



UNIVERSIDADE FEDERAL DO CEARÁ
CENTRO DE CIÊNCIAS
DEPARTAMENTO DE FÍSICA
CURSO DE GRADUAÇÃO EM FÍSICA

SOFIA VERAS LOPES

CRISTALIZAÇÃO E SUPERFLUIDEZ EM UM CONDENSADO DE BOSE-EINSTEIN
UNIDIMENSIONAL COM INTERAÇÕES DO TIPO *SOFT-CORE*

FORTALEZA

2025

SOFIA VERAS LOPES

CRISTALIZAÇÃO E SUPERFLUIDEZ EM UM CONDENSADO DE BOSE-EINSTEIN
UNIDIMENSIONAL COM INTERAÇÕES DO TIPO *SOFT-CORE*

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado
ao Curso de Graduação em Física do Centro
de Ciências da Universidade Federal do Ceará,
como requisito parcial à obtenção do grau de
bacharel em Física.

Orientador: Prof. Dr. Andrey Chaves

FORTALEZA

2025

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação
Universidade Federal do Ceará
Sistema de Bibliotecas
Gerada automaticamente pelo módulo Catalog, mediante os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

- L855c Lopes, Sofia.
Cristalização e superfluidez em um condensado de Bose-Einstein unidimensional com interações do tipo soft-core / Sofia Lopes. – 2025.
56 f. : il. color.
- Trabalho de Conclusão de Curso (graduação) – Universidade Federal do Ceará, Centro de Ciências, Curso de Física, Fortaleza, 2025.
Orientação: Prof. Dr. Andrey Chaves.
1. superfluidos. 2. supersólidos. 3. condensados de Bose-Einstein. 4. equação de Gross-Pitaevskii. I. Título.
CDD 530
-

SOFIA VERAS LOPES

CRISTALIZAÇÃO E SUPERFLUIDEZ EM UM CONDENSADO DE BOSE-EINSTEIN
UNIDIMENSIONAL COM INTERAÇÕES DO TIPO *SOFT-CORE*

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado
ao Curso de Graduação em Física do Centro
de Ciências da Universidade Federal do Ceará,
como requisito parcial à obtenção do grau de
bacharel em Física.

Aprovada em: 25 de julho de 2025

BANCA EXAMINADORA

Prof. Dr. Andrey Chaves (Orientador)
Universidade Federal do Ceará (UFC)

Prof. Dr. João Mílton Pereira Junior
Universidade Federal do Ceará (UFC)

MSc. José Fernandes de Oliveira Neto
Universidade Federal do Ceará (UFC)

À minha mãe, Robéria, ao meu companheiro,
Genivaldo e às minhas cadelas, Pipoca e Jade.

AGRADECIMENTOS

Primeiramente, agradeço à minha mãe, Robéria, por ter me ensinado as mais importantes lições, pela dedicação integral, pelo cuidado, carinho e amor incondicional.

Agradeço também imensamente ao meu companheiro, Genivaldo, por fazer meus dias mais felizes e leves, pelos conselhos e ensinamentos, pelo apoio emocional nessa trajetória, e por todo o amor que tem me dado.

Agradeço aos meus irmãos, Matheus e Gabriel, por sempre acreditarem em mim.

Agradeço à minha amiga de infância, Letícia, por me acompanhar e apoiar em todas as etapas da minha vida e, por apesar dos períodos de ausência, insistir em nossa amizade. Às minhas amigas da escola, Gizele e Luana, pelas boas risadas, pelos brigadeiros, pelas histórias, pelos ensinamentos de vida e por sempre estarem disponíveis quando eu preciso comemorar as vitórias ou sofrer pelas derrotas.

Agradeço aos meus amigos da graduação, Vitor, Gabrielle, Italo, Fernanda e Willian, por me proporcionarem momentos inesquecíveis nos últimos 4 anos.

Agradeço a todos os profissionais responsáveis pela limpeza do Departamento de Física e aos funcionários do restaurante universitário, pois seus trabalhos permitiram um ambiente ideal para o desenvolvimento deste trabalho.

Agradeço aos funcionários da secretaria e à coordenação do Departamento de Física, em especial à Rebeca, por sempre serem muito solícitos.

Agradeço a todos os professores que contribuíram para minha formação de alguma forma, em especial ao Prof. João Milton e ao Prof. Diego Rabelo pela disponibilidade.

Ao Prof. Andrey Chaves, por ter aceitado o meu convite, por toda a sua orientação na elaboração deste trabalho, nos projetos de iniciação científica, pela disponibilidade e por contribuir com a minha formação profissional compartilhando seu vasto conhecimento.

Por fim, agradeço ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico - CNPq, pelo suporte financeiro.

“A vida é melhor aproveitada quando você aprende o máximo possível sobre o máximo de coisas possíveis.”

(Tim Minchin)

RESUMO

Em um sistema de muitos bósons em baixas temperaturas, as partículas podem todas ocupar o mesmo estado fundamental do sistema, formando assim um condensado de Bose-Einstein. Neste caso, todos os bósons compartilham uma mesma função de onda para descrever o estado do sistema. Uma maneira de se estudar este sistema é através da equação de Gross-Pitaevskii (EGP), que tem a forma de uma equação de Schrodinger não-linear, cuja solução é uma função cujo módulo quadrado representa uma densidade de partículas ao longo do espaço em cada instante de tempo. Para o caso em que o potencial de interação entre partículas é uma interação de contato, uma função constante é solução da EGP. Para o caso de interações dipolo-dipolo em condensados de bósons dipolares, a equação adquire uma forma mais complicada, com um potencial não-local, mas a solução constante continua válida dependendo das condições de contorno. Porém, uma situação curiosa ocorre quando consideramos um potencial do tipo *soft-core*, ou seja, um potencial de interação com um valor finito V dentro de um intervalo de distâncias partícula-partícula de 0 a R ; note que, fazendo $V \rightarrow \infty$ e $R \rightarrow 0$, este potencial recai na da interação de contato. No potencial *soft-core*, encontra-se uma modulação periódica na densidade de partículas: neste caso, o condensado possui propriedades de superfluido, como de costume, mas também uma modulação periódica que traz características de um sólido, o que justifica chamar este estado de "supersólido". Neste trabalho, usamos um método de evolução em tempo imaginário para resolver a EGP de forma numérica para um condensado de bósons interagindo com potencial *soft-core*. Com isso, investigamos as condições necessárias no sistema para se obter estados supersólidos e discutimos a possibilidade de se observar este tipo de estado em sistemas reais futuramente.

Palavras-chave: superfluidos; supersólidos; condensados de Bose-Einstein; equação de Gross-Pitaevskii.

ABSTRACT

In a system of many bosons at low temperatures, the particles can all occupy the same ground state, thus forming a Bose-Einstein condensate. In this case, all bosons share a single wave function to describe the system's state. One way to study this system is through the Gross-Pitaevskii equation (GPE), which has the form of a nonlinear Schrodinger equation, whose solution is a function whose squared modulus represents a particle density throughout space at each instant of time. For the case where the interaction potential between particles is a contact interaction, a constant function is the solution to the GPE. For dipole-dipole interactions in dipolar boson condensates, the equation takes on a more complicated form, with a nonlocal potential, but the constant solution remains valid depending on the boundary conditions. However, a curious situation arises when we consider a soft-core potential, that is, an interaction potential with a finite value V within a range of particle-particle distances from 0 to R ; note that, setting $V \rightarrow \infty$ and $R \rightarrow 0$, this potential falls within the contact interaction potential. In the soft-core potential, a periodic modulation in the particle density is found: in this case, the condensate possesses superfluid properties, as usual, but also a periodic modulation that brings characteristics of a solid, justifying the term "supersolid." In this work, we use an imaginary time evolution method to solve the GPE numerically for a condensate of interacting bosons with a soft-core potential. Thus, we investigate the conditions necessary in the system to obtain supersolid states and discuss the possibility of observing this type of state in real systems in the future.

Keywords: superfluids; supersolids; Bose-Einstein condensates; Gross-Pitaevskii equation.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – Espectro de excitação de um sistema superfluido, para o qual há um comportamento linear $\varepsilon_k \sim k$ que domina em momentos baixos, enquanto um mínimo de energia (mínimo do roton) ocorre no momento de energia Δ . . .	38
Figura 2 – Domínio unidimensional discretizado com \mathcal{N} de pontos espaçados uniformemente em um intervalo $[0,L]$	41
Figura 3 – Representação espacial da função barreira para o caso em que o potencial tem intensidade constante igual 1 dentro do intervalo $[-0.5,0.5]$ e 0 fora desta região.	48
Figura 4 – Transformada de Fourier do potencial generalizado em função de k para $g = 100, a = 1$ e para $U_0 = 0$ (preta), 300 (azul), 900 (verde) e 1500 (vermelha) e 1577 (roxa).	49
Figura 5 – Gráfico do espectro de excitação de Bogoliubov para $g = 100, a = 1, \rho = 1, m = 1$ e para $U_0 = 0$ (preta), 300 (azul), 900 (verde) e 1500 (vermelha) e 1577 (roxa).	50
Figura 6 – Perfil de densidade de um sistema interagindo através do potencial generalizado no espaço real. (a) $U_0 = 0$ (amarelo): estado sem modulação de densidade. (b) $U_0 = 1500$ (roxo): surgimento de tendência de cristalização. (c) $U_0 = 2000$ (verde): aumento significativo nas modulações de densidade. (d) $U_0 = 3000$ (azul): formação de modulação periódica bem definida. . . .	51

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Classificação dos termos da interação \hat{H}_{int} por categoria	35
--	----

LISTA DE SÍMBOLOS

\hat{K}	Energia cinética total de um sistema de partículas
q_i	i-ésima coordenada generalizada
p_i	i-ésimo momento generalizado
\dot{q}_i	Velocidade generalizada
\dot{p}_i	Força generalizada
Δx	Intervalo finito do eixo x no espaço de fase
Δp	Intervalo finito do eixo p no espaço de fase
\hbar	Constante de Planck reduzida
\mathcal{H}	Espaço de Hilbert
H	Operador Hamiltoniano
m	Massa total das partículas
U	Potencial de interação entre partículas
k	Número de onda
v	Volume de confinamento das partículas
ρ	Densidade do fluido
t	Tempo
δt	Variação do tempo
δt	Variação do tempo em tempo imaginário
w	Frequência angular
\hat{a}	Operador de aniquilação
\hat{a}^\dagger	Operador de criação
\hat{N}	Operador número
$\varepsilon_{p(lab)}$	Energia de dispersão no referencial do laboratório.
$\varepsilon_{p(fluid)}$	Energia de dispersão no referencial do fluido.
p	Momento total das partículas
w_{crit}	Velocidade crítica do superfluido.

r_{Bohr}

Raio de Bohr

Ry

Constante de Rydberg

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	14
1.1	Superfluidez, Supersolidez e Condensados de Bose-Einstein: histórico e motivação	15
1.2	Escopo do trabalho	18
2	FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	20
2.1	Mecânica quântica de muitos corpos	20
2.1.1	<i>Descrição em primeira quantização</i>	<i>20</i>
2.1.2	<i>Descrição em segunda quantização</i>	<i>24</i>
2.1.2.1	<i>Operadores de criação e aniquilação</i>	<i>24</i>
2.1.2.2	<i>Representação de estados e operadores em segunda quantização</i>	<i>27</i>
2.2	Transformação de Bogoliubov	30
2.3	Espectro de excitação para um sistema de Bósons fracamente interagen- tes	31
2.4	Crítério de Landau	36
2.5	Equação de Gross-Pitaevskii	38
3	METODOLOGIA NUMÉRICA	40
3.1	Método das diferenças finitas	40
3.1.1	<i>Construção dos operadores</i>	<i>42</i>
3.2	Decomposição de Suzuki-Trotter	43
3.2.1	<i>Evolução temporal em tempo imaginário</i>	<i>45</i>
4	RESULTADOS	47
4.1	Potencial Generalizado	47
4.2	Evolução temporal para o estado fundamental	50
5	CONCLUSÕES E TRABALHOS FUTUROS	52
	REFERÊNCIAS	53

1 INTRODUÇÃO

As fases da matéria referem-se às diferentes formas em que sistemas macroscópicos podem ser encontrados. Classicamente, a matéria se apresenta em três fases: sólida, líquida e gasosa. Do ponto de vista macroscópico, a matéria é homogênea, porém, microscopicamente, é composta por um conjunto muito grande de partículas e a dinâmica determina em qual fase um corpo vai se encontrar.

As transições de fase são observadas constantemente em nosso cotidiano. Um exemplo emblemático ocorre no ciclo das chuvas: as águas dos rios aquecem e formam vapor que, pela baixa densidade, tende a subir. Em alta altitude, devido à baixa temperatura, o vapor se condensa novamente na forma líquida, caracterizando transições entre as fases líquida e gasosa da água. Ainda usando a água como exemplo, se um cubo de gelo for retirado de um congelador, em poucos minutos ele se encontra na forma líquida. Observando esses exemplos e outros inúmeros casos de mudança de fase, é possível notar intuitivamente que existe uma relação direta entre transições de fase e temperatura.

Um dos primeiros e mais importantes modelos a estabelecer a relação entre a dinâmica do ponto de vista microscópico e a temperatura foi a teoria cinética dos gases. Esse modelo parte de algumas suposições: a primeira delas é que cada partícula é livre para se movimentar, podendo ter uma velocidade determinada de forma aleatória. A segunda suposição é que essas partículas estão sofrendo constantes colisões perfeitamente elásticas entre si e com as paredes do recipiente. Além disso, considera-se que o tamanho dos constituintes é muito menor do que a distância média entre eles e, com isso, a interação entre as partículas do gás se limita a colisões. Utilizando Mecânica Newtoniana para obter uma equação que descreve a pressão a partir de um ponto de vista microscópico e comparando com a Lei dos Gases, obtida empiricamente, conclui-se que:

$$\langle E_{\text{cin}} \rangle = \frac{3}{2} k_B T. \quad (1.1)$$

Assim, conforme a temperatura tende a zero, a energia cinética das partículas deveria ter o mesmo comportamento; Entretanto, a energia cinética é dada por $p^2/2m$, e uma energia cinética nula implica em um momento nulo. Porém, esse não é um comportamento possível para o momento das partículas devido à relação de incerteza de Heisenberg,

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}, \quad (1.2)$$

ou seja, no limite de $T = 0$, não temos movimento devido a temperatura, mas ainda temos flutuações de origem quântica. Essas flutuações estão associadas a transições de fase quânticas. Essas flutuações influenciam no balanço de energia do sistema, contribuindo para o aparecimento de fases exóticas da matéria, como a superfluidez e supercondutividade.

1.1 Superfluidez, Supersolidez e Condensados de Bose-Einstein: histórico e motivação

No início do século XX, o desenvolvimento de novas técnicas experimentais permitiu, pela primeira vez, a investigação das propriedades da matéria em temperaturas criogênicas. Nesse contexto, Heike Kamerlingh Onnes se propôs a estudar as propriedades do hélio nessas condições, tornando-se assim a primeira pessoa a conseguir que o hélio transicionasse para a fase líquida em 1908 (Delft; Kes, 2010). Esse evento marcou o início de uma série de descobertas sobre a matéria em condições extremas.

Seguindo os estudos das propriedades do hélio, no ano de 1927, M. Wolfke, em colaboração com o ex-aluno de Kamerlingh Onnes, Willem H. Keesom, mediu a constante dielétrica do hélio líquido em função da temperatura e encontrou uma descontinuidade em seu comportamento a 2,2 K. Esse ponto foi chamado de ponto λ e foi interpretado como uma transição entre dois estados distintos do hélio líquido: o hélio I, acima do ponto λ e o hélio II, dele (WARSAW UNIVERSITY OF TECHNOLOGY. FACULTY OF PHYSICS, 2021).

Anos depois, Willem H. Keesom, juntamente com sua filha A.P. Keesom, demonstrou que o hélio II tem uma condutividade térmica extremamente elevada (Keesom; Keesom, 1932). Com base nisso, Kapitza suspeitou que esse fenômeno poderia estar relacionado ao movimento do próprio fluido, que seria extremamente eficiente se o hélio tivesse uma viscosidade muito baixa. Em seu artigo, mostrou que a viscosidade do hélio II é pelo menos 1.500 vezes menor que a do hélio I em pressão normal (Kapitza, 1938). Com esses resultados, ele concluiu que:

O limite atual talvez seja suficiente para sugerir, por analogia com os supercondutores, que o hélio abaixo do ponto λ entra em um estado especial que poderia ser chamado de 'superfluido'. (Kapitza, 1938)

Albert Einstein, utilizando o método desenvolvido pelo Satyendra Nath Bose, propôs que, ao resfriar átomos bosônicos não interagentes abaixo de uma temperatura crítica

$$T_c = C \frac{\hbar^2 n^{2/3}}{M k_B}, \quad (1.3)$$

onde n e M são a densidade de átomos e a sua massa, respectivamente, e C é uma constante multiplicativa, uma fração macroscópica dessas partículas se condensaria no estado quântico

mais baixo, levando o sistema a um fenômeno conhecido como condensação de Bose-Einstein (Einstein, 2005).

Fritz W. London foi o primeiro a propor uma conexão entre os fenômenos de superfluidez e condensação de Bose-Einstein. Seguindo os cálculos desenvolvidos por Einstein, ele demonstrou que, para um gás de Bose ideal com a densidade do hélio líquido, o valor de T_c obtido era próximo de T_λ .

Lev Landau, no entanto, criticava a proposta de London, argumentando que o hélio não poderia ser tratado como um gás de bósons não interagentes devido às suas fortes interações de curto alcance. Por essa razão, Landau desenvolveu sua teoria da quantização do movimento dos fluidos sem levar em conta a condensação de Bose-Einstein (Landau, 2018).

A abordagem de Landau consistia em separar o hélio II como uma mistura de dois líquidos: um superfluido e outro normal. Essa separação pode ser entendida ao imaginarmos um líquido contido em um recipiente que se move com velocidade v . Se o líquido for superfluido, este não tem viscosidade e, portanto, não é arrastado pela parede. Já se for um líquido normal, este se move de acordo com a dinâmica clássica de fluidos. Em seu artigo, Landau mostrou que não há transição contínua entre a fase superfluida ($\nabla \times v \neq 0$) e a fase normal ($\nabla \times v = 0$), de modo que a menor energia para a transição entre essas duas fases deveria ser um certo intervalo Δ .

Landau também afirma que todo estado do sistema com baixa energia pode ser considerado como um conjunto de excitações elementares individuais, que ele divide em duas categorias distintas: quanta de som, conhecidos como fônons, e que possuem uma relação de dispersão linear,

$$\varepsilon = cp \tag{1.4}$$

e vórtices elementares, que ele chama de rótons, e para os quais ele propõe a relação,

$$\varepsilon = \Delta + \frac{p^2}{2\mu}. \tag{1.5}$$

O grande avanço para a descrição do fenômeno da superfluidez feito por Landau é bem resumido na sua frase:

A suposição de que o nível normal de movimentos potenciais está abaixo do começo do espectro de movimentos de vórtices leva ao fenômeno da superfluidez. (Landau, 2018)

Fisicamente, essa frase de Landau nos diz que o gap energético Δ atua como uma barreira contra a destruição do estado superfluido. Ou seja, em baixas velocidades, o fluido não possui energia suficiente para criar excitações rotacionais, permanecendo no estado irrotacional, superfluido.

Confirmando a proposta de London, Penrose e Onsager publicaram um artigo no qual argumentaram, baseado em primeiros princípios, que um critério unificado para a condensação seria aplicável tanto a líquidos quanto a gases, critério este que era satisfeito no hélio II. Contudo, utilizaram o mesmo argumento para sustentar que um sólido não poderia sofrer condensação de Bose-Einstein. Esta última afirmação gerou amplo debate nos anos seguintes à publicação do artigo de Penrose e Onsager, com inúmeros trabalhos subsequentes contestando essa conclusão (Chester, 1970; Leggett, 1970; Gross, 1957).

A supersolidez é uma fase da matéria que combina tanto propriedades típicas de sólidos como propriedades de superfluidos. A primeira menção desse estado foi feita por E.P. Gross, em sua teoria unificada de bósons interagentes, onde ele previu a possibilidade de uma fase superfluida com densidade modulada de bósons fracamente interagentes, descrita por um campo clássico (Gross, 1957).

O aparecimento dessa fase está relacionado à presença de um mínimo local no gráfico do espectro de excitações do sistema em um vetor de onda finito $k \neq 0$ (Ancilotto *et al.*, 2013). Para um líquido uniforme de bósons interagentes, as excitações elementares são descritas pela dispersão de Bogoliubov:

$$\varepsilon_k = \sqrt{\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m}\right) \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + 2\rho\tilde{U}\right)}. \quad (1.6)$$

Quando a transformada de Fourier do potencial de interação, \tilde{U} , assume valores negativos em certos valores de k , sua contribuição negativa leva ao aparecimento de um mínimo de roton. Comparando isso com a teoria de Landau, nota-se que essa diminuição no gap favorece a destruição do estado superfluido.

Apesar dos imensos esforços teóricos e experimentais no estudo da superfluidez, supersolidez e condensação de Bose-Einstein, uma teoria completa dos mecanismos que levam à formação de fases cristalizadas ainda não é completamente compreendida. Com isso, o tema se mantém como uma área relevante, com numerosos estudos sendo publicados recentemente na literatura científica (Xu *et al.*, 2025; Platt *et al.*, 2025; Liebster *et al.*, 2025).

Recentemente, fases supersólidas foram previstas para bósons sem spin confinados e

condensados em duas dimensões, que interagem através de potenciais de curto alcance que não se tornam arbitrariamente grandes em distâncias pequenas, uma classe de potenciais chamada de *soft-core* (Henkel *et al.*, 2010; Cinti *et al.*, 2010).

Neste trabalho, iremos revisar os estudos que levam à previsão de fases supersólidas em condensados de Bose-Einstein, como na abordagem de Bogoliubov que leva à Eq. (1.6), e estudaremos o comportamento de um fluido com um potencial *soft-core* através um método numérico, com o objetivo de encontrar uma tendência de cristalização na densidade de partículas no estado fundamental à medida que o *gap* do estado de roton diminui. O método implementado em um código computacional construído em Python.

1.2 Escopo do trabalho

O restante desta monografia será organizado da seguinte forma:

No capítulo 2, desenvolvemos a descrição teórica de sistemas quânticos de muitos corpos, começando pela primeira quantização, onde introduzimos os postulados fundamentais da mecânica quântica. Na segunda quantização, definimos os estados e reescrevemos a Hamiltoniana em termos de operadores de campo. Apresentamos a transformação de Bogoliubov para diagonalizar Hamiltonianas de muitos corpos, aplicando-a a um gás de bósons fracamente interagentes para obter o espectro de excitação. Por fim, discutimos o critério de Landau para superfluidez e a equação de Gross-Pitaevskii.

No capítulo 3, apresentaremos a discretização da equação de Schrödinger independente do tempo via método das diferenças finitas (MDF), obtendo representações matriciais dos operadores de energia cinética e energia potencial. Aplicaremos este método ao caso de uma Equação de Gross-Pitaevskii, que tem uma forma matemática similar à de uma equação de Schrödinger com um termo de potencial não-linear. Além disso, apresentamos o método de evolução com o operador de evolução temporal no tempo imaginário e, para lidar com a não comutatividade entre os operadores que compõem o Hamiltoniano, aplicamos a decomposição de Suzuki-Trotter de segunda ordem, que aproxima a evolução temporal simetricamente através de produtos de exponenciais. Mostraremos que, ao evoluir uma função arbitrária no tempo imaginário, esta função acaba convergindo para o estado fundamental do sistema.

No capítulo 4, com o objetivo de reproduzir o critério da formação de uma fase supersólida, implementaremos um modelo numérico em Python para um potencial que inclui um termo de interação entre partículas do tipo *soft-core*. Com isso, obtemos o estado fundamental de

um sistema de partículas com interações desse tipo, obedecendo à equação de Gross-Pitaevskii, o qual apresenta a formação de um padrão de densidade cristalina, permeada por regiões onde o parâmetro de ordem não é nulo, ou seja, onde ele ainda é superfluido.

2 FUNDAMENTACAO TEÓRICA

Esta seção foi baseada nas seguintes referências: no livro (Cohen-tannoudji *et al.*, 1986), no livro (Bruus; Flensburg, 2004), no livro (Griffiths; Schroeter, 2018), no artigo (Bogolubov, 1947), nas notas de aulas (Simon, 2019) e nas referências citadas ao longo da seção.

2.1 Mecânica quântica de muitos corpos

2.1.1 Descrição em primeira quantização

A descrição de um sistema clássico baseia-se na determinação do estado do sistema em todos os pontos de sua trajetória, dadas suas condições iniciais, por meio de uma equação de movimento. No formalismo hamiltoniano, o estado de uma partícula em um instante t é completamente determinado pelo conjunto de coordenadas generalizadas e momentos generalizados $\{q_i(t), p_i(t)\}$, ou seja, dado esse conjunto, todas as grandezas físicas associadas ao sistema podem ser obtidas. A evolução temporal do estado é descrita pelas equações de Hamilton,

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}; \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}. \quad (2.1)$$

Quando se trata de um sistema quântico, o ato de medir uma grandeza altera o estado do sistema. Por exemplo, se medimos a posição de uma partícula, o estado da partícula será alterado, gerando uma incerteza na medida do momento. Essa alteração é descrita pela Eq. (1.2).

Portanto, não é possível determinar o estado de uma partícula quântica em termos do conjunto de posições e momentos. Entretanto, medindo vários sistemas quânticos nas mesmas condições, podemos categorizar quais são os possíveis valores de momento e de posição que uma partícula quântica pode assumir. Com isso, faz-se necessária uma descrição probabilística dos estados. Para essa descrição, vamos apresentar como ponto de partida seis postulados.

Postulado 2.1.1 *O estado de um sistema quântico isolado em um instante t é representado por um vetor unitário pertencente a um espaço de Hilbert complexo \mathcal{H} , $|\psi_t\rangle$.*

O primeiro postulado exige que o vetor de estado seja unitário, isso se deve ao fato de os estados quânticos estarem associados a probabilidades e, por construção, a soma ou, no caso contínuo, a integral, de todas as probabilidades deve ser igual a um. De forma equivalente, podemos enunciar isso pela condição de normalização,

$$\langle \psi_t | \psi_t \rangle = 1. \quad (2.2)$$

Postulado 2.1.2 *Toda quantidade física mensurável A é descrita por um operador Hermitiano \hat{A} agindo no espaço de Hilbert \mathcal{H} .*

Uma das consequências mais importantes do Postulado 2.1.2 é que, dado que um certo operador \hat{A} é Hermitiano, é possível construir uma base ortonormal do espaço de estados do sistema a partir dos autoestados de \hat{A} ,

$$\langle v_i | v_j \rangle = \delta_{ij}. \quad (2.3)$$

Com isso, pode-se expressar qualquer vetor de estado $|\psi\rangle$ como uma série em termos dos autoestados do operador \hat{A} ,

$$|\psi\rangle = \sum_i c_i |v_i\rangle. \quad (2.4)$$

Postulado 2.1.3 *O resultado da medida de quantidade física A só pode ser um dos autovalores do operador \hat{A} .*

Postulado 2.1.4 *Quando a quantidade física A é medida em um sistema em um estado normalizado $|\psi\rangle$, a probabilidade de medir um dos autovalores λ_1 é o módulo ao quadrado da projeção do autovetor correspondente ao autovalor λ_1 no estado $|\psi\rangle$.*

Se λ_i é o autovalor associado ao autoestado v_i do observável A , a condição de normalização tem como consequência a seguinte condição para os coeficientes:

$$\sum_i |c_i|^2 = 1. \quad (2.5)$$

Os coeficientes c_i possuem uma interpretação fundamental na nossa descrição probabilística, uma vez que estão associados à amplitude de probabilidade de medir um determinado autovalor correspondente aos autoestados. Entretanto, as amplitudes de probabilidade não podem ser medidas diretamente, limitando as características físicas às probabilidades em si.

Se acrescentarmos uma fase $e^{i\theta}$ ao estado inicial, a probabilidade de medir aquele estado permanecerá a mesma. Ou seja, podemos dizer que ψ e $e^{i\theta}\psi$ representam o mesmo estado físico.

Postulado 2.1.5 *Se a medida da quantidade física A em um sistema em um estado $|\psi\rangle$ tiver como resultado o autovalor λ_1 , o estado do sistema imediatamente após a medição é a projeção normalizada do estado ψ no subespaço gerado pelos autovetores com autovalor λ_1 .*

Postulado 2.1.6 *A evolução temporal de um estado quântico $|\psi_t\rangle$ é descrita pela equação de Schrödinger, onde \hat{H} é um operador Hermitiano associado a energia total do sistema.*

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi_t\rangle = \hat{H} |\psi_t\rangle \quad (2.6)$$

Esta é uma equação diferencial de primeira ordem, cuja solução é uma exponencial do operador Hamiltoniano:

$$|\psi_t\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} |\psi_0\rangle \quad (2.7)$$

Dado que existe uma descrição teórica robusta para os estados de uma partícula quântica, surge naturalmente a pergunta: *Podemos construir uma teoria quântica análoga para um sistema de muitas partículas?* A resposta para essa pergunta é sim; entretanto, temos que impor algumas condições adicionais.

Para isso, é preciso construir o estado do sistema de muitas partículas. Podemos fazer isso expandindo a função de onda de muitos corpos em termos de um conjunto completo de funções de onda de uma partícula, incorporando, assim, mais um postulado.

Postulado 2.1.7 *O espaço vetorial do sistema de muitas partículas é o produto tensorial dos espaços de estados de partícula única.*

$$H_{(\text{muitos-corpos})} = H_1 \otimes H_2 \otimes \cdots \otimes H_N. \quad (2.8)$$

A escolha do postulado 2.1.7 para esse caso justifica-se principalmente porque a dimensão do espaço gerado pelo produto tensorial é o produto das dimensões dos espaços individuais. Por exemplo, considere uma partícula quântica que tem 2 estados possíveis, $|v_1\rangle$ e $|v_2\rangle$. Então, o espaço de Hilbert desse sistema tem dimensão 2, e o estado quântico é uma superposição desses estados:

$$|\psi\rangle = c_1 |v_1\rangle + c_2 |v_2\rangle. \quad (2.9)$$

Agora, considere duas partículas idênticas onde cada uma tem 2 estados possíveis, $|v_1\rangle$ e $|v_2\rangle$. Os estados compostos possíveis são $\{(v_1, v_1), (v_2, v_1), (v_1, v_2), (v_2, v_2)\}$ e a dimensão do espaço de Hilbert é 4. Ou seja, se um sistema é composto por S subsistemas, cada um dos quais com R resultados possíveis para uma medição, então o sistema composto é descrito

por R^S resultados possíveis. No estado composto das duas partículas, precisamos considerar todas as combinações possíveis de estados:

$$|\Psi\rangle = A_{v_1, v_1} |v_1\rangle_1 \otimes |v_1\rangle_2 + A_{v_2, v_1} |v_2\rangle_1 \otimes |v_1\rangle_2 + A_{v_1, v_2} |v_1\rangle_1 \otimes |v_2\rangle_2 + A_{v_2, v_2} |v_2\rangle_1 \otimes |v_2\rangle_2. \quad (2.10)$$

Usando a ortonormalidade e a relação de completeza, também é possível escrever a função de onda muitas partículas da seguinte forma (Altland; Simons, 2010):

$$\psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_l) = \sum_{v_1, v_2, \dots, v_k} A_{v_1, v_2, \dots, v_k} \psi_{v_1}(\vec{x}_1) \psi_{v_2}(\vec{x}_2) \cdots \psi_{v_k}(\vec{x}_l). \quad (2.11)$$

Ao permutarmos duas partículas, a condição de normalização para o estado de muitas partículas garante que esse dois estados devem diferir em apenas uma fase,

$$\hat{P}_{ij} \psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \tilde{\mathbf{x}}_i, \dots, \tilde{\mathbf{x}}_j, \dots, \vec{x}_N) = e^{i\theta} \psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \tilde{\mathbf{x}}_j, \dots, \tilde{\mathbf{x}}_i, \dots, \vec{x}_N). \quad (2.12)$$

Em um sistema quântico, as partículas são indistinguíveis, e portanto a norma da função de onda deve continuar a mesma após a troca de posições, ou seja, existem apenas dois valores permitidos para $e^{i\theta}$. A forma como o estado muda quando trocamos as posições de duas partículas define duas categorias de partículas idênticas: quando $e^{i\theta} = +1$, trata-se de um estado bosônico, e quando $e^{i\theta} = -1$, o estado é fermiônico. Em outras palavras,

$$\hat{P}_{ij} \psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \tilde{\mathbf{x}}_i, \dots, \tilde{\mathbf{x}}_j, \dots, \vec{x}_N) = +1 \cdot \psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \tilde{\mathbf{x}}_j, \dots, \tilde{\mathbf{x}}_i, \dots, \vec{x}_N) \quad (\text{Bósons})$$

$$\hat{P}_{ij} \psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \tilde{\mathbf{x}}_i, \dots, \tilde{\mathbf{x}}_j, \dots, \vec{x}_N) = -1 \cdot \psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \tilde{\mathbf{x}}_j, \dots, \tilde{\mathbf{x}}_i, \dots, \vec{x}_N), \quad (\text{Férmions})$$

onde \hat{P}_{ij} é o operador permutação entre uma partícula de coordenadas x_i e uma partícula com coordenada x_j .

Analogamente, podemos dizer que o espaço vetorial dos estados de N partículas possui dois subespaços: um para estados fermiônicos e outro para bosônicos. Assim, precisamos construir um operador que projete o estado geral no subespaço que corresponde à representação desejada, isso é feito através do operador de simetrização para bosons e operador de antisimetização para fermions,

$$\hat{S}_+ = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{P \in S_n} P \quad (2.13)$$

$$\hat{S}_- = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{P \in S_n} \text{sgn}(P) P, \quad (2.14)$$

em que $\text{sgn}(P)$ representa o sinal da permutação, sendo igual a $+1$ se P for uma permutação par e -1 se P for uma permutação ímpar.

Como o foco deste trabalho é realizar um estudo apenas para bósons omitirei o desenvolvimento para o caso antissimétrico daqui em diante.

A aplicação do operador de simetrização à função de onda de N partículas pode ser representada de forma simplificada em termos do permanente ($|\cdot|_+$),

$$\hat{S}_+ \Psi_{v(\text{muitos-corpos})}(\vec{x}_i) \equiv \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_{v_1}(\vec{x}_1) & \psi_{v_2}(\vec{x}_1) & \cdots & \psi_{v_N}(\vec{x}_1) \\ \psi_{v_1}(\vec{x}_2) & \psi_{v_2}(\vec{x}_2) & \cdots & \psi_{v_N}(\vec{x}_2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_{v_1}(\vec{x}_N) & \psi_{v_2}(\vec{x}_N) & \cdots & \psi_{v_N}(\vec{x}_N) \end{vmatrix}_+. \quad (2.15)$$

Conhecendo os estados e levando em conta os postulados mencionados aqui, temos uma descrição completa para o sistema de N partículas. Entretanto, para um sistema com um número de partículas muito grande, o cálculo da função de onda de muito corpos em primeira quantização se torna inconveniente, pois geralmente não estamos interessados na posição particular de cada partícula, já que se trata de um sistema de partículas indistinguíveis, mas sim no número de partículas que ocupa cada um dos estados. Essa redundância é superada quando usamos a representação em segunda quantização.

2.1.2 Descrição em segunda quantização

2.1.2.1 Operadores de criação e aniquilação

Dentre as soluções analíticas da equação de Schrödinger, talvez a mais importante seja para o potencial harmônico. Sua relevância está no fato de que quase qualquer potencial suave pode ser aproximado por um oscilador harmônico próximo a um ponto de mínimo local. Além disso, outra razão que reforça sua importância é o fato de que ao resolver o problema do oscilador harmônico quântico pelo método algébrico, podemos definir dois operadores não hermitianos, normalmente chamados de operadores de abaixamento e levantamento, os quais possuem características muito similares aos operadores de criação e aniquilação que serão essenciais para a construção do formalismo de muitos corpos em segunda quantização, tema da próxima sessão.

O Hamiltoniano para um potencial harmônico é

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 q^2}{2}. \quad (2.16)$$

Como definido pelo Postulado 2.1.2, os observáveis quânticos são representados por operadores. Nesse caso, as variáveis p e q são substituídas pelos operadores \hat{p} e \hat{x} , definidos respectivamente como

$$\hat{p} = i\hbar \frac{d}{dx}; \quad (2.17)$$

$$\hat{x} = x. \quad (2.18)$$

Assim, a equação de Schrödinger independente do tempo, para o oscilador harmônico quântico é

$$H\psi = \left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2 \hat{x}^2}{2} \right) \psi = E\psi. \quad (2.19)$$

Por simplicidade, reescrevemos o Hamiltoniano em termos de operadores que o tornam adimensional,

$$\hat{p}^2 = \frac{1}{2m\hbar\omega} \hat{p}^2; \quad (2.20)$$

$$\hat{x}^2 = \frac{m\omega^2}{2\hbar\omega} \hat{x}^2. \quad (2.21)$$

Para um dado número complexo $z = \alpha + i\beta$, seu módulo ao quadrado é escrito em termos do quadrado de seus coeficientes reais α e β ,

$$z^2 = \bar{z}z = (\alpha - i\beta)(\alpha + i\beta) = \alpha^2 + \beta^2 - i[\beta, \alpha] \quad (2.22)$$

sendo o produto de números reais comutativo, então $[\beta, \alpha] = 0$.

A partir disso, surge a ideia de tentar escrever o Hamiltoniano em termos de um operador e seu conjugado transposto. Para fazer isso com os operadores definirei um operador

$$\hat{N} = \hat{a}^\dagger \hat{a} \quad (2.23)$$

a partir dos operadores \hat{P} e \hat{X} ,

$$\hat{N} = (P + iX)(P - iX) = P^2 + X^2 + i[X, P]. \quad (2.24)$$

A diferença desse caso para o caso do módulo quadrado de um número complexo é que operadores nem sempre comutam entre si. Pela definição das Eqs. (2.17) e (2.18), ou simplesmente pelo princípio da incerteza, temos

$$[X, P] = \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}} \sqrt{\frac{m\omega^2}{2\hbar\omega}} [x, p] = \frac{i}{2}. \quad (2.25)$$

Portanto, o Hamiltoniano, em termos dos operadores de criação e aniquilação é

$$H = \hbar\omega \left(\hat{a}\hat{a}^\dagger + \frac{1}{2} \right). \quad (2.26)$$

Tendo definido os operadores de abaixamento \hat{a} e levantamento \hat{a}^\dagger e conhecendo a relação de comutação $[X, P] = \frac{i}{2}$, podemos calcular as relações de comutação entre os operadores

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1; \quad (2.27)$$

$$[\hat{a}^\dagger, \hat{a}^\dagger] = [\hat{a}, \hat{a}] = 0. \quad (2.28)$$

Usando as as relações de comutação entre os operadores de criação e aniquilação, podemos calcular as relações de comutação com o Hamiltoniano

$$[H, \hat{a}] = \left[\hbar\omega \left(\hat{a}\hat{a}^\dagger - \frac{1}{2} \right), \hat{a} \right] = \hbar\omega \left(\hat{a}[\hat{a}^\dagger, \hat{a}] + [\hat{a}, \hat{a}]\hat{a}^\dagger \right) = -\hbar\omega\hat{a} \quad (2.29)$$

$$[H, \hat{a}^\dagger] = \left[\hbar\omega \left(\hat{a}\hat{a}^\dagger - \frac{1}{2} \right), \hat{a}^\dagger \right] = \hbar\omega \left(\hat{a}[\hat{a}^\dagger, \hat{a}^\dagger] + [\hat{a}, \hat{a}^\dagger]\hat{a} \right) = \hbar\omega\hat{a}^\dagger \quad (2.30)$$

Expandindo o comutador do Hamiltoniano com o operador de abaixamento, obtemos

$$H\hat{a}\psi_n = -\hbar\omega\hat{a}\psi_n + \hat{a}E_n\psi_n = (E_n - \hbar\omega)\hat{a}\psi_n, \quad (2.31)$$

ou seja, a aplicação do operador \hat{a} em um autoestado n gera um decaimento para o autoestado de energia diminuída por $\hbar\omega$.

Analogamente, a expansão do comutador do Hamiltoniano com o operador de levantamento gera

$$H\hat{a}^\dagger\psi_n = \hbar\omega\hat{a}^\dagger\psi_n + \hat{a}^\dagger E_n\psi_n = (E_n + \hbar\omega)\hat{a}^\dagger\psi_n. \quad (2.32)$$

Se ψ_0 é autoestado de energia mais baixa, devemos impor que $\hat{a}\psi_0 = 0$,

$$\hat{a}\psi_0 = (\hat{P} + i\hat{X})\psi_0 = 0. \quad (2.33)$$

Dessa forma, podemos usar essa relação para encontrar a forma geral de ψ_0 substituindo as definições dos operadores \hat{P} e \hat{X} , escritas nas Eqs. (2.20) e (2.21). A partir dessa substituição, encontramos a equação diferencial

$$\frac{d\psi_0}{\psi_0} = -\frac{mw}{\hbar}x, \quad (2.34)$$

cuja solução geral é dada por:

$$\psi_0 = A \exp\left(-\frac{mwx^2}{2\hbar}\right). \quad (2.35)$$

em que A é uma constante de normalização.

A aplicação do operador de levantamento no estado fundamental tem como autovalor o primeiro estado excitado, e cada nova aplicação gera a energia do estado posterior, aumentando a energia por $\hbar w$, assim o n -ésimo estado quântico desse sistema deve ser proporcional a n aplicações do operador de levantamento no estado fundamental,

$$\psi_n = A_n (\hat{a}^\dagger)^n \psi_0, \quad (2.36)$$

onde A_n é uma constante de normalização.

A expectativa agora é de que possamos definir operadores de criação e destruição de uma partícula num dado estado de um sistema de muitos corpos em analogia aos estados de levantamento e abaixamento que definimos aqui.

2.1.2.2 Representação de estados e operadores em segunda quantização

O postulado 2.1.1 estabelece que um sistema quântico em um tempo t é um vetor unitário pertencente a um espaço vetorial complexo. Na representação em segunda quantização esse espaço vetorial complexo passa a ser o espaço de Fock. Os estados no espaço de Fock são dados pela especificação do número de partículas em cada estado, sendo representado por:

$$|n_{v_1}, n_{v_2}, \dots, n_{v_N}\rangle \quad (2.37)$$

onde n_{v_j} é o número de partículas no estado v_j .

Com isso, a soma das partículas em todos os estados deve ser igual ao número de partículas do sistema,

$$\sum_i n_{v_i} = N. \quad (2.38)$$

Na seção anterior, mostramos que a aplicação do operador criação $\hat{a}_{v_j}^\dagger$ aumenta o estado da partícula $|v_j\rangle$ em um estado quântico, isso implica que

$$\hat{a}_{v_j}^\dagger |n_{v_j}\rangle \propto |n_{v_j} + 1\rangle. \quad (2.39)$$

Da mesma forma, mostramos que a aplicação do operador aniquilação \hat{a}_{v_j} diminui o estado da partícula $|v_j\rangle$ em um estado quântico,

$$\hat{a}_{v_j} |n_{v_j}\rangle \propto |n_{v_j} - 1\rangle. \quad (2.40)$$

Aplicando o operador de criação ao resultado da aniquilação, obtemos um estado proporcional ao estado original,

$$\hat{a}_{v_j}^\dagger \hat{a}_{v_j} |n_{v_j}\rangle \propto |n_{v_j}\rangle. \quad (2.41)$$

O operador $\hat{a}_{v_j}^\dagger \hat{a}_{v_j}$ é exatamente o operador \hat{N}_{v_j} que definimos na seção 2.1.2.1. Denotaremos a constante de proporcionalidade da Eq. (2.41) como sendo n_{v_j} ,

$$\hat{N}_{v_j} |n_{v_j}\rangle = n_{v_j} |n_{v_j}\rangle. \quad (2.42)$$

O fato de que as partículas são idênticas implica que a ordem em que duas partículas são criadas ou aniquiladas não gerará como consequência uma diferença no estado do sistema no cenário em que uma é criada enquanto a outra é aniquilada, a ordem em que isso ocorre só altera o estado do sistema quando os dois ocorrem em um mesmo estado. Essas características da aplicação dos operadores de criação e aniquilação são traduzidas pelas relações de comutação dadas nas Eqs. (2.27) e (2.28). A partir disso, derivam-se duas relações de comutação para o operador \hat{N}_{v_j} ,

$$[\hat{N}_{v_j}, \hat{a}_{v_j}^\dagger] = \hat{a}_{v_j}^\dagger; \quad (2.43)$$

$$[\hat{N}_{v_j}, \hat{a}_{v_j}] = -\hat{a}_{v_j}. \quad (2.44)$$

Aplicando o operador \hat{N}_{v_j} em $\hat{a}_{v_j}|n_{v_j}\rangle$ e utilizando a Eq.(2.44), temos que

$$\hat{N}_{v_j}(\hat{a}_{v_j}|n_{v_j}\rangle) = (\hat{a}_{v_j}\hat{N}_{v_j} - \hat{a}_{v_j})|n_{v_j}\rangle = (n_{v_j} - 1)(\hat{a}_{v_j}|n_{v_j}\rangle). \quad (2.45)$$

Isso mostra que $\hat{a}_{v_j}|n_{v_j}\rangle$ é um autovalor de \hat{N}_{v_j} com autovalor $(n_{v_j} - 1)$.

Da mesma forma, aplicando o operador \hat{N}_{v_j} em $\hat{a}_{v_j}^\dagger|n_{v_j}\rangle$ e utilizando a Eq.(2.44):

$$\hat{N}_{v_j}(\hat{a}_{v_j}^\dagger|n_{v_j}\rangle) = (\hat{a}_{v_j}^\dagger\hat{N}_{v_j} + \hat{a}_{v_j}^\dagger)|n_{v_j}\rangle = (n_{v_j} + 1)(\hat{a}_{v_j}^\dagger|n_{v_j}\rangle) \quad (2.46)$$

Isso mostra que $\hat{a}_{v_j}^\dagger|n_{v_j}\rangle$ é um autovalor de \hat{N}_{v_j} com autovalor $(n_{v_j} + 1)$.

Com isso, é possível mostrar que as constantes de proporcionalidade na aplicação dos operadores de criação e aniquilação são:

$$\hat{a}_{v_j}|n_{v_j}\rangle = \sqrt{n_{v_j}}|n_{v_j} - 1\rangle; \quad (2.47)$$

$$\hat{a}_{v_j}^\dagger|n_{v_j}\rangle = \sqrt{n_{v_j} + 1}|n_{v_j} + 1\rangle. \quad (2.48)$$

Ou, de maneira geral,

$$(\hat{a}_{v_j}^\dagger)^{n_{v_j}}|0\rangle = \sqrt{n_{v_j}!}|n_{v_j}\rangle. \quad (2.49)$$

Ainda, se quisermos manter a descrição em termos dos operadores de criação e aniquilação mas com uma representação em termos das posições definimos os operadores de campo quânticos $\hat{\psi}^\dagger(x)$ e $\hat{\psi}(x)$, que criam e aniquilam partículas em uma posição x , respectivamente. Eles são definidos como

$$\hat{\psi}^\dagger(x) = \sum_v \psi_v(x) \hat{a}_v^\dagger; \quad (2.50)$$

$$\hat{\psi}(x) = \sum_v \psi_v(x) \hat{a}_v. \quad (2.51)$$

O Hamiltoniano geral é escrito como

$$\hat{H} = \hat{K} + \hat{V} + \hat{U}, \quad (2.52)$$

onde os termos do Hamiltoniano, escritos com operadores de campo, são

$$\hat{K} = -\frac{\hbar^2}{2m} \int dx \frac{d}{dx} \hat{\psi}^\dagger(x) \frac{d}{dx} \hat{\psi}(x); \quad (2.53)$$

$$V = \int dx \hat{\psi}^\dagger(x) V(x) \hat{\psi}(x); \quad (2.54)$$

$$\hat{U} = \frac{1}{2} \int dx \hat{\psi}^\dagger(x) \hat{\psi}^\dagger(x') U(x - x') \hat{\psi}(x) \hat{\psi}(x'). \quad (2.55)$$

2.2 Transformação de Bogoliubov

Até aqui, desenvolvemos as ferramentas necessárias para uma descrição quântica geral de muitos corpos. A partir de agora, vamos resolver um problema específico de muitos corpos usando o método aproximativo desenvolvido por Nikolai Bogoliubov (Bogolubov, 1947; Bogoliubov, jul. 1958). Este método consiste em diagonalizar um hamiltoniano de um sistema de muitas partículas a partir de uma certa transformação canônica. Nesta seção, focaremos especificamente no procedimento de diagonalização para uma hamiltoniana simplificada, onde as variáveis são tratadas como números complexos, sem inicialmente considerar o significado físico específico de cada parâmetro. O tratamento usando os parâmetros físicos explicitamente será desenvolvido na seção subsequente. Assim, iniciaremos com o Hamiltoniano de Bogoliubov,

$$H_{bog} = \beta(a^*a) + \gamma(a^*a^* + aa). \quad (2.56)$$

Para diagonalizar o Hamiltoniano, introduzimos novos operadores a e a^* através de uma transformação linear, conhecida como transformação de Bogoliubov. Essa transformação é dada através das Eqs. (2.57) e (2.58).

$$b = u \cdot a + v \cdot a^* \quad (2.57)$$

$$b^* = u \cdot a^* + v \cdot b \quad (2.58)$$

Para que o processo de diagonalização não altere as equações obedecidas pela Hamiltoniana de Bogoliubov, devemos impor que essa transformação seja canônica. Isso acontece apenas se o determinante da matriz de transformação for igual a um, o que nos leva à condição,

$$|u|^2 - |v|^2 = 1. \quad (2.59)$$

Dessa forma, uma escolha natural para parametrização de u e v seria:

$$\begin{cases} u(\theta) = \cosh \theta, \\ v(\theta) = \sinh \theta. \end{cases} \quad (2.60)$$

Com esta parametrização, a condição Eq. (2.59) é imediatamente satisfeita, pois

$$\cosh^2(\theta) - \sinh^2(\theta) = 1. \quad (2.61)$$

Escrevendo o Hamiltoniano em termos das novas variáveis, temos

$$H = [\beta (\cosh^2 \theta + \sinh^2 \theta) - 4\gamma (\cosh \theta \sinh \theta)] bb^* + [-\beta (\cosh \theta \sinh \theta) + \gamma (\cosh^2 \theta + \sinh^2 \theta)] [b^2 + b^{*2}]. \quad (2.62)$$

Diagonalizar o Hamiltoniano significa reduzi-lo à forma $H = \varepsilon \cdot bb^*$. Para que isso ocorra, devemos escolher o valor de θ tal que os termos não diagonais se anulem. Essa condição implica

$$\beta (\cosh \theta \sinh \theta) = \gamma (\cosh^2 \theta + \sinh^2 \theta). \quad (2.63)$$

Utilizando as identidades trigonométricas hiperbólicas,

$$\cosh(2\theta) = \cosh^2(\theta) + \sinh^2(\theta); \quad (2.64)$$

$$\sinh(2\theta) = 2 \sinh(\theta) \cosh(\theta); \quad (2.65)$$

podemos escrever o $\cosh \theta$ em termos do $\sinh \theta$,

$$\cosh(2\theta) = \frac{\beta}{2\gamma} \sinh(2\theta). \quad (2.66)$$

e, pela relação dada pela equação 2.61,

$$\sinh(2\theta) = \left(\frac{\beta^2}{4\gamma^2} - 1 \right)^{-1/2}. \quad (2.67)$$

Assim, podemos substituir no coeficiente não nulo do Hamiltoniano o $\cosh \theta$ e o $\sinh \theta$ em termos de β e γ . Com isso, a Hamiltoniana de Bogoliubov finalmente pode ser escrita em sua forma diagonal,

$$H_{bog} = \varepsilon_k \cdot \hat{b} \hat{b}^\dagger, \quad (2.68)$$

onde

$$\varepsilon = \frac{1}{2\gamma} (\beta^2 - 4\gamma^2)^{1/2}. \quad (2.69)$$

2.3 Espectro de excitação para um sistema de Bósons fracamente interagentes

No artigo em que Bogoliubov desenvolveu seu método aproximativo pela primeira vez, ele buscava demonstrar fisicamente que um gás de Bose-Einstein pode exibir o fenômeno da superfluidez. Para isso, utilizou o método da segunda quantização combinado com seu procedimento de aproximação demonstrado na seção anterior.

No período em que Bogoliubov publicou seu trabalho, já era bem conhecida a ideia de Landau de postular a existência de excitações coletivas, fônons e rotons, para explicar o comportamento superfluido. Bogoliubov mostrou que, no caso de interações moleculares suficientemente pequenas, os estados de baixa excitação do gás podem ser descritos como um gás de Bose-Einstein perfeito composto por "quasi-partículas" que representam as excitações elementares.

A condensação de Bose-Einstein ocorre quando há uma ocupação macroscópica de um estado quântico quando o sistema é resfriado a temperaturas muito próximas do zero absoluto, ou seja, o número de partículas ocupando esse estado deve ser da ordem do número de Avogadro.

No caso ideal de um gás de bósons não interagentes, todas as partículas do sistema ocupam o mesmo estado quando a condensação ocorre, de modo que o número de partículas condensadas N_0 é exatamente igual ao número total de partículas do sistema ($N_0 = N$). Entretanto, se as partículas forem fracamente interagentes, essa relação é apenas aproximadamente válida, ou seja, grande parte das partículas do sistema está condensada, mas há uma pequena fração δN que se encontra em outros estados. Para aplicarmos o método de Bogoliubov vamos considerar um sistema de N moléculas monoatômicas idênticas fracamente interagentes em um volume macroscópico v , sujeitas à estatística de Bose-Einstein.

Sabendo que o número de partículas pode ser escrito em termos dos operadores de criação e aniquilação de acordo com a Eq. (2.23), torna-se conveniente separá-lo em um termo condensado ($i = 0$) e um termo não condensado ($i \neq 0$),

$$\hat{N} = \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_0 + \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k = N_0 + \delta N. \quad (2.70)$$

Como estamos tratando de uma ocupação macroscópica do estado condensado $N_0 \gg 1$. Agora, analisaremos como fica a relação de comutação de $\hat{a}_0^\dagger \hat{a}_0$ nesse caso,

$$\hat{a}_0^\dagger \hat{a}_0 |N_0\rangle = N_0 |N_0\rangle, \quad (2.71)$$

$$\hat{a}_0 \hat{a}_0^\dagger |N_0\rangle = (N_0 + 1) |N_0\rangle \approx N_0 |N_0\rangle \quad (2.72)$$

o que implica que

$$[\hat{a}_0^\dagger, \hat{a}_0] \approx 0 \quad (2.73)$$

Ou seja, para esse caso é razoável tratarmos \hat{a}_0^\dagger e \hat{a}_0 como apenas números ignorando sua não comutatividade,

$$\hat{a}_0^\dagger = \hat{a}_0 = \sqrt{N_0}. \quad (2.74)$$

Na ausência de potencial externo ($V(\mathbf{r}) = 0$), o Hamiltoniano do sistema, em termos do formalismo da segunda quantização, é escrita como

$$\hat{H} = \hat{H}_{cin} + \hat{H}_{int} \quad (2.75)$$

em que

$$\hat{H}_{cin} := -\frac{\hbar^2}{2m} \int d\mathbf{r} \nabla \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) \nabla \hat{\psi}(\mathbf{r}) \quad (2.76)$$

e

$$\hat{H}_{int} := \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}') U(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \hat{\psi}(\mathbf{r}) \hat{\psi}(\mathbf{r}'), \quad (2.77)$$

onde $U(\mathbf{r})$ é o potencial de interação entre os bósons.

Nosso objetivo daqui em diante será reescrever a Hamiltoniana desse sistema no formato de um Hamiltoniano de Bogoliubov. Este cálculo será realizado em duas etapas: resolveremos separadamente o termo cinético e, depois, o termo de interação. Como primeiro passo, vamos expandir os operadores de campo em termos das autofunções normalizadas do operador momento de uma partícula:

$$\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{p}} e^{-i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} / \hbar} \hat{a}_{\mathbf{p}}^\dagger, \quad (2.78)$$

$$\hat{\psi}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{p}} e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} / \hbar} \hat{a}_{\mathbf{p}}. \quad (2.79)$$

Substituindo as expansões (2.78) e (2.79) em (2.76), vale que

$$\begin{aligned} \hat{H}_{cin} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \int d\mathbf{r} \left(\frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{p}'} e^{-i\mathbf{p}' \cdot \mathbf{r} / \hbar} \hat{a}_{\mathbf{p}'}^\dagger \right) \nabla^2 \left(\frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{p}} e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} / \hbar} \hat{a}_{\mathbf{p}} \right) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2mV} \sum_{\mathbf{p}} \sum_{\mathbf{p}'} \hat{a}_{\mathbf{p}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{p}'} \int d\mathbf{r} e^{-i\mathbf{p}' \cdot \mathbf{r} / \hbar} \nabla^2 \left(e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} / \hbar} \right). \end{aligned} \quad (2.80)$$

A aplicação do laplaciano na função $e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar}$ resulta simplesmente na própria função vezes um fator $-\frac{p^2}{\hbar^2}$, portanto

$$\hat{H}_{cin} = \sum_{\mathbf{p}} \sum_{\mathbf{p}'} \frac{p^2}{2m\nu} \hat{a}_{\mathbf{p}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{p}'} \int d\mathbf{r} e^{i(\mathbf{p}-\mathbf{p}')\cdot\mathbf{r}/\hbar}. \quad (2.81)$$

Resolvendo a integral, chegamos à forma final da parte cinética da Hamiltoniano:

$$\hat{H}_{cin} = \sum_{\mathbf{p}} \sum_{\mathbf{p}'} \frac{p^2}{2m} \hat{a}_{\mathbf{p}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{p}'} \delta_{\mathbf{p}-\mathbf{p}',0} = \sum_{\mathbf{p}} \frac{p^2}{2m} \hat{a}_{\mathbf{p}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{p}}. \quad (2.82)$$

Seguindo o mesmo procedimento adotado para o termo cinético, substituímos os operadores (2.78) e (2.79) na parte de interação da Hamiltoniana:

$$\hat{H}_{int} = \frac{1}{2\nu^2} \sum_{\mathbf{p}_1} \hat{a}_{\mathbf{p}_1}^\dagger \sum_{\mathbf{p}_2} \hat{a}_{\mathbf{p}_2}^\dagger \sum_{\mathbf{p}_3} \hat{a}_{\mathbf{p}_3} \sum_{\mathbf{p}_4} \hat{a}_{\mathbf{p}_4} \int d\mathbf{r} e^{i(-\mathbf{p}_1+\mathbf{p}_3)\cdot\mathbf{r}/\hbar} \int d\mathbf{r}' U(\mathbf{r}-\mathbf{r}') e^{i(-\mathbf{p}_2+\mathbf{p}_4)\cdot\mathbf{r}'/\hbar}. \quad (2.83)$$

Se introduzirmos a coordenada relativa $\mathbf{R} = \mathbf{r}' - \mathbf{r}$, a integral sobre r' pode ser reescrita como proporcional à transformada de Fourier do potencial $\tilde{U}_{-\mathbf{p}_2+\mathbf{p}_4}$.

$$\begin{aligned} \int d\mathbf{r}' U(\mathbf{r}-\mathbf{r}') e^{i(-\mathbf{p}_2+\mathbf{p}_4)\cdot\mathbf{r}'/\hbar} &= e^{i(-\mathbf{p}_2+\mathbf{p}_4)\cdot\mathbf{r}/\hbar} \int d\mathbf{R} U(\mathbf{R}) e^{i(-\mathbf{p}_2+\mathbf{p}_4)\cdot\mathbf{R}/\hbar} \\ &= \tilde{U}_{-\mathbf{p}_2+\mathbf{p}_4} e^{i(-\mathbf{p}_2+\mathbf{p}_4)\cdot\mathbf{r}/\hbar} \end{aligned} \quad (2.84)$$

Portanto,

$$\begin{aligned} \hat{H}_{int} &= \frac{1}{2\nu^2} \sum_{\mathbf{p}_1} \hat{a}_{\mathbf{p}_1}^\dagger \sum_{\mathbf{p}_2} \hat{a}_{\mathbf{p}_2}^\dagger \sum_{\mathbf{p}_3} \hat{a}_{\mathbf{p}_3} \sum_{\mathbf{p}_4} \hat{a}_{\mathbf{p}_4} \tilde{U}_{-\mathbf{p}_2+\mathbf{p}_4} \int d\mathbf{r} e^{i(-\mathbf{p}_1-\mathbf{p}_2+\mathbf{p}_3+\mathbf{p}_4)\cdot\mathbf{r}/\hbar} \\ &= \frac{1}{2\nu} \sum_{\mathbf{p}_1} \sum_{\mathbf{p}_2} \sum_{\mathbf{p}_3} \sum_{\mathbf{p}_4} \hat{a}_{\mathbf{p}_1}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{p}_2}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{p}_3} \hat{a}_{\mathbf{p}_4} \tilde{U}_{-\mathbf{p}_2+\mathbf{p}_4} \delta_{-\mathbf{p}_1-\mathbf{p}_2+\mathbf{p}_3+\mathbf{p}_4,0} \end{aligned} \quad (2.85)$$

Vamos agora analisar individualmente cada caso da soma, considerando a restrição imposta pela função delta de que os termos não nulos devem satisfazer $p_3 + p_4 - p_1 - p_2 = 0$.

Termo condensado	1	$p_1 = p_2 = p_3 = p_4 = 0$ $\frac{\tilde{U}_0}{2v} \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_0 \hat{a}_0$
Termos antissimétricos	2	$p_1 = p_2 = 0; p_3 = p = -p_4$ $\frac{\tilde{U}_{-p}}{2v} \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_0^\dagger \sum_{p \neq 0} \hat{a}_p \hat{a}_{-p}$
	3	$p_3 = p_4 = 0; p_1 = p = -p_2$ $\frac{\tilde{U}_p}{2v} \hat{a}_0 \hat{a}_0 \sum_{p \neq 0} \hat{a}_p^\dagger \hat{a}_{-p}^\dagger$
Termos simétricos	4	$p_1 = p_3 = 0; p_2 = p_4 = p$ $\frac{\tilde{U}_{-p}}{2v} \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_0 \sum_{p \neq 0} \hat{a}_p^\dagger \hat{a}_p$
	5	$p_1 = p_4 = 0; p_2 = p_3 = p$ $\frac{\tilde{U}_{-p}}{2v} \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_0 \sum_{p \neq 0} \hat{a}_p^\dagger \hat{a}_p$
	6	$p_2 = p_3 = 0; p_1 = p_4 = p$ $\frac{\tilde{U}_p}{2v} \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_0 \sum_{p \neq 0} \hat{a}_p^\dagger \hat{a}_p$
	7	$p_2 = p_4 = 0; p_1 = p_3 = p$ $\frac{\tilde{U}_0}{2v} \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_0 \sum_{p \neq 0} \hat{a}_p^\dagger \hat{a}_p$

Tabela 1 – Classificação dos termos da interação \hat{H}_{int} por categoria

Utilizando a definição para os operadores de criação e aniquilação dada na equação 2.74 nos termos contidos na Tabela 1 podemos reescrever a H_{int} da seguinte forma

$$\hat{H}_{int} = \frac{\tilde{U}_0 N_0^2}{2v} + \sum_{p \neq 0} \frac{\tilde{U}_p N_0}{2v} \left(\hat{a}_p^\dagger \hat{a}_{-p}^\dagger + \hat{a}_p \hat{a}_{-p} + 4\hat{a}_p^\dagger \hat{a}_p \right) \quad (2.86)$$

Usando a Eq. (2.70) vamos expandir N_0 em termos de N e δN , pelo argumento de que grande parte das partículas do sistema está condensada iremos desprezar termos com potências maiores que um de δN , de modo que

$$\hat{H} = \frac{\tilde{U}_0 \rho N}{2} + \sum_{p \neq 0} \left(\frac{p^2}{2m} + \frac{\tilde{U}_p \rho}{v} \right) \hat{a}_p^\dagger \hat{a}_p + \sum_{p \neq 0} \frac{\tilde{U}_p \rho}{2v} \left(\hat{a}_p^\dagger \hat{a}_{-p}^\dagger + \hat{a}_p \hat{a}_{-p} \right). \quad (2.87)$$

Comparando com hamiltoniano de Bogoliubov, temos

$$\beta = \frac{p^2}{2m} + \frac{g\rho}{v}; \quad (2.88)$$

$$\gamma = \frac{g\rho}{2v}. \quad (2.89)$$

Substituindo essa definição de β e γ na equação 2.69, obtemos que

$$\varepsilon_k = \left[\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} \right) \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + 2\rho \tilde{U}_k \right) \right]^{1/2}. \quad (2.90)$$

2.4 Critério de Landau

Landau mostrou que, desde que o espectro de excitação cumpra determinadas condições, o fluido pode se mover sem dissipar energia (Landau, 2018). Veremos que essa condição relaciona superfluidez a condensados de Bose-Einstein por meio do comportamento da dispersão de Bogoliubov.

Um fluido comum sofre forças de atrito com a paredes do recipiente em que está contido, e entre partes do próprio fluido, convertendo parte da energia cinética em energia térmica. O superfluido, no entanto, caracteriza-se por apresentar viscosidade nula, o que significa que a dissipação clássica de energia não ocorre. Se o fluido perde sua característica de superfluidez, o cisalhamento entre partes do fluido será possível, o que permite que ocorram ondulações de densidade no fluido, e isso ocorre se há criação espontânea de quasipartículas. Portanto, o critério para determinar se a energia do superfluido pode ser dissipada consiste em verificar se é energeticamente possível a criação espontânea de quasipartículas.

Consideremos que esse fluido em questão possui um espectro de excitação ε_k , que corresponde à relação energia-momento no referencial de repouso do superfluido. O próximo passo é analisar se a energia e o momento são conservados em um processo de criação de uma quasipartícula.

As quasipartículas são criadas espontaneamente quando $\varepsilon_{p(lab)}$ atinge seu valor mínimo. $\varepsilon_{p(lab)}$ só se torna negativa quando a energia de excitação no referencial do laboratório,

$$\varepsilon_{p(lab)} = \varepsilon_{p(fluid)} - \mathbf{p} \cdot \mathbf{w} \quad (2.91)$$

satisfaz a condição

$$\varepsilon_{p(fluid)} - \mathbf{p} \cdot \mathbf{w} < 0 \quad (2.92)$$

O valor máximo de $\mathbf{p} \cdot \mathbf{w}$ ocorre quando \mathbf{w} e \mathbf{p} são paralelos, o que implica que

$$\frac{\mathcal{E}_{p(fluid)}}{p} < w \quad (2.93)$$

A velocidade crítica é definida como o menor quociente entre a energia das excitações $\mathcal{E}_{p(fluid)}$ e seu momento p , considerando todos os momentos p possíveis.

$$w_{crit} = \min_p \frac{\mathcal{E}_{p(fluid)}}{p} \quad (2.94)$$

Abaixo da velocidade crítica, não há maneira de criar quasipartículas e ao mesmo tempo manter a conservação da energia. Se a velocidade do fluido for maior que a velocidade crítica, isso indica que o fluido possui energia suficiente para criar excitações rotacionais, ou seja, para superar o gap de energia entre o estado superfluido e o estado normal

Aplicando o espectro de energia para bósons não interagentes na definição de velocidade crítica, obtemos:

$$w_{crit} = \min_p \left(\frac{p^2}{2mp} \right) = \min_p \left(\frac{p}{2m} \right) = 0 \quad (2.95)$$

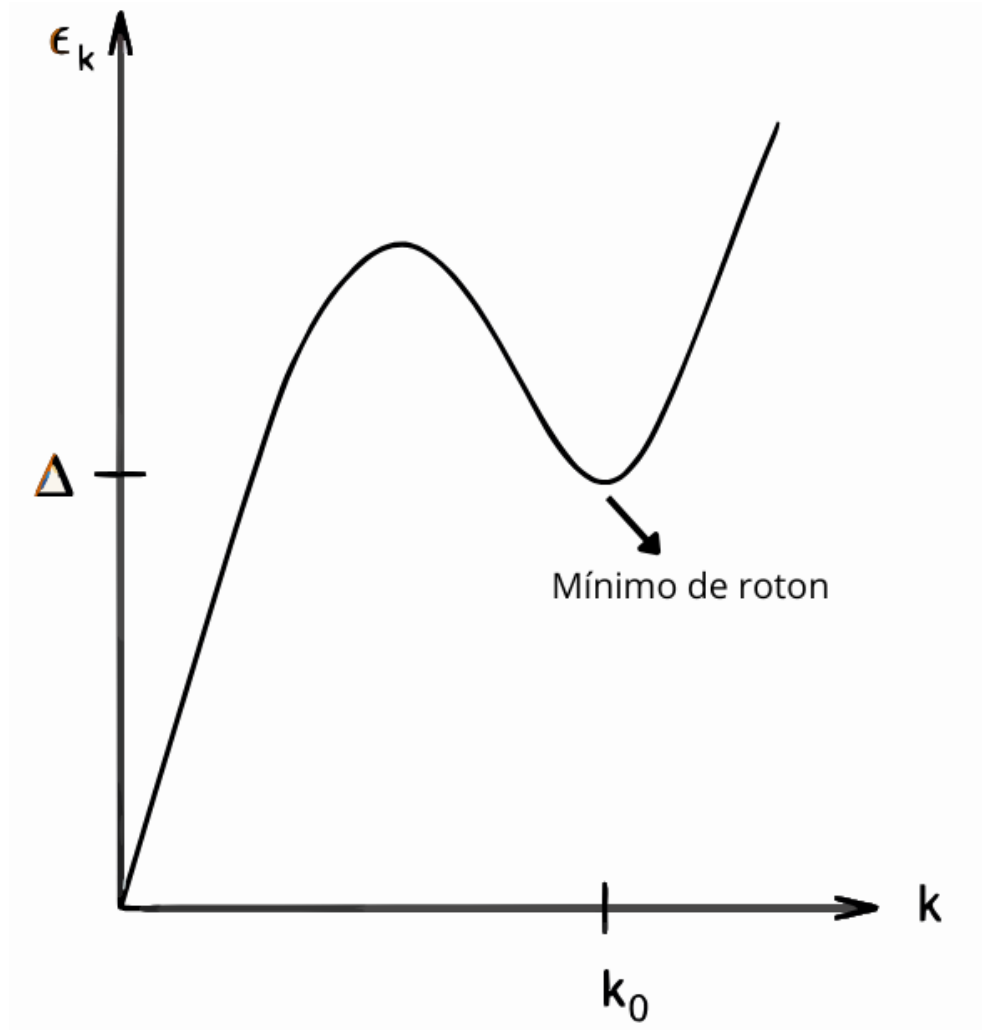
Desta relação, conclui-se que condensados de Bose-Einstein não interagentes não podem exibir superfluidez, pois qualquer fluxo com velocidade $v > 0$ seria suficiente para causar dissipação de energia.

Portanto, para estudar superfluidos precisamos tratar de um condensado de bósons interagentes: a determinação da velocidade crítica para a superfluidez do sistema é determinado o espectro de excitações no referencial do fluido em repouso descrito pela relação de dispersão de Bogoliubov dada pela Eq. (1).

$$w_{crit} = \min_p \left(\left[\left(\frac{1}{2m} \right) \left(\frac{p^2}{2m} + 2\rho\tilde{U} \right) \right]^{1/2} \right) \quad (2.96)$$

O aparecimento de um estado cristalino está relacionado à presença de um mínimo local no gráfico do espectro de excitações do sistema em um vetor de onda finito $k \neq 0$, como ilustrado na Figura 1. Dessa forma, se quisermos estudar esse estado superfluido devemos escolher parâmetros que reproduzam essa condição. Nessa equação de dispersão, o único parâmetro que pode assumir valores negativos é a transformada de Fourier do potencial, ou seja, os valores mínimos dessa equação vão ser determinados a partir de \tilde{U} , o tamanho desse mínimo também é determinado pela densidade do fluido ρ .

Figura 1 – Espectro de excitação de um sistema superfluido, para o qual há um comportamento linear $\epsilon_k \sim k$ que domina em momentos baixos, enquanto um mínimo de energia (mínimo do roton) ocorre no momento de energia Δ



Fonte: adaptado de (Pethick; Smith, 2008).

2.5 Equação de Gross-Pitaevskii

A equação de Gross-Pitaevskii fornece uma descrição para um gás diluído sujeito à estatística de Bose-Einstein em baixas temperaturas. Para essa descrição, usa-se a aproximação de Bogoliubov de que a maior parte das partículas se encontra no estado fundamental e, portanto, os operadores de criação e aniquilação podem ser considerados números reais. Com isso, o operador de campo dado na Eq. (2.50) é simplesmente substituído por um campo clássico $\psi(\mathbf{r})$, chamado de parâmetro de ordem ou função de onda do condensado.

Aplicando a substituição do operador de campo pelo parâmetro de ordem clássico no Hamiltoniano expresso em termos dos operadores de campo, Eq. (2.52), obtemos o funcional

de energia para o sistema:

$$E[\psi] = \int dx \left(\frac{\hbar^2}{2m} \left| \frac{d\psi(x)}{dx} \right|^2 + V(x) |\psi(x)|^2 + |\psi(x)|^2 \int_{-\infty}^{\infty} U(x-x') |\psi(x')|^2 dx' \right), \quad (2.97)$$

onde V representa um possível potencial externo, normalmente usado para aprisionar os bósons em uma região do espaço.

Para garantir que a conservação do número total de partículas N seja satisfeita, a função de onda do condensado precisa ser normalizada:

$$N = \int dx |\psi(x)|^2. \quad (2.98)$$

Para incorporar essa restrição no funcional de energia, utilizamos o método dos multiplicadores de Lagrange:

$$F[\psi] = E[\psi] - \mu N. \quad (2.99)$$

O estado fundamental corresponde à energia mínima e, portanto, é encontrado minimizando o funcional de energia:

$$\frac{\delta F}{\delta \psi^*} = 0. \quad (2.100)$$

Tratando ψ e ψ^* como variáveis independentes no cálculo variacional, obtemos a equação de Gross-Pitaevskii independente do tempo:

$$\left(\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) + \int_{-\infty}^{\infty} U(x-x') |\Psi(x')|^2 dx' \right) \Psi(x) = \mu \Psi(x). \quad (2.101)$$

$$\left(\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right) \Psi(x) = \mu \Psi(x). \quad (2.102)$$

Nas próximas seções, trataremos a equação de Gross-Pitaevskii incorporando o termo não linear ao potencial $V(x)$, reescrevendo-o como:

$$V(x) \rightarrow V(x) + \int_{-\infty}^{\infty} U(x-x') |\Psi(x')|^2 dx'. \quad (2.103)$$

Dessa forma, todo o tratamento numérico será realizado utilizando uma equação equivalente à equação de Schrödinger independente do tempo, mas com um potencial modificado que inclui um termo não-linear.

3 METODOLOGIA NUMÉRICA

Nesta seção, descrevemos as principais técnicas numéricas empregadas na construção do nosso modelo. O método parte da discretização da equação de Schrödinger, realizada por meio de diferenças finitas, que converte os operadores diferenciais para uma representação matricial utilizada para a evoluir a função de onda em tempo imaginário.

3.1 Método das diferenças finitas

A descrição matemática dos fenômenos físicos é tradicionalmente expressa através de equações diferenciais. Entretanto, a complexidade de muitos desses problemas torna frequentemente impossível ou impraticável a obtenção de soluções analíticas exatas, tornando-se necessárias abordagens numéricas. O método das diferenças finitas (MDF) é uma técnica de discretização que baseia-se em operações aritméticas básicas e expansões em série de Maclaurin. Essa simplicidade torna o método atraente para discretização e resolução de equações diferenciais em diversos contextos, tanto lineares quanto não-lineares, independentes ou dependentes do tempo (Powell, 2002; Maia; Gasparetto, 2003; Fuls; Mathews, 2004; Mattsson; Nordström, 2006; Moczo *et al.*, 2007; Leveque, 2007; Böhmer, 2010; Monserrat, 2018). Tem-se mostrado particularmente eficaz na solução numérica da equação de Schrödinger como demonstrado em (Soriano *et al.*, 2004; Simos, 1998; Rossman *et al.*, 2020; Delfour *et al.*, 1981).

Por simplicidade, transformaremos a equação de Schrödinger independente do tempo para sua forma adimensional tomando as substituições:

$$\frac{\hbar^2}{2m} = Ry \cdot r_{Bohr}^2; \quad (3.1)$$

$$\bar{x} = \frac{x}{r_{Bohr}}; \quad (3.2)$$

$$\bar{V} = \frac{V}{Ry}; \quad (3.3)$$

$$\bar{E} = \frac{E}{Ry}. \quad (3.4)$$

$$(3.5)$$

Assim, a equação que buscamos discretizar é

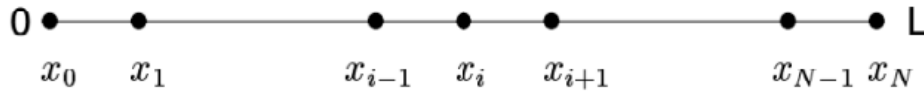
$$-\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x). \quad (3.6)$$

A primeira etapa para aplicar o método de diferenças finitas é discretizar o domínio. Para isso, dividimos esse intervalo em um número específico (\mathcal{N}) de pontos, e cada ponto será identificado por um número natural j multiplicado por um espaçamento uniforme de Δx ,

$$x_j = j * \Delta x \quad (3.7)$$

A Figura 2 ilustra essa discretização, mostrando a distribuição uniforme dos pontos no intervalo $[0, L]$.

Figura 2 – Domínio unidimensional discretizado com \mathcal{N} de pontos espaçados uniformemente em um intervalo $[0, L]$



Fonte: Retirado de (Fontana, 2019).

A série de Maclaurin de uma função $\psi_{i+1} = \psi(x_{j=i+1})$ é definida como

$$\psi_{i+1} = \psi_i + (x_{i+1} - x_i) \left. \frac{d\psi}{dx} \right|_{x=x_i} + \frac{(x_{i+1} - x_i)^2}{2!} \left. \frac{d^2\psi}{dx^2} \right|_{x=x_i} + \frac{(x_{i+1} - x_i)^3}{3!} \left. \frac{d^3\psi}{dx^3} \right|_{x=x_i} + \dots \quad (3.8)$$

e para o ponto anterior x_{i-1} como

$$\psi_{i-1} = \psi_i + (x_{i-1} - x_i) \left. \frac{d\psi}{dx} \right|_{x=x_i} + \frac{(x_{i-1} - x_i)^2}{2!} \left. \frac{d^2\psi}{dx^2} \right|_{x=x_i} + \frac{(x_{i-1} - x_i)^3}{3!} \left. \frac{d^3\psi}{dx^3} \right|_{x=x_i} + \dots \quad (3.9)$$

.

Subtraindo a Eq. (3.9) da Eq. (3.8), obtemos

$$\psi_{i+1} - \psi_{i-1} = \left[(x_{i+1} - x_{i-1}) + \frac{(x_{i+1} - x_{i-1})^2}{2!} + \frac{(x_{i+1} - x_{i-1})^3}{3!} + \dots \right] \left. \frac{d\psi}{dx} \right|_{x=x_i} \quad (3.10)$$

$$(3.11)$$

No caso em que a diferença entre os pontos do domínio discretizado é muito pequena, os termos de ordem superior na série podem ser desprezados. Isso nos permite truncar a Eq. (3.11) em primeira ordem e com isso obter uma aproximação a derivada primeira na forma

$$\left. \frac{d\psi}{dx} \right|_{x=x_i} \approx \frac{\psi_{i+1} - \psi_{i-1}}{x_{i+1} - x_{i-1}}. \quad (3.12)$$

Essa expressão é conhecida como a aproximação por diferenças finitas centradas.

Para calcular a segunda derivada, somamos as Eqs. (3.9) e (3.8) e truncamos a expressão resultante em segunda ordem obtendo que a segunda derivada em x_i é

$$\left. \frac{d^2 \psi}{dx^2} \right|_{x=x_i} \approx \frac{\psi_{i+1} - 2\psi_i + \psi_{i-1}}{x_{i+1} - x_{i-1}}. \quad (3.13)$$

A aplicação da Eq.(3.13) em Eq.(3.6), resultando em uma forma discretizada da equação de Schrödinger dada por

$$-\left(\frac{\psi_{i+1} - 2\psi_i + \psi_{i-1}}{\Delta x^2} \right) + V_i \psi_i = E \psi_i, \quad (3.14)$$

para cada ponto x_i no domínio discretizado.

3.1.1 Construção dos operadores

Nesta seção, utilizamos o método das diferenças finitas para discretizar os operadores de energia cinética (K) e energia potencial (V), obtendo suas representações matriciais.

Vamos supor um problema em que as partículas estão confinadas a se mover dentro de um certo domínio, discretizado usando MDF em \mathcal{N} pontos. Para resolver a equação de Schrödinger em uma região limitada, as condições precisam garantir que a função de onda seja nula nos limites do domínio. Em termos práticos, as condições são:

$$\psi_0 = 0 \quad \text{e} \quad \psi_N = 0. \quad (3.15)$$

Podemos escrever a equação 3.14 na forma

$$\left(\frac{2}{\Delta x^2} \right) \psi_i + \left(\frac{-1}{\Delta x^2} \right) (\psi_{i+1} + \psi_{i-1}) + V_i \psi_i = E \psi_i \quad (3.16)$$

Expandindo em termos dos índices, podemos resumir a Eq. (3.16) como a soma dos operadores \hat{K} e \hat{V} definidos na forma matricial.

O operador \hat{K} , obtido pela implementação do MDF no termo $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}$, assume a forma de uma matriz tridiagonal:

$$\hat{K} = \frac{1}{\Delta x^2} \begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 2 \end{bmatrix}. \quad (3.17)$$

onde os termos não nulos estão concentrados na diagonal principal e nas subdiagonais adjacentes. O operador \hat{V} , obtido pela implementação do MDF no termo $V(x)$, por sua vez, é uma matriz diagonal,

$$\hat{V} = \begin{bmatrix} V_1 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & V_2 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & V_3 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & V_4 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & V_N \end{bmatrix}. \quad (3.18)$$

Tendo construído as representações matriciais dos operadores, na seção 3.2 usaremos essas representações para descrever a evolução temporal dos estados quânticos.

3.2 Decomposição de Suzuki-Trotter

As exponenciais de operadores são onipresentes em mecânica quântica, pois são capazes de representar rotações e translações espaciais e temporais. Embora na mecânica quântica o tempo seja tratado como um parâmetro e não como um operador, o Postulado 2.1.6 estabelece a noção de uma evolução temporal de um estado quântico descrita pela ação de um operador. Dessa forma, surge a ideia de definir um operador de evolução temporal de um sistema quântico, expresso pela Eq. (3.19).

$$\hat{T} = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\delta t \hat{H}\right) \quad (3.19)$$

Este operador satisfaz as propriedades:

$$\hat{T}^\dagger \hat{T} = \mathbb{I} \quad (3.20)$$

$$\hat{T}(t_1 + t_2) = \hat{T}(t_1)\hat{T}(t_2). \quad (3.21)$$

As propriedades descritas pelas Eqs. (3.21) e (3.20) garantem a conservação da norma dos estados quânticos durante a evolução temporal, assegurando que a interpretação probabilística da mecânica quântica seja preservada, e também estabelecem que aplicações sucessivas de translações temporais se combinam aditivamente.

Com isso, pode-se demonstrar que este operador fornece uma descrição equivalente à equação de Schrödinger tradicional. A demonstração pode ser encontrada no capítulo 2 de (Sakurai; Napolitano, 2013).

A Eq. (2.7) pode ser escrita em termos dos operadores de \hat{K} e \hat{V} considerando $\hat{H} = \hat{K} + \hat{V}$. Como já discutimos nas seções anteriores, esses operadores em geral não comutam, ou seja:

$$[\hat{K}, \hat{V}] = \hat{K}\hat{V} - \hat{V}\hat{K} \neq 0. \quad (3.22)$$

Esta não-comutatividade implica que a exponencial da soma não pode ser simplesmente fatorada, então

$$e^{-\frac{i}{\hbar}(\hat{K}+\hat{V})t} \neq e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{K}t} e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{V}t}. \quad (3.23)$$

A diferença entre estas expressões é dada pela fórmula de Baker-Campbell-Hausdorff (Zhang, 2017), que para intervalos de tempo δt resulta em:

$$e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{K}\delta t} e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{V}\delta t} = e^{-\frac{i}{\hbar}(\hat{K}+\hat{V})\delta t + \frac{i}{2\hbar}[\hat{K}, \hat{V}]\delta t^2 + \dots} \quad (3.24)$$

Dado um operador \hat{A} , sua exponencial pode ser expandida em série de Taylor como

$$e^{\hat{A}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\hat{A}^n}{n!} = \mathbb{I} + \hat{A} + \frac{\hat{A}^2}{2!} + \dots. \quad (3.25)$$

Com isso, podemos usar o método de Decomposição de Suzuki-Trotter para afirmar que o produto das exponenciais dos operadores é aproximadamente igual à exponencial da soma deles. Para os fins deste trabalho será mais conveniente usar a Decomposição de Suzuki-Trotter de segunda ordem, caso em que ao escrevermos os produtos simetricamente as exponenciais de T e V . Utilizando a Eq.(3.25) para os coeficientes simetrizados,

$$e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{\hat{V}t}{2n}} e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{\hat{K}\delta t}{n}} e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{\hat{V}\delta t}{2n}} = \mathbb{I} - \frac{i}{\hbar} \frac{(\hat{K} + \hat{V})\delta t}{n} + \mathcal{O}\left(\frac{\delta t^2}{n^2}\right) \quad (3.26)$$

e elevamos o produto das expansões até primeira ordem, a n, pode-se escrever a Eq. (3.26) como sendo uma expansão binomial:

$$e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{V}t} e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{K}\delta t} e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{V}\delta t} \approx \left(\mathbb{I} - \frac{i}{\hbar} \frac{(\hat{K} + \hat{V})\delta t}{n} \right)^n = \sum_{k=0}^n \frac{n!}{k!(n-k)!} \left(-\frac{i}{\hbar} \frac{(\hat{K} + \hat{V})\delta t}{n} \right)^k \mathbb{I}^{(n-k)} \quad (3.27)$$

$$= \sum_{k=0}^n \frac{1}{k!} \left(1 - \frac{1}{n} \right) \left(1 - \frac{2}{n} \right) \dots \left(1 - \frac{(k+1)}{n} \right) \left(-\frac{i}{\hbar} (\hat{K} + \hat{V})\delta t \right)^k. \quad (3.28)$$

Dessa forma, para o limite $n \rightarrow \infty$ concluímos que:

$$e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{V}\delta t}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{K}\delta t}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{V}\delta t} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \left(-\frac{i}{\hbar}(\hat{K} + \hat{V})\delta t \right)^k. \quad (3.29)$$

Reconhecendo forma a expansão da série de Taylor do operador de evolução temporal na (Eq. 3.29), obtemos a forma final da aproximação simétrica:

$$e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{V}\delta t}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{K}\delta t}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{V}\delta t} \approx e^{-\frac{i}{\hbar}(\hat{K} + \hat{V})\delta t}. \quad (3.30)$$

Assim, a evolução de um estado quântico pode ser aproximada para

$$\psi(x, t + \delta t) \approx \exp\left(\frac{-i}{2\hbar}\delta t V\right) \exp\left(\frac{-i}{\hbar}\delta t T\right) \exp\left(\frac{-i}{2\hbar}\delta t V\right) \psi(x, t). \quad (3.31)$$

Veremos nas próximas seções que isso vai nos permitir reduzir o processo de solução da equação de Schrödinger dependente do tempo à resolução de sistemas matriciais para cada intervalo de tempo.

3.2.1 Evolução temporal em tempo imaginário

Na descrição analítica, os operadores possuem o fator $\frac{i}{\hbar}$, e por causa disso teríamos que tratar todo o problema em termos de variáveis complexas. Para ignorarmos a natureza complexa do operador nos cálculos numéricos, realizamos a substituição $\delta\tau = i \cdot \delta t$, portanto, a evolução temporal em tempo imaginário é expressa como

$$\psi(x, \tau + \delta\tau) \approx \exp\left(\frac{-1}{2\hbar}\delta\tau V\right) \exp\left(\frac{-1}{\hbar}\delta\tau K\right) \exp\left(\frac{-1}{2\hbar}\delta\tau V\right) \psi(x, \tau). \quad (3.32)$$

Note que calcular a evolução temporal é correspondente a aplicação de três operadores exponenciais em $\psi(x, \tau)$. Para determinar $\psi(x, \tau + \delta\tau)$, dividimos o processo em três passos, cada um envolvendo a aplicação de um termo exponencial presente na Eq. (3.32).

1. A primeira aplicação é feita pelo operador $\exp\left(\frac{-1}{2\hbar}\delta\tau V\right)$, definido pela variável σ ,

$$\sigma = \exp\left(\frac{-1}{2\hbar}\delta\tau V\right) \psi(x, \tau). \quad (3.33)$$

Usando a definição matricial de V dada na Eq.(3.18) o esse passo se reduz a multiplicação de uma matriz diagonal(V) por uma matriz coluna correspondente ao estado ψ .

2. A segunda aplicação é feita pelo operador $\exp\left(\frac{-1}{\hbar}\delta\tau K\right)$ em σ , definido pela variável ζ

$$\zeta = \exp\left(\frac{-i}{\hbar}\delta t K\right) \sigma, \quad (3.34)$$

onde se simetrizarmos ζ e aplicarmos a Decomposição de Suzuki-Trotter de segunda ordem, teremos

$$\exp\left(\frac{-1}{\hbar}\delta\tau K\right)\varepsilon \approx \left(\frac{e^{-\frac{1}{2\hbar}\hat{K}\delta\tau}}{e^{\frac{1}{2\hbar}\hat{K}\delta\tau}}\right)\varepsilon. \quad (3.35)$$

Utilizando a Eq.(3.25) para os coeficientes simetrizados, e aproximando em primeira ordem, obtemos

$$\zeta\left(1 + \frac{1}{2\hbar}\delta\tau K\right) \approx \left(1 - \frac{1}{2\hbar}\delta\tau K\right)\sigma \quad (3.36)$$

Dada a definição matricial de K dada na Eq.(3.17) e a variável σ obtida pelo passo 2 ζ pode ser obtido através solução do sistema matricial descrito pela a Eq. (3.36).

3. A última aplicação é feita pelo operador $\exp\left(\frac{-1}{2\hbar}\delta\tau V\right)$ em ζ , resultando finalmente em $\psi(x, t + \delta t)$.

Conforme provado em (Chaves *et al.*, 2015), uma função de onda inicial arbitrária, quando propagada no tempo, necessariamente converge para a função de onda do estado fundamental à medida que τ tende ao infinito.

4 RESULTADOS

Neste capítulo, discutimos uma escolha de potencial que permite observar modulação periódica na densidade de um superfluido alcançada na condição de formação de um mínimo de roton na relação de dispersão calculada no Capítulo 2.

Além disso, utilizando a equação de Gross-Pitaevskii simplificada definida pela Eq.(2.103), investigamos como esse sistema se comporta no estado fundamental. A solução numérica desta equação foi obtida através da propagação em tempo imaginário, cujo o método numérico foi desenvolvido no Capítulo 3 deste trabalho.

Com isso, nossos resultados mostram que a escolha do potencial induz interações negativas que criam um mínimo de roton. A implementação do método numérico revela modulações periódicas na densidade a partir de certos valores de potencial, caracterizando o surgimento de um estado supersólido.

4.1 Potencial Generalizado

Considerando o caso particular em que o potencial de interação entre partículas é um potencial de contato,

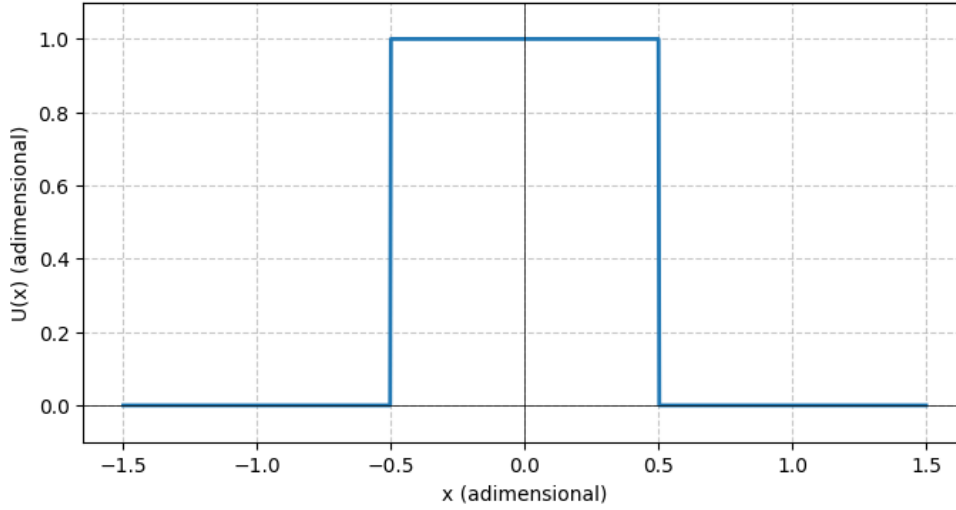
$$g\delta(x), \tag{4.1}$$

a equação de Gross-Pitaevskii fornece uma descrição simples para condensados de Bose-Einstein, com uma solução constante. Porém, essa escolha apresenta um problema quando desejamos estudar a cristalização no estado superfluido. Como discutido no Capítulo 2, para que ocorra cristalização, a transformada de Fourier do potencial de interação deve assumir valores negativos em algum intervalo de k , pois é a condição necessária para o surgimento de um mínimo de roton no espectro de Bogoliubov. O problema é que a transformada de Fourier do potencial de contato $g\delta(x)$ é simplesmente a constante positiva g , que não pode produzir um mínimo de roton.

Com isso, para estudar a cristalização no estado superfluido propomos uma generalização do potencial de interação como a soma do termo de contato com um potencial *soft-core*.

Consideramos neste trabalho como potencial *soft-core* uma função retangular centrada na origem com intensidade constante U_0 dentro de um intervalo de largura $2a$ e que se anula fora desta região, como ilustrado na Figura 3.

Figura 3 – Representação espacial da função barreira para o caso em que o potencial tem intensidade constante igual 1 dentro do intervalo $[-0.5, 0.5]$ e 0 fora desta região.



Fonte: Produzido pelo autor.

Com isso, o potencial generalizado assume a forma:

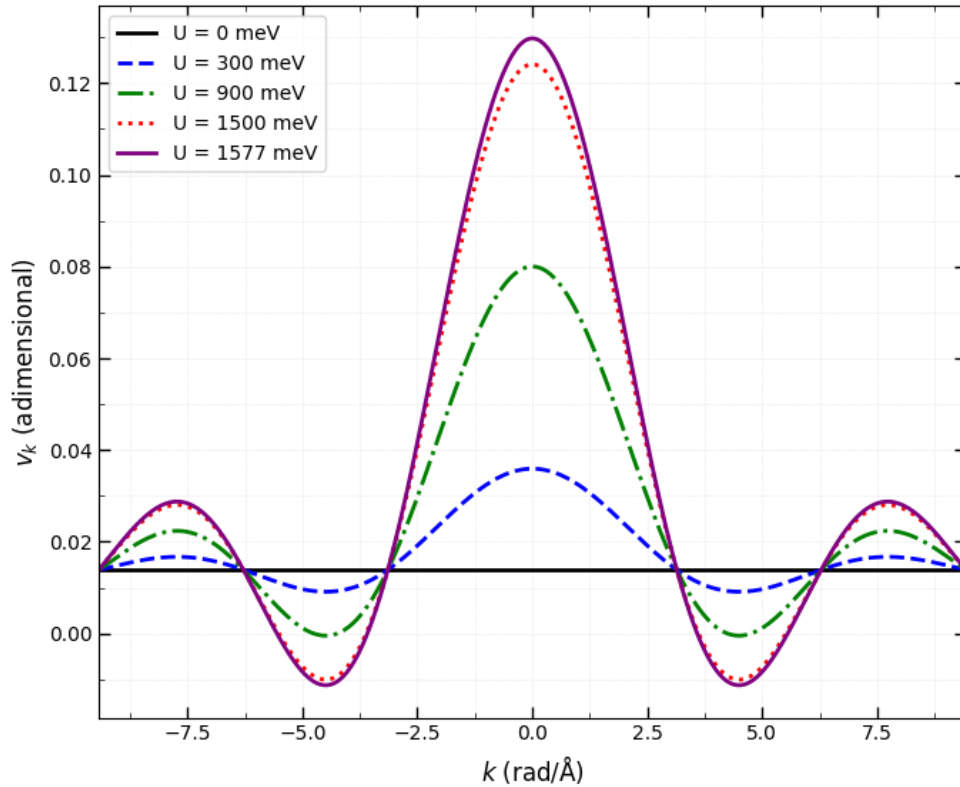
$$U = g\delta(x) + U_0 \text{rect}\left(\frac{x}{a}\right), \quad (4.2)$$

A transformada de Fourier deste potencial generalizado resulta em:

$$\tilde{U}(k) = g + U_0 a \text{sinc}(\pi k a), \quad (4.3)$$

com $\text{sinc}(x) \equiv \sin(x)/x$. A Figura 4 ilustra o comportamento da transformada de Fourier deste potencial, mostrando que contribuição oscilatória do termo *soft-core* permite a existência de regiões com valores negativos. Na implementação numérica $\tilde{U}(k)$ é incorporado à evolução temporal através da transformada rápida de Fourier (FFT) e, em seguida para aplicação do operador em termos da energia cinética retornamos ao espaço das posições pela transformada rápida de Fourier inversa (IFFT). Neste trabalho não irei entrar em detalhes dessa técnica pelo fato de sua implementação em Python ser bem direta, para informações detalhadas consulte (SciPy Community, 2024).

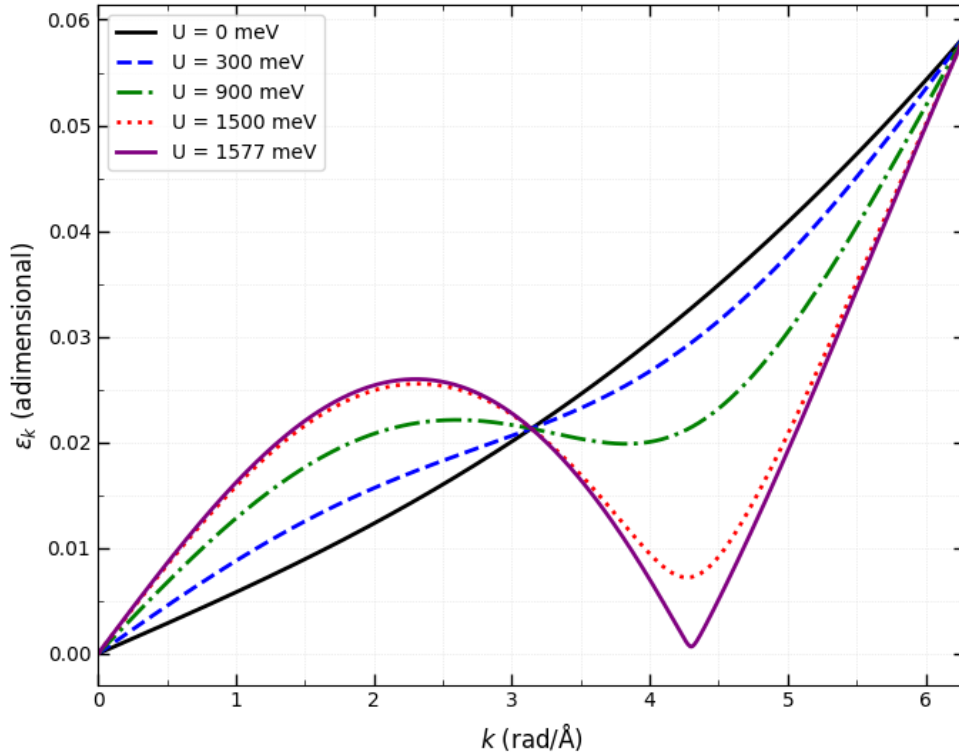
Figura 4 – Transformada de Fourier do potencial generalizado em função de k para $g = 100$, $a = 1$ e para $U_0 = 0$ (preta), 300 (azul), 900 (verde) e 1500 (vermelha) e 1577 (roxa).



Fonte: Produzido pelo autor.

No Capítulo 2, mostramos que o espectro de excitações é dado pela Eq.(2.69). Ao aplicarmos a transformada de Fourier do potencial generalizado nessa equação e plotando a energia do espectro de Bogoliubov para este potencial, encontramos o comportamento descrito na Figura 5, o qual exibe de fato uma parte linear em momentum baixo (também conhecido como estado de fônon do espectro) e um mínimo de roton.

Figura 5 – Gráfico do espectro de excitação de Bogoliubov para $g = 100$, $a = 1$, $\rho = 1$, $m = 1$ e para $U_0 = 0$ (preta), 300 (azul), 900 (verde) e 1500 (vermelha) e 1577 (roxa).



Fonte: Produzido pelo autor.

Note que os valores de mínimo local no gráfico de dispersão ocorrem para $|k|$ entre 3 rad/Å e 6 rad/Å, correspondente ao intervalo transformada de Fourier do potencial generalizado ilustrado na Figura 5 assume valores imaginários, assim como esperado no desenvolvimento teórico. Além disso, o valor de $U_0 = 1577$ meV é o limite antes que o ε_k torne-se imaginário.

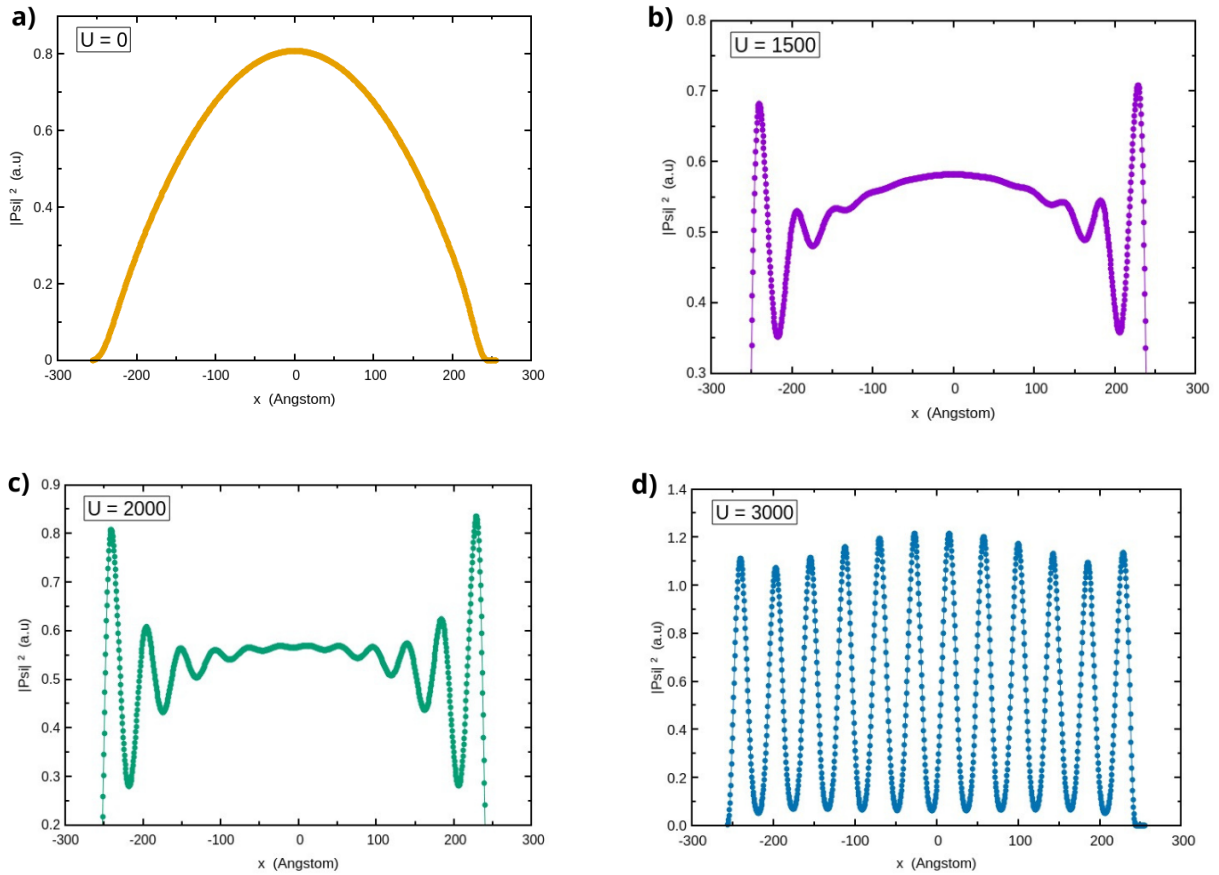
4.2 Evolução temporal para o estado fundamental

Considerando a simplificação descrita pela Eq.(2.103), o potencial aplicado na Eq.(3.18) deve ter um termo de potencial externo mais outro termo de interação entre as partículas. Tratamos agora um sistema quântico confinado em um poço de potencial infinito¹, com interações entre partículas descritas pelo potencial generalizado discutido seção anterior.

Com base na metodologia desenvolvida no Capítulo 3, realizamos a evolução temporal em tempo imaginário até a convergência do estado fundamental do sistema. A Figura 6 mostra o perfil de densidade $|\psi|^2$ em função de x para quatro valores de U_0 após a convergência do estado fundamental do sistema.

¹ A implementação numérica aproxima um poço infinito utilizando potenciais finitos muito maiores que os parâmetros que caracterizam o sistema.

Figura 6 – Perfil de densidade de um sistema interagindo através do potencial generalizado no espaço real. (a) $U_0 = 0$ (amarelo): estado sem modulação de densidade. (b) $U_0 = 1500$ (roxo): surgimento de tendência de cristalização. (c) $U_0 = 2000$ (verde): aumento significativo nas modulações de densidade. (d) $U_0 = 3000$ (azul): formação de modulação periódica bem definida.



Fonte: Produzido pelo autor.

Conforme ilustrado na Figura 6(a), para $U_0 = 0$ recuperamos o estado fundamental do sistema, onde a ausência de interação faz com que a forma da função de onda se reduza à solução da equação de Schrödinger para um poço infinito, sem modulações de densidade. A solução de uma equação de Gross-Pitaevskii neste caso seria na verdade uma constante, mas as condições de contorno impostas aqui obrigam a função ψ a atingirem zero nas bordas do problema.

Na Figura 6(b), observa-se tendência de cristalização antes dos valores de potencial onde ε_k torna-se imaginário. A região próxima às bordas do sistema já exibe indícios de uma transição para uma fase supersólida, com picos de densidade se formando nas proximidades do limite do poço para $U_0 = 1500$. Essa tendência se intensifica com o aumento de U_0 , como pode ser observado na Figura 6(c). Por fim, na Figura 6(d), verifica-se que para $U_0 = 3000$, emerge uma modulação periódica bem definida, característica do estado supersólido.

5 CONCLUSÕES E TRABALHOS FUTUROS

Neste trabalho, apresentamos os fundamentos teóricos para investigar a formação de cristalização em sistemas superfluidos. Para isso, introduzimos uma descrição quântica de muitos corpos e, a partir dessa descrição, estabelecemos a relação de Bogoliubov através de uma aproximação para os operadores de criação e aniquilação, além de descrevermos o critério de Landau para superfluidez. Essa descrição permitiu caracterizar as condições necessárias para o aparecimento de cristalização em superfluidos.

A análise teórica indicou que a formação de uma fase supersólida está ligada ao aparecimento de uma instabilidade caracterizada por um mínimo de energia em momento finito. Para reproduzir o critério da formação de uma fase supersólida, construímos um modelo numérico em Python que faz a evolução temporal da equação de Gross-Pitaevskii independente do tempo, aproximando a evolução temporal simetricamente através de produtos de exponenciais pela Decomposição de Suzuki-Trotter, utilizando uma generalização do potencial de interação como a soma do termo de contato com um potencial *soft-core*.

Aplicamos a evolução em temporal via propagação em tempo imaginário e obtivemos o estado fundamental do sistema, cujos resultados confirmaram a formação de um padrão cristalino na distribuição de densidades de partículas no sistema superfluido, o que indica a formação de um supersólido.

Como perspectivas futuras, pretendemos estender o método para o caso bidimensional para estudar sistemas bidimensionais de condensados de bósons. Com isso, iremos buscar situações reais onde as interações entre bósons podem ser descritas por um potencial *soft-core*, em busca de sistemas onde a cristalização do condensado pode ser observada e possivelmente controlada.

REFERÊNCIAS

- ALTLAND, A.; SIMONS, B. D. **Condensed matter field theory**. [S. l.]: Cambridge university press, 2010.
- ANCILOTTO, F.; ROSSI, M.; TOIGO, F. Supersolid structure and excitation spectrum of soft-core bosons in 3d. **arXiv preprint arXiv:1309.2769**, 2013.
- BOGOLIUBOV, N. A new method in the theory of superconductivity. **Soviet Physics Jetp**, v. 34, n. 7, p. 41–46, jul. 1958.
- BOGOLUBOV, N. On the theory of superfluidity. **Journal of Physics**, v. 19, n. 4, p. 23 – 32, 1947.
- BÖHMER, K. **Numerical methods for nonlinear elliptic differential equations: a synopsis**. [S. l.]: OUP Oxford, 2010.
- BRUUS, H.; FLENSBERG, K. **Many-body quantum theory in condensed matter physics: an introduction**. [S. l.]: Oxford university press, 2004.
- CHAVES, A.; FARIAS, G.; PEETERS, F.; FERREIRA, R. The split-operator technique for the study of spinorial wavepacket dynamics. **Communications in computational physics**, Cambridge University Press, v. 17, n. 3, p. 850–866, 2015.
- CHESTER, G. Speculations on bose-einstein condensation and quantum crystals. **Physical Review A**, APS, v. 2, n. 1, p. 256, 1970.
- CINTI, F.; JAIN, P.; BONINSEGNI, M.; MICHELI, A.; ZOLLER, P.; PUPILLO, G. Supersolid droplet crystal in a dipole-blockaded gas. **Physical Review Letters**, APS, v. 105, n. 13, p. 135301, 2010.
- COHEN-TANNOUDJI, C.; DIU, B.; LALOE, F. **Quantum mechanics: Volume 1: Basic concepts, tools, and applications**. [S. l.]: Wiley-VCH, 1986.
- DELFOUR, M.; FORTIN, M.; PAYR, G. Finite-difference solutions of a non-linear schrödinger equation. **Journal of computational physics**, Elsevier, v. 44, n. 2, p. 277–288, 1981.
- DELFT, D. V.; KES, P. The discovery of superconductivity. **Physics today**, AIP Publishing, v. 63, n. 9, p. 38–43, 2010.
- EINSTEIN, A. Sitzungsberichte der preussischen akademie der wissenschaften i, 3–14 (1925). **A tradução deste trabalho foi feita na Revista Brasileira de Ensino de Física**, v. 27, p. 113, 2005.
- FONTANA, E. Introdução ao método de diferenças finitas com aplicações em engenharia química. **Notas de Aula-Métodos Matemáticos Aplicados à Engenharia Química II**, 2019.
- FULS, W. F.; MATHEWS, R. Transient thermal analysis of a pbmr spent fuel tank using finite differences. **R&D Journal**, Ownership of copyright in terms of the Work remains with the Authors, v. 20, p. 8–15, 2004.
- GRIFFITHS, D. J.; SCHROETER, D. F. **Introduction to quantum mechanics**. Third edition. Cambridge ; New York, NY: Cambridge University Press, 2018. ISBN 978-1-107-18963-8.

GROSS, E. P. Unified theory of interacting bosons. **Physical Review**, APS, v. 106, n. 1, p. 161, 1957.

HENKEL, N.; NATH, R.; POHL, T. Three-dimensional roton excitations and supersolid formation in rydberg-excited bose-einstein condensates. **Physical review letters**, APS, v. 104, n. 19, p. 195302, 2010.

KAPITZA, P. Viscosity of liquid helium below the λ -point. **Nature**, Nature Publishing Group UK London, v. 141, n. 3558, p. 74–74, 1938.

KEESOM, W.; KEESOM, A. On the anomaly in the specific heat of liquid helium. **Verhandlingen der Koninklijke Akademie van Wetenschappen (Amsterdam)**, v. 35, p. 736, 1932.

LANDAU, L. The theory of superfluidity of helium. In: **KHALATNIKOV, I. M. An Introduction to the Theory of Superfluidity**. Boca Raton: CRC Press, 2018. p. 185–204.

LEGGETT, A. J. Can a solid be "superfluid"? **Physical Review Letters**, APS, v. 25, n. 22, p. 1543, 1970.

LEVEQUE, R. J. **Finite difference methods for ordinary and partial differential equations: steady-state and time-dependent problems**. [S. l.]: SIAM, 2007.

LIEBSTER, N.; SPARN, M.; KATH, E.; DUCHENE, J.; STROBEL, H.; OBERTHALER, M. K. Supersolid-like sound modes in a driven quantum gas. **Nature Physics**, Nature Publishing Group UK London, p. 1–7, 2025.

MAIA, M.; GASPARETTO, C. A numerical solution for the entrance region of non-newtonian flow in annuli. **Brazilian Journal of Chemical Engineering**, SciELO Brasil, v. 20, n. 2, p. 201–211, 2003.

MATTSSON, K.; NORDSTRÖM, J. High order finite difference methods for wave propagation in discontinuous media. **Journal of Computational Physics**, Elsevier, v. 220, n. 1, p. 249–269, 2006.

MOCZO, P.; ROBERTSSON, J. O.; EISNER, L. The finite-difference time-domain method for modeling of seismic wave propagation. **Advances in geophysics**, Elsevier, v. 48, p. 421–516, 2007.

MONSERRAT, B. Electron–phonon coupling from finite differences. **Journal of Physics: Condensed Matter**, IOP Publishing, v. 30, n. 8, p. 083001, feb 2018. Disponível em: <https://dx.doi.org/10.1088/1361-648X/aaa737>.

PETHICK, C. J.; SMITH, H. **Bose–Einstein condensation in dilute gases**. [S. l.]: Cambridge university press, 2008.

PLATT, L.; BAILLIE, D.; BLAKIE, P. Supersolid spectroscopy. **Physical Review A**, APS, v. 111, n. 5, p. 053305, 2025.

POWELL, A. Finite difference solution of the heat equation. **Technical Paper, March 14th**, 2002.

ROSSMAN, T. A.; PARKS, Z. P.; MESSINA, M. Observing quantum dynamics in real time: An excel-ready finite-difference algorithm for solving the time-dependent schro'odinger equation. **Journal of Chemical Education**, ACS Publications, v. 97, n. 4, p. 1026–1034, 2020.

SAKURAI, J. J.; NAPOLITANO, J. **Mecânica quântica moderna**. 2. ed. Porto Alegre: Bookman, 2013.

SciPy Community. **Fast Fourier Transform (scipy.fft)**. 2024. Acessado em: 08-07-2025. Disponível em: <https://docs.scipy.org/doc/scipy/tutorial/fft.html>.

SIMON, H. Lecture notes for quantum matter. Oxford University,, 2019.

SIMOS, T. An accurate finite difference method for the numerical solution of the schrödinger equation. **Journal of computational and applied mathematics**, Elsevier, v. 91, n. 1, p. 47–61, 1998.

SORIANO, A.; NAVARRO, E. A.; PORTI, J. A.; SUCH, V. Analysis of the finite difference time domain technique to solve the schrödinger equation for quantum devices. **Journal of applied physics**, American Institute of Physics, v. 95, n. 12, p. 8011–8018, 2004.

WARSAW UNIVERSITY OF TECHNOLOGY. FACULTY OF PHYSICS. **The activity of Professor Mieczysław Wolfke**. 2021. Disponível em: <https://www.fizyka.pw.edu.pl/index.php/en/Faculty/History-of-the-Faculty/The-activity-of-Professor-Mieczyslaw-Wolfke>. Acesso em: 13 jul. 2025.

XU, Y.; HASIK, J.; PONSIOEN, B.; NEVIDOMSKYY, A. H. Simulating spin dynamics of supersolid states in a quantum ising magnet. **Physical Review B**, APS, v. 111, n. 6, p. L060402, 2025.

ZHANG, R. The baker-campbell-hausdorff formula. **Columbia University: New York, NY, USA**, 2017.