi_b) e^{-2i\nu_a t} \quad (3.33)$$

$$\Psi_a^2 \longrightarrow [(\Psi_a + \delta\Psi_a) e^{-i\nu_a t}]^2 = (\Psi_a^2 + 2\Psi_a \delta\Psi_a) e^{-2i\nu_a t} \quad (3.34)$$

Assim, usando as 3.31, 3.32, 3.33 e 3.34 em 3.13.

$$\begin{aligned}
& 2\nu_a(\Psi_b + \delta\Psi_b)e^{-2i\nu_a t} + \frac{d\delta\Psi_b}{dt}e^{-2i\nu_a t} = \\
& = \varepsilon(\Psi_b + \delta\Psi_b)e^{-2i\nu_a t} + \lambda(|\Psi_b|^2\Psi_b + 2|\Psi_b|^2\delta\Psi_b + \Psi_b^2\delta\Psi_b^*)e^{-2i\nu_a t} + \\
& + \lambda(|\Psi_a|^2\Psi_b + \Psi_b\Psi_a\delta\Psi_a^* + \Psi_b\Psi_a^*\delta\Psi_b + |\Psi_a|^2\delta\Psi_b)e^{-2i\nu_a t} + \\
& + \alpha(\Psi_a^2 + 2\Psi_a\delta\Psi_a)e^{-2i\nu_a t}
\end{aligned} \tag{3.35}$$

Separa-se a parte estacionária da perturbação.

$$2\nu_a\Psi_b = \varepsilon\Psi_b + \lambda|\Psi_b|^2\Psi_b + \lambda|\Psi_a|^2\Psi_b + \alpha\Psi_a^2 \tag{3.36}$$

$$\begin{aligned}
& 2\nu_a\delta\Psi_b + \frac{d\delta\Psi_b}{dt} = \\
& = \varepsilon\delta\Psi_b + \lambda(|\Psi_b|^2\delta\Psi_b + \Psi_b^2\delta\Psi_b^*) + \\
& + \lambda(\Psi_b\Psi_a\delta\Psi_a^* + \Psi_b\Psi_a^*\delta\Psi_b + |\Psi_a|^2\delta\Psi_b) + \\
& + 2\alpha\Psi_a\delta\Psi_a
\end{aligned} \tag{3.37}$$

Usando as definições $\Psi_{a,b} = |\Psi_{a,b}|e^{i\phi_{a,b}}$ e $\delta\Psi_{a,b} \rightarrow \delta\Psi_{a,b}e^{-i\phi_{a,b}}$ nas 3.36 e 3.37.

$$2\nu_a = \varepsilon + \lambda|\Psi_b|^2 + \lambda|\Psi_a|^2 + \alpha\beta\frac{|\Psi_a|^2}{|\Psi_b|} \tag{3.38}$$

Esta equação coincide com a equação estacionária se $\nu_a = \nu$.

$$\begin{aligned}
& 2\nu_a\delta\Psi_b + \frac{d\delta\Psi_b}{dt} = \\
& = \varepsilon\delta\Psi_b + \lambda(|\Psi_b|^2\delta\Psi_b + |\Psi_b|^2\delta\Psi_b^*) + \\
& + \lambda(|\Psi_b||\Psi_a|\delta\Psi_a^* + |\Psi_b||\Psi_a|\delta\Psi_b + |\Psi_a|^2\delta\Psi_b) + \\
& + 2\alpha\beta|\Psi_a|\delta\Psi_a
\end{aligned} \tag{3.39}$$

Fazendo 3.39 – 3.38.

$$\begin{aligned}
& \frac{d\delta\Psi_b}{dt} = \lambda|\Psi_b|^2\delta\Psi_b^* + \lambda(|\Psi_b||\Psi_a|\delta\Psi_a^* + |\Psi_b||\Psi_a|\delta\Psi_b) + \\
& + \alpha\beta(2|\Psi_a|\delta\Psi_a - \frac{|\Psi_a|^2}{|\Psi_b|\delta\Psi_b})
\end{aligned} \tag{3.40}$$

Definindo $Re(\delta\Psi_b) = R_b$ e $Im(\delta\Psi_b) = I_b$ de modo a $\delta\Psi_b = R_b + iI_b$.
Chega-se à:

$$-\frac{dI_b}{dt} = 2\lambda|\Psi_a||\Psi_b|R_a + 2\lambda|\Psi_b|^2R_b + 2\alpha\beta|\Psi_a|R_a - \alpha\beta\frac{|\Psi_a|^2}{|\Psi_b|}R_b \quad (3.41)$$

$$\frac{dR_b}{dt} = \alpha\beta(2|\Psi_a|I_a - \alpha\beta\frac{|\Psi_a|^2}{|\Psi_b|}I_b) \quad (3.42)$$

O primeiro vínculo é $|\Psi_a|\frac{dR_a}{dt} + 2|\Psi_b|\frac{dR_b}{dt} = 0$. Faz-se $N = \int(|\Psi_a|^2 + 2|\Psi_b|^2)d^3r \Rightarrow \frac{dN}{dt} = \int(\Psi_a^*\frac{d\Psi_a}{dt} + \Psi_a\frac{d\Psi_a^*}{dt} + 2\Psi_b^*\frac{d\Psi_b}{dt} + 2\Psi_b\frac{d\Psi_b^*}{dt})d^3r = 2\int Re(\Psi_a^*\frac{d\Psi_a}{dt} + 2\Psi_b^*\frac{d\Psi_b}{dt})d^3r \Rightarrow \frac{dN}{dt} = 2\int Re(\Psi_a^*\frac{d\delta\Psi_a}{dt} + 2\Psi_b^*\frac{d\delta\Psi_b}{dt})d^3r$. Redefinindo $\delta\Psi_a \rightarrow \delta\Psi_a e^{-i\phi_a}$ chega-se à $\frac{dN}{dt} = 2\int Re(|\Psi_a|\frac{d\delta\Psi_a}{dt} + 2|\Psi_b|\frac{d\delta\Psi_b}{dt})d^3r = 2\int(|\Psi_a|\frac{dR_a}{dt} + 2|\Psi_b|\frac{dR_b}{dt})d^3r = 0$. Assim, o significado físico é que o número de partículas é conservado ($\frac{dN}{dt} = 0$). Então $\delta N = 0 \Rightarrow \Psi_a^*\delta\Psi_a + 2\Psi_b^*\delta\Psi_b = 0 \Rightarrow |\Psi_a|R_a + 2|\Psi_b|R_b = 0 \Rightarrow R_b = -\frac{|\Psi_a|}{2|\Psi_b|}R_a$. Derivando R_b obtem-se de 3.42

$$\frac{d^2R_b}{dt^2} = \alpha\beta(2|\Psi_a|\frac{dI_a}{dt} - \alpha\beta\frac{|\Psi_a|^2}{|\Psi_b|}\frac{dI_b}{dt}) \quad (3.43)$$

De 3.41 e 3.29

$$\begin{aligned} \frac{d^2R_b}{dt^2} = & -\alpha\beta[(2|\Psi_a|(2\lambda|\Psi_a|^2R_a + 2\lambda|\Psi_a||\Psi_b|R_b + 2\alpha\beta|\Psi_a|R_b) + \\ & + \frac{|\Psi_a|^2}{|\Psi_b|}(2\lambda|\Psi_a||\Psi_b|R_a + 2\lambda|\Psi_b|^2R_b + 2\alpha\beta|\Psi_a|R_a - \alpha\beta\frac{|\Psi_a|^2}{|\Psi_b|}R_b)] \end{aligned} \quad (3.44)$$

Usando o vínculo $R_a = -2\frac{|\Psi_b|}{|\Psi_a|}R_b$.

$$\frac{d^2R_b}{dt^2} = (2\alpha\beta\lambda|\Psi_a|^2|\Psi_b| - 8\alpha^2|\Psi_a|^2 - \alpha^2\frac{|\Psi_a|^4}{|\Psi_b|^2})R_b \quad (3.45)$$

Definindo $A = (\frac{\lambda|\Psi_a|^2}{2} - \alpha\beta(+\frac{|\Psi_a|^4}{4|\Psi_b|^3} + \frac{2|\Psi_a|^2}{|\Psi_b|}))$

$$\frac{d^2R_b}{dt^2} = 4\alpha\beta|\Psi_b|AR_b \quad (3.46)$$

Assim $\omega^2 = -4\alpha\beta|\Psi_b|A$. Se $\beta = -1 \Rightarrow A > 0$ e ω^2 também. Assim ω é real e o sistema é estável. Logo as soluções associadas à $\beta = -1$ ($|\Psi_b| = -B \pm \sqrt{B^2 + C}$) são estáveis.

Já se $\beta = +1$ obtem-se $\omega^2 = -4\alpha|\Psi_b|A$. Assim, para $\omega^2 > 0$ é preciso $A < 0$. Logo, para $A > 0$ o sistema é instável. Para achar a região onde $A < 0$ deve-se achar primeiramente a curva onde $A = 0$. Fora desta curva $A > 0$ ou $A < 0$. Se um ponto do gráfico $\nu \times \varepsilon$ corresponder à $A > 0$ então toda a região limitada pela curva $A = 0$ está associada à $A > 0$. Caso $A < 0$ a situação é análoga.

O grande problema é que neste contexto tal procedimento mostra-se impreciso. Isto se deve ao fato de que as curvas $A = 0$ não tem expressão analítica. Assim fica difícil dividir o plano $\nu \times \varepsilon$ em regiões. Consequentemente não é possível saber em que região o ponto se encontra. Uma das soluções para $A = 0$ é $|\Psi_a| = 0$. Tal solução não terá grande importância pois as curvas correspondente à $|\Psi_a| = 0$ limitam a região onde a solução com $\beta = +1$ é válida. Já as outras soluções de $A(\varepsilon, \nu) = 0$ não são curvas analiticamente determinadas. Assim, ao invés de localizar tais curvas, o que será feito é calcular A para cada ponto nos resultados numéricos feitos no final deste capítulo.

3.4 Energia das soluções atômico-moleculares

Há regiões no gráfico $\nu \times \varepsilon$ em que pode haver duas soluções estáveis: $A2$ e $B3$ (ver fig.2.5).

Um critério para evitar a ambiguidade das soluções é verificar as energias correspondentes a cada uma das soluções.

Como os condensados são uniformes, pode-se escrever:

$$E = \int \mathcal{H} d^3r = \mathcal{H}V \quad (3.47)$$

$$N = \int \rho d^3r = \rho V \quad (3.48)$$

Onde V é o volume do condensado e N é o número de partículas. Dividindo ambas as equações.

$$\frac{E}{N} = \frac{\mathcal{H}V}{\rho V} = \frac{\mathcal{H}}{\rho} \quad (3.49)$$

$$E = \left(\frac{\mathcal{H}}{\rho}\right)N \quad (3.50)$$

Considerando que os dois condensados tem o mesmo número de partículas para comparar suas energias basta calcular a energia por partícula $\frac{\mathcal{H}}{\rho}$.

Eis os cálculos abaixo da solução geral $|\Psi_b| = \beta B \pm \sqrt{B^2 + C}$. Partindo da 3.3 (o único caso analisado será àquele que $\lambda_a = \lambda_b = \lambda$).

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & \frac{\lambda}{2}|\Psi_b|^4 + \frac{\lambda}{2}|\Psi_b|^4 + \varepsilon|\Psi_b|^2 + \\ & + \lambda|\Psi_a|^2|\Psi_b|^2 + \alpha(\Psi_a^2\Psi_b^* + \Psi_b\Psi_a^{*2}) \end{aligned} \quad (3.51)$$

Sabe-se que $|\Psi_a|^4 + |\Psi_b|^4 + 2|\Psi_a|^2|\Psi_b|^2 = (|\Psi_a|^2 + |\Psi_b|^2)^2$. Além disso sabe-se que $\Psi_a^2\Psi_b^* = |\Psi_a|^2 e^{2i\phi_a} |\Psi_b| e^{-i\phi_b} = |\Psi_a|^2 |\Psi_b| e^{i(2\phi_a - \phi_b)} = |\Psi_a|^2 |\Psi_b| \beta$ onde $\beta = \pm 1$. E ainda $\Psi_b\Psi_a^{*2} = (\Psi_a^2\Psi_b^*)^* = (|\Psi_a|^2 |\Psi_b| \beta)^* = |\Psi_a|^2 |\Psi_b| \beta$. Substituindo na 3.51.

$$\mathcal{H} = \frac{\lambda}{2}(|\Psi_a|^2 + |\Psi_b|^2)^2 + \varepsilon|\Psi_b|^2 + 2\alpha\beta|\Psi_a|^2|\Psi_b| \quad (3.52)$$

Lembrando que $|\Psi_a|^2 = \frac{\nu - 2\alpha\beta|\Psi_b|}{\lambda} - |\Psi_b|^2$ e substituindo na 3.51.

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & \frac{\lambda}{2} \left(\frac{\nu - 2\alpha\beta|\Psi_b|}{\lambda} \right)^2 + \\ & + \varepsilon|\Psi_b|^2 + 2\alpha\beta \left(\frac{\nu - 2\alpha\beta|\Psi_b|}{\lambda} - |\Psi_b|^2 \right) |\Psi_b| \end{aligned} \quad (3.53)$$

Lembrando que $C = \frac{\nu}{3\lambda} \Rightarrow \nu = 3\lambda C$.

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & \frac{\lambda}{2} \left(\frac{3\lambda C - 2\alpha\beta|\Psi_b|}{\lambda} \right)^2 + \\ & + \varepsilon|\Psi_b|^2 + 2\alpha\beta \left(\frac{3\lambda C - 2\alpha\beta|\Psi_b|}{\lambda} - |\Psi_b|^2 \right) |\Psi_b| = \\ = & \varepsilon|\Psi_b|^2 + \frac{9\lambda^2 C^2 - 12\lambda C \alpha\beta |\Psi_b| + 4\alpha^2 |\Psi_b|^2}{2\lambda} + \\ & + 2\alpha\beta \left(3C|\Psi_b| - \frac{2\alpha}{\lambda} |\Psi_b|^2 - |\Psi_b|^3 \right) = \\ = & \frac{9\lambda C^2}{2} + |\Psi_b| (-6\alpha\beta C + 6\alpha\beta C) + \\ & + |\Psi_b|^2 \left(\varepsilon + \frac{2\alpha^2}{\lambda} - \frac{4\alpha^2}{\lambda} \right) - 2\alpha\beta |\Psi_b|^3 \end{aligned} \quad (3.54)$$

$$\mathcal{H} = \frac{9\lambda C^2}{2} + |\Psi_b|^2 \left(\varepsilon - \frac{2\alpha^2}{\lambda} \right) - 2\alpha\beta |\Psi_b|^3 \quad (3.55)$$

Lembrando que $B = \frac{\lambda\varepsilon - \lambda\nu - 2\alpha^2}{6\lambda\alpha}$ então $6\lambda\alpha B = \lambda\varepsilon - \lambda\nu - 2\alpha^2 \Rightarrow \lambda\varepsilon - \lambda\nu = (6\alpha B + \nu)\lambda \Rightarrow \varepsilon - 2\frac{\alpha^2}{\lambda} = 3\lambda C + 6\alpha B$. Logo

$$\mathcal{H} = \frac{9\lambda C^2}{2} + |\Psi_b|^2 (6\alpha B + 3\lambda C) - 2\alpha\beta |\Psi_b|^3 \quad (3.56)$$

A substituição das variáveis ε e ν por B e C foi usada por dois motivos: facilita os cálculos, como será visto e porque $|\Psi_b|$ está em função de B e C . Finalmente pode-se calcular \mathcal{H} . Usam-se as relações $(a+b)^2 = a^2 + 2ab + b^2$ e $(a+b)^3 = a^3 + 3a^2b + 3ab^2 + b^3$.

$$|\Psi_b| = \beta B \pm \sqrt{B^2 + C} \quad (3.57)$$

$$\begin{aligned} |\Psi_b|^2 &= (\beta B \pm \sqrt{B^2 + C})^2 = \\ &= (\beta B)^2 + 2(\pm 1)B\sqrt{B^2 + C} + (\pm 1)^2(B^2 + C) \end{aligned} \quad (3.58)$$

Como $\beta^2 = 1$ e $(\pm 1)^2 = 1$.

$$\begin{aligned} |\Psi_b|^2 &= B^2 \pm 2B\sqrt{B^2 + C} + (B^2 + C) = \\ &= 2B^2 \pm 2B\sqrt{B^2 + C} + C \end{aligned} \quad (3.59)$$

$$\begin{aligned} |\Psi_b|^3 &= (\beta B \pm \sqrt{B^2 + C})^3 = \\ &= (\beta B)^3 + 3(\beta B)^2(\pm 1)(B^2 + C) + \\ &\quad + 3\beta B(\pm 1)^2(B^2 + C) + (\pm 1)^3(\sqrt{B^2 + C})^3 \end{aligned} \quad (3.60)$$

Como $\beta^3 = \beta^2\beta = \beta$ e analogamente $(\pm 1)^3 = \pm 1$.

$$\begin{aligned} |\Psi_b|^3 &= \beta B^3 \pm 3B^2\sqrt{B^2 + C} + 3\beta B(B^2 + C) \pm (B^2 + C)\sqrt{B^2 + C} = \\ &= 4\beta B^3 + 3\beta BC \pm \sqrt{4B^2 + C} \end{aligned} \quad (3.61)$$

Substituindo as 3.59 e 3.61 na 3.56 obtem-se:

$$\mathcal{H} = \frac{9\lambda C^2}{2} + (2B^2 \pm 2B\sqrt{B^2 + C} + C)(6\alpha B + 3\lambda C) + \\ -2\alpha\beta(4\beta B^3 + 3\beta C \pm \sqrt{4B^2 + C}) \quad (3.62)$$

Usando que $\beta^2 = 1$

$$\mathcal{H} = \frac{9\lambda C^2}{2} + \\ +(12\alpha B^3 + 6B^2\lambda C + 6\alpha BC + 3\lambda C^2 - 8\alpha B^3 - 6\alpha BC) + \\ \pm\beta\sqrt{B^2 + C}(12\alpha B^2 + 6\lambda BC - 8\alpha B^2 - 2\alpha C) \quad (3.63)$$

$$\mathcal{H} = \frac{15\lambda C^2}{2} + 4\alpha B^3 + 6B^2\lambda C + \\ \pm\beta\sqrt{B^2 + C}(4\alpha B^2 + 6\lambda BC - 2\alpha C) \quad (3.64)$$

Calculando a densidade usando as relações de $|\Psi_a|^2$ e $|\Psi_b|^2$.

$$\rho = |\Psi_a|^2 + 2|\Psi_b|^2 = \frac{\nu - 2\alpha\beta|\Psi_b|}{\lambda} - |\Psi_b|^2 + 2|\Psi_b|^2 = \\ = \frac{\nu - 2\alpha\beta|\Psi_b|}{\lambda} + |\Psi_b|^2 = \\ = \frac{3\lambda C - 2\alpha\beta(\beta B \pm \sqrt{B^2 + C})}{\lambda} + (2B^2 \pm 2\beta B\sqrt{B^2 + C} + C) \quad (3.65)$$

$$\rho = 2B^2 + 4C - \frac{2\alpha B}{\lambda} \pm \sqrt{B^2 + C}\left(2B - \frac{2\alpha}{\lambda}\right) \quad (3.66)$$

Definindo as variáveis

$$C_1 = \frac{15\lambda C^2}{2} + 4\alpha B^3 + 6B^2\lambda C \quad (3.67)$$

$$C_2 = 4\alpha B^2 + 6\lambda BC - 2\alpha C \quad (3.68)$$

$$C_3 = B^2 + 2C - \frac{\alpha B}{\lambda} \quad (3.69)$$

$$C_4 = B - \frac{2\alpha}{\lambda} \quad (3.70)$$

Assim escreve-se \mathcal{H} e ρ como

$$\mathcal{H} = C_1 \pm \beta\sqrt{B^2 + C}C_2 \quad (3.71)$$

$$\rho = 2(C_3 \pm \beta\sqrt{B^2 + C}C_4) \quad (3.72)$$

$$\frac{\mathcal{H}}{\rho} = \frac{C_1 \pm \beta\sqrt{B^2 + C}C_2}{2(C_3 \pm \beta\sqrt{B^2 + C}C_4)} \quad (3.73)$$

Como $\rho > 0$ a grandeza $\frac{\rho}{2}$ também o é. Assim, multiplica-se o numerador e o denominador por $(C_3 \mp \beta\sqrt{B^2 + C}C_4)$. Usando $(a + b)(a - b) = a^2 - b^2$ obtém-se.

$$\begin{aligned} \frac{\mathcal{H}}{\rho} &= \frac{(C_1 \pm \beta\sqrt{B^2 + C}C_2)(C_3 \mp \beta\sqrt{B^2 + C}C_4)}{2(C_3 \pm \beta\sqrt{B^2 + C}C_4)(C_3 \mp \beta\sqrt{B^2 + C}C_4)} = \\ &= \frac{C_1C_3 \mp \beta\sqrt{B^2 + C}C_1C_4 \pm \beta\sqrt{B^2 + C}C_2C_3 - (B^2 + C)C_2C_4}{2(C_3^2 - (B^2 + C)C_4^2)} \end{aligned} \quad (3.74)$$

$$\frac{\mathcal{H}}{\rho} = \frac{C_1C_3 - (B^2 + C)C_2C_4 \pm \beta\sqrt{B^2 + C}(C_2C_3 - C_1C_4)}{2(C_3^2 - (B^2 + C)C_4^2)} \quad (3.75)$$

Toda a dependência de β ou do sinal (± 1) das densidades $|\Psi_a|^2$ e $|\Psi_b|^2$ está embutido no termo $(C_2C_3 - C_1C_4)$. Se $(C_2C_3 - C_1C_4) = 0$ então a energia de todas soluções são iguais: já se $(C_2C_3 - C_1C_4) > 0$ então a solução $|\Psi_b| = B + \sqrt{B^2 + C}$ terá maior energia que a solução $|\Psi_b| = -B + \sqrt{B^2 + C}$. Mas se $(C_2C_3 - C_1C_4) < 0$ então a situação se inverte. Sempre a energia da solução $|\Psi_b| = B + \sqrt{B^2 + C}$ é igual à de $|\Psi_b| = -B - \sqrt{B^2 + C}$. Isto não constitui nenhum problema pois não existe região no gráfico $\varepsilon\nu$ em que coexistam as duas soluções.

Para saber se $(C_2C_3 - C_1C_4)$ é positivo ou negativo toma-se o procedimento padrão: acha-se a curva (ou as curvas) onde $(C_2C_3 - C_1C_4) = 0$. O espaço $\nu \times \varepsilon$ fica dividido em regiões. Se um ponto de cada região for positivo

toda a região o será. O mesmo ocorre se um ponto for negativo. Calcula-se C_2C_3 e C_1C_4 a partir das 3.72 à 3.75.

$$C_2C_3 = 4\alpha B^4 + 8\alpha B^2C - \frac{4\alpha^2 B^3}{\lambda} + 6\lambda B^3C + \\ + 12\lambda BC^2 - 6\alpha B^2C - 2\alpha B^2C - 4\alpha C^2 + \frac{2\alpha^2 BC}{\lambda} \quad (3.76)$$

$$C_2C_3 = 4\alpha B^4 - \frac{4\alpha^2 B^3}{\lambda} + 6\lambda B^3C + \\ + 12\lambda BC^2 - 4\alpha C^2 + \frac{2\alpha^2 BC}{\lambda} \quad (3.77)$$

$$C_1C_4 = \frac{15\lambda BC^2}{2} + 4\alpha B^4 + 6\lambda CB^3 + \\ - \frac{15\alpha C^2}{2} - \frac{4\alpha^2 B^3}{\lambda} - 6\alpha B^2C \quad (3.78)$$

Então:

$$C_2C_3 - C_1C_4 = \frac{9\lambda BC^2}{2} + \frac{7\alpha C^2}{2} + \frac{2\alpha^2 BC}{\lambda} + 6\alpha B^2C \quad (3.79)$$

$$C_2C_3 - C_1C_4 = C\left(\frac{9\lambda BC}{2} + \frac{7\alpha C}{2} + \frac{2\alpha^2 B}{\lambda} + 6\alpha B^2\right) \quad (3.80)$$

A curva $(C_2C_3 - C_1C_4) = 0$ ocorre em $C = 0$ ou $\frac{9}{2}\lambda BC + \frac{7}{2}\alpha C + 2\frac{\alpha^2}{\lambda}B + 6\alpha B^2 = 0$. Se $C = 0 \Rightarrow \frac{\nu}{3} = 0 \Rightarrow \nu = 0$. Já se $\frac{9}{2}\lambda BC + \frac{7}{2}\alpha C + 2\frac{\alpha^2}{\lambda}B + 6\alpha B^2 = 0$ faz-se as substituições $B = \frac{\lambda\varepsilon - \lambda\nu - 2\alpha^2}{6\lambda\alpha}$ e $C = \frac{\nu}{3\lambda}$.

$$\frac{9\lambda}{2}\left(\frac{\lambda\varepsilon - \lambda\nu - 2\alpha^2}{6\lambda\alpha}\right)\left(\frac{\nu}{3\lambda}\right) + \frac{7\alpha}{2}\left(\frac{\nu}{3\lambda}\right) + \\ + \frac{2\alpha^2}{\lambda}\left(\frac{\lambda\varepsilon - \lambda\nu - 2\alpha^2}{6\lambda\alpha}\right) + 6\alpha \frac{(\lambda^2\varepsilon^2 + \lambda^2\nu^2 + 4\alpha^4 - 2\lambda^2\varepsilon\nu - 4\lambda\varepsilon\alpha^2 + 4\lambda\nu\alpha^2)}{(6\alpha\lambda)^2} =$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{\lambda^2 \varepsilon \nu - \lambda^2 \nu^2 - 2\alpha^2 \nu \lambda}{4\lambda^2 \alpha} + \frac{7\alpha^2 \nu \lambda}{6\lambda^2 \alpha} + \\
&+ \frac{\lambda \varepsilon \alpha^2 - \lambda \nu \alpha^2 - 2\alpha^4}{3\lambda^2 \alpha} + \frac{\lambda^2 \varepsilon^2 + \lambda^2 \nu^2 + 4\alpha^4 - 2\lambda^2 \varepsilon \nu - 4\lambda \varepsilon \alpha^2 + 4\lambda \nu \alpha^2}{6\lambda^2 \alpha} = \\
&= \frac{-\lambda^2 \varepsilon \nu - \lambda^2 \nu^2 + 12\lambda \nu \alpha^2 - 4\lambda \varepsilon \alpha^2 + 2\lambda^2 \varepsilon^2}{12\lambda^2 \alpha} = 0 \tag{3.81}
\end{aligned}$$

Assim

$$\lambda^2 \nu^2 + \nu(\lambda^2 \varepsilon - 12\lambda \alpha^2) + 4\lambda \varepsilon \alpha^2 - 2\lambda^2 \varepsilon^2 = 0 \tag{3.82}$$

Pela fórmula de Báskara

$$\begin{aligned}
\nu &= \frac{-(\lambda^2 \varepsilon - 12\lambda \alpha^2) \pm \sqrt{(\lambda^2 \varepsilon - 12\lambda \alpha^2)^2 - 4\lambda^2(4\lambda \varepsilon \alpha^2 - 2\lambda^2 \varepsilon^2)}}{2\lambda^2} = \\
&= -\frac{\varepsilon}{2} + \frac{6\alpha^2}{\lambda} \pm \sqrt{\frac{\lambda^4 \varepsilon^2 - 24\lambda^3 \alpha^2 \varepsilon + 144\lambda^2 \alpha^4 - 16\lambda^3 \varepsilon \alpha^2 + 8\lambda^4 \varepsilon^2}{4\lambda^4}} = \\
&= -\frac{\varepsilon}{2} + \frac{6\alpha^2}{\lambda} \pm \sqrt{\frac{9}{4}\varepsilon^2 - \frac{10\alpha^2}{\lambda}\varepsilon + \frac{36\alpha^4}{\lambda^2}} \tag{3.83}
\end{aligned}$$

Define-se assim a curva ν''_{\pm} onde

$$\nu''_{\pm} = -\frac{\varepsilon}{2} + \frac{6\alpha^2}{\lambda} \pm \sqrt{\frac{9}{4}\varepsilon^2 - \frac{10\alpha^2}{\lambda}\varepsilon + \frac{36\alpha^4}{\lambda^2}} \tag{3.84}$$

Para saber onde as curvas ν''_{+} e ν''_{-} se interceptam basta calcular onde $(\frac{9}{4}\varepsilon^2 - \frac{10\alpha^2}{\lambda}\varepsilon + 36\frac{\alpha^4}{\lambda^2}) = 0$. Usando Báskara $\varepsilon = \frac{\frac{10\alpha^2}{\lambda} \pm \sqrt{\frac{100\alpha^4}{\lambda^2} - \frac{9 \cdot 36\alpha^4}{\lambda^2}}}{2 \cdot \frac{9}{4}} = (\frac{10 \pm \sqrt{-224}}{2}) \frac{\alpha^2}{\lambda}$. Logo, não há valor real para que ε satisfaça a equação acima.

Então, sempre $\nu_{+} \neq \nu_{-}$. As duas curvas nunca se interceptam.

Resta então saber onde as curvas ν''_{+} e ν''_{-} interceptam as curvas ν'_{+} , ν'_{-} e ν_{+} . Isto é fundamental pois as regiões onde ocorre ambiguidade nas soluções atômico-molecular estão limitadas por estas curvas.

Escreve-se

$$\nu''_{\pm} = \nu'_{\pm} \tag{3.85}$$

Como será visto a seguir, o sinal ± 1 sumirá com os cálculos.

$$\begin{aligned}
& -\frac{\varepsilon}{2} + \frac{6\alpha^2}{\lambda} \pm \sqrt{\frac{9}{4}\varepsilon^2 - \frac{10\alpha^2}{\lambda}\varepsilon + \frac{36\alpha^4}{\lambda^2}} = \\
& = \varepsilon + \frac{4\alpha^2}{\lambda} \pm \frac{2\alpha}{\lambda}\sqrt{\lambda\varepsilon + 4\alpha^2} \quad (3.86)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \frac{3}{2}\varepsilon - \frac{2\alpha^2}{\lambda} = \\
& \pm \sqrt{\frac{9}{4}\varepsilon^2 - \frac{10\alpha^2}{\lambda}\varepsilon + \frac{36\alpha^4}{\lambda^2}} \mp \frac{2\alpha}{\lambda}\sqrt{\lambda\varepsilon + 4\alpha^2} \quad (3.87)
\end{aligned}$$

Elevando os dois membros da equação ao quadrado.

$$\begin{aligned}
& \frac{9}{4}\varepsilon^2 - 6\frac{\alpha^2}{\lambda}\varepsilon + \frac{4\alpha^4}{\lambda^2} = \frac{9}{4}\varepsilon^2 - 6\frac{\alpha^2}{\lambda}\varepsilon + \\
& + \frac{52\alpha^4}{\lambda^2} + \frac{4\alpha}{\lambda}(\pm 1)(\mp 1)\sqrt{\frac{9}{4}\varepsilon^2 - \frac{10\alpha^2}{\lambda}\varepsilon + \frac{36\alpha^4}{\lambda^2}}\sqrt{\lambda\varepsilon + 4\alpha^2} \quad (3.88)
\end{aligned}$$

$$-\frac{48\alpha^4}{\lambda^2} = \frac{4\alpha}{\lambda}(\pm 1)(\mp 1)\sqrt{\frac{9\lambda}{4}\varepsilon^3 + 9\varepsilon^2\alpha^2 - 10\alpha^2\varepsilon^2 - \frac{40\alpha^4}{\lambda}\varepsilon + \frac{144\alpha^6}{\lambda^2} + \frac{36\alpha^4}{\lambda}\varepsilon} \quad (3.89)$$

$$-\frac{12\alpha^3}{\lambda} = (\pm 1)(\mp 1)\sqrt{\frac{9\lambda}{4}\varepsilon^3 + 9\varepsilon^2\alpha^2 - 10\alpha^2\varepsilon^2 - \frac{4\alpha^4}{\lambda}\varepsilon + \frac{144\alpha^6}{\lambda^2}} \quad (3.90)$$

Novamente, elevam-se os dois membros da equação ao quadrado. Tal operação some com o sinal $(\pm 1)(\mp 1)$.

$$\frac{144\alpha^6}{\lambda^2} = \frac{9\lambda}{4}\varepsilon^3 + 9\varepsilon^2\alpha^2 - 10\alpha^2\varepsilon^2 - \frac{4\alpha^4}{\lambda}\varepsilon + \frac{144\alpha^6}{\lambda^2} \quad (3.91)$$

$$\frac{9\lambda}{4}\varepsilon^3 - \alpha^2\varepsilon^2 - \frac{4\alpha^4}{\lambda}\varepsilon = 0 \quad (3.92)$$

$$\varepsilon\left(\frac{9\lambda}{4}\varepsilon^2 - \alpha^2\varepsilon - \frac{4\alpha^4}{\lambda}\right) = 0 \quad (3.93)$$

Logo $\varepsilon = 0$ ou $\frac{9\lambda}{4}\varepsilon^2 - \alpha^2\varepsilon - \frac{4\alpha^4}{\lambda} = 0$.

Usando a fórmula Báskara.

$$\frac{9\lambda}{4}\varepsilon^2 - \alpha^2\varepsilon - \frac{4\alpha^4}{\lambda} = 0 \quad (3.94)$$

$$\varepsilon = \frac{\alpha^2 \pm \sqrt{\alpha^4 + 36\alpha^4}}{\frac{9\lambda}{2}} \quad (3.95)$$

$$\varepsilon = \frac{2}{9}(1 \pm \sqrt{37})\frac{\alpha^2}{\lambda} \quad (3.96)$$

Como o sinal \pm desapareceu não é possível saber quais são os cruzamentos de ν'_+ e ν'_- com ν''_+ e ν''_- . Então é necessário calcular os valores de ν''_+ , ν'_+ , ν''_+ e ν'_- relativos aos três valores de ε .

Para $\varepsilon = 0$ obtem-se $\nu''_+ = \frac{12\alpha^2}{\lambda}$, $\nu''_- = 0$, $\nu'_+ = \frac{8\alpha^2}{\lambda}$, $\nu'_- = 0$. Logo em $\varepsilon = 0$ o que está sendo interceptado são as curvas ν''_- e ν'_- .

Já para $\varepsilon = \frac{2}{9}(1 + \sqrt{37})\frac{\alpha^2}{\lambda} = \frac{1.57\alpha^2}{\lambda}$ obtem-se $\nu''_+ = \frac{10.30\alpha^2}{\lambda}$, $\nu''_- = \frac{0.13\alpha^2}{\lambda}$, $\nu'_+ = \frac{10.30\alpha^2}{\lambda}$, $\nu'_- = \frac{0.85\alpha^2}{\lambda}$. Assim, em $\varepsilon = \frac{1.57\alpha^2}{\lambda}$ as curvas que se cruzam são ν''_+ e ν'_+ .

Enfim, para $\varepsilon = \frac{2}{9}(1 - \sqrt{37})\frac{\alpha^2}{\lambda} = \frac{-1.13\alpha^2}{\lambda}$. Os valores das curvas são: $\nu''_+ = \frac{13.65\alpha^2}{\lambda}$, $\nu''_- = \frac{-0.52\alpha^2}{\lambda}$, $\nu'_+ = \frac{6.26\alpha^2}{\lambda}$, $\nu'_- = \frac{-0.52\alpha^2}{\lambda}$. Portanto em $\varepsilon = \frac{-1.13\alpha^2}{\lambda}$ as curvas que se interceptam são ν''_- e ν'_- .

Começa-se estudando a intersecção entre ν''_+ e ν'_+ . Para $\varepsilon = \frac{1\alpha^2}{\lambda}$, $\nu''_+ = \frac{10.81\alpha^2}{\lambda}$ e $\nu'_+ = \frac{9.47\alpha^2}{\lambda}$. Já para $\varepsilon = \frac{2\alpha^2}{\lambda}$, $\nu''_+ = \frac{10\alpha^2}{\lambda}$ e $\nu'_+ = \frac{10.89\alpha^2}{\lambda}$. Assim, para $\varepsilon \geq \frac{1.57\alpha^2}{\lambda}$, $\nu''_+ \leq \nu'_+$. Como ν''_+ não intercepta ν'_- , para $\varepsilon \geq \frac{1.57\alpha^2}{\lambda}$ vale $\nu'_- \leq \nu''_+ \leq \nu'_+$. Assim a curva ν''_+ a partir de $\varepsilon = \frac{1.57\alpha^2}{\lambda}$ fica contida na *reg.A2* dividindo-a em duas sub-regiões. Como $\nu''_+ \geq \nu'_-$ para $\varepsilon \geq \frac{1.57\alpha^2}{\lambda}$ então $\nu''_+ > 0$ na região de interesse (ver fig. 3.1).

Agora basta calcular a função $(C_2C_3 - C_1C_4)$ acima da curva e abaixo dela. O ponto $(\frac{3\alpha^2}{\lambda}, \frac{10\alpha^2}{\lambda})$ fica acima da curva ν''_+ . Para tal ponto a função $(C_2C_3 - C_1C_4) < 0$. Logo, acima da curva ν''_+ a solução $|\Psi_b| = B + \sqrt{B^2 + C}$ tem menor energia do que $|\Psi_b| = -B + \sqrt{B^2 + C}$. Tomando o ponto $(0, \frac{1\alpha^2}{\lambda})$, que fica abaixo de ν''_+ chega-se à $(C_2C_3 - C_1C_4) > 0$. Logo abaixo de ν''_+ a solução $|\Psi_b| = -B + \sqrt{B^2 + C}$ tem menor energia do que $|\Psi_b| = B + \sqrt{B^2 + C}$.

Assim, a *reg.A2* fica dividida em duas sub-regiões: *reg.A21* com $0 \leq \nu \leq \nu''_+$ para $\frac{-4\alpha^2}{\lambda} \leq \varepsilon \leq 0$, $\nu'_- \leq \nu \leq \nu'_+$ para $0 \leq \varepsilon \leq \frac{1.57\alpha^2}{\lambda}$, $\nu'_- \leq \nu \leq \nu''_+$ para $\varepsilon \geq \frac{1.57\alpha^2}{\lambda}$; *reg.A22* que fica em $\nu''_+ \leq \nu \leq \nu'_+$ para $\varepsilon \geq \frac{1.57\alpha^2}{\lambda}$.

Sub-regiões de A2

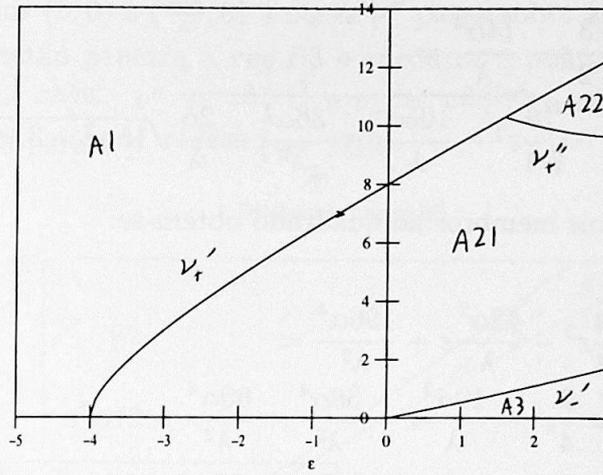


Figura 3.1: Plano $\nu \times \epsilon$. Esta figura exhibe a divisão da região $A2$ em duas sub-regiões: $A21$ e $A22$.

Resta analisar as intersecções entre ν'' e ν'_- . A primeira intersecção está em $(\frac{-1.13\alpha^2}{\lambda}, \frac{-0.52\alpha^2}{\lambda})$ e a segunda em $(0, 0)$. Para $\epsilon = \frac{-1\alpha^2}{\lambda}$, $\nu'' = \frac{-0.45\alpha^2}{\lambda} =$ e $\nu'_- = \frac{-0.46\alpha^2}{\lambda}$. Como $(0, 0)$ faz parte do limite da região $B3$ então para $\frac{-1.13\alpha^2}{\lambda} \leq \epsilon \leq 0$ a curva ν'' passa por cima da curva ν'_- . Logo, a curva ν'' não penetra na *reg. B3* no intervalo $\frac{-1.13\alpha^2}{\lambda} \leq \epsilon \leq 0$. Para $\epsilon = \frac{-1.5\alpha^2}{\lambda}$, $\nu'' = \frac{-0.74\alpha^2}{\lambda}$ e $\nu'_- = \frac{-0.26\alpha^2}{\lambda}$. Logo, a curva ν'' penetra a região $B3$ para $\epsilon \leq \frac{-1.13\alpha^2}{\lambda}$.

Para analisar como a curva ν'' penetra na *reg. B3* é necessário ver as intersecções entre esta curva e ν_+ , que é o outro limite da região estudada. Faz-se

$$\nu'' = \nu_+ \quad (3.97)$$

$$\begin{aligned} & -\frac{1}{2}\epsilon + \frac{6\alpha^2}{\lambda} - \sqrt{\frac{9}{4}\epsilon^2 - \frac{10\alpha^2}{\lambda}\epsilon + \frac{36\alpha^2}{\lambda^2}} = \\ & = \epsilon - \frac{8\alpha^2}{\lambda} + \frac{2\alpha}{\lambda}\sqrt{15\alpha^2 - 3\lambda\epsilon} \end{aligned} \quad (3.98)$$

$$\frac{3}{2}\varepsilon - \frac{14\alpha^2}{\lambda} = -\sqrt{\frac{9}{4}\varepsilon^2 - \frac{10\alpha^2}{\lambda}\varepsilon + \frac{36\alpha^2}{\lambda^2} - \frac{2\alpha}{\lambda}\sqrt{15\alpha^2 - 3\lambda\varepsilon}} \quad (3.99)$$

Elevando os dois membros ao quadrado obtém-se:

$$\begin{aligned} & \frac{9}{4}\varepsilon^2 - \frac{42\alpha^2}{\lambda}\varepsilon + \frac{196\alpha^4}{\lambda^2} = \\ & = \frac{9}{4}\varepsilon^2 - \frac{10\alpha^2}{\lambda}\varepsilon + \frac{36\alpha^4}{\lambda^2} + \frac{60\alpha^4}{\lambda^2} - 21\alpha^2\varepsilon + \\ & + \frac{2\alpha}{\lambda}\sqrt{15\alpha^2 - 3\lambda\varepsilon}\sqrt{\frac{9}{4}\varepsilon^2 - \frac{10\alpha^2}{\lambda}\varepsilon + \frac{36\alpha^2}{\lambda^2} - \frac{2\alpha}{\lambda}} \end{aligned} \quad (3.100)$$

$$\begin{aligned} & -\frac{20\alpha^2}{\lambda}\varepsilon + \frac{100\alpha^4}{\lambda^2} = \\ & = \frac{2\alpha}{\lambda}\sqrt{\frac{135\alpha^2}{4}\varepsilon^2 - \frac{27\lambda}{4}\varepsilon^3 - \frac{150\alpha^4}{\lambda}\varepsilon + 30\alpha^2\varepsilon^2 + \frac{540\alpha^6}{\lambda^2} - \frac{108\alpha^4}{\lambda}} \end{aligned} \quad (3.101)$$

$$-10\alpha\varepsilon + \frac{50\alpha^3}{\lambda} = \sqrt{63.75\alpha^2\varepsilon^2 - \frac{27\lambda}{4}\varepsilon^3 - \frac{258\alpha^4}{\lambda}\varepsilon + \frac{540\alpha^6}{\lambda^2}} \quad (3.102)$$

$$\begin{aligned} & 100\alpha^2\varepsilon^2 - \frac{1000\alpha^4}{\lambda}\varepsilon + \frac{2500\alpha^6}{\lambda^2} = \\ & = 63.75\alpha^2\varepsilon^2 - \frac{27\lambda}{4}\varepsilon^3 - \frac{258\alpha^4}{\lambda}\varepsilon + \frac{540\alpha^6}{\lambda^2} \end{aligned} \quad (3.103)$$

$$36.25\alpha^2\varepsilon^2 - \frac{742\alpha^4}{\lambda}\varepsilon + \frac{1960\alpha^6}{\lambda^2} + \frac{27\lambda}{4}\varepsilon^3 = 0 \quad (3.104)$$

Não há solução analítica trivial para a equação acima. Tomando um procedimento numérico chega-se aos valores: $\varepsilon = \frac{-1.26\alpha^2}{\lambda}$, $\varepsilon = \frac{2\alpha^2}{\lambda}$ e $\varepsilon = \frac{5\alpha^2}{\lambda}$. O ponto $(\frac{5\alpha^2}{\lambda}, \frac{-3\alpha^2}{\lambda})$ fica externo à *reg.B3*. Já o ponto $(\frac{2\alpha^2}{\lambda}, 0)$ fica no limite

desta região. Para $\varepsilon = \frac{1\alpha^2}{\lambda}$, $\nu'' = \frac{0.18\alpha^2}{\lambda}$ e $\nu_+ = \frac{-0.072\alpha^2}{\lambda}$. Como na *reg.B3* $\nu < 0$ entre os pontos $(0, 0)$ e $(\frac{2\alpha^2}{\lambda}, 0)$ a curva ν'' passa sobre a região *B3*. Então a curva em questão penetra a *reg.B3* e encontra o ponto $(\frac{-1.26\alpha^2}{\lambda}, \frac{-0.59\alpha^2}{\lambda})$. Como para $\varepsilon = \frac{-1.5\alpha^2}{\lambda}$, $\nu'' = \frac{-0.74\alpha^2}{\lambda}$ e $\nu_+ = \frac{-0.67\alpha^2}{\lambda}$ a curva ν'' passa por baixo da *reg.B3* para $\varepsilon \leq \frac{-1.26\alpha^2}{\lambda}$ (ver 3.2).

Fig.

Divisao da regioao B3

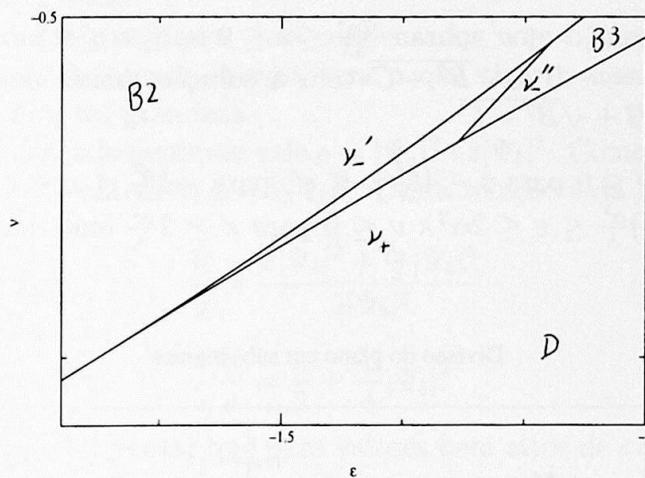


Figura 3.2: Plano $\nu \times \varepsilon$. Esta figura exhibe a divisão da região *B3*

A curva ν'' divide a região *B3* em duas outras: uma à esquerda e outra à direita de ν_- . Tomando-se o ponto $(0, \frac{-0.1\alpha^2}{\lambda})$ à direita da curva ν_- chega-se à $(C_2C_3 - C_1C_4) > 0$. Para o ponto $(\frac{-1.26\alpha^2}{\lambda}, \frac{-0.58\alpha^2}{\lambda})$ abaixo da curva ν_- obtem-se $(C_2C_3 - C_1C_4) > 0$. Assim, em qualquer ponto da *reg.B3* a solução $|\Psi_b| = -B - \sqrt{B^2 + C}$ tem maior energia do que $|\Psi_b| = -B + \sqrt{B^2 + C}$.

Como na região *B3* há apenas soluções estáveis e sempre a energia da solução $|\Psi_b| = -B + \sqrt{B^2 + C}$ é menor do que $|\Psi_b| = -B - \sqrt{B^2 + C}$ não é necessário subdividir a *reg.B3* em sub-regiões.

Finalmente obtem-se as regiões e o gráfico do plano $\nu \times \varepsilon$ (ver 3.3):

- Reg. *A1* $\nu \geq 0$, para $\varepsilon \leq -4\frac{\alpha^2}{\lambda}$ $\nu \geq \nu'_+$, para $\varepsilon \geq -4\frac{\alpha^2}{\lambda}$ vale $|\Psi_b| = B + \sqrt{B^2 + C}$
- Reg. *A21* $0 \leq \nu \leq \nu'_+$ para $-4\frac{\alpha^2}{\lambda} \leq \varepsilon \leq 0$ $\nu'_- \leq \nu \leq \nu'_+$ para $0 \leq \varepsilon \leq 1.57\frac{\alpha^2}{\lambda}$ $\nu'_- \leq \nu \leq \nu''_+$ vale $|\Psi_b| = \beta B + \sqrt{B^2 + C}$ com a solução

menos energética sendo àquela com $\beta = -1$

- Reg. $A22$ $\nu''_+ \leq \nu \leq \nu'_+$ para $\varepsilon \geq 1.57 \frac{\alpha^2}{\lambda}$ vale $|\Psi_b| = \beta B + \sqrt{B^2 + C}$ com a solução menos energética sendo àquela com $\beta = +1$
- Reg. $A3$ $0 \leq \nu \leq \nu'_-$ para $\varepsilon \geq 0$ vale $|\Psi_b| = -B + \sqrt{B^2 + C}$
- Reg. $B2$ $\nu'_- \leq \nu \leq 0$ para $-4 \frac{\alpha^2}{\lambda} \leq \varepsilon \leq 0$ vale $|\Psi_b| = -B + \sqrt{B^2 + C}$
- Reg. $B3$ $\nu_+ \leq \nu \leq \nu'_-$ para $-\frac{7\alpha^2}{4\lambda} \leq \varepsilon \leq 0$ $\nu_+ \leq \nu \leq 0$ para $0 \leq \varepsilon \leq 2 \frac{\alpha^2}{\lambda}$ vale $|\Psi_b| = -B \pm \sqrt{B^2 + C}$ com a solução menos energética sendo $|\Psi_b| = -B + \sqrt{B^2 + C}$
- Reg. D $\nu \leq 0$ para $\varepsilon - 4 \frac{\alpha^2}{\lambda}$ $\nu \leq \nu'_-$ para $-4 \frac{\alpha^2}{\lambda} \leq \varepsilon \leq (-\frac{7}{4}) \frac{\alpha^2}{\lambda}$ $\nu < \nu_+$ para $(-\frac{7}{4}) \frac{\alpha^2}{\lambda} \leq \varepsilon \leq 2\alpha^2\lambda$ $\nu \leq 0$ para $\varepsilon \geq 2 \frac{\alpha^2}{\lambda}$ onde não vale solução alguma.

Divisao do plano em sub-regioes

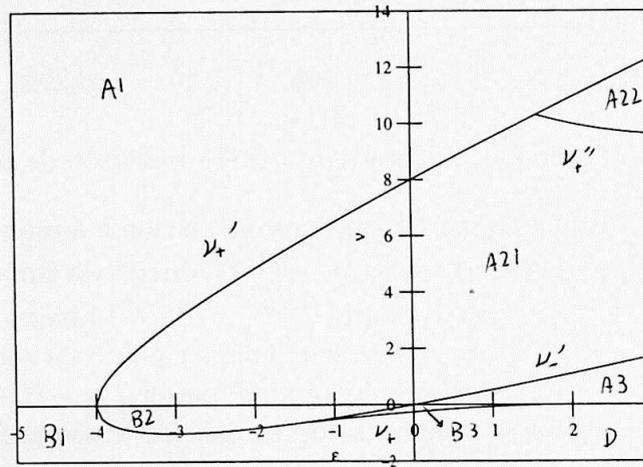


Figura 3.3: Esta figura exhibe o plano $\nu \times \varepsilon$ dividido em regiões e sub-regiões segundo o critério da energia.

3.5 Energia da solução molecular

Várias tentativas foram feitas para comparar a energia do condensado molecular com o condensado atômico-molecular. Infelizmente, ao contrário do que ocorreu na solução atômico-molecular, não foi possível dividir o gráfico $\nu \times \varepsilon$ em regiões onde se sabe qual a solução de menor energia.

Resta então calcular numericamente a energia de cada solução do condensado e compara-los.

Da 3.50 sabe-se que dados dois condensados com o mesmo número de partículas aquele de menor energia será o que tiver o menor $\frac{\mathcal{H}}{\rho}$. Logo, é necessário calcular tal grandeza.

Em um condensado qualquer vale $\rho = |\Psi_a|^2 + 2|\Psi_b|^2$. Como no condensado molecular $|\Psi_a| = 0$ obtem-se $\rho = 2|\Psi_b|^2$. Desta relação e da 3.2 obtem-se:

$$\frac{\mathcal{H}}{\rho} = \frac{\varepsilon|\Psi_b|^2 + \frac{\lambda_b}{2}|\Psi_b|^4}{2|\Psi_b|^2} \quad (3.105)$$

$$\frac{\mathcal{H}}{\rho} = \frac{\varepsilon}{2} + \frac{\lambda_b}{4}|\Psi_b|^2 \quad (3.106)$$

Porém, é razoável pensar que para valores bem altos de ε a solução molecular seja instável ou de maior energia que as outras. Isto se deve ao fato de que será grande energia necessária para dois átomos formarem uma molécula.

Também é razoável achar que para valores bem baixos de ε a solução molecular seja estável e de menor energia que as outras. É evidente que neste caso os átomos formarão moléculas minimizando a energia.

3.6 Pressão da solução molecular.

A questão da pressão em um sistema uniforme é muito importante para entender o confinamento deste. Assim, se um sistema uniforme possui pressão positiva ele tende a expandir-se. Para conter tal expansão é necessária a presença de uma parede que exerça pressão de fora para dentro. Um exemplo disto é um gás no interior de um balão de borracha ou mesmo de uma garrafa.

Quando a pressão é negativa, o sistema tende a colapsar. A pressão também pode ser nula. Neste caso o sistema não colapsa e nem se expande.

No caso dos condensados Bose-Einstein o recipiente é uma armadilha magnética (ou ótica). Determinando a pressão do condensado, é possível saber se haverá armadilha que conterá o condensado.

Começa-se estudando a pressão no condensado molecular. A definição de pressão é:

$$P = -\frac{\delta E}{\delta V} \quad (3.107)$$

Usando a 3.47 vê-se que $E = \mathcal{H}V$.

$$P = -\frac{\delta(\mathcal{H}V)}{\delta V} \quad (3.108)$$

$$P = -V\frac{\delta\mathcal{H}}{\delta V} - \mathcal{H} \quad (3.109)$$

Como $\rho = \frac{N}{V}$ então a expressão acima fica:

$$P = -V\frac{\delta\rho}{\delta V}\frac{\delta\mathcal{H}}{\delta\rho} - \mathcal{H} \quad (3.110)$$

$$P = -V\left(-\frac{N}{V^2}\right)\frac{\delta\mathcal{H}}{\delta\rho} - \mathcal{H} \quad (3.111)$$

$$P = \rho\frac{\delta\mathcal{H}}{\delta\rho} - \mathcal{H} \quad (3.112)$$

Para o condensado molecular sabe-se que $\rho = \rho_a + 2\rho_b = 2\rho_b$. O hamiltoniano de tal sistema está em 3.2. Porém, para facilitar a notação substitui-se $|\Psi_b|^2$ por ρ_b . Assim:

$$\mathcal{H} = \varepsilon\rho_b + \frac{\lambda}{2}\rho_b^2 \quad (3.113)$$

$$\frac{\delta\mathcal{H}}{\delta\rho} = \frac{\delta\rho_b}{\delta\rho}\frac{\delta\mathcal{H}}{\delta\rho_b} = \frac{1}{2}(\varepsilon + \lambda\rho_b) \quad (3.114)$$

Substituindo a 3.114 na 3.112 obtem-se:

$$P = 2\rho_b\frac{1}{2}(\varepsilon + \lambda\rho_b) - (\varepsilon\rho_b + \frac{\lambda}{2}\rho_b^2) = \frac{\lambda\rho^2}{2} \quad (3.115)$$

Assim, a pressão no condensado molecular é positiva. Logo o condensado pode ser confinado. É interessante notar que na curva $\nu = \frac{\varepsilon}{2}$ a pressão é nula pois ρ_b é nulo. Assim, o vácuo não exerce pressão alguma (o que já era esperado).

3.7 Pressão da solução atômico-molecular.

A pressão no condensado atômico-molecular é totalmente análoga à pressão do condensado molecular. Basta usar a expressão da densidade como $\rho = \rho_a + 2\rho_b$. O hamiltoniano é obtido da 3.52 fazendo as substituições de $|\Psi_a|^2$ e $|\Psi_b|^2$ respectivamente por ρ_a e ρ_b . Assim:

$$\mathcal{H} = \varepsilon\rho_b + \frac{\lambda}{2}(\rho_a + \rho_b)^2 + 2\alpha\rho_a\sqrt{\rho_b} \quad (3.116)$$

Calculando $\frac{\delta\mathcal{H}}{\delta\rho}$ e usando a expressão $\rho = \rho_a + 2\rho_b$.

$$\frac{\delta\mathcal{H}}{\delta\rho} = \frac{\delta\rho_a}{\delta\rho} \frac{\delta\mathcal{H}}{\delta\rho_a} + \frac{\delta\rho_b}{\delta\rho} \frac{\delta\mathcal{H}}{\delta\rho_b} = \lambda(\rho_a + \rho_b) + 2\alpha\sqrt{\rho_b} + \frac{1}{2}(\varepsilon + \lambda(\rho_a + \rho_b) - \frac{\alpha\rho_a}{\sqrt{\rho_b}}) \quad (3.117)$$

Substituindo a 3.117 na 3.112.

$$P = (\rho_a + 2\rho_b)(\lambda(\rho_a + \rho_b) + 2\alpha\sqrt{\rho_b} + \frac{1}{2}(\varepsilon + \lambda(\rho_a + \rho_b) - \frac{\alpha\rho_a}{\sqrt{\rho_b}})) - (\varepsilon\rho_b + \frac{\lambda}{2}(\rho_a + \rho_b)^2 + 2\alpha\rho_a\sqrt{\rho_b}) \quad (3.118)$$

Após manipulações algébricas:

$$P = \frac{\varepsilon}{2}\rho_a + \frac{\lambda}{2}(2\rho_a^2 + 5\rho_b^2 + 7\rho_a\rho_b) + \frac{\alpha}{\sqrt{\rho_b}}(4\rho_b^2 - \frac{\rho_a^2}{2} - \rho_a\rho_b) \quad (3.119)$$

Infelizmente, após inúmeras tentativas, não foi possível determinar analiticamente uma curva no gráfico $\nu \times \varepsilon$ onde a pressão fosse nula. Assim, o cálculo da pressão será numérico.

Um fato interessante é que nesta expressão o vácuo ($\rho_a = \rho_b = 0$) corresponde a uma pressão nula. Além disso, se apenas o número de átomos tender a zero ($\rho_a \rightarrow 0$) a pressão tende a um valor positivo ($P \rightarrow \frac{5\lambda\rho_b^2}{2} + 4\alpha\rho_b^{\frac{3}{2}}$). Assim, nas curvas ν'_{\pm} quando $|\Psi_a|^2$ é nula a pressão não pode ser negativa.

3.8 Resultados numéricos.

Pode-se tomar um procedimento padrão para determinar as soluções associadas à um ponto do plano $\nu \times \varepsilon$.

1-) Identificar a região à que o ponto pertence e relaciona-la com as soluções possíveis.

2-) Se a região contiver a solução $|\Psi_b| = B + \sqrt{B^2 + C}$ verificar a função $A(\varepsilon, \nu)$. Se $A < 0$ a solução é estável. Caso contrário a solução é instável.

3-) Calcular os valores de $|\Psi_a|^2$ e $|\Psi_b|^2$ das soluções estáveis. É importante calcular uma quantidade f definida como $\frac{|\Psi_a|^2}{|\Psi_a|^2 + 2|\Psi_b|^2}$. f corresponde a fração de átomos em relação ao condensado total.

4-) Caso se verifique que há solução molecular ($\nu \geq \frac{\varepsilon}{2}$), calcula-se a densidade $|\Psi_b|^2$.

5-) Caso haja solução molecular, calcular numericamente as energias das soluções atômico-molecular e da molecular.

6-) Calcular a pressão das soluções atômico-moleculares estáveis a fim de descobrir se ela é positiva, negativa ou nula.

Para ilustrar isso analisam-se alguns pontos do gráfico. Começa-se com $(0, \frac{1\alpha^2}{\lambda})$.

1-) Ele pertence à *reg. A21*, onde a energia da solução $|\Psi_b| = -B + \sqrt{B^2 + C}$ é menor do que a de $|\Psi_b| = B + \sqrt{B^2 + C}$.

2-) Calcula-se $A(0, \frac{1\alpha^2}{\lambda}) = -0.32\frac{\alpha^2}{\lambda} < 0$. Logo a solução $|\Psi_b| = B + \sqrt{B^2 + C}$ é estável.

3-) As densidades são $|\Psi_a|^2 = \frac{1.93\alpha^2}{\lambda}$, $|\Psi_b|^2 = \frac{1.60\alpha^2}{\lambda}$, $f = 0.38$ para a solução $|\Psi_b| = -B + \sqrt{B^2 + C}$ e $|\Psi_a|^2 = \frac{0.40\alpha^2}{\lambda}$, $|\Psi_b|^2 = \frac{0.07\alpha^2}{\lambda}$, $f = 0.74$ para a solução $|\Psi_b| = B + \sqrt{B^2 + C}$.

4-) Como $1 > \frac{1}{2}0$, há solução molecular. Assim, $|\Psi_b|^2 = \frac{2\alpha^2}{\lambda}$.

5-) As energias ficam: da solução $|\Psi_b| = B + \sqrt{B^2 + C}$ $\frac{H}{\rho} = \frac{0.60\alpha}{\lambda}$, de $|\Psi_b| = -B + \sqrt{B^2 + C}$ $\frac{H}{\rho} = \frac{0.26\alpha}{\lambda}$ e da solução molecular $\frac{H}{\rho} = \frac{0.5\alpha}{\lambda}$.

6-) As pressões são: da solução $|\Psi_b| = -B + \sqrt{B^2 + C}$ $P = 25.0535\frac{\alpha^2}{\lambda}$, de $|\Psi_b| = B + \sqrt{B^2 + C}$ $P = -0.0680554\frac{\alpha^2}{\lambda}$.

Outro ponto interessante é $(\frac{3\alpha^2}{\lambda}, \frac{10\alpha^2}{\lambda})$.

1-) Ele pertence à *reg. A22*, onde a energia da solução $|\Psi_b| = B + \sqrt{B^2 + C}$ é menor do que a de $|\Psi_b| = -B + \sqrt{B^2 + C}$.

2-) $A(\frac{3\alpha^2}{\lambda}, \frac{10\alpha^2}{\lambda}) = \frac{-3.74\alpha^2}{\lambda} < 0$ logo a solução com $\beta = +1$ é estável.

3-) As densidades são $|\Psi_a|^2 = \frac{2.80\alpha^2}{\lambda}$, $|\Psi_b|^2 = \frac{1.58\alpha^2}{\lambda}$, $f = 0.09$ para a solução $|\Psi_b| = -B + \sqrt{B^2 + C}$ e $|\Psi_a|^2 = \frac{7.53\alpha^2}{\lambda}$, $|\Psi_b|^2 = \frac{0.74\alpha^2}{\lambda}$, $f = 0.83$ para a solução $|\Psi_b| = B + \sqrt{B^2 + C}$.

4-) Como $\frac{10\alpha^2}{\lambda} > \frac{1}{2}\frac{3\alpha^2}{\lambda}$, há solução molecular. Assim, $|\Psi_b|^2 = \frac{17\alpha^2}{\lambda}$.

5-) As energias ficam respectivamente: da solução $|\Psi_b| = -B + \sqrt{B^2 + C}$ $\frac{H}{\rho} = \frac{5.48\alpha^2}{\lambda}$, de $|\Psi_b| = -B + \sqrt{B^2 + C}$ $\frac{H}{\rho} = \frac{5.52\alpha}{\lambda}$ e da solução molecular $\frac{H}{\rho} = \frac{5.72\alpha}{\lambda}$.

6-) As pressões são: da solução $|\Psi_b| = -B + \sqrt{B^2 + C}$ $P = 933.891 \frac{\alpha^2}{\lambda}$, da solução $|\Psi_b| = -B + \sqrt{B^2 + C}$ $P = 52.22 \frac{\alpha^2}{\lambda}$.

Um terceiro ponto é $(\frac{10\alpha^2}{\lambda}, \frac{20\alpha^2}{\lambda})$.

1-) Ele pertence à *reg.A22*

2-) $A(\frac{10\alpha^2}{\lambda}, \frac{20\alpha^2}{\lambda}) = \frac{3.76\alpha^2}{\lambda} > 0$ logo a solução com $\beta = +1$ é instável.

3-) As densidades são $|\Psi_a|^2 = \frac{2.80\alpha^2}{\lambda}$, $|\Psi_b|^2 = \frac{27.73\alpha^2}{\lambda}$, $f = 0.05$ para a solução $|\Psi_b| = -B + \sqrt{B^2 + C}$.

4-) Como $\frac{20\alpha^2}{\lambda} > \frac{1}{2} \frac{10\alpha^2}{\lambda}$, há solução molecular. Assim, $|\Psi_b|^2 = \frac{30\alpha^2}{\lambda}$.

5-) As energias ficam respectivamente: da solução $|\Psi_b| = -B + \sqrt{B^2 + C}$ $\frac{H}{\rho} = \frac{12.25\alpha}{\lambda}$ e da solução molecular $\frac{H}{\rho} = \frac{12.50\alpha}{\lambda}$.

6-) A pressão da solução $|\Psi_b| = -B + \sqrt{B^2 + C}$ é $P = 2784.83 \frac{\alpha^2}{\lambda}$.

Enfim analisa-se o ponto $(0, \frac{-0.1\alpha^2}{\lambda})$.

1-) Ele pertence à *reg.B3* onde a solução $|\Psi_b| = -B - \sqrt{B^2 + C}$ tem maior energia do que $|\Psi_b| = -B + \sqrt{B^2 + C}$.

2-) Não há a solução $|\Psi_b| = B + \sqrt{B^2 + C}$

3-) As densidades são $|\Psi_a|^2 = \frac{0.72\alpha^2}{\lambda}$, $|\Psi_b|^2 = \frac{0.33\alpha^2}{\lambda}$, $f = 0.52$ para a solução $|\Psi_b| = -B + \sqrt{B^2 + C}$ e $|\Psi_a|^2 = \frac{0.01\alpha^2}{\lambda}$, $|\Psi_b|^2 = \frac{0.003\alpha^2}{\lambda}$, $f = 0.65$ para a solução $|\Psi_b| = -B - \sqrt{B^2 + C}$.

4-) Como $\frac{-0.1\alpha^2}{\lambda} < \frac{1}{2} 0$, não há solução molecular.

5-) Não é necessário.

6-) As pressões são: da solução $|\Psi_b| = -B + \sqrt{B^2 + C}$, $P = 1.52385 \frac{\alpha^2}{\lambda}$, da solução $|\Psi_b| = -B - \sqrt{B^2 + C}$, $P = -0.000965024 \frac{\alpha^2}{\lambda}$

3.9 Análise das soluções uniformes.

Foi mostrado que a solução $|\Psi_b| = -B + \sqrt{B^2 + C}$ é estável. Em quase em todo o plano $\nu \times \varepsilon$ esta é a solução de menor energia.

Lembrando que $B = \frac{\lambda\varepsilon - \lambda\nu - 2\alpha^2}{6\lambda\alpha}$, fica bem claro que para valores elevados de ε B é grande. Se $B^2 \gg C \Rightarrow |\Psi_b| = -B + \sqrt{B^2 + C} \rightarrow 0$. Por outro lado $B^2 \gg C \Rightarrow |\Psi_b| = B + \sqrt{B^2 + C} \rightarrow \infty$. Quando ε fica muito alto, a energia gasta para dois átomos formarem uma molécula é alta também. Logo, a formação de moléculas fica inibida. A solução que corresponde a esta

inibição é $|\Psi_b| = -B + \sqrt{B^2 + C}$. Isto explica o pôrque da solução $|\Psi_b| = B + \sqrt{B^2 + C}$ ser quase sempre mais energética do que $|\Psi_b| = -B + \sqrt{B^2 + C}$. Várias simulações numéricas também mostraram muitos pontos do gráfico $\nu \times \varepsilon$ onde a solução $|\Psi_b| = B + \sqrt{B^2 + C}$ era instável. É bem provável que a maior parte da sub-região *calA22* seja instável para a última solução citada.

Já a solução $|\Psi_b| = -B - \sqrt{B^2 + C}$ ocorre apenas na *reg.B3*. É fácil ver que a densidade molecular desta solução é menor que a da solução $|\Psi_b| = -B + \sqrt{B^2 + C}$. Como em *B3* ε é bem próximo de zero não há razão para que os átomos "evitem" a forma molecular ou a atômica. Mas as interações átomo-átomo, molécula-átomo e molécula-molécula são positivas ($\lambda > 0$). Cada molécula que se desfaz gera dois átomos. Logo o aumento em $|\Psi_a|^2$ supera a diminuição em $|\Psi_b|^2$. Olhando na 3.52, vê-se que neste caso a formação de átomos aumenta a energia do sistema. Assim, a formação de moléculas é favorecida. Além disso, a formação de moléculas aumenta a densidade do sistema. Se ρ aumenta $\frac{\mu}{\rho}$ diminui, minimizando ainda mais a energia do sistema. Por todos estes motivos a solução $|\Psi_b| = -B + \sqrt{B^2 + C}$ terá menos energia do que $|\Psi_b| = -B - \sqrt{B^2 + C}$.

Com o aumento de ε , a energia da solução molecular deveria aumentar bruscamente. Porém, como foi citado no parágrafo anterior, a formação de átomos aumenta a energia do sistema. A compensação de tais efeitos fazem com que nas simulações numéricas realizadas a energia do condensado molecular seja intermediária à duas soluções atômico-moleculares (ver simulações realizadas). No caso da região estudada possuir apenas uma solução atômico-molecular, a solução molecular terá maior energia.

Será que o condensado escolhe o estado de menor energia? Em primeira análise é óbvio que sim. Porém, as temperaturas utilizadas na formação de tais condensados no estado fundamental é tão baixa que talvez seja mais fácil conseguir um condensado excitado. Isto é uma questão em aberto.

Com as simulações numéricas realizadas, é bem provável que a solução $|\Psi_b| = -B + \sqrt{B^2 + C}$ sempre corresponda a uma pressão positiva. Já a solução $|\Psi_b| = -B - \sqrt{B^2 + C}$ quase sempre está associado a uma pressão negativa, exceto nas proximidades da curva ν_+ onde ela é positiva, e na curva $\nu = 0$, onde ela é nula. Na solução $|\Psi_b| = B + \sqrt{B^2 + C}$ a pressão assume valores positivos ou negativos. Como foi visto, a solução molecular é estritamente positiva. Então fica flagrante uma importante associação: a pressão cresce à medida que a fração de átomos diminui. Basta ver as simulações numéricas da seção anterior e notar que a pressão da solução

molecular nunca é negativa. A interpretação física mais simples é que a tendência de uma molécula transformar-se em dois átomos corresponde a uma pressão positiva pois dois átomos ocupam mais espaço que uma molécula; por razões análogas a tendência de dois átomos transformarem-se em uma molécula corresponde a uma pressão negativa. Outra interpretação física é que o que gera uma diminuição na pressão é o fato de haverem dois tipos de corpos no condensado: átomos e moléculas. Tal interpretação é coerente com a 3.119 pois o único termo da expressão da pressão que pode ser negativo é aquele que está multiplicada por α .

Capítulo 4

Condensados de Bose-Einstein atômico-moleculares não uniformes.

4.1 Condensado Bose-Einstein não uniforme.

Até agora foram estudados os condensados de Bose-Einstein atômico-molecular e molecular uniformes. Sabe-se que tal estudo é demasiado limitado pois os condensados obtidos experimentalmente são finitos e mantidos sob armadilha magnética (ou ótica), o que torna a uniformidade do condensado impossível. Ainda assim, dentro da aproximação de Thomas-Fermi, localmente, o condensado comporta-se como uniforme. Esta é a grande utilidade do estudo feito no capítulo anterior.

Para analisar os condensados não uniformes é necessário levar em conta os potenciais V_a e V_b . Usa-se o hamiltoniano da 3.52.

Os gráficos são desenhados como anteriormente pois a energia e a estabilidade de um condensado não uniforme (segmentos verticais no plano $\nu \times \epsilon$) não são iguais às de um uniforme (pontos no plano $\nu \times \epsilon$).

O critério usado para escolher as soluções nas regiões de ambiguidade será neste caso a “continuidade”. Na natureza não existem transições descontínuas (ou são bem raras). Neste caso em particular, há apenas a descontinuidade na *Reg. B3*, o que já foi visto. Porém, qualquer outra descontinuidade invalida a aproximação de Thomas-Fermi. O operador energia cinética é $\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2$. Uma descontinuidade na derivada da função de onda corresponde

à um laplaciano infinito. Assim, a energia cinética não pode ser desprezada. Como as temperaturas utilizadas nos experimentos são da ordem de $10^{-9}K$, a densidade de partículas é baixa, e a interação entre as partículas é fraca, a aproximação de Thomas-Fermi deve ser boa.

Para saber a distância entre o núcleo do condensado ($r = 0$) e um ponto qualquer basta fazer um cálculo simples:

$$\nu = \mu - V(r) \implies V(r) = \mu - \nu \quad (4.1)$$

Como $V(r) = kr^2$ então

$$kr^2 = \mu - \nu \implies r = \sqrt{\frac{\mu - \nu}{k}} \quad (4.2)$$

Esta simples expressão torna possível calcular em que raio ocorre a transição de uma solução para outra. Além disso, torna possível calcular o raio do condensado. Para tais cálculos basta saber qual o valor de ν o condensado muda de solução ou encontra o vácuo.

Resta agora estudar as soluções contínuas.

4.2 Anulamento das soluções

As curvas que dividem o plano $\nu \times \varepsilon$ em suas diversas regiões são $\nu = 0$, ν'_+ , ν'_- e ν_+ . Como foi visto ν'_+ separa as soluções reais das complexas (não reais). Assim há uma descontinuidade. Quanto às outras curvas, foi demonstrado que elas correspondem a possibilidade de $|\Psi_b| = 0$ ou $|\Psi_a| = 0$. Será que elas constituem descontinuidades? Certamente não, pois para calcular as curvas $\nu = 0$, ν_+ e ν_- supôs-se a continuidade. Resta saber então quais soluções são anuladas pelas curvas. Por exemplo, foi provado que em ν'_+ $|\Psi_a| = 0$. Mas há duas soluções que margeam ν'_+ : $|\Psi_b| = -B + \sqrt{B^2 + C}$ e $B + \sqrt{B^2 + C}$. Qual delas se anula?

Começa-se analisando a densidade molecular $|\Psi_b|$. Como foi visto, $|\Psi_b|$ só pode se anular em $\nu = 0$. As soluções que tocam tal curva são as três válidas. Assim escreve-se tais soluções com $\nu = 0$. Para isso usam-se as expressões feitas anteriormente para escrever $|\Psi_b|$.

$$B = \frac{\lambda\varepsilon - \lambda\nu - 2\alpha^2}{6\alpha\lambda} \implies B(\nu = 0) = \frac{\lambda\varepsilon - 2\alpha^2}{6\alpha\lambda} = \frac{\varepsilon}{6\alpha} - \frac{\alpha}{3\lambda} \quad (4.3)$$

$$C = \frac{\nu}{3\lambda} \implies C(\nu = 0) = 0 \quad (4.4)$$

$$\begin{aligned} |\Psi_b| &= \beta B \pm \sqrt{B^2 + C} = \beta \left(\frac{\varepsilon}{6\alpha} - \frac{\alpha}{3\lambda} \right) \pm \sqrt{\left(\frac{\varepsilon}{6\alpha} - \frac{\alpha}{3\lambda} \right)^2} = \\ &= \beta \left(\frac{\varepsilon}{6\alpha} - \frac{\alpha}{3\lambda} \right) \pm \left| \frac{\varepsilon}{6\alpha} - \frac{\alpha}{3\lambda} \right| \end{aligned} \quad (4.5)$$

Se $\frac{\varepsilon}{6\alpha} - \frac{\alpha}{3\lambda} \geq 0 \implies \varepsilon \geq 2\frac{\alpha^2}{\lambda}$.

Logo se $\varepsilon \geq 2\frac{\alpha^2}{\lambda} \implies \left| \frac{\varepsilon}{6\alpha} - \frac{\alpha}{3\lambda} \right| = \frac{\varepsilon}{6\alpha} - \frac{\alpha}{3\lambda}$. Então

$$\begin{aligned} |\Psi_b| &= \beta B \pm \sqrt{B^2 + C} = \beta \left(\frac{\varepsilon}{6\alpha} - \frac{\alpha}{3\lambda} \right) \pm \sqrt{\left(\frac{\varepsilon}{6\alpha} - \frac{\alpha}{3\lambda} \right)^2} = \\ &= \beta \left(\frac{\varepsilon}{6\alpha} - \frac{\alpha}{3\lambda} \right) \pm \left(\frac{\varepsilon}{6\alpha} - \frac{\alpha}{3\lambda} \right) = \\ &= \left(\frac{\varepsilon}{6\alpha} - \frac{\alpha}{3\lambda} \right) (\beta \pm 1) \end{aligned} \quad (4.6)$$

Assim, para $\varepsilon \geq 2\frac{\alpha^2}{\lambda}$ a curva $\nu = 0$ fornece como solução nula $|\Psi_b| = -B + \sqrt{B^2 + C}$.

Para $\varepsilon \leq 2\frac{\alpha^2}{\lambda}$ obtem-se:

$$\left| \frac{\varepsilon}{6\alpha} - \frac{\alpha}{3\lambda} \right| = -\left(\frac{\varepsilon}{6\alpha} - \frac{\alpha}{3\lambda} \right) \quad (4.7)$$

Assim

$$\begin{aligned} |\Psi_b| &= \beta \left(\frac{\varepsilon}{6\alpha} - \frac{\alpha}{3\lambda} \right) \pm \left(-\left(\frac{\varepsilon}{6\alpha} - \frac{\alpha}{3\lambda} \right) \right) = \\ &= \left(\frac{\varepsilon}{6\alpha} - \frac{\alpha}{3\lambda} \right) (\beta \mp 1) \end{aligned} \quad (4.8)$$

Assim, para $\varepsilon \leq 2\frac{\alpha^2}{\lambda}$ a curva $\nu = 0$ fornece como soluções nulas $|\Psi_b| = B + \sqrt{B^2 + C}$ e $|\Psi_b| = -B - \sqrt{B^2 + C}$.

Como já foi provado, se $\nu = 0$ e $|\Psi_b| = 0 \implies |\Psi_a|^2 = 0$. Mas não haverá uma região em $\nu = 0$ onde $|\Psi_b| = 0$ e $|\Psi_a|^2 = 0$? Não. Já foi provado que a solução $|\Psi_a| \neq 0$ e $|\Psi_b| = 0$ é impossível. Conclui-se que em $\nu = 0$, para $\varepsilon \geq 2\frac{\alpha^2}{\lambda}$ $|\Psi_a|^2 = 0$ na solução $|\Psi_b| = -B + \sqrt{B^2 + C}$, e para $\varepsilon \leq 2\frac{\alpha^2}{\lambda}$ $|\Psi_a|^2 = 0$ nas soluções $|\Psi_b| = B + \sqrt{B^2 + C}$ e $|\Psi_b| = -B - \sqrt{B^2 + C}$.

Resta analisar as curvas ν'_+ e ν'_- . Para a análise de tais curvas convêm introduzir uma nova variável: $\gamma = \pm 1$. Assim:

$$\nu'_\pm = \varepsilon + 4\frac{\alpha^2}{\lambda} + 2\frac{\alpha\gamma}{\lambda}\sqrt{\lambda\varepsilon + 4\alpha^2} \quad (4.9)$$

Ficando claro que $\gamma = +1$ corresponde à ν'_+ e $\gamma = -1$ à ν'_- . Assim, substitui-se ν_\pm em ν obtendo:

$$\begin{aligned} B(\nu'_\pm) &= \frac{\lambda\varepsilon - \lambda\nu'_\pm - 2\alpha^2}{6\alpha\lambda} = \\ &= \frac{\lambda\varepsilon - \lambda(\varepsilon + 4\frac{\alpha^2}{\lambda} + 2\frac{\alpha\gamma}{\lambda}\sqrt{\lambda\varepsilon + 4\alpha^2}) - 2\alpha^2}{6\alpha\lambda} = \\ &= \frac{-6\alpha^2 - 2\alpha\gamma\sqrt{\lambda\varepsilon + 4\alpha^2}}{6\lambda\alpha} = -\frac{\alpha}{\lambda} - \frac{\gamma}{\lambda}\sqrt{\lambda\varepsilon + 4\alpha^2} \quad (4.10) \end{aligned}$$

$$C(\nu'_\pm) = \frac{\nu'_\pm}{3\lambda} = \frac{\varepsilon}{3\lambda} + \frac{4\alpha^2}{3\lambda^2} + \frac{2\alpha\gamma}{3\lambda^2}\sqrt{\lambda\varepsilon + 4\alpha^2} \quad (4.11)$$

$$\begin{aligned} B^2 + C &= \left(-\frac{\alpha}{\lambda} - \frac{\gamma}{\lambda}\sqrt{\lambda\varepsilon + 4\alpha^2}\right)^2 + \left(\frac{\varepsilon}{3\lambda} + \frac{4\alpha^2}{3\lambda^2} + \frac{2\alpha\gamma}{3\lambda^2}\sqrt{\lambda\varepsilon + 4\alpha^2}\right) = \\ &= \frac{\alpha^2}{\lambda^2} + \frac{2\alpha\gamma}{3\lambda^2}\sqrt{\lambda\varepsilon + 4\alpha^2} + \frac{\lambda\varepsilon - 4\alpha^2}{9\lambda^2} + \\ &+ \frac{\varepsilon}{3\lambda} + \frac{4\alpha^2}{3\lambda^2} + \frac{2\alpha\gamma}{3\lambda^2}\sqrt{\lambda\varepsilon + 4\alpha^2} = \\ &= \frac{25\alpha^2}{9\lambda^2} + \frac{4\varepsilon}{9\lambda} + \frac{4\alpha\gamma}{3\lambda^2}\sqrt{\lambda\varepsilon + 4\alpha^2} \quad (4.12) \end{aligned}$$

Agora resta achar $\sqrt{B^2 + C}$. Faz-se uma tentativa de solução calculando

$$\begin{aligned} \left(\frac{\alpha}{\lambda} + \frac{2\gamma}{3\lambda}\sqrt{\lambda\varepsilon + 4\alpha^2}\right)^2 &= \frac{\alpha^2}{\lambda^2} + \frac{4\alpha\gamma}{3\lambda^2}\sqrt{\lambda\varepsilon + 4\alpha^2} + \frac{4(\lambda\varepsilon + 4\alpha^2)}{9\lambda^2} = \\ &= \frac{25\alpha^2}{9\lambda^2} + \frac{4\varepsilon}{9\lambda} + \frac{4\alpha\gamma}{3\lambda^2}\sqrt{\lambda\varepsilon + 4\alpha^2} \quad (4.13) \end{aligned}$$

Logo

$$B^2 + C = \left(\frac{\alpha}{\lambda} + \frac{2\gamma}{3\lambda}\sqrt{\lambda\varepsilon + 4\alpha^2}\right)^2 \quad (4.14)$$

Mas

$$\begin{aligned} \left(\frac{\alpha\gamma}{\lambda} + \frac{2}{3\lambda}\sqrt{\lambda\varepsilon + 4\alpha^2}\right)^2 &= \gamma^2\left(\frac{\alpha}{\lambda} + \frac{2\gamma}{3\lambda}\sqrt{\lambda\varepsilon + 4\alpha^2}\right)^2 = \\ &= \left(\frac{\alpha}{\lambda} + \frac{2\gamma}{3\lambda}\sqrt{\lambda\varepsilon + 4\alpha^2}\right)^2 = B^2 + C \end{aligned} \quad (4.15)$$

Assim

$$\begin{aligned} B^2 + C &= \left(\frac{\alpha}{\lambda} + \frac{2\gamma}{3\lambda}\sqrt{\lambda\varepsilon + 4\alpha^2}\right)^2 = \\ &= \left(\frac{\alpha\gamma}{\lambda} + \frac{2}{3\lambda}\sqrt{\lambda\varepsilon + 4\alpha^2}\right)^2 \end{aligned} \quad (4.16)$$

Começa-se com $\gamma = +1$.

$$B^2 + C = \left(\frac{\alpha}{\lambda} + \frac{2}{3\lambda}\sqrt{\lambda\varepsilon + 4\alpha^2}\right)^2 \quad (4.17)$$

$$\begin{aligned} \sqrt{B^2 + C} &= \sqrt{\left(\frac{\alpha}{\lambda} + \frac{2}{3\lambda}\sqrt{\lambda\varepsilon + 4\alpha^2}\right)^2} = \\ &= \left|\frac{\alpha}{\lambda} + \frac{2}{3\lambda}\sqrt{\lambda\varepsilon + 4\alpha^2}\right| = \frac{\alpha}{\lambda} + \frac{2}{3\lambda}\sqrt{\lambda\varepsilon + 4\alpha^2} \end{aligned} \quad (4.18)$$

Se $\gamma = -1$.

$$\begin{aligned} B^2 + C &= \left(\frac{\alpha}{\lambda} - \frac{2}{3\lambda}\sqrt{\lambda\varepsilon + 4\alpha^2}\right)^2 = \\ &= \left(\frac{-\alpha}{\lambda} + \frac{2}{3\lambda}\sqrt{\lambda\varepsilon + 4\alpha^2}\right)^2 \end{aligned} \quad (4.19)$$

$$\begin{aligned} \sqrt{B^2 + C} &= \sqrt{\left(\frac{\alpha}{\lambda} - \frac{2}{3\lambda}\sqrt{\lambda\varepsilon + 4\alpha^2}\right)^2} = \\ &= \left|\frac{\alpha}{\lambda} - \frac{2}{3\lambda}\sqrt{\lambda\varepsilon + 4\alpha^2}\right| \end{aligned} \quad (4.20)$$

Para $\frac{\alpha}{\lambda} - \frac{2}{3\lambda}\sqrt{\lambda\varepsilon + 4\alpha^2} \geq 0 \implies \alpha \geq \frac{2}{3}\sqrt{\lambda\varepsilon + 4\alpha^2}$.

Como ambos os membros da inequação são maiores que zero, eleva-se tudo ao quadrado.

$$\begin{aligned}\alpha^2 &\geq \frac{4}{9}(\lambda\varepsilon + 4\alpha^2) \implies 9\alpha^2 \geq 4\lambda\varepsilon + 16\alpha^2 \\ \varepsilon &\leq -\frac{7\alpha^2}{4\lambda}\end{aligned}\quad (4.21)$$

Assim, para $\varepsilon \leq -\frac{7\alpha^2}{4\lambda} \implies \left(\frac{\alpha}{\lambda} - \frac{2}{3\lambda}\sqrt{\lambda\varepsilon + 4\alpha^2}\right) \geq 0 \implies \left|\frac{\alpha}{\lambda} - \frac{2}{3\lambda}\sqrt{\lambda\varepsilon + 4\alpha^2}\right| =$

Então para $\varepsilon \leq -\frac{7\alpha^2}{4\lambda}$

$$\sqrt{B^2 + C} = \frac{\alpha}{\lambda} + \frac{2\gamma}{3\lambda}\sqrt{\lambda\varepsilon + 4\alpha^2} \quad (4.22)$$

Analogamente é fácil ver que para $\varepsilon \geq -\frac{7\alpha^2}{4\lambda}$.

$$\left|\frac{\alpha}{\lambda} - \frac{2}{3\lambda}\sqrt{\lambda\varepsilon + 4\alpha^2}\right| = \frac{-\alpha}{\lambda} + \frac{2}{3\lambda}\sqrt{\lambda\varepsilon + 4\alpha^2} \quad (4.23)$$

Isto implica que para $\varepsilon \geq -\frac{7\alpha^2}{4\lambda} \implies \sqrt{B^2 + C} = \frac{\alpha\gamma}{\lambda} + \frac{2}{3\lambda}\sqrt{\lambda\varepsilon + 4\alpha^2}$.

Então fica fácil ver quais soluções de $|\Psi_a|^2 = 0$ em ν'_+ e ν'_- . Para $\varepsilon \geq -\frac{7\alpha^2}{4\lambda}$.

$$\begin{aligned}|\Psi_b| &= \beta B \pm \sqrt{B^2 + C} = \\ &= \beta\left(\frac{-\alpha}{\lambda} - \frac{\gamma}{3\lambda}\sqrt{\lambda\varepsilon + 4\alpha^2}\right) \pm \left(\frac{\alpha\gamma}{\lambda} + \frac{2}{3\lambda}\sqrt{\lambda\varepsilon + 4\alpha^2}\right) = \\ &= \frac{\alpha}{\lambda}(-\beta \pm \gamma) + \frac{\gamma}{3\lambda}\sqrt{\lambda\varepsilon + 4\alpha^2}(-\gamma\beta \pm 2)\end{aligned}\quad (4.24)$$

$$\begin{aligned}|\Psi_b|^2 &= \frac{\alpha^2}{\lambda^2}(1 \mp 2\beta\gamma + 1) + \frac{2\alpha\gamma}{3\lambda^2}\sqrt{\lambda\varepsilon + 4\alpha^2}(-\gamma\beta \pm 2)(-\beta \pm \gamma) + \\ &+ \frac{\lambda\varepsilon + 4\alpha^2}{9\lambda^2}(1 \mp 4\gamma\beta + 4) = \frac{\alpha^2}{\lambda^2}\left(\frac{38}{9} \mp \frac{38}{9}\beta\gamma\right) + \\ &+ \frac{\varepsilon}{9\lambda}(5 \mp 2\gamma\beta) + \frac{2\alpha\gamma}{3\lambda^2}\sqrt{\lambda\varepsilon + 4\alpha^2}(3 \mp 3\gamma\beta)\end{aligned}\quad (4.25)$$

$$|\Psi_a|^2 = \frac{\nu - 2\alpha\beta|\Psi_b|}{\lambda} - |\Psi_b|^2 =$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{\varepsilon}{\lambda} + \frac{4\alpha^2}{\lambda^2} + \frac{2\alpha\gamma}{\lambda^2} \sqrt{\lambda\varepsilon + 4\alpha^2} + \\
&\quad - \frac{2\alpha\beta}{\lambda} \left(\frac{\alpha}{\lambda} (-\beta \pm \gamma) + \frac{\gamma}{3\lambda} \sqrt{\lambda\varepsilon + 4\alpha^2} (-\gamma\beta \pm 2) \right) - \frac{\alpha^2}{\lambda^2} \left(\frac{38}{9} \mp \frac{38}{9} \beta\gamma \right) + \\
&\quad - \frac{\varepsilon}{9\lambda} (5 \mp 2\gamma\beta) - \frac{2\alpha\gamma}{3\lambda^2} \sqrt{\lambda\varepsilon + 4\alpha^2} (3 \mp 3\gamma\beta) = \\
&= \frac{\varepsilon}{9\lambda} (4 \pm 4\gamma\beta) + \frac{\alpha^2}{\lambda^2} \left(\frac{16}{9} \pm \frac{16}{9} \gamma\beta \right) + \frac{2\alpha}{3\lambda^2} \sqrt{\lambda\varepsilon + 4\alpha^2} (\beta \pm \gamma) = \\
&= \left(\frac{4\varepsilon}{9\lambda} + \frac{16\alpha^2}{9\lambda^2} + \frac{2\alpha\beta}{3\lambda^2} \sqrt{\lambda\varepsilon + 4\alpha^2} \right) (1 \pm \beta\gamma) \tag{4.26}
\end{aligned}$$

Assim, para $\varepsilon \geq \frac{-7\alpha^2}{4\lambda}$ a curva ν'_+ corresponde a $|\Psi_a|^2 = 0$ na solução $|\Psi_b| = -B + \sqrt{B^2 + C}$. Já a curva ν'_- , no mesmo intervalo, tem $|\Psi_a|^2 = 0$ para as soluções $|\Psi_b| = B + \sqrt{B^2 + C}$ e $|\Psi_b| = -B - \sqrt{B^2 + C}$. O anulamento de $|\Psi_a|^2$ também pode ocorrer para $\left(\frac{4\varepsilon}{9\lambda} + \frac{16\alpha^2}{9\lambda^2} + \frac{2\alpha\beta}{3\lambda^2} \sqrt{\lambda\varepsilon + 4\alpha^2} \right) = 0$. Mas a solução de tal equação são apenas pontos no gráfico $\nu \times \varepsilon$. Como já foi provado tais pontos não podem estar contidos fora das curvas ν'_+ ou ν'_- .

Analisando agora o intervalo $\varepsilon \leq \frac{-7\alpha^2}{4\lambda}$ e utilizando a 4.23.

$$\begin{aligned}
|\Psi_b| &= \beta B \pm \sqrt{B^2 + C} = \\
&= \beta \left(\frac{-\alpha}{\lambda} - \frac{\gamma}{3\lambda} \sqrt{\lambda\varepsilon + 4\alpha^2} \right) \pm \left(\frac{\alpha}{\lambda} + \frac{2\gamma}{3\lambda} \sqrt{\lambda\varepsilon + 4\alpha^2} \right) = \\
&= \frac{\alpha}{\lambda} (-\beta \pm 1) + \frac{\gamma}{3\lambda} \sqrt{\lambda\varepsilon + 4\alpha^2} (-\beta \pm 2) \tag{4.27}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
|\Psi_b|^2 &= \frac{\alpha^2}{\lambda^2} (1 \mp 2\beta + 1) + \frac{2\alpha\gamma}{3\lambda^2} \sqrt{\lambda\varepsilon + 4\alpha^2} (-\beta \pm 2)(-\beta \pm 1) + \\
&\quad + \frac{\lambda\varepsilon + 4\alpha^2}{9\lambda^2} (1 \mp 4\beta + 4) = \frac{\alpha^2}{\lambda^2} \left(\frac{38}{9} \pm \frac{34}{9} \beta \right) + \\
&\quad + \frac{\varepsilon}{9\lambda} (5 \pm 2\beta) + \frac{2\alpha\gamma}{3\lambda^2} \sqrt{\lambda\varepsilon + 4\alpha^2} (3 \pm 3\beta) \tag{4.28}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
|\Psi_a|^2 &= \frac{\nu - 2\alpha\beta|\Psi_b|}{\lambda} - |\Psi_b|^2 = \\
&= \frac{\varepsilon}{\lambda} + \frac{4\alpha^2}{\lambda^2} + \frac{2\alpha\gamma}{\lambda^2} \sqrt{\lambda\varepsilon + 4\alpha^2} +
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& -\frac{2\alpha\beta}{\lambda}\left(\frac{\alpha}{\lambda}(-\beta \pm 1) + \frac{\gamma}{3\lambda}\sqrt{\lambda\varepsilon + 4\alpha^2}(-\beta \pm 2)\right) - \frac{\alpha^2}{\lambda^2}\left(\frac{38}{9} \pm \frac{34}{9}\beta\right) + \\
& -\frac{\varepsilon}{9\lambda}(5 \pm 2\beta) - \frac{2\alpha\gamma}{3\lambda^2}\sqrt{\lambda\varepsilon + 4\alpha^2}(3 \pm 3\beta) = \\
& = \frac{\varepsilon}{9\lambda}(4 \mp 4\beta) + \frac{\alpha^2}{\lambda^2}\left(\frac{16}{9} \mp \frac{16}{9}\gamma\beta\right) + \frac{2\alpha\gamma}{3\lambda^2}\sqrt{\lambda\varepsilon + 4\alpha^2}(1 \pm \beta) = \\
& = \left(\frac{4\varepsilon}{9\lambda} + \frac{16\alpha^2}{9\lambda^2} + \frac{2\alpha\gamma}{3\lambda^2}\sqrt{\lambda\varepsilon + 4\alpha^2}\right)(1 \mp \beta) \tag{4.29}
\end{aligned}$$

Assim, para $\varepsilon \leq -\frac{7\alpha^2}{4\lambda}$ o anulamento da densidade $|\Psi_a|^2 = 0$ não depende de γ . Assim a solução com $|\Psi_a|^2 = 0$ é $|\Psi_b| = -B + \sqrt{B^2 + C}$ tanto na curva ν'_+ como ν'_- . Resta a possibilidade de $\left(\frac{4\varepsilon}{9\lambda} + \frac{16\alpha^2}{9\lambda^2} + \frac{2\alpha\gamma}{3\lambda^2}\sqrt{\lambda\varepsilon + 4\alpha^2}\right) = 0$ para que $|\Psi_a| = 0$. Porém, como no caso anterior, tal equação tem como solução apenas pontos no gráfico $\nu \times \varepsilon$. Isto é análogo ao que acontece para $\varepsilon \geq -\frac{7\alpha^2}{4\lambda}$.

Com as informações contidas acima é possível saber onde as soluções anulam-se. Assim para a solução $|\Psi_b| = -B + \sqrt{B^2 + C}$, $|\Psi_b| = 0$ e $|\Psi_a| = 0$ em $\nu = 0$ para $\varepsilon > \frac{2\alpha^2}{\lambda}$; $|\Psi_a|^2 = 0$ em ν'_+ e em ν'_- para $-\frac{4\alpha^2}{\lambda} \leq \varepsilon \leq -\frac{7\alpha^2}{4\lambda}$.

Já a solução $|\Psi_b| = B + \sqrt{B^2 + C}$ tem $|\Psi_b| = 0$ e $|\Psi_a| = 0$ em $\nu = 0$ para $\varepsilon \leq 0$; $|\Psi_a| = 0$ em ν'_- para $\varepsilon \geq 0$.

Enfim, a solução $|\Psi_b| = -B - \sqrt{B^2 + C}$ tem $|\Psi_b| = 0$ e $|\Psi_a| = 0$ em $\nu = 0$ para $0 \leq \varepsilon \leq \frac{2\alpha^2}{\lambda}$; $|\Psi_a| = 0$ em ν'_- para $-\frac{7\alpha^2}{4\lambda} \leq \varepsilon \leq 0$.

Chega-se a uma constatação bastante interessante. Quando uma solução existe em duas regiões vizinhas, as curvas que a separam não as afetam. Por exemplo, a solução $|\Psi_b| = B + \sqrt{B^2 + C}$ existe nas regiões $\mathcal{A}1$ e $\mathcal{A}2$. Tais regiões são separadas pela curva ν'_+ . Ora, nem $|\Psi_a|$ e nem $|\Psi_b|$ anulam-se nesta curva. Como ambas as densidades são funções contínuas, pode-se dizer que elas não "sentem" tal curva.

Agora serão analisadas todas soluções que mantêm a continuidade por todo o plano $\nu \times \varepsilon$. Como já foi dito serão excluídas as soluções descontínuas.

4.3 Solução I.

A primeira solução que é contínua por todo o plano $\nu \times \varepsilon$ é a solução molecular. Sua continuidade já foi provada. Para relembrar ela consiste em $|\Psi_a| = 0$; $|\Psi_b|^2 = \frac{2\nu - \varepsilon}{\lambda}$ para $\nu \geq \frac{\varepsilon}{2}$ e $|\Psi_b| = 0$ para $\nu \leq \frac{\varepsilon}{2}$ (ver fig. 4.1).

O raio do condensado molecular é obtido da eq.4.2.

$$r = \sqrt{\frac{\mu - \frac{\varepsilon}{2}}{k}} \quad (4.30)$$

Solucao I

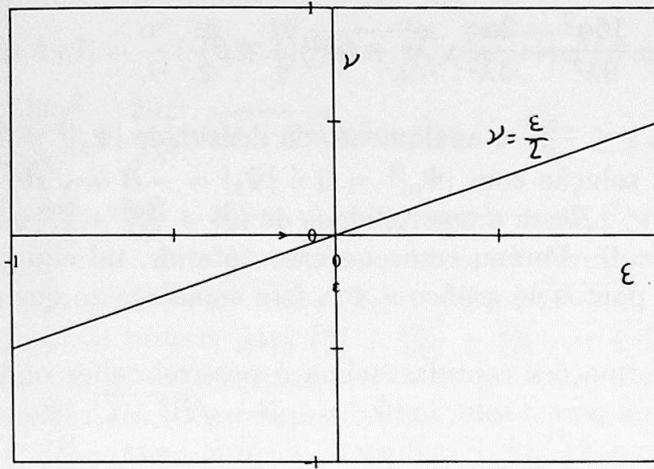


Figura 4.1: Solução I exibida em um gráfico $\nu \times \varepsilon$.

4.4 Solução II.

Toma-se a região do plano $\nu \times \varepsilon$ onde há ambiguidade de solução, *reg. A2*. Escolhe-se uma delas: $|\Psi_b| = B + \sqrt{B^2 + C}$. Como ela não é afetada por ν'_+ , a solução escolhida para a região *A1* fica sendo $|\Psi_b| = B + \sqrt{B^2 + C}$ também.

Na *reg. A3* a solução $|\Psi_b| = B + \sqrt{B^2 + C}$ não é válida. É preciso que a solução válida nesta região seja contínua em relação à *reg. A2*. Como já foi visto, para $\nu \geq 0$ a curva ν'_- anula $|\Psi_a|^2$. Porém, a solução válida na *reg. A3*, $|\Psi_b| = -B + \sqrt{B^2 + C}$ não é afetada pela curva ν'_- ($|\Psi_a|^2 = 0$) para $\varepsilon \geq -\frac{7\alpha^2}{4\lambda}$. Assim, se a solução $|\Psi_b| = B + \sqrt{B^2 + C}$ é válida na *reg. A2* a solução $|\Psi_b| = -B + \sqrt{B^2 + C}$ não pode ser na *reg. A3*.

A solução que pode estender-se além da curva ν'_- é àquela em que para $\nu = \nu'_-$, $|\Psi_a|^2 = 0$. Como já foi provado, nesta curva a solução molecular toca a solução atômico-molecular. Assim, esta constitui uma solução contínua.

Mas ainda é preciso verificar se a curva que separa a solução molecular do vácuo, $\nu = \frac{\varepsilon}{2}$ não intercepta a curva ν'_- . Caso isto aconteça, a solução atômico-molecular $|\Psi_b| = B + \sqrt{B^2 + C}$ encontrará abruptamente o vácuo, embora na última curva citada $|\Psi_a|^2 = 0$, $|\Psi_b| \neq 0$ (pelo menos para $\nu \neq 0$). Tal descontinuidade em $|\Psi_b|$ invalida o critério da continuidade. Então teste-se a igualdade

$$\nu'_- = \frac{\varepsilon}{2} \quad (4.31)$$

$$\varepsilon + 4\frac{\alpha^2}{\lambda} - 2\frac{\alpha}{\lambda}\sqrt{\lambda\varepsilon + 4\alpha^2} = \frac{\varepsilon}{2} \quad (4.32)$$

$$\frac{\varepsilon}{2} + 4\frac{\alpha^2}{\lambda} = 2\frac{\alpha}{\lambda}\sqrt{\lambda\varepsilon + 4\alpha^2} \quad (4.33)$$

Elevando os dois membros ao quadrado.

$$\frac{\varepsilon^2}{4} + 4\frac{\varepsilon\alpha^2}{\lambda} + 16\frac{\alpha^4}{\lambda^2} = 4\frac{\alpha^2}{\lambda^2}(\lambda\varepsilon + 4\alpha^2) \quad (4.34)$$

$$\frac{\varepsilon^2}{4} + 4\frac{\varepsilon\alpha^2}{\lambda} + 16\frac{\alpha^4}{\lambda^2} = 4\frac{\alpha^2\varepsilon}{\lambda} + 16\frac{\alpha^4}{\lambda^2} \quad (4.35)$$

$$\frac{\varepsilon^2}{4} = 0 \quad (4.36)$$

$$\varepsilon = 0 \quad (4.37)$$

Assim, o único ponto de intersecção entre as curvas ν'_- e $\frac{\varepsilon}{2}$ é $\varepsilon = 0$. Neste ponto $\nu = \nu'_- = \frac{\varepsilon}{2} = 0$. Para $\varepsilon = 5\frac{\alpha^2}{\lambda}$ obtem-se $\nu = 3\frac{\alpha^2}{\lambda}$ e $\frac{\varepsilon}{2} = \frac{5\alpha^2}{2\lambda}$. Já para $\varepsilon = -3\frac{\alpha^2}{\lambda}$ chega-se à $\nu'_- = -\frac{\alpha^2}{\lambda}$ e $\frac{\varepsilon}{2} = -\frac{3\alpha^2}{2\lambda}$. Como a única intersecção entre ν'_- e $\frac{\varepsilon}{2}$ é $\varepsilon = 0$ então para $\varepsilon \neq 0$ vale $\nu'_- > \frac{\varepsilon}{2}$. Conclui-se então que além de ν'_- está a solução molecular.

Há ainda uma dificuldade: em $\nu = 0$ para $\varepsilon < 0$ a solução $|\Psi_b| = B + \sqrt{B^2 + C}$ resulta em $|\Psi_a|^2 = |\Psi_b| = 0$. A solução molecular só apresenta tal resultado em $\nu = \frac{\varepsilon}{2}$. Assim fica claro que para $\nu \neq 0$ a curva $\nu = 0$ não intercepta $\frac{\varepsilon}{2}$. Logo, a solução molecular não pode suceder $|\Psi_b| = B + \sqrt{B^2 + C}$ para $\varepsilon < 0$. Na região B2 existe a solução $|\Psi_b| = -B + \sqrt{B^2 + C}$. Esta também não pode suceder $|\Psi_b| = B + \sqrt{B^2 + C}$ pois neste intervalo $|\Psi_b| = -B + \sqrt{B^2 + C}$ não tem $|\Psi_a|^2$ anulada. Resta então o vácuo.

A estrutura final da solução II fica sendo:

Em $\varepsilon \leq 0$ para $\nu \leq 0$ obtém-se o vácuo; para $\nu \geq 0$ vale $|\Psi_b| = B + \sqrt{B^2 + C}$.

Em $\varepsilon \geq 0$ para $\nu \leq \frac{\varepsilon}{2}$ obtém-se o vácuo; para $\frac{\varepsilon}{2} \leq \nu \leq \nu'_-$ vale a solução molecular; para $\nu \geq \nu'_-$ vale $|\Psi_b| = B + \sqrt{B^2 + C}$.

Tal distribuição é contínua em todo o plano $\nu \times \varepsilon$. Tal solução está na figura 4.2.

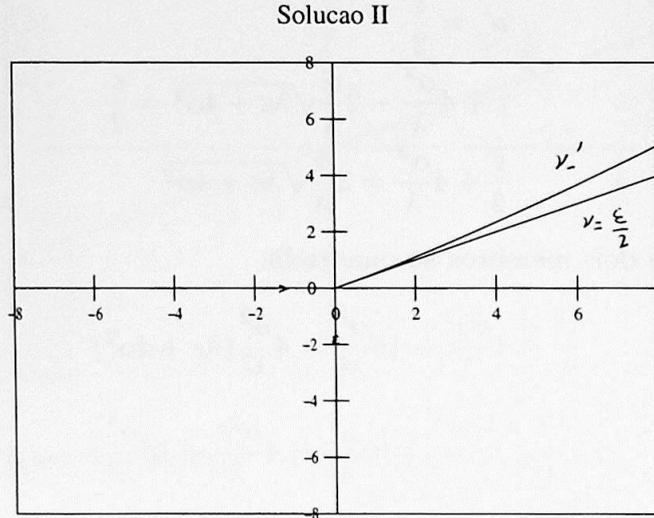


Figura 4.2: Solução II exibida no plano $\nu \times \varepsilon$.

Usando a 4.2 para valores negativos de ε o raio do condensado é $r = \sqrt{\frac{\mu}{k}}$. Já para valores positivos de ε o raio do condensado é $r = \sqrt{\frac{\mu - \varepsilon}{k}}$ sendo o ponto de transição da solução atômico-molecular para molecular em $r = \sqrt{\frac{\mu - \nu'_-}{k}}$.

4.5 Solução III.

Tomando-se novamente a região A2 escolhe-se a outra solução: $|\Psi_b| = -B + \sqrt{B^2 + C}$. Como para $\varepsilon \geq -\frac{7\alpha^2}{4\lambda}$ a solução $|\Psi_b| = -B + \sqrt{B^2 + C}$ não é afetada pela curva ν_- na reg. A3 vale a mesma solução. Além disso, para $\varepsilon \leq 2\frac{\alpha^2}{\lambda}$ a solução em questão não é afetada pela curva $\nu = 0$. Assim, na reg. B2 vale a mesma solução.

Na região $B3$ há uma ambiguidade de soluções: vale $|\Psi_b| = -B + \sqrt{B^2 + C}$ e $|\Psi_b| = -B - \sqrt{B^2 + C}$. Porém, neste intervalo, a solução $|\Psi_b| = -B + \sqrt{B^2 + C}$ não é alterada pela curva $\nu = 0$ nem pela curva ν'_- . Assim, na reg. $B3$ vale a solução $|\Psi_b| = -B + \sqrt{B^2 + C}$. Para confirmar tal fato, vê-se que para $\varepsilon \leq 2\frac{\alpha^2}{\lambda}$ a solução $|\Psi_b| = -B - \sqrt{B^2 + C}$ fornece para $\nu = 0$ os valores $|\Psi_b| = |\Psi_a|^2 = 0$ o que não ocorre na solução $|\Psi_b| = -B + \sqrt{B^2 + C}$.

Na região $A1$ há a solução $|\Psi_b| = B + \sqrt{B^2 + C}$. Porém, $|\Psi_b| = -B + \sqrt{B^2 + C}$ tem $|\Psi_a|$ anulada em tal curva enquanto a outra solução não o tem. Logo, usando o critério da continuidade, não pode ser válida a solução $|\Psi_b| = B + \sqrt{B^2 + C}$ na reg. $A1$. Resta então a solução molecular na reg. $A1$.

Na região D nenhuma solução atômico-molecular é aceita. A solução molecular "encontra" o vácuo apenas na reta $\frac{\varepsilon}{2}$. Assim, usando o critério da continuidade, para $\varepsilon \leq -4\frac{\alpha^2}{\lambda}$ em $\nu \leq 0$ vale a solução molecular.

No intervalo $-4\frac{\alpha^2}{\lambda} \leq \varepsilon \leq -\frac{7\alpha^2}{4\lambda}$ a reta ν'_- fornece $|\Psi_a| = 0$ para a solução $|\Psi_b| = -B + \sqrt{B^2 + C}$. Então a solução que sucede $|\Psi_b| = -B + \sqrt{B^2 + C}$ para $\nu \leq \nu'_-$ é a solução molecular. A única objeção que poderia haver é a reta $\frac{\varepsilon}{2}$ interceptar ν'_- . Isto não acontece pois já foi provado que para $\varepsilon \neq 0$ obtém-se $\nu'_- > \frac{\varepsilon}{2}$.

Já no intervalo $-\frac{7\alpha^2}{4\lambda} \leq \varepsilon \leq 2\frac{\alpha^2}{\lambda}$ a situação é mais complicada. Neste intervalo a solução $|\Psi_b| = -B + \sqrt{B^2 + C}$ não é afetada pela curva ν'_- . Na curva ν_+ não é obtida a condição $|\Psi_a|^2 = 0$ de modo que esta não pode ser sucedida pela solução molecular. Porém, a reta vertical $\varepsilon = -\frac{7\alpha^2}{4\lambda}$ não pode afetar a solução molecular. Logo, para $\varepsilon \geq -\frac{7\alpha^2}{4\lambda}$ vale a solução molecular. Resta saber se a reta $\frac{\varepsilon}{2}$ intercepta a curva ν_+ e onde isto ocorre. Faz-se $\frac{\varepsilon}{2} = \nu_+$:

$$\frac{\varepsilon}{2} = \varepsilon - 8\frac{\alpha^2}{\lambda} + 2\frac{\alpha}{\lambda}\sqrt{15\alpha^2 - 3\lambda\varepsilon} \quad (4.38)$$

$$\frac{\varepsilon}{2} - 8\frac{\alpha^2}{\lambda} = -2\frac{\alpha}{\lambda}\sqrt{15\alpha^2 - 3\lambda\varepsilon} \quad (4.39)$$

Elevando tudo ao quadrado:

$$\frac{\varepsilon^2}{4} - 8\frac{\varepsilon\alpha^2}{\lambda} + 64\frac{\alpha^4}{\lambda^2} = 4\frac{\alpha^2}{\lambda^2}(15\alpha^2 - 3\lambda\varepsilon) \quad (4.40)$$

$$\frac{\varepsilon^2}{4} + 4\frac{\varepsilon\alpha^2}{\lambda} + 4\frac{\alpha^4}{\lambda^2} = 0 \quad (4.41)$$

Aplicando a fórmula de Báskara:

$$\varepsilon = \frac{-4\frac{\alpha^2}{\lambda} \pm \sqrt{16\frac{\alpha^4}{\lambda^2} - 4\frac{1}{4}(4\frac{\alpha^4}{\lambda^2})}}{2 * \frac{1}{4}} \quad (4.42)$$

$$\varepsilon = (-8 \pm \sqrt{4 * 12}) \frac{\alpha^2}{\lambda} \quad (4.43)$$

$$\varepsilon = (-8 \pm \sqrt{48}) \frac{\alpha^2}{\lambda} \quad (4.44)$$

Sendo $\sqrt{48} \approx 6.93$ os valores possíveis para ε são $-1.07\frac{\alpha^2}{\lambda}$ e $-14.93\frac{\alpha^2}{\lambda}$. Como o intervalo de interesse é $-\frac{7\alpha^2}{4\lambda} \leq \varepsilon \leq 2\frac{\alpha^2}{\lambda}$ então o valor $-14.93\frac{\alpha^2}{\lambda}$ é descartado. No ponto $\nu = -\frac{7\alpha^2}{4\lambda}$ obtem-se $\nu_+ = \nu'_- > \frac{\varepsilon}{2}$. Como no intervalo de interesse o único ponto de intersecção entre ν_+ e $\frac{\varepsilon}{2}$ é $\varepsilon = -1.07\frac{\alpha^2}{\lambda}$ então, neste mesmo intervalo, para $\varepsilon < -1.07\frac{\alpha^2}{\lambda}$ vale que $\nu_+ > \frac{\varepsilon}{2}$. Para $\varepsilon = 0$ é obtido $\nu_+ = (-8 + 2\sqrt{15})\frac{\alpha^2}{\lambda} \approx -0.26\frac{\alpha^2}{\lambda}$ enquanto que $\frac{\varepsilon}{2} = 0$. Assim, para $\varepsilon > -1.07\frac{\alpha^2}{\lambda}$ vale $\frac{\varepsilon}{2} > \nu_+$.

Conclui-se então que para $\varepsilon \geq -\frac{7\alpha^2}{4\lambda}$ em $\nu < \nu_+$ a solução molecular vale até $\varepsilon = -1.07\frac{\alpha^2}{\lambda}$. A descontinuidade que existe na curva ν_+ no intervalo $-\frac{7\alpha^2}{4\lambda} \leq \varepsilon \leq 2\frac{\alpha^2}{\lambda}$ já foi suficientemente comentada. Ela é aceitável.

A estrutura da solução III fica sendo:

Em $\varepsilon \leq -4\frac{\alpha^2}{\lambda}$ para $\nu \leq \frac{\varepsilon}{2}$ obtem-se o vácuo; para $\nu \geq \frac{\varepsilon}{2}$ a solução é molecular.

Em $-4\frac{\alpha^2}{\lambda} \leq \varepsilon \leq -\frac{7\alpha^2}{4\lambda}$ para $\nu \leq \frac{\varepsilon}{2}$ obtem-se o vácuo; para $\frac{\varepsilon}{2} \leq \nu \leq \nu'_-$ vale a solução molecular; já para $\nu'_- \leq \nu \leq \nu'_+$ fica válida a solução $|\Psi_b| = -B + \sqrt{B^2 + C}$; enfim, para $\nu \geq \nu'_+$ vale a solução molecular.

Em $-\frac{7\alpha^2}{4\lambda} \leq \varepsilon \leq -1.07\frac{\alpha^2}{\lambda}$ para $\nu \leq \frac{\varepsilon}{2}$ obtem-se o vácuo; para $\frac{\varepsilon}{2} \leq \nu \leq \nu_+$ vale a solução molecular; já para $\nu_+ \leq \nu \leq \nu'_+$ fica válida a solução $|\Psi_b| = -B + \sqrt{B^2 + C}$; enfim, para $\nu \geq \nu'_+$ vale a solução molecular.

Em $-1.07\frac{\alpha^2}{\lambda} \leq \varepsilon \leq 2\frac{\alpha^2}{\lambda}$ para $\nu \leq \nu_+$ obtem-se o vácuo; para $\nu_+ \leq \nu \leq \nu'_+$ vale a solução $|\Psi_b| = -B + \sqrt{B^2 + C}$; já para $\nu \geq \nu'_+$ vale a solução molecular.

Em $\varepsilon \geq 2\frac{\alpha^2}{\lambda}$ para $\nu \leq 0$ obtem-se o vácuo; para $0 \leq \nu \leq \nu'_+$ vale a solução $|\Psi_b| = -B + \sqrt{B^2 + C}$; e para $\nu \geq \nu'_+$ vale a solução molecular.

Tal solução está na figura 4.3.

Solucao III

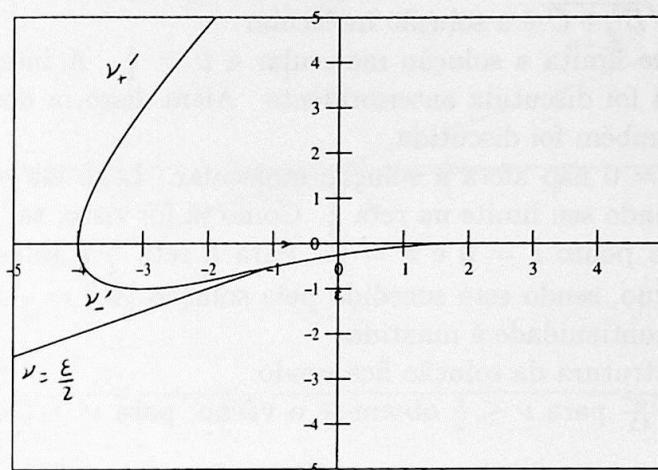


Figura 4.3: Solução III exibida no plano $\nu \times \epsilon$.

Usando a 4.2 chega-se ao raio do condensado e nos pontos de transição. Tais resultados são triviais e serão omitidos.

4.6 Solução IV.

Há uma ambiguidade na região $\mathcal{B}3$: são válidas as soluções $|\Psi_b| = -B + \sqrt{B^2 + C}$ e $|\Psi_b| = -B - \sqrt{B^2 + C}$. Na solução III já foi visto tal região com a solução $|\Psi_b| = -B + \sqrt{B^2 + C}$. Assim, resta analisar a reg. $\mathcal{B}3$ com a solução $|\Psi_b| = -B - \sqrt{B^2 + C}$.

A solução $|\Psi_b| = -B - \sqrt{B^2 + C}$ é afetada pela curva $\nu = 0$ para o intervalo $0 \leq \nu \leq 2\frac{\alpha^2}{\lambda}$ que anula $|\Psi_a|^2$ e $|\Psi_b|^2$. Na reg. $\mathcal{A}3$ que faz fronteira com $\mathcal{B}3$ neste intervalo, a única solução atômico-molecular válida é $|\Psi_b| = -B + \sqrt{B^2 + C}$. No intervalo citado, tal solução não é afetada pela reta $\nu = 0$ ficando $|\Psi_a|^2$ e $|\Psi_b|^2$ não nulos. Assim, aplicando o critério da continuidade, vê-se que a solução $|\Psi_b| = -B + \sqrt{B^2 + C}$ não pode suceder $|\Psi_b| = -B - \sqrt{B^2 + C}$. A única solução que mantém a continuidade é o vácuo.

Além disso, a solução $|\Psi_b| = -B - \sqrt{B^2 + C}$ tem $|\Psi_a|^2$ anulada para a curva ν_- no intervalo $-\frac{7\alpha^2}{4\lambda} \leq \epsilon \leq 0$. Na região $\mathcal{B}2$ que faz fronteira com

$\mathcal{B}3$ a única solução válida é $|\Psi_b| = -B + \sqrt{B^2 + C}$. Como no intervalo em questão $|\Psi_b| = -B + \sqrt{B^2 + C}$ não é afetada por ν'_- tal solução não pode suceder $|\Psi_b| = -B - \sqrt{B^2 + C}$. Logo a única solução que pode suceder $|\Psi_b| = -B - \sqrt{B^2 + C}$ é a solução molecular.

A curva que limita a solução molecular é $\nu = \frac{\varepsilon}{2}$. A intersecção desta reta com ν_+ já foi discutida anteriormente. Além disso, a descontinuidade na curva ν_+ também foi discutida.

A curva $\nu = 0$ não afeta a solução molecular. Logo ela estende-se por $\nu > 0$ encontrando seu limite na reta $\frac{\varepsilon}{2}$. Como já foi visto, tal reta encontra $\nu = 0$ e ν'_- no ponto $\varepsilon = 0$ e $\nu = 0$. Para a reta $\frac{\varepsilon}{2}$ a solução molecular encontra o vácuo, sendo este sucedido pela solução $|\Psi_b| = -B - \sqrt{B^2 + C}$ na reg. $\mathcal{B}3$. A continuidade é mantida.

Assim, a estrutura da solução fica sendo:

Em $\varepsilon \leq -\frac{7\alpha^2}{4\lambda}$ para $\nu \leq \frac{\varepsilon}{2}$ obtém-se o vácuo; para $\nu \geq \frac{\varepsilon}{2}$ vale a solução molecular.

Em $-\frac{7\alpha^2}{4\lambda} \leq \varepsilon \leq -1.07\frac{\alpha^2}{\lambda}$ para $\nu \leq \frac{\varepsilon}{2}$ obtém-se o vácuo; para $\frac{\varepsilon}{2} \leq \varepsilon \leq \nu_+$ vale a solução molecular; já para $\nu_+ \leq \nu \leq \nu'_-$ tem-se a solução $|\Psi_b| = -B - \sqrt{B^2 + C}$; e para $\nu \geq \nu'_-$ vale a solução molecular.

Em $-1.07\frac{\alpha^2}{\lambda} \leq \varepsilon \leq 0$ para $\nu \leq \nu_+$ obtém-se o vácuo; para $\nu_+ \leq \nu \leq \nu'_-$ vale a solução $|\Psi_b| = -B - \sqrt{B^2 + C}$; para $\nu \geq \nu'_-$ tem-se a solução molecular.

Em $0 \leq \varepsilon \leq 2\frac{\alpha^2}{\lambda}$ para $\nu \leq \nu_+$ obtém-se o vácuo; para $\nu_+ \leq \nu \leq 0$ vale a solução $|\Psi_b| = -B - \sqrt{B^2 + C}$; já para $0 \leq \nu \leq \frac{\varepsilon}{2}$ chega-se ao vácuo; e para $\nu \geq \frac{\varepsilon}{2}$ tem-se a solução molecular.

Em $\varepsilon \geq 2\frac{\alpha^2}{\lambda}$ para $\nu \leq \frac{\varepsilon}{2}$ vale o vácuo; para $\nu \geq \frac{\varepsilon}{2}$ obtém-se a solução molecular.

A solução *IV* está na figura 4.4.

Usando a 4.2 chega-se ao raio do condensado e nos pontos de transição. Tais resultados são triviais e serão omitidos.

4.7 Simulações numéricas.

Para comparar os dados experimentais com os resultados analíticos é necessário fazer um gráfico de $|\Psi_a|^2$ e $|\Psi_b|^2$ em função do raio. Porém para tal empreendimento faz-se necessário o uso de unidades realísticas. Para tanto utilizam-se artigos sobre experimentos.

Uma vez em posse destes dados seguem-se os passos:

Solucao IV

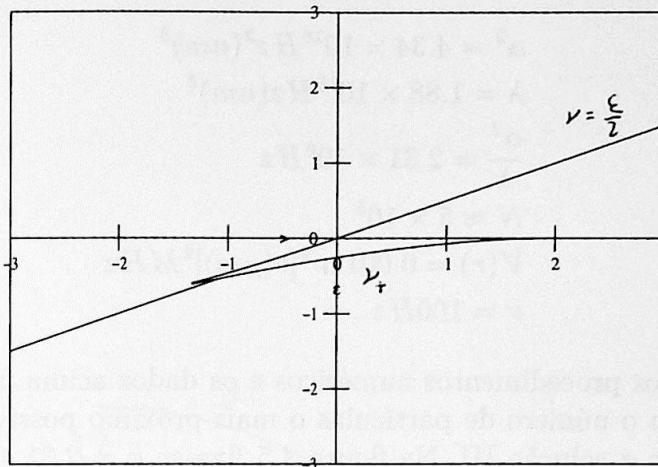


Figura 4.4: Solução IV exibida no plano $\nu \times \epsilon$.

- 1-) Escolhe-se uma das quatro soluções.
- 2-) Fixando ϵ dado no experimento “chuta-se” um potencial químico μ .
- 3-) Feito isso utiliza-se a 4.2 copiada abaixo para saber os pontos de transição e raio do condensado.

$$r = \sqrt{\frac{\mu - \nu}{k}} \quad (4.45)$$

4-) Através da relação $N = \int (|\Psi_a|^2 + 2|\Psi_b|^2) d^3r$ calcula-se o número de partículas do condensado, tomando os limites de integração do passo 2. Se o número coincidir com os dados experimentais prosseguir. Caso contrário repetir os passos 2, 3 e 4 convenientemente, com outro μ até chegar a um valor bem próximo do experimental.

5-) Programar o computador para desenhar o gráfico de $|\Psi_a|^2(r)$ e $|\Psi_b|^2(r)$.

6-) Comparar com os dados experimentais. Caso haja grande diferença entre o modelo e o experimento volta-se ao passo 1 escolhendo outra solução.

Em um dos experimentos realísticos ϵ varia entre $-15 \frac{\alpha^2}{\lambda}$ e $10 \frac{\alpha^2}{\lambda}$ (no artigo em que a experiência é citada a variável ϵ não está explícita, porém ela é função do campo magnético e da ressonância de Feshbach). Assim, vale a pena fazer simulações com estes valores. Os dados estão expostos abaixo:

$$\alpha^2 = 4.34 \times 10^{16} Hz^2 (nm)^3 \quad (4.46)$$

$$\lambda = 1.88 \times 10^{10} Hz (nm)^3 \quad (4.47)$$

$$\frac{\alpha^2}{\lambda} = 2.31 \times 10^6 Hz \quad (4.48)$$

$$N \approx 5 \times 10^5 \quad (4.49)$$

$$V(r) = 0.0011\nu^2[r(\mu m)]^2 MHz \quad (4.50)$$

$$\nu = 100 Hz \quad (4.51)$$

Utilizando os procedimentos numéricos e os dados acima faz-se algumas simulações com o número de partículas o mais próximo possível de 5×10^5 . Começa-se com a solução III. Na figura 4.5 fixa-se $\varepsilon = 2.31 \times 10^7 Hz (10 \frac{\alpha^2}{\lambda})$ obtem-se $\mu = 1.98 \times 10^6 (0.88 \frac{\alpha^2}{\lambda})$ e $N = 502562$. Além disso, é calculado o valor da energia do sistema, $E = 5681.74 Hz$. As figuras 4.6, 4.7 e 4.8 mostram respectivamente os valores $\varepsilon = 0$, $\varepsilon = -10 \frac{\alpha^2}{\lambda}$ e $\varepsilon = -15 \frac{\alpha^2}{\lambda}$. Os valores de μ , N e E aparecem nas figuras.

Com os mesmos dados a solução II é simulada. Fixam-se ε nos mesmos valores fixados na solução III. Os valores de μ , N e E aparecem nas figuras correspondentes. Ver figuras 4.9, 4.10, 4.11 e 4.12.

A solução IV também é simulada com os dados citados, sendo os valores de ε , ν , N e E expostos nas figuras 4.13 e 4.14. Como para $\varepsilon \leq -4 \frac{\alpha^2}{\lambda}$ as soluções III e IV se igualam nem todos os gráficos precisam ser desenhados.

Enfim, a solução I é simulada com os mesmos dados e da mesma maneira. Nem todos os gráficos precisam ser desenhados porque para $\varepsilon \leq -4 \frac{\alpha^2}{\lambda}$ as soluções I, III e IV se igualam (ver 4.15).

4.8 Análise das soluções não uniformes.

Nas simulações numéricas a ordem de energia do sistema (em ordem crescente) foi: solução III, solução I, solução IV e solução II (em algumas simulações a solução IV tem maior energia do que a solução II).

Não há solução analítica para a energia dos condensados não uniformes. Então pode-se conceber estes como um conjunto de condensados uniformes para pequenas variações da distância entre um ponto no condensado e o núcleo deste. Pode-se dizer que a energia do condensado é a soma das energias

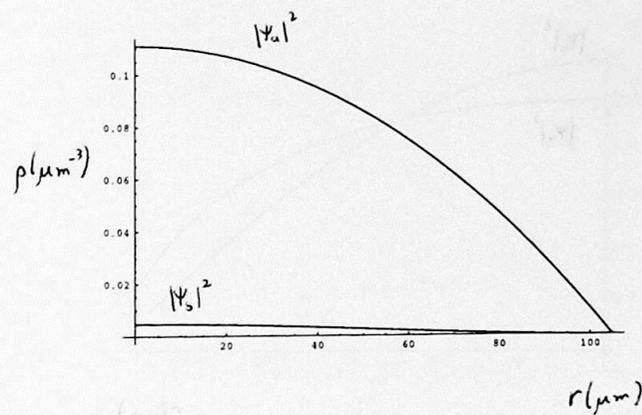


Figura 4.5: Gráfico de $|\Psi_a|^2$ e $|\Psi_b|^2$ em função do raio r . Em $r = 0$ a densidade atômica é maior do que a molecular. A solução é do tipo $|\Psi_b| = -B + \sqrt{B^2 + C}$. As constantes do experimento são $\mu = 1.98 * 10^6 Hz$, $\varepsilon = 2.31 * 10^7 Hz$, $N = 502562$ e $E = 5681.74 Hz$. Todos os gráficos à seguir tem como unidade de raio μm e unidade de densidade μm^{-3}

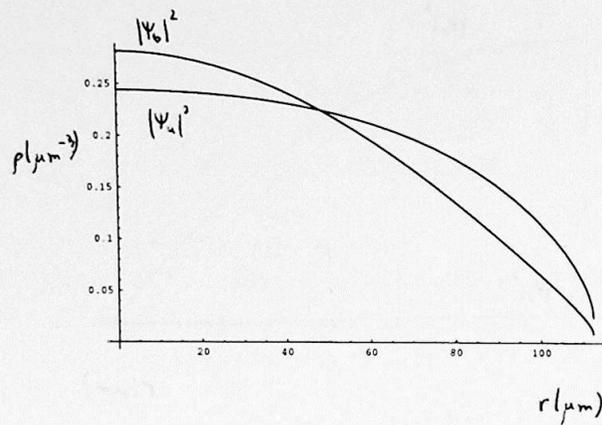


Figura 4.6: Gráfico de $|\Psi_a|^2$ e $|\Psi_b|^2$ em função do raio r . Em $r = 0$ a densidade atômica é menor do que a molecular. A solução é do tipo $|\Psi_b| = -B + \sqrt{B^2 + C}$. As constantes do experimento são $\mu = 1.71 * 10^6 Hz$, $\varepsilon = 0$, $N = 503360$ e $E = 32287.8 Hz$.

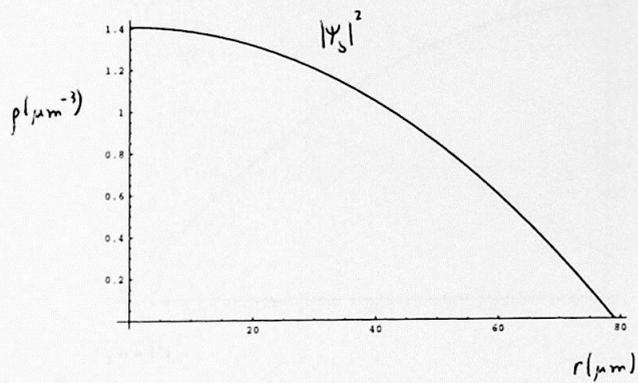


Figura 4.7: Gráfico de $|\Psi_b|^2$ em função do raio r ($|\Psi_a|^2 = 0$). A solução é do tipo molecular. As constantes do experimento são $\mu = -4.38 * 10^6 Hz$, $\varepsilon = -2.31 * 10^7 Hz$, $N = 498078$ e $E = -80996 Hz$.

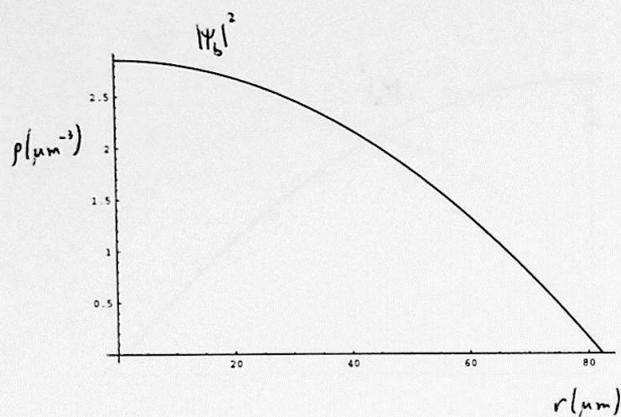


Figura 4.8: Gráfico de $|\Psi_b|^2$ em função do raio r ($|\Psi_a|^2 = 0$). A solução é do tipo molecular. Em $r = 0$ a densidade atômica é maior do que a molecular. As constantes do experimento são $\mu = -9.47 * 10^6 \text{ Hz}$, $\varepsilon = -3.46 * 10^7 \text{ Hz}$, $N = 500973$ e $E = -318070.7 \text{ Hz}$.

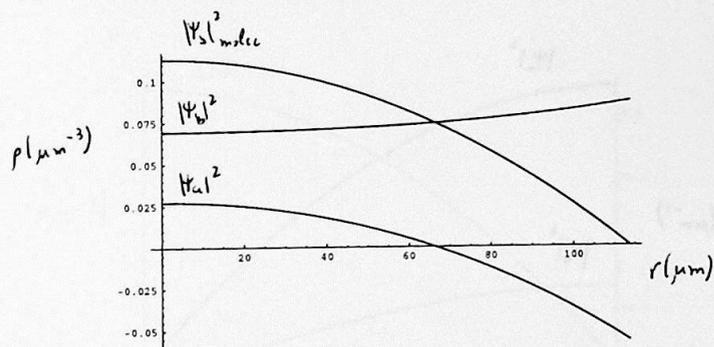


Figura 4.9: Gráfico de $|\Psi_a|^2$ e $|\Psi_b|^2$ e $|\Psi_b|^2_{molec}$ (da solução molecular) em função do raio r . Em $r = 0$ a densidade atômica é a menor de todas, enquanto a maior é a puramente molecular. A solução é do tipo $|\Psi_b| = B + \sqrt{B^2 + C}$ até o ponto em que $|\Psi_a|^2 = 0$. Daí em diante vale a solução puramente molecular. As constantes do experimento são $\mu = 16.86 * 10^6 Hz$, $\varepsilon = 2.31 * 10^7 Hz$, $N = 505681$ e $E = 93616.3 Hz$.

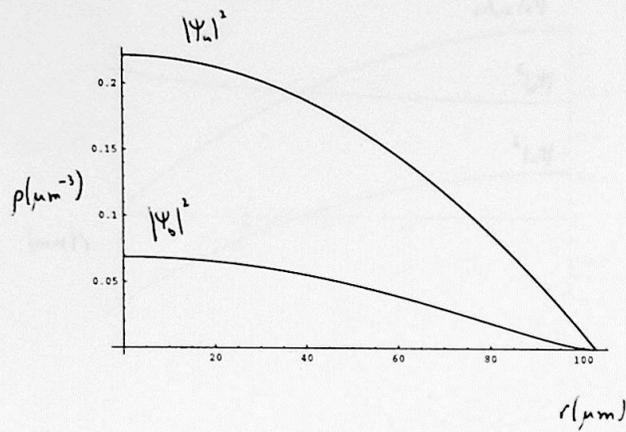


Figura 4.10: Gráfico de $|\Psi_a|^2$ e $|\Psi_b|^2$ em função do raio r . Em $r = 0$ a densidade atômica é maior do que a molecular. A solução é do tipo $|\Psi_b| = B + \sqrt{B^2 + C}$. As constantes do experimento são $\mu = 7.16 * 10^6 Hz$, $\varepsilon = 0$, $N = 503013$ e $E = 49940.18 Hz$.

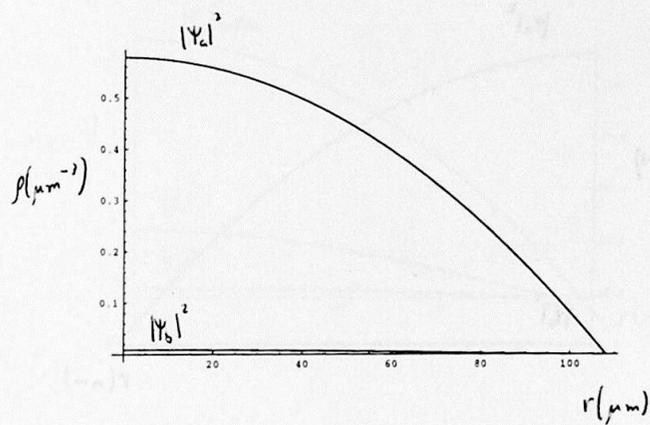


Figura 4.11: Gráfico de $|\Psi_a|^2$ e $|\Psi_b|^2$ em função do raio r . Em $r = 0$ a densidade atômica é maior do que a molecular. A solução é do tipo $|\Psi_b| = B + \sqrt{B^2 + C}$. As constantes do experimento são $\mu = 8.316 * 10^6 Hz$, $\varepsilon = -2.31 * 10^7 Hz$, $N = 497287$ e $E = 64835.9 Hz$.

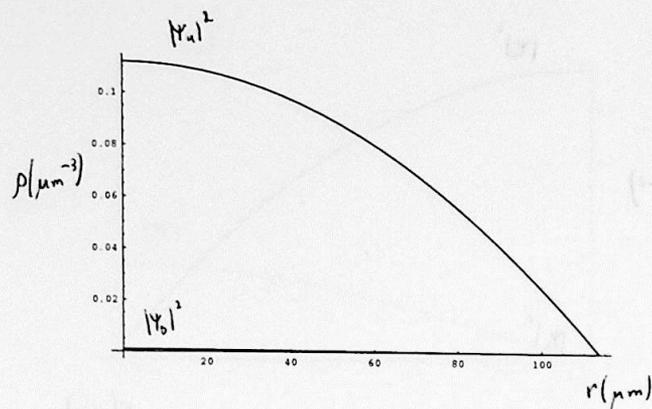


Figura 4.12: Gráfico de $|\Psi_a|^2$ e $|\Psi_b|^2$ em função do raio r . Em $r = 0$ a densidade atômica é maior do que a molecular. A solução é do tipo $|\Psi_b| = B + \sqrt{B^2 + C}$. As constantes do experimento são $\mu = 6.7 * 10^6 \text{Hz}$, $\epsilon = -3.46 * 10^7 \text{Hz}$, $N = 500382$ e $E = 76398.27 \text{Hz}$.

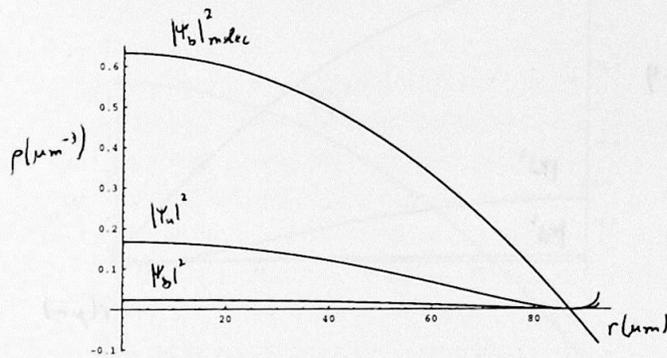


Figura 4.13: Gráfico de $|\Psi_a|^2$, $|\Psi_b|^2$ e $|\Psi_b|^2_{molec}$ (da solução molecular) em função do raio r . A solução é molecular até o ponto em que $|\Psi_b|^2_{molec}$ desta solução se anula. Nesta região, apesar de $|\Psi_b|^2 \geq 0$, $|\Psi_b| \leq 0$. A partir daí vale a solução do tipo $|\Psi_b| = -B - \sqrt{B^2 + C}$. As constantes do experimento são $\mu = 4.39 * 10^6 \text{ Hz}$, $\varepsilon = 0$, $N = 502387$ e $E = 87456 \text{ Hz}$.

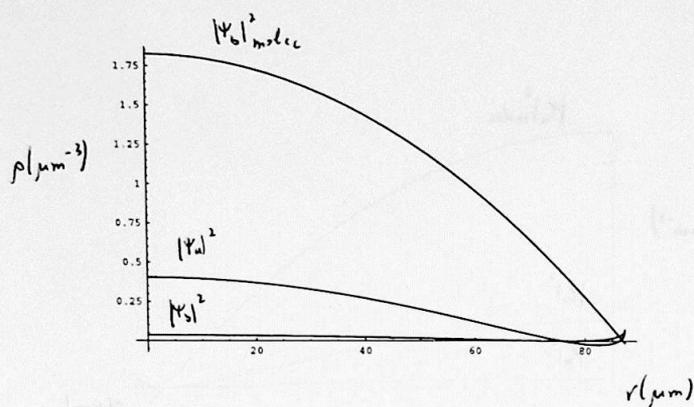


Figura 4.14: Gráfico de $|\Psi_a|^2$, $|\Psi_b|^2$ e $|\Psi_b|^2_{molec}$ (da solução molecular) em função do raio r . A solução é molecular até o ponto em que $|\Psi_b|^2_{molec}$ desta solução se anula. Nesta região, apesar de $|\Psi_b|^2 \geq 0$, $|\Psi_b| \leq 0$. A partir daí vale o vácuo pois tanto $|\Psi_b|^2$ da solução molecular como $|\Psi_a|^2$ ficam negativos. A partir do ponto em que $|\Psi_a|^2$ e $|\Psi_b|^2$ ficam positivos a solução fica do tipo $|\Psi_b| = -B - \sqrt{B^2 + C}$ (no gráfico esta parte fica quase que imperceptível pois é muito pequena em relação à extensão do condensado. As constantes do experimento são $\mu = 3.67 * 10^6 Hz$, $\varepsilon = 2.31 * 10^6 Hz$, $N = 495736$ e $E = 148119 Hz$.

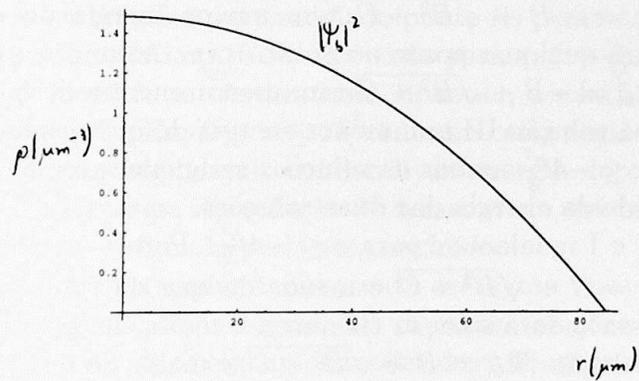


Figura 4.15: Gráfico de $|\Psi_b|^2$ em função do raio r ($|\Psi_a|^2 = 0$). A solução é do tipo molecular. As constantes do experimento são $\mu = 5.313 * 10^6 Hz$, $\varepsilon = 0$, $N = 507829$ e $E = 231658 Hz$.

de condensados infinitamente finos (uma casca de condensado). Ou melhor, tal energia é a integral da densidade de energia no volume.

Em quase todo o plano $\varepsilon \times \nu$ a energia da solução $|\Psi_b| = -B + \sqrt{B^2 + C}$ é menor do que da solução $|\Psi_b| = B + \sqrt{B^2 + C}$. Além disso, nas simulações numéricas feitas anteriormente, a solução $|\Psi_b| = -B + \sqrt{B^2 + C}$ tem menor energia do que a solução puramente molecular. Assim, para $\varepsilon \geq -4\frac{\alpha^2}{\lambda}$, a energia do condensado tem valor menor na solução III do que na solução II. Para $\varepsilon \leq -4\frac{\alpha^2}{\lambda}$ a solução II torna-se totalmente molecular. Para valores negativos de ε (bem menores que zero) tanto a argumentação física como as simulações numéricas mostraram que a solução molecular tem menor energia do que a solução $|\Psi_b| = B + \sqrt{B^2 + C}$. Então, para $\varepsilon \leq -4\frac{\alpha^2}{\lambda}$ a solução III também corresponde à uma energia menor do que a solução II.

A solução $|\Psi_b| = -B + \sqrt{B^2 + C}$ tem menor energia do que $|\Psi_b| = -B - \sqrt{B^2 + C}$ para qualquer ponto no gráfico $\varepsilon x \nu$. Além disso, como já foi visto, a solução $|\Psi_b| = -B + \sqrt{B^2 + C}$ tem menor energia do que a solução molecular. Assim, a solução III tem menor energia do que a solução IV para $\varepsilon \geq -4\frac{\alpha^2}{\lambda}$. Para $\varepsilon \leq -4\frac{\alpha^2}{\lambda}$ ambas as soluções se igualam o que obviamente implica na igualdade da energia das duas soluções.

As soluções III e I igualam-se para $\varepsilon \leq -4\frac{\alpha^2}{\lambda}$. Para $\varepsilon \geq -4\frac{\alpha^2}{\lambda}$ a energia da solução $|\Psi_b| = -B + \sqrt{B^2 + C}$ é menor do que da solução molecular. Assim a energia associada a solução III nunca é maior do que da solução I.

A energia da solução $|\Psi_b| = B + \sqrt{B^2 + C}$ é maior do que a da solução molecular em quase todas as simulações numéricas feitas para condensados uniformes. Assim a solução I tem menor energia do que a solução II.

Para $\varepsilon \leq -\frac{7\alpha^2}{4\lambda}$ e para $\varepsilon \geq 2\frac{\alpha^2}{\lambda}$ as soluções I e IV igualam-se. No intervalo $-\frac{7\alpha^2}{4\lambda} \leq \varepsilon \leq 2\frac{\alpha^2}{\lambda}$ para $\nu \leq \frac{\varepsilon}{2}$ a solução I torna-se solução trivial: o vácuo. Neste caso não faz sentido comparar as energias das soluções. Para $\nu \geq \frac{\varepsilon}{2}$, no mesmo intervalo citado, as soluções podem ser comparadas por uma via indireta. Isto se deve ao fato de que nos condensados uniformes não há uma grande região do plano $\nu \times \varepsilon$ em que coexistam as soluções $|\Psi_b| = -B - \sqrt{B^2 + C}$ e a molecular. Como nesta região ε tem valor próximo de zero, a formação de moléculas não fica inibida e nem favorecida. Assim, o que determina a diferença de energia é o número de partículas (moléculas mais átomos). Cada molécula que se desfaz gera dois átomos. Neste processo o aumento da energia de interação átomo-átomo é o dobro do que a diminuição causada pela interação molécula-molécula. Assim, a produção de átomos fica inibida sendo a energia mínima a da so-

lução molecular. Então a solução I tem menor energia do que a solução IV. Confirmando tal fato para $\varepsilon \geq 0$, concebe-se um condensado como na solução I. Para transformá-lo em condensado com solução IV, basta fazer com que algumas moléculas do condensado transformem-se em átomos. Em $\varepsilon \geq 0$ haverá uma camada “vazia” (com vácuo) seguida de uma camada com a solução $|\Psi_b| = -B - \sqrt{B^2 + C}$. Como a expressão da energia é $E = \int \mathcal{H} d^3r = \int \mathcal{H}(4\pi r^2) dr$ um aumento razoável no raio do condensado (provocado pelo vácuo) é capaz de dar uma grande diferença na energia total do condensado.

Comparar as soluções II e IV constitui-se uma tarefa complicada. Não há nenhuma região no plano $\varepsilon \times \nu$ em que coexistam as soluções $|\Psi_b| = -B - \sqrt{B^2 + C}$ e $|\Psi_b| = B + \sqrt{B^2 + C}$. Porém, os cálculos analíticos mostraram que se houvesse tal região, para um dado ponto no plano $\varepsilon \times \nu$ as energias das duas soluções se igualariam. Como foi visto para $\varepsilon \leq -\frac{7\alpha^2}{4\lambda}$ e para $\varepsilon \geq 2\frac{\alpha^2}{\lambda}$ as soluções I e IV igualam-se. Assim, neste intervalo, a solução IV tem a mesma energia da solução I. Em $0 \leq \varepsilon \leq 2\frac{\alpha^2}{\lambda}$ há uma certa região de vácuo. Como foi visto, tal região implica um aumento da energia do condensado. Logo neste intervalo a energia da solução II é menor do que da solução IV. No intervalo $-\frac{7\alpha^2}{4\lambda} \leq \varepsilon \leq 0$ nada pode ser concluído.

Há uma falha na argumentação usada até agora: nos condensados uniformes a comparação das energias das diversas soluções foi feita com um mesmo valor de ε e ν . Nos exemplos mostrados até agora os valores de ν que os condensados ocupavam não eram tão diferentes assim. Por exemplo, no caso extremo de $\varepsilon = 10\frac{\alpha^2}{\lambda}$, a solução II ocupa um intervalo em ν que vai de $7.2\frac{\alpha^2}{\lambda}$ a $5\frac{\alpha^2}{\lambda}$. Já a solução III vai de $\nu = 0$ a $0.6\frac{\alpha^2}{\lambda}$. Assim, a maior parte do condensado tem os mesmos valores de ν . Porém, quando o módulo de ε aumenta muito os valores de ν divergem bastante pois cada solução é limitada por curvas que afastam-se umas das outras à medida que $|\varepsilon|$ aumenta.

Assim para $\varepsilon \rightarrow +\infty$ a formação de moléculas fica inibida. Deste modo, as soluções I e IV ficam iguais e tem alta energia. Como já foi visto, neste contexto $B \rightarrow +\infty \Rightarrow |\Psi_b| = B + \sqrt{B^2 + C} \rightarrow +\infty$ e $|\Psi_b| = B - \sqrt{B^2 + C} \rightarrow 0$. Assim, a energia da solução II fica maximizada enquanto a energia da solução III fica minimizada. Assim, neste caso a menor energia continua com a solução III, a maior com II e as intermediárias com I e IV (que são iguais).

Para $\varepsilon \rightarrow -\infty$ a formação de moléculas fica estimulada. As soluções I, III e IV igualam-se em tal contexto, tornando-se a solução molecular.

Estas tem sua energia minimizada. Como já foi visto, nesta situação $B \rightarrow -\infty \Rightarrow |\Psi_b| = B + \sqrt{B^2 + C} \rightarrow 0$. Assim a solução II tem sua energia maximizada.

Conclui-se então que em ordem crescente de energia as soluções ficam: solução III, I, IV e II. Em algumas situações ($0 \leq \varepsilon \leq 2\frac{\alpha^2}{\lambda}$) a solução II tem menor energia do que IV.

O estudo da estabilidade é mais complexo. Em primeiro lugar fica fácil lembrar que a aproximação de Thomas-Fermi não leva em conta a energia cinética. Assim, é bem provável que a descrição usada neste trabalho não valha para os condensados de maior energia. É razoável pensar que a energia cinética das partículas destruirá a estabilidade de alguns sistemas.

A solução II é quase sempre a de maior energia. Além disso, para condensados uniformes há regiões do plano $\nu \times \varepsilon$ em que a solução $|\Psi_b| = B + \sqrt{B^2 + C}$ é instável. Concebe-se um condensado não uniforme como um conjunto de condensados uniformes de comprimento infinitesimal. É razoável pensar que a solução II é instável quando há valores de ν que ficam na região onde $|\Psi_b| = B + \sqrt{B^2 + C}$ é instável. Porém, isto é apenas uma estimativa. A união de um sistema instável com um estável não implica a instabilidade do sistema total. Ainda assim é bem provável que a solução II seja instável.

Já a solução I é bem diferente. Nos condensados uniformes moleculares a solução é sempre estável. Porém, a energia da solução molecular aumenta linearmente com ε . Tal aumento de energia pode implicar na instabilidade do sistema. Assim, é razoável dizer que a solução I só é estável para valores negativos de ε ou quando este aproxima-se de zero.

Não se pode esquecer que para cada ponto do condensado é possível associar uma pressão. Mas é bom lembrar que tal pressão não tem o mesmo significado da pressão do condensado uniforme. No caso da uniformidade, a pressão é constante e seu sinal determinará o tipo de armadilha magnética usado para a contenção. Já no caso da pressão não uniforme o estudo se torna bem mais complexo. Para as soluções I e II ocorre um encontro "suave" com o vácuo. Como no limite do condensado (a região onde ele encontra o vácuo) a pressão é nula, pode-se imaginar que sua própria borda "segura" o sistema. Na solução III há uma descontinuidade devido a aproximação de Thomas-Fermi. Considerando que num caso realístico o encontro com o vácuo é suave, é razoável pensar que ele também contém uma borda que o mantenha. No caso da solução IV a situação é bem mais complexa.

Para valores altos de ε a solução IV fica igual a solução I. Para o inter-

valo ($0 \leq \varepsilon \leq 2\frac{\alpha^2}{\lambda}$) quando $0 \leq \nu \leq \frac{\varepsilon}{2}$ há a formação de vácuo no núcleo do condensado. Baseado no que foi estudado para condensados uniformes, a pressão exercida na parte externa do condensado é provavelmente negativa o que o torna instável. Isto não constitui nenhum absurdo pois a densidade na solução $|\Psi_b| = -B - \sqrt{B^2 + C}$ cresce com o raio. Caso haja armadilha, esta forçará o condensado a comprimir-se, visto que o vácuo não impõe resistência, e este perderá sua estabilidade. Para $\nu \geq \frac{\varepsilon}{2}$ há um núcleo de solução molecular, seguido vácuo e finalmente a solução $|\Psi_b| = -B - \sqrt{B^2 + C}$. Se houver armadilha, a parte externa do condensado é forçada a comprimir-se quebrando a estabilidade do condensado. Uma pressão negativa no condensado molecular é impossível. Então resta apenas a possibilidade para tal solução uma pressão nula no condensado interior (o que é verdadeiro para a "borda" do condensado molecular) e negativa no exterior. Enfim, para $-\frac{7\alpha^2}{4\lambda} \leq \varepsilon \leq 0$ se $\nu \leq \nu'_-$ o condensado é estável pois não há vácuo e sua energia não é alta. Mas para $\nu \geq \nu'_-$ o condensado tem um comportamento estranho: do núcleo do condensado até o ponto de transição da solução molecular para $|\Psi_b| = -B - \sqrt{B^2 + C}$ a densidade do condensado decresce. Daí em diante ela aumenta. Na reta $\varepsilon = 0$ a transição entre as duas soluções citadas chega a ter densidade nula. É como se no intervalo citado o vácuo estivesse prestes a ser formado. Assim a estabilidade da solução IV está intimamente ligada à pressão. É bem provável que tal solução seja instável

A solução $|\Psi_b| = -B + \sqrt{B^2 + C}$ é sempre estável para condensados uniformes. Além disso, para condensados não uniformes, ele corresponde a menor energia de todas as soluções possíveis. Para $\varepsilon \leq 4\frac{\alpha^2}{\lambda}$ a solução III iguala-se à I que é estável nesta região. Certamente a solução III é estável.

Os dados experimentais disponíveis não permitem concluir qual das soluções aparecem nas experiências. Mas é quase certo que tal solução é a III. A questão da existência do espectro de condensado Bose-Einstein atômico e molecular é uma questão em aberto. Para valores de ε próximos à zero as diferenças de energia das diversas soluções são menores do que para $|\varepsilon|$ grande. Logo se houver um espectro do condensado estudado neste trabalho este só deve ocorrer para $|\varepsilon|$ próximo à zero.

Capítulo 5

Conclusão

Neste trabalho foi analisada a coexistência de um condensado de Bose-Einstein atômico com um molecular. Para calcular as funções de onda associadas com os condensados atômico e molecular foi usada a aproximação de Thomas-Fermi. Usando o princípio variacional foram calculadas as equações dos estados estacionários.

Um condensado formado somente por moléculas é solução das equações estacionárias. Ao contrário do que o bom senso poderia afirmar, um condensado atômico não é uma solução estacionária.

A solução estacionária interessante é a híbrida: atômica e molecular. Porém, tal solução não é analítica para um caso geral. Assim, foram analisadas as soluções atômico-moleculares para um caso particular: os coeficientes de interação átomo-átomo (λ_a), molécula-molécula (λ_b) e átomo-molécula (λ) são todos iguais entre si ($\lambda_a = \lambda_b = \lambda$).

Há duas variáveis que determinam as funções de onda: a dessintonia e o potencial químico. Assim, as soluções são exibidas em um diagrama que tem como abcissa a dessintonia e ordenada o potencial químico. Neste plano foram exibidas as regiões onde há soluções inválidas. Tal invalidade deve-se ao fato de que nestas regiões as funções de onda estão associadas à densidades negativas ou não reais.

O uso da aproximação de Thomas-Fermi implica que o condensado é considerado localmente uniforme. Assim foram analisadas as soluções já citadas no contexto de condensados uniformes. Vários cálculos tornam-se bastante simples quando o condensado é uniforme.

Primeiramente, foi feito um teste de estabilidade perturbando o número de átomos de um condensado. Tal alteração é acoplada à alteração do número

de moléculas de modo à preservar o número total de partículas. O resultado foi que o condensado molecular é sempre estável. Além disso, das soluções atômica-moleculares, àquela que apresentaram estabilidade em todo o plano citado foram às que tinham a fração do número de moléculas diminuída a medida que a dessintonia aumentava.

Posteriormente foi feito um cálculo das energias associadas à condensados com diferentes soluções e o mesmo número de partículas. A solução que minimiza a energia é uma das soluções estáveis.

Enfim, foi realizado um cálculo da pressão de um condensado. A mesma solução estável que minimizou a energia tem a pressão positiva. Já a outra solução estável tem pressão negativa, o que gera um colapso do sistema. Assim, o critério de estabilidade usado só permite saber se o condensado resiste a uma perturbação e não se ele é realmente estável.

Todas as possíveis soluções para condensados não uniformes foram calculadas e analisadas em seus pormenores. No total foram três soluções atômico-moleculares e uma solução molecular.

A solução que minimizou a energia foi uma mistura de solução molecular com uma solução atômica-molecular, àquela que em condensados uniformes é estável, minimiza a energia e tem pressão positiva. É bem provável que os condensados obtidos experimentalmente correspondam à esta solução. Assim, pode-se concluir que em um condensado atômico-molecular a dessintonia determina a fração de moléculas e o potencial químico a distribuição espacial das funções de onda.

Referências Bibliográficas

- [1] Einstein A *Sitzungsberichte der Preussischen Akademie der Wissenschaften zu Berlin* **3** 18 (1925)
- [2] Huang K *Statistic Mechanics* (Ed. Jonh Wiley and Sons, New York) (1987)
- [3] Cohen-Tannoudji C N *Rev. Mod. Phys.* **71** 1 (1998)
- [4] Anderson M H, Ensher J R, Mathews M R, Wieman C E and Cornell E A *Science* **269** 198 (1995)
- [5] Davis K B, Mewes M O, Andrews M R, van Duuten N J, Durfee D D, Kurn D M and Ketterle W *Phys. Rev. Lett.* **75** 3969 (1995)
- [6] Bradley C C, Sackett C A, Tollet J J and Hulet R G *Phys. Rev. Lett.* **75** 1687 (1995)
- [7] Tin-Lun and V B Shenoy *Phys. Rev. Lett.* **77** 3276 (1996)
- [8] Ruostekoski J, Collett J, Graham R, Walls D *Phys. Rev A* **57** 511 (1998)
- [9] D S Hall M R Mattews, J R Ensher, C E Wieman, E A Cornell *Phys. Rev. Lett.* **81** 1539 (1998)
- [10] H Pu, N P Bigelow *Phys. Rev. Lett.* **80** 1130 (1998)
- [11] C K Law, H Pu, N P Bigelow, J H Eberly *Phys. Rev. Lett.* **79** 3105 (1997)
- [12] E Timmermans, P Tommasini, M Hussein, A Kerman *Phys. Reports.* **315** 199 (1999)

- [13] C J Myatt et al *Phys. Rev. Lett.* **78** 586 (1997)
- [14] C J Williams and P S Julienne *Science's Compass* **287** 986 (2000)
- [15] Roahn Wynar, R S Freeland, D J Han, C Ryu, D J Heizen *Phys. Reports.* **287** 1016 (2000)