

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
INSTITUTO DE FÍSICA
Programa de Pós-Graduação em Física

Condensação de Bose-Einstein para um gás de bósons não interagentes em confinamentos bidimensionais em automatos celulares complexos *

Daniel Schardosim Calovi

Dissertação de mestrado realizada sob orientação da Profa. Dra. Sandra Denise Prado e apresentada ao Instituto de Física da UFRGS em preenchimento do requisito final para a obtenção do título de Mestre em Física.

Porto Alegre
29 de Março de 2007

*Trabalho financiado pela Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES).

Agradecimentos

O presente trabalho é fruto de anos de iniciação científica, bem como os dois anos de mestrado, em todos esses anos eu tenho algumas pessoas a agradecer que foram essenciais para o trabalho que a seguir será apresentado.

Meus agradecimentos principais vão é claro, para a idealizadora desse trabalho, a pessoa que me manteve motivado e prosseguindo, mesmo quando os desafios teóricos e numéricos pareciam estar acima da minha compreensão, a minha orientadora, Sandra Denise Prado, sempre me motivou e me deu o apoio que eu necessitava. A conclusão desse trabalho se deve em grande parte, a sua dedicação e perseverança. Muito obrigado por esses anos em que estive sob sua orientação.

Agradecimentos especiais vão também para os órgãos financiadores da pesquisa, CNPq nos anos de iniciação científica, e seguido pelo apoio da CAPES agora no mestrado, bem como para o Centro Nacional de Supercomputação, o CESUP-RS, pelas quase mil horas de processamento, onde o apoio do Luís Fernando Fernandez em todas as dúvidas e problemas encontrados nesses anos foram essenciais para essa conclusão que agora apresento.

Agradeço também ao Instituto de Física da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, por toda a infra-estrutura oferecida, que foram também essenciais para esse trabalho.

Em agradecimentos mais pessoais, gostaria de agradecer a minha família por sempre ter me apoiado nessa carreira tão inusitada que é a física, mesmo agora que entro numa nova (e mais longa) jornada ainda nesse meio tão diferente.

Resumo

Neste trabalho estudamos as propriedades termodinâmicas da Condensação de Bose-Einstein (CBE) para um gás de bósons não-interagentes confinado em potenciais bidimensionais $V(x, y)$ que apresentam classicamente, um caos-suave (*soft chaos*), isto é, um espaço de fases compartilhado por ilhas de estabilidade e mares de caos. O formalismo estatístico mais apropriado para os nossos objetivos é o descrito pelo ensemble canônico, de forma que o número de partículas N é mantido fixo em cada simulação. Nosso principal objetivo é investigar se o caos pode caracterizar algum comportamento distinto nas propriedades do Condensado de Bose-Einstein. Para comparação dos nossos resultados com a literatura, mostramos em detalhes todos os cálculos para o oscilador bidimensional e a caixa bidimensional suavizados¹. No potencial harmônico a suavização implica em um amortecimento da frequência de oscilação, enquanto que para a caixa bidimensional, a suavização implica em um aumento da área da caixa quando N é aumentado. Esse recurso é necessário, uma vez que não se define rigorosamente uma transição de fase em sistemas com dimensão menor que três. Embora a suavização pareça ser mais um recurso matemático que físico, ela descreve bem a CBE em potenciais suaves.

Para estudar o efeito do caos na CBE, escolhemos dois potenciais: i) O potencial Nelson, que é um potencial parabólico que descreve essencialmente dois osciladores harmônicos x e y com um termo de acoplamento não-linear que origina caos; ii) O potencial quártico, cuja base é mais achatada parecendo-se mais com uma caixa. Simulamos também a situação em que a partícula confinada é sujeita a um campo magnético perpendicular uniforme ao longo do eixo z . Os nossos resultados mostram que estatísticas que são bilineares em relação à densidade de energia do potencial de confinamento, como a variância do número de ocupação do estado fundamental, exibem assinatura do caos subjacente.

¹do inglês “*smoothed potentials*”

Abstract

In this work we examine some of the thermodynamics properties of Bose-Einstein Condensation (BEC) for a gas of non-interacting bosons trapped in bidimensional potentials $V(x,y)$. We choose potentials that exhibit *soft chaos* in the classical regime which means they have a mixed phase space where islands of stability share the space with chaotic seas. We also describe the statistics via the canonical ensemble formalism which is more appropriate for our purposes. In this case, the number of particles N is kept fixed through each numerical simulation. Our main goal is to detect, if there is any, influence of the subjacent chaotic behavior in the BEC. For a matter of comparison, we show in details the calculations of both smoothed bidimensional harmonic oscillator and smoothed bidimensional box. The smoothing is equivalent to weakening the potential, so that it can be understood as to slowing down the oscillator frequency and to an enlargement of the box side as N is increased. This is necessary since phase transitions are rigorously violated in systems with dimension $d < 3$. Although this smoothing seems rather artificial, it models well BEC in non-rigid potentials.

In order to study any possible fingerprint of chaos in the Bose-Einstein condensate we choose two potentials: i) Nelson Potential which is a paraboloid describing two harmonic oscillators coupled via a term that is responsible for the chaos in the system and ii) Quartic Potential which has a flat bottom resembling a box. We were also able to simulate the potentials with uniform magnetic field in the z direction. Our results show that statistics that are bilinear in the potential density of states like the particle number fluctuation of the ground state exhibit some fingerprints of the subjacent chaos.

Conteúdo

Lista de Figuras

1	Introdução	p. 1
2	Pequenos CBE em gases bidimensionais	p. 7
2.1	Transição de fase e CBE	p. 7
2.2	CBE: a ocupação macroscópica do estado fundamental	p. 9
2.3	Confinamentos bidimensionais suavizados	p. 11
2.3.1	Análise do OH bidimensional	p. 11
2.3.2	OH Anisotrópico	p. 17
2.3.3	Caixa Bidimensional	p. 19
3	CBE para confinamentos bidimensionais caóticos	p. 23
3.1	Limite Semiclássico: caos clássico e caologia quântica	p. 23
3.2	Potenciais de confinamento	p. 26
3.2.1	Dinâmica clássica dos potenciais	p. 27
3.2.2	A quantização dos potenciais	p. 31
4	Análise dos resultados	p. 36
4.1	O potencial químico	p. 36
4.2	O número de ocupação do estado fundamental	p. 43
4.3	O calor específico	p. 45
4.4	A variância do número de ocupação de partículas no estado fundamental	p. 53

4.4.1	Cálculo numérico da variância	p. 53
4.4.2	Variância em termos da Fórmula do Traço	p. 54
5	Considerações finais	p. 59
	Bibliografia	p. 62

Lista de Figuras

- 2.1 Calor específico a volume constante (C_v) em função da temperatura. p. 9
- 2.2 Potencial químico (normalizado pela energia do estado fundamental) em função da temperatura normalizada por T_0 referente ao OH isotrópico e com ampliação da região perto de $T_c = 0,78T_0$. Linha sólida representa sistema com 10 partículas, linha tracejada representa 100 partículas e linha traço-ponto 10000 partículas p. 16
- 2.3 Ocupação do estado fundamental normalizado pelo número de partículas do sistema em função da temperatura normalizada por T_0 para o caso do OH isotrópico. Linha sólida representa sistema com 10 partículas, linha tracejada 100 partículas, linha traço-ponto 10000 partículas e linha pontilhada a previsão teórica (limite termodinâmico $N \rightarrow \infty$) p. 16
- 2.4 Comparação da ocupação do estado fundamental normalizada pelo número de partículas do sistema e da variação do potencial químico (normalizado pela energia do estado fundamental), ambos em função da temperatura normalizada por T_0 , entre o OH isotrópico e anisotrópico. Cada coluna corresponde a casos com diferentes números de partículas no sistema. Para o potencial químico foi evidenciada a abcissa para que se possa ver mais claramente a T_c (temperatura para qual $\mu = 0$). A linha sólida representa o caso isotrópico e a linha tracejada o anisotrópico. Para esses cálculos $\gamma = \sqrt[4]{\frac{2}{0,1}}$ p. 20
- 3.1 Visualização das distribuições espectrais do espaçamento entre níveis consecutivos, onde a linha sólida representa a distribuição de Poisson - $P(s) = e^{-s}$ - a tracejada a distribuição Gaussiana Ortogonal - $P(s) = \frac{\pi s}{2} e^{-\frac{\pi}{4}s^2}$ - e a pontilhada a distribuição Gaussiana Unitária - $P(s) = \frac{32s^2}{\pi^2} e^{-\frac{4}{\pi}s^2}$ p. 24
- 3.2 Representação gráfica das linhas equipotenciais do potencial Nelson p. 28
- 3.3 Seção de Poincaré $X \times P_x$ para o potencial Nelson para $E=0,05$ (correspondendo ao caso de $\hbar = 0,01$) e campo magnético nulo, para $y = 0$ e $P_y > 0$. . . p. 29

3.4	Representação gráfica das linhas equipotenciais do potencial Quártico	p. 30
3.5	Seção de Poincaré $Y \times P_y$ para o potencial Quártico para $E=0,003$ e campo magnético nulo, para $x = 0$ e $P_x > 0$	p. 31
3.6	Seção de Poincaré $Y \times P_y$ para o potencial Quártico para $E=0,003$ e $\mathbf{B}=\mathbf{0,35}$, para $x = 0$ e $P_x > 0$	p. 32
3.7	Representação da variação da energia em função do campo magnético dos 50 primeiros níveis do OH anisotrópico para $\hbar = 0,01$	p. 34
3.8	Representação da variação da energia em função do campo magnético dos 50 primeiros níveis do potencial Nelson para $\hbar = 0,001$	p. 34
3.9	Representação da variação da energia em função do campo magnético dos 50 primeiros níveis do potencial Nelson para $\hbar = 0,01$	p. 35
3.10	Representação da variação da energia em função do campo magnético dos 50 primeiros níveis do potencial Quártico para $\hbar = 0,01$	p. 35
4.1	Potencial químico normalizado pela energia do estado fundamental em função da temperatura normalizada por T_0 (sem campo magnético aplicado) para os sistemas: Nelson com $\hbar = 0,001$ (linha sólida), Nelson com $\hbar = 0,01$ (linha tracejada) e OH anisotrópico (triângulos). O gráfico à esquerda foi feito com $N=10$ enquanto o gráfico à direita com $N=100$	p. 39
4.2	Potencial químico normalizado pela energia do estado fundamental em função da temperatura normalizada por T_0 (submetido a um campo magnético de intensidade $\mathbf{B}=\mathbf{0,5}$) para os sistemas: Nelson com $\hbar = 0,001$ (linha sólida), Nelson com $\hbar = 0,01$ (linha tracejada) e OH anisotrópico (triângulos). O gráfico à esquerda foi feito com $N=10$ enquanto o gráfico à direita com $N=100$	p. 39
4.3	Potencial químico normalizado pela energia do estado fundamental em função da temperatura normalizada por T_0 (submetido a um campo magnético de intensidade $\mathbf{B}=\mathbf{1,0}$) para os sistemas: Nelson com $\hbar = 0,001$ (linha sólida), Nelson com $\hbar = 0,01$ (linha tracejada) e OH anisotrópico (triângulos). O gráfico à esquerda foi feito com $N=10$ enquanto o gráfico à direita com $N=100$	p. 40

- 4.4 Comparação do potencial químico do potencial Quártico com a caixa. Gráfico esquerdo corresponde ao potencial quártico e o direito a caixa bidimensional. Linha sólida corresponde a um sistema com $N=10$, linha tracejada a um sistema com $N=25$ e os triângulos $N=50$ p. 40
- 4.5 Comparação do potencial químico do potencial Quártico submetidos a campos magnéticos de intensidade diferentes, $\mathbf{B}=0,5$ para a figura à esquerda e $\mathbf{B}=1,0$ para a figura à direita. Linha sólida corresponde a um sistema com $N=10$, linha tracejada a um sistema com $N=25$ e os triângulos $N=50$ p. 41
- 4.6 Ocupação do estado fundamental normalizado pelo número de partículas em função da temperatura normalizada por T_0 (sem campo magnético aplicado) para os sistemas: Nelson com $\hbar = 0,001$ (linha sólida), Nelson com $\hbar = 0,01$ (linha tracejada) e OH anisotrópico (triângulos) p. 45
- 4.7 Ocupação do estado fundamental normalizado pelo número de partículas em função da temperatura normalizada por T_0 (submetido a um campo magnético de intensidade $\mathbf{B}=0,5$) para os sistemas: Nelson com $\hbar = 0,001$ (linha sólida), Nelson com $\hbar = 0,01$ (linha tracejada) e OH anisotrópico (triângulos) p. 45
- 4.8 Ocupação do estado fundamental normalizado pelo número de partículas em função da temperatura normalizada por T_0 (submetido a um campo magnético de intensidade $\mathbf{B}=1,0$) para os sistemas: Nelson com $\hbar = 0,001$ (linha sólida), Nelson com $\hbar = 0,01$ (linha tracejada) e OH anisotrópico (triângulos) p. 46
- 4.9 Comparação da ocupação do estado fundamental do potencial Quártico com a caixa sem campo magnético aplicado. Gráfico esquerdo corresponde ao potencial quártico e o direito a caixa bidimensional. Linha sólida corresponde a um sistema com $N=10$, linha tracejada a um sistema com $N=25$ e os triângulos $N=50$ p. 46
- 4.10 Comparação da ocupação do estado fundamental do potencial Quártico submetidos a campos magnéticos de intensidade diferentes, $\mathbf{B}=0,5$ para a figura à esquerda e $\mathbf{B}=1,0$ para a figura à direita. Linha sólida corresponde a um sistema com $N=10$, linha tracejada a um sistema com $N=25$ e os triângulos $N=50$ p. 47

- 4.11 Variação da T_c normalizada por T_0 em função da intensidade B do campo magnético no potencial Nelson. A linha sólida representa $\hbar = 0,001$ e a linha tracejada $\hbar = 0,01$. Figuras realizadas para $N=10$ e $N=100$ p. 47
- 4.12 Variação da T_c normalizada por T_0 em função do número de partículas do sistema no potencial Nelson. A linha sólida representa $\hbar = 0,001$ e a linha tracejada $\hbar = 0,01$. Figuras realizadas para campos magnéticos de intensidade: $B=0$, $B=0,5$ e $B=1$ p. 48
- 4.13 Variação da T_c em função do campo magnético aplicado no sistema para o potencial Quártico. A linha sólida representa $N = 10$ e a linha tracejada $N = 100$ p. 48
- 4.14 Variação da T_c em função do número de partículas do sistema no potencial Nelson. A linha sólida representa $B = 0$, a linha tracejada $B = 0,5$ e a linha pontilhada $B = 1,0$ p. 49
- 4.15 Variação do calor específico a volume constante (C_v) normalizado por N em função da temperatura normalizada por T_0 (sem campo magnético aplicado) para os sistemas: Nelson com $\hbar = 0,001$ (linha sólida), Nelson com $\hbar = 0,01$ (linha tracejada) e OH anisotrópico (triângulos) p. 50
- 4.16 Variação do calor específico a volume constante (C_v) normalizado por N em função da temperatura normalizada por T_0 (submetido a um campo magnético de intensidade $\mathbf{B=0,5}$) para os sistemas: Nelson com $\hbar = 0,001$ (linha sólida), Nelson com $\hbar = 0,01$ (linha tracejada) e OH anisotrópico (triângulos) p. 51
- 4.17 Variação do calor específico a volume constante (C_v) normalizado por N em função da temperatura normalizada por T_0 (submetido a um campo magnético de intensidade $\mathbf{B=1,0}$) para os sistemas: Nelson com $\hbar = 0,001$ (linha sólida), Nelson com $\hbar = 0,01$ (linha tracejada) e OH anisotrópico (triângulos) p. 51
- 4.18 Comparação do calor específico a volume constante (C_v) referente ao potencial Quártico com a caixa sem campo magnético aplicado. Gráfico à esquerda corresponde ao potencial quártico e o à direita a caixa bidimensional. Linha sólida corresponde a um sistema com $N=10$, linha tracejada a um sistema com $N=25$ e os triângulos $N=50$ p. 52

4.19	Comparação do calor específico a volume constante (C_V) referente ao potencial Quártico submetidos a campos magnéticos de intensidade diferentes, $\mathbf{B}=\mathbf{0,5}$ para a figura à esquerda e $\mathbf{B}=\mathbf{1,0}$ para a figura à direita. Linha sólida corresponde a um sistema com $N=10$, linha tracejada a um sistema com $N=25$ e os triângulos $N=50$	p. 52
4.20	Variância em função da temperatura (normalizada por T_0) e campo magnético, $\Delta N_0(\frac{T}{T_c}, B)$, para o potencial Quártico com $N = 10$	p. 56
4.21	Variância em função da temperatura (normalizada por T_0) e campo magnético, $\Delta N_0(\frac{T}{T_c}, B)$, para o potencial Quártico com $N = 25$	p. 56
4.22	Variância em função da temperatura (normalizada por T_0) e campo magnético, $\Delta N_0(\frac{T}{T_c}, B)$, para o potencial Quártico com $N = 50$	p. 57
4.23	Variância em função da temperatura (normalizada por T_0) e campo magnético, $\Delta N_0(\frac{T}{T_0}, B)$, para o potencial Nelson com $N = 10$ e $\hbar = 0,01$	p. 57
4.24	Variância em função da temperatura (normalizada por T_0) e campo magnético, $\Delta N_0(\frac{T}{T_0}, B)$, para o potencial Nelson com $N = 25$ e $\hbar = 0,01$	p. 58
4.25	Variância em função da temperatura (normalizada por T_0) e campo magnético, $\Delta N_0(\frac{T}{T_0}, B)$, para o potencial Nelson com $N = 50$ e $\hbar = 0,01$	p. 58

1 Introdução

Quando um gás de átomos bosônicos é resfriado abaixo de uma temperatura crítica T_c , uma fração relativamente alta de átomos se condensa no estado de mais baixa energia. Esse fenômeno foi primeiramente previsto por Einstein em 1925 [1] como uma das conseqüências da distribuição de Bose-Einstein para o número de ocupação

$$N_j = \frac{1}{e^{\beta(E_j - \mu)} - 1}, \quad (1.1)$$

sendo E_j o j -ésimo autovalor de energia da partícula única, $\beta = 1/(k_B T)$ onde T é a temperatura e k_B a constante de Boltzmann. O potencial químico μ pode ser determinado, não-trivialmente, através do vínculo entre o número N de partículas no sistema e a soma:

$$\sum_{j=0}^{\infty} N(E_j) = N, \quad (1.2)$$

onde o índice $j = 0$ denota o estado fundamental. A Condensação de Bose-Einstein (CBE) para partículas não-interagentes é totalmente descrita pelas equações (1.1) e (1.2) e é um fenômeno puramente quântico, sendo conseqüência das propriedades de simetria das autofunções para partículas indistinguíveis na Mecânica Quântica. Átomos de massa m a uma temperatura T podem ser modelados por meio de pacotes de onda com uma extensão típica da ordem de alguns comprimentos de onda de de Broglie $\lambda_T = (2\pi\hbar^2/mk_B T)^{1/2}$. Esse comprimento de onda térmico (dependente da temperatura do sistema) representa a incerteza na posição associada à distribuição do momentum térmico e é inversamente proporcional a raiz quadrada da temperatura. Quando os átomos são resfriados ao ponto em que λ_T se torna comparável à sepa-

ração inter-atômica, os pacotes de onda se sobrepõem e a indistinguibilidade das partículas se torna importante. Nessa temperatura os bósons sofrem uma transição de fase quanto-mecânica formando o Condensado de Bose-Einstein, ou seja, uma nuvem coerente de átomos, todos ocupando o mesmo estado quântico e em particular, o estado de mais baixa energia. A CBE é um fenômeno de condensação que sempre acontece no estado de mais baixa energia.¹ Assim, em um gás homogêneo como um gás confinado em uma caixa com paredes infinitas, o estado fundamental tem a mesma extensão espacial que qualquer estado excitado e a condensação somente ocorre no espaço de momentum. Entretanto, quando um gás é confinado em um potencial espacialmente não-homogêneo, como por exemplo o potencial harmônico, o acoplamento entre energia e espaço altera fundamentalmente a natureza da CBE. Neste caso, a CBE ocorre no estado fundamental, aquele com a menor extensão e observa-se, portanto, a CBE no espaço de configuração [3].

A receita da CBE consiste em resfriar um gás extremamente diluído (caso contrário ocorreriam as mudanças de fase mais comuns como as que levam o gás para o estado líquido ou sólido) ao ponto em que o comprimento de onda térmico λ_T seja da ordem da distância inter-atômica. Tipicamente, a densidade n do gás nas temperaturas sub-micro-kelvin de transição é da ordem de 10^{14}cm^{-3} (que corresponde a densidade de um gás na temperatura ambiente a uma pressão de 10^{-2}mbar) [3, 4]. Embora os experimentos pareçam conceitualmente simples, eles envolvem desafios altamente técnicos. A CBE foi primeiramente demonstrada em 1995, em junho com rubídio, em julho com lítio e em setembro com sódio. Atualmente existem cerca de 20 grandes grupos em 8 países trabalhando com diferentes átomos e diferentes técnicas [4]. A maioria dos experimentos atingem a degenerescência quântica para temperaturas entre 500nK e $2\mu\text{K}$, em densidades entre 10^{14} e 10^{15}cm^{-3} . Os maiores condensados têm 20 milhões de átomos de sódio e 1 bilhão de átomos de hidrogênio. Um ciclo de resfriamento dura entre 10 segundos a alguns minutos e, neste tempo reduz-se a temperatura ambiente por um fator de um bilhão. Dependendo do confinamento, que muitas vezes é magnético, o formato do condensado é arredondado com um diâmetro de 10 a 50 μm ou cilíndrico com cerca de $15\mu\text{m}$ de diâme-

¹Em experimentos de condensados fora do equilíbrio a CBE pode ocorrer em um estado diferente do fundamental [2]

tro e $300\mu\text{m}$ em comprimento [3, 4]. O condensado é bastante coerente [4], pois mesmo com fracas interações, os átomos podem ser tratados como tendo todos a mesma função de onda da partícula única com 99% de precisão.

O sucesso dos experimentos com átomos ultra-resfriados aumentou o interesse na CBE no regime de interação fraca ou mesmo nula. Nestes experimentos os átomos são confinados por forças externas, que podem ser modeladas por um potencial harmônico tridimensional. O resultado mais surpreendente, foi obtido por Ketterle e van Druten [5], que sugere que em termos da ocupação macroscópica do estado fundamental, a CBE pode ocorrer até mesmo em confinamentos unidimensionais. Este é, no entanto, um tópico delicado para o qual há controvérsias na literatura. O teorema de Hohenberg de 1967 [6, 7], conhecido como Teorema de Hohenberg-Mermin-Wagner demonstrou que a CBE só pode ocorrer em sistemas com dimensão estritamente maior que dois. Trabalhos mais recentes mostram que a impossibilidade da CBE para sistemas uni e bidimensionais é fato somente para potenciais rígidos. Em sistemas não-homogêneos (potenciais suavizados, discutido na seção 2.3), no entanto, a CBE acontece também em sistemas de uma ou duas dimensões. Associada ainda à dimensionalidade do sistema, outro fator importante no estudo da CBE é o número finito de partículas (N). A teoria usual da CBE assume o limite termodinâmico de um sistema infinito, mas surpreendentemente a CBE pode ocorrer em um potencial harmônico unidimensional se N é finito. Tanto a dimensionalidade quanto o número de partículas são aspectos importantes no nosso trabalho de modo que essas sutilezas serão discutidas com algum detalhe no capítulo 2.

Para finalizar esse panorama sucinto do acelerado progresso nesta área de estudo, podemos rephrasear Ketterle [4] e dizer que as pesquisas no CBE em gases podem ser divididas em duas grandes áreas: i) pesquisas em lasers atômicos ou condensados atômicos como um gás coerente, onde se espera a menor interação possível entre átomos de forma que os experimentos são feitos preferencialmente em baixas densidades (tecnologicamente essa área favorece experimentos em óptica atômica e do ponto de vista teórico, essa área favorece as investigações de aspectos básicos da Mecânica Quântica) e ii) pesquisas em CBE como um sistema de muitos-corpos ou um novo fluido quântico, sendo o foco nesta área a interação entre átomos que se dá no regime

de altas densidades.

Neste contexto, estudamos algumas das grandezas mais consideradas na literatura que caracterizam a CBE para um gás de N bósons não-interagentes confinado em um potencial bi-dimensional suavizado $V(x,y)$ e sujeito a um campo magnético constante B na direção z . À temperaturas baixas, os bósons ocupam maciçamente os níveis de mais baixa energia do sistema. Ao variarmos adiabaticamente a intensidade B do campo magnético, os níveis de energia variam como função de B . Se a Hamiltoniana é classicamente caótica, nenhuma degenerescência é esperada e os níveis de energia da contraparte quântica flutuarão exibindo *avoided crossings* (cruzamentos evitados). Para o caso de uma Hamiltoniana integrável, então os níveis podem (e tipicamente o fazem) cruzar-se, exibindo um comportamento mais suave quando a intensidade B é variada [8]. A dinâmica² dos níveis de energia como função do campo magnético geralmente é diferente para sistemas com análogos clássicos regulares e caóticos [9] e a questão é se isto realmente leva a um comportamento distinto nas propriedades do CBE.

Nosso trabalho consistiu em estudar as propriedades do número de ocupação N_0 , potencial químico μ , calor específico C_v e variância $\Delta N_0/N$ no ensemble canônico. Por definição, o ensemble canônico é o mais apropriado para descrever sistemas finitos (N finito e fixo). Há porém, uma série de trabalhos que discutem a questão das diferentes estatísticas: ensembles canônico e grand-canônico. Elas concordam no limite termodinâmico, mas apresentam divergências para sistemas finitos [10]. Optamos pelo ensemble canônico mantendo coerência com os trabalhos que discutem CBE em sistemas finitos e potenciais suaves conforme será descrito no capítulo 2. Mostramos que o número de ocupação pode ser expresso como a soma de um termo suave (que depende da densidade média dos níveis de energia) mais uma contribuição oscilatória associada com órbitas periódicas. O termo suave é relacionado às correções para a aproximação assintótica de Weyl para a densidade de energia $d(E)$ e o termo oscilatório é obtido usando-se a Fórmula do Traço de Gutzwiller [11].

²Varição dos níveis de energia em função de um parâmetro do sistema

Como resultado vemos que o número de ocupação é independente da dinâmica clássica regular ou caótica do sistema, uma vez que em média depende somente dos termos de correção da série de Weyl para a densidade de energia e , assim, é determinada somente pelas propriedades globais que não estão relacionadas à estabilidade das trajetórias clássicas [12]. Isto é confirmado por nossos resultados numéricos. No entanto a variância, por ser bilinear em relação à densidade de estados carrega informações da estabilidade das órbitas periódicas do potencial de confinamento.

Para o estudo numérico dos potenciais não-lineares escolhemos uma Hamiltoniana (do potencial Nelson) não-escalável, não-integrável e suave, que exhibe comportamento regular em energias baixas e comportamento caótico em energias altas. Usando diferentes valores de \hbar , selecionamos os primeiros níveis que permanecem na região mais regular ou na região mais caótica. Deste modo, todas as propriedades de simetria dos casos regular e caótico são exatamente as mesmas, pois correspondem ao mesmo sistema e portanto, diferenças no comportamento de qualquer das propriedades analisadas seriam exclusivamente devidas ao comportamento regular ou caótico da faixa de energia em questão. O potencial Nelson para baixas energias é bastante semelhante ao potencial do oscilador harmônico bidimensional, de forma que os resultados entre ambos confinamentos serão sistematicamente comparados. Usamos ainda uma segunda Hamiltoniana do potencial Quártico com uma escolha de parâmetros tal que o sistema é bastante caótico mesmo para energias baixas. Nesse caso uma maneira de tornar a dinâmica do sistema mais regular foi o uso de um campo magnético uniforme perpendicular ao plano $x - y$. Estudamos então as propriedades do condensado à medida que o campo se torna mais intenso e o sistema mais regular.

Esta dissertação está organizada na seguinte forma: o capítulo 2 mostra a problemática da CBE para sistemas de baixa dimensionalidade. Convém ressaltar que há controvérsias na literatura se a condensação, no sentido estrito de uma mudança de fase, acontece ou não para um sistema de dimensionalidade menor que três. Veremos que sob certas condições a condensação, definida em termos de uma ocupação macroscópica do estado fundamental, de fato acontece. Do ponto de vista teórico, a CBE em confinamentos de baixa dimensionalidade traz novos de-

safios relevantes para o entendimento dos fundamentos da teoria, sendo que em duas dimensões ela pode ser importante para o entendimento da supercondutividade em alta temperatura [13] (há modelos que tentam explicar a supercondutividade como resultado da CBE de bipolarons). Como exemplos padrões na literatura, faremos aqui o cálculo detalhado da CBE para o potencial harmônico bidimensional e a caixa bidimensional. O capítulo 3 descreve as propriedades clássicas e quânticas dos potenciais de confinamento. Escolhemos potenciais bidimensionais de forma que apresentaremos sucintamente a relação entre a dinâmica clássica nos potenciais de confinamento e as estatísticas espectrais do sistema quântico equivalente no limite semi-clássico segundo a Teoria das Matrizes Aleatórias [14]. Por limite semi-clássico devemos entender que há um número relativamente grande de níveis de energia numa região de energia ΔE , de forma que a dinâmica clássica praticamente não se altera nesse intervalo. O capítulo 4 apresenta os resultados da CBE para os potenciais não lineares: o potencial Nelson e o potencial quártico. Esses potenciais apresentam uma dinâmica clássica mista, ou seja, o espaço de fases compartilha regiões caóticas com toros regulares [12]. Como o espectro de energia contém informação dessas características [15], nosso objetivo é analisar como isso se reflete nas propriedades da condensação de Bose-Einstein. Finalmente, no capítulo 5, são apresentadas nossas considerações finais.

2 *Pequenos CBE em gases bidimensionais*

Neste capítulo discutimos a problemática (em relação a CBE) da questão da dimensionalidade, do número de partículas e da sua definição precisa. Apresentaremos os resultados teóricos e numéricos para um número finito de partículas confinadas em potenciais bidimensionais suavizados como o oscilador harmônico e a caixa quadrada.

2.1 **Transição de fase e CBE**

Na maioria dos livros-texto de Mecânica Estatística, como por exemplo em [16], a teoria da CBE é formulada para N bósons de massa m , não-interagentes, confinados em um contêiner tridimensional de volume V . Nesse sistema, uma ocupação macroscópica do estado fundamental ocorre para uma temperatura finita T_c dada por:

$$T_c = \frac{h^2}{2\pi k_B m} \left[\frac{1}{2,612} \frac{N}{V} \right]^{2/3}, \quad (2.1)$$

onde k_B é a constante de Boltzmann e h a constante de Planck.

Uma maneira simples de entendermos a CBE é através do comprimento de onda térmico

$$\lambda_T = (2\pi\hbar^2/mk_B T)^{1/2}. \quad (2.2)$$

Substituindo a eq.(2.1) na eq.(2.2) podemos escrever $n\lambda_T^3 = 2,612$, sendo $n = N/V$ a densidade de partículas. Assim, a condensação ocorre quando a distância média entre partículas $n^{-1/3}$ for aproximadamente igual ao comprimento de onda térmico. O produto $n\lambda^3$ é a chamada

densidade do espaço de fases e descreve o volume de configuração (espaço) \times momentum disponível a um dado sistema físico. Em três dimensões, o espaço de configuração é dividido em células de volume h^3 . Uma unidade celular pode conter um número arbitrariamente grande de bósons. Esse fenômeno é consequência da distribuição de Bose-Einstein para o número de ocupação de partículas com spin inteiro. O número de ocupação no nível de energia j é dado por:

$$N_j = \frac{1}{e^{\beta(E_j - \mu)} - 1} = \frac{ze^{-\beta E_j}}{1 - ze^{-\beta E_j}}, \quad (2.3)$$

sendo E_j o j -ésimo autovalor de energia da partícula única e $\beta = 1/(k_B T)$, k_B a constante de Boltzmann, T a temperatura e $z = e^{\beta \mu}$ a fugacidade, onde μ é o potencial químico. Pode-se determinar μ através do vínculo entre o número N de partículas no sistema e a soma:

$$N_0 + \sum_{j=1}^{\infty} N(E_j) = N, \quad (2.4)$$

com $j = 0$ indexando o estado fundamental. O estado fundamental aparece de modo explícito na soma (2.4) para evitar divergências nas contas a seguir. Foi Einstein quem chamou a atenção para o fato que o número de ocupação N_0 do estado de mais baixa energia E_0 deveria ser tratado de modo especial. Menos sutilmente, outras propriedades interessantes podem ser deduzidas da eq.(2.3) como por exemplo, que $\mu \leq E_0$, uma vez que o número de ocupação tem que ser positivo. Para temperatura ambiente todos os gases se comportam classicamente, de forma que podemos negligenciar o 1 no denominador na segunda igualdade da eq.(2.3). Assim sendo, para um cubo rígido de raio r_0 , pode-se mostrar que:

$$N_j \leq N_0 = \left(\frac{\lambda_T}{r_0} \right)^3 N \ll 1, \quad (2.5)$$

significando que todos os estados são, na prática, igualmente e microscopicamente populados. Nesse sentido, não é tão surpreendente que em $T = 0$ todas as partículas estejam no estado fundamental. O fenômeno interessante é que há possibilidade de uma ocupação macroscópica do estado fundamental (da ordem do número de partículas N) em temperaturas finitas e é justamente esse o fenômeno da CBE.

Considere o sistema de N bósons mantido em um volume V constante e reduza a tempe-

ratura. Para manter a normalização representada pela eq.(2.4), o potencial químico μ deve se ajustar no sentido de se aproximar do valor da energia do estado fundamental, isto é, $\mu \rightarrow E_0$. Abaixo de alguma temperatura crítica T_c , o número de ocupação em qualquer estado que não seja o fundamental só pode atingir N se $\mu = E_0$ e, portanto, o potencial químico já não depende mais da temperatura. Para temperaturas abaixo de T_c , o número de ocupação dos estados excitados diminui enquanto que a população do estado fundamental aumenta proporcionalmente. A CBE também é acompanhada pelo aparecimento de um pico pronunciado e distinto no calor específico [16] (como pode-se ver na figura 2.1) do sistema na temperatura crítica [13, 17]. Essas discontinuidades em propriedades termodinâmicas são fenômenos típicos de transições de fase.

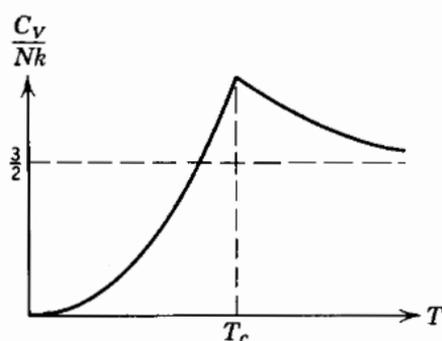


Figura 2.1: Calor específico a volume constante (C_v) em função da temperatura.

2.2 CBE: a ocupação macroscópica do estado fundamental

Uma transição de fase é a transformação de um sistema para um novo estado macroscópico, com propriedades físicas distintas. Do ponto de vista da Mecânica Estatística, durante a transição de fase a função de partição (ou alguma das propriedades termodinâmicas derivadas dela), apresentará alguma singularidade. Além disso, a Mecânica Estatística nos dá a informação de que para termos uma transição de fase precisamos que o sistema esteja no limite termodinâmico, ou seja, tanto o volume quanto o número de partículas do sistema tendendo ao infinito enquanto a densidade é mantida constante. Sabe-se também [18] que em sistemas finitos a função de partição, assim como todas as propriedades termodinâmicas derivadas dela, estão completamente

livres de qualquer singularidade, ou seja, livre de qualquer possível transição de fase. Contrastando com essa definição, estamos familiarizados com experimentos que realizaram uma transição de fase gerando condensados de Bose-Einstein (BE). Todas as experiências em questão envolviam um número limitado de átomos que variava entre 10^6 e 10^9 , estando ainda assim, muito distante do limite termodinâmico. Considerando que o método mais utilizado para o resfriamento do condensado é o de *magnetic traps* (armadilhas magnéticas), método esse que se baseia em confinar os átomos de menor energia cinética (menor temperatura). Pode-se ver então que o motivo da pequena quantidade de átomos se deve ao fato de que o principal método para resfriar o sistema consiste justamente em remover átomos.

Entretanto, em tais experimentos não é errado falar em condensados de BE, pois apesar de não corresponder totalmente aos requisitos da teoria (dimensionalidade, volume e número finito de átomos), não estamos sujeitos às mesmas limitações propostas por ela. Einstein [1], Hohenberg [6] e Mermin [7] ao se referir a um condensado de BE, estavam propondo um condensado em um sistema infinito, sem barreiras: um condensado de partículas livres. Em tal sistema a condensação ocorre no espaço de momentum, enquanto no espaço de configuração, a densidade dos átomos seria finita por todo o espaço. Experimentalmente é necessário conter os átomos, especialmente quando se utilizam as "armadilhas magnéticas" (método que confina os átomos em um potencial magnético). Ao acrescentar essa barreira no condensado estamos alterando fundamentalmente a natureza da CBE devido ao acoplamento entre a energia e espaço. O teorema de Chester, Penrose e Onsager (teorema CPO) [19, 20], que é baseado num lema de Penrose e Onsager [21], nos diz que não pode haver transição de fase em um sistema com menos de três dimensões. Entretanto, o mesmo teorema tem como condição de validade que o sistema deve ter uma densidade de partículas n finita em todo o espaço, condição essa que é violada ao acrescentarmos um simples Oscilador Harmônico (OH) que apresenta uma densidade infinita na origem quando ocorre uma CBE [22].

Comparando ao condensado em espaço de momentum, podemos definir uma pseudotransição que contém as características básicas de uma transição de fase, ou seja, uma mudança abrupta na ocupação do estado fundamental, quando o sistema é resfriado à baixas tempera-

turas. Trabalhos teóricos [23, 24] também mencionam uma temperatura pseudocrítica onde, para valores inferiores a esta, o potencial químico do sistema aumenta muito lentamente e a ocupação do estado fundamental cresce rapidamente.

Uma análise profunda dos teoremas em questão pode ser vista em detalhe em diversos trabalhos teóricos [25, 26], mas isto foge ao objetivo dessa dissertação. Para manter a densidade constante em todos os pontos e estudar o limite termodinâmico dos sistemas aqui abordados, usamos um recurso de suavização do potencial proposto por Mullin [22] e usado também por Ketterle [5]. O método proposto por Mullin equivale ao um re-escalamento do potencial em função do número de partículas. Para o potencial harmônico, esse procedimento é o equivalente a abaixar a frequência de oscilação para zero, enquanto N é aumentado. O procedimento parece pouco físico para o oscilador harmônico, mas o equivalente em uma situação fisicamente mais plausível seria a de aumentar os lados do cubo como função do número de partículas para o confinamento na caixa. Embora, tal procedimento pareça mais um recurso matemático que experimental, esse modelo descreve bem experiências nas quais os gases são confinados por meio de potenciais suaves, campos gravitacionais e contêineres rotatórios [27]. O procedimento de suavização será detalhado para o oscilador e a caixa bidimensionais na sequência deste capítulo. Vale ressaltar, já neste ponto, que a estrutura dos níveis de energia não se altera, apenas o valor nominal da energia dos níveis.

O motivo de utilizar sistemas bidimensionais em nosso trabalho, é que são estes justamente os mais utilizados nos experimentos. Como os átomos tem que ser restringidos pelas "armadilhas magnéticas" os potenciais mais utilizados são os do OH e a caixa bidimensional, sendo estes sistemas analisados a seguir no decorrer desse capítulo.

2.3 Confinamentos bidimensionais suavizados

2.3.1 Análise do OH bidimensional

Os cálculos a seguir foram baseados em [22], e adaptados para os nossos sistemas. Como a teoria nos diz que as transições de fase devem ocorrer no limite termodinâmico, temos então que analisar nossos sistemas para vermos como algumas de suas características mudam a medida que vamos nos aproximando desse limite. É necessário, portanto, um processo de suavização do potencial para que possamos variar o número de partículas mantendo a densidade constante. Caso somente alterássemos o número de partículas não poderíamos ter certeza de que a densidade não estivesse influenciando nas características analisadas, enquanto com o procedimento utilizado a seguir veremos exatamente as diferenças que ocorrem à medida que aproximamos o nosso sistema finito do limite termodinâmico.

Para as análises a seguir, utilizaremos um OH bidimensional isotrópico, cujo Hamiltoniano e níveis de energia são definidos por:

$$H = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{\omega^2 x^2}{2} + \frac{p_y^2}{2m} + \frac{\omega^2 y^2}{2} \quad e \quad E_{n_x, n_y} = \hbar\omega(n_x + n_y + 1). \quad (2.6)$$

Sabendo que o número de partículas do sistema é dado pela distribuição de BE, N é obtido através da relação:

$$N = \sum_{n_x, n_y=0}^{\infty} \frac{1}{e^{\beta(\hbar\omega(n_x+n_y+1)-\mu)} - 1}, \quad (2.7)$$

onde $\beta = 1/k_B T$, sendo k_B a constante de Boltzmann, T a temperatura e μ o potencial químico. Considerando a densidade $\rho = N/R_s^2$ onde R_s é o raio de alcance do potencial do OH, para mantermos a densidade constante, teremos que aumentar o tamanho do sistema para compensar as novas partículas ao se aumentar N , sendo assim $R_s \propto \sqrt{N}$. Podemos definir o potencial harmônico em função de R_s de maneira que o potencial harmônico e frequência do sistema sejam dados por:

$$U(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} V_0 \left(\frac{\mathbf{r}}{R_s} \right)^2 \quad (2.8)$$

$$\omega = \sqrt{\frac{V_0}{R_s^2 m}} \propto \frac{1}{R_s} \propto \frac{1}{\sqrt{N}}. \quad (2.9)$$

Com essa suavização do potencial a frequência terá direta influência do número de partículas. Considerando que a energia é proporcional a ω vamos ter uma mudança na distância entre os

níveis de energia tornando-os mais compactados à medida que aumentamos N . Podemos definir uma temperatura de escala T_0 como:

$$T_0 = \frac{\hbar}{k_B} \sqrt{\rho \frac{V_0}{m}}. \quad (2.10)$$

Com essa definição podemos reescrever a eq.(2.7) em função de T_0/T e unificando a soma em um único índice, tomando o cuidado com os estados degenerados, ela se torna:

$$N = N_0 + \sum_{p=0}^{\infty} \frac{p+2}{e^{\frac{T_0}{T\sqrt{N}}p+\alpha} - 1}, \quad (2.11)$$

onde $\alpha = \beta(\hbar\omega - \mu) + \frac{T_0}{T\sqrt{N}}$. Como o estado fundamental é de extrema importância para as análises posteriores, ele foi explicitado como N_0 , em (2.11).

Considerando o limite termodinâmico, o espaçamento entre os níveis de energia será tão pequeno que ele pode ser tomado por contínuo, isto é, $\omega \rightarrow 0$, $\Delta E = \frac{T_0}{T\sqrt{N}} \ll E$. Podemos então aproximar a soma da eq.(2.11), por uma integral:

$$N \approx N_0 + \int_0^{\infty} \frac{p+2}{e^{\frac{T_0}{T\sqrt{N}}p+\alpha} - 1} dp. \quad (2.12)$$

Definimos uma nova variável $u = \frac{T_0}{T\sqrt{N}}p$ de maneira que eq.(2.12) fique escrita em função das Integrais de Bose. Temos assim:

$$N \approx N_0 + N \left(\frac{T}{T_0} \right)^2 \int_0^{\infty} \frac{u}{e^{u+\alpha} - 1} du + 2\sqrt{N} \frac{T}{T_0} \int_0^{\infty} \frac{1}{e^{u+\alpha} - 1} du, \quad (2.13)$$

onde as integrais de Bose são dadas por:

$$F_{\sigma}(\alpha) = \frac{1}{\Gamma(\sigma)} \int_0^{\infty} du \frac{u^{\sigma-1}}{e^{u+\alpha} - 1} = \sum_{p=1}^{\infty} \frac{e^{-\alpha p}}{p^{\sigma}}, \quad (2.14)$$

sendo $\Gamma(\sigma)$ a Função Gama. Considerando o limite termodinâmico é simples de se ver que o termo de ordem N irá dominar sobre os outros dois (N_0 e \sqrt{N}). Desta forma podemos aproximar a eq.(2.13) simplesmente pelo termo em $F_2(\alpha)$. Vale notar que para $\sigma = 1$, as integrais de Bose têm limite finito quando α é pequeno. Sendo α função do estado fundamental, μ e $1/\sqrt{N}$, a T_c para a qual o potencial químico é zero resultará em $\alpha = 0$. Isso deve-se ao fato dos outros dois termos serem funções de $1/\sqrt{N}$ (seja diretamente como o terceiro, ou devido à

condição imposta a ω na eq.(2.9)) e estando no limite termodinâmico ambos tendem a zero.

Para acharmos essa T_c expandimos $F_2(\alpha)$

$$F_2(\alpha) \approx \zeta(2) - \alpha(1 - \ln \alpha) + \dots \quad (2.15)$$

sendo $\zeta(2)$ a função ζ de Riemann. A partir dessa aproximação é fácil ver que a ocupação na temperatura T_c será dado por

$$N \approx N \left(\frac{T_c}{T_0} \right)^2 F_2(0), \quad (2.16)$$

de onde podemos finalmente estimar T_c como

$$T_c \approx \sqrt{\frac{1}{\zeta(2)}} T_0 \approx 0,78 T_0. \quad (2.17)$$

De posse do limite superior da temperatura para ocupação, podemos ver a partir da eq.(2.13) (note que para $T < T_c$, α será sempre zero) que a ocupação do estado fundamental, para as temperaturas inferiores a T_c será:

$$\frac{N_0}{N} \approx 1 - \left(\frac{T}{T_c} \right)^2. \quad (2.18)$$

Pela eq.(2.18) fica claro no caso de $T = T_c$ a ocupação do estado fundamental será zero, e tal transição brusca confirma a transição de fase no sistema, caracterizando também a existência de uma condensação de BE no caso do OH bidimensional isotrópico. Vale notar que para N finito, não podemos continuar usando a aproximação da eq.(2.15), e o termo referente a F_1 não poderá ser considerado nulo, alterando assim não só o comportamento da ocupação do estado fundamental, mas também da T_c . Vamos agora calcular numericamente o potencial químico para diversos valores de N, nos possibilitando assim, ver as diferenças de comportamento entre os diferentes casos.

Para calcular numericamente μ , utilizamos o método da bissecção. Tal método nos diz que sendo $f(x)$ uma função contínua no intervalo $[a, b]$, cujo produto $f(a)f(b) < 0$, então existe nesse intervalo algum x' tal que $f(x') = 0$. Subtraindo N em ambos lados da eq.(2.7), o método se torna aplicável permitindo calcular o potencial químico. Sendo assim, usamos dois valores de teste para μ e a cada iteração verificamos (da maneira descrita acima) se o valor correto do

potencial está contido no intervalo escolhido e em qual metade do intervalo ele está localizado. Dessa maneira o intervalo onde o valor para que $f(x') = 0$ está contido, diminui pela metade a cada passo. Como em princípio poderíamos sempre achar um intervalo menor onde μ se encontra, vamos definir a precisão pelo número de partículas que obtemos usando o valor do potencial estipulado. Portanto vamos definir como precisão numérica o quão perto chegamos de N definido anteriormente, que no caso será $\pm 10^{-12}$.

Na figura 2.2 temos o potencial químico normalizado pela energia do estado fundamental. Essa normalização é necessária, pois no limite termodinâmico e abaixo da T_c , μ tende justamente ao valor de E_0 . Sabendo que o número de partículas influencia ω , e portanto a energia do sistema, o valor da energia no estado fundamental seria diferente para cada caso. Normalizando por essa energia temos então que para todos os casos o potencial começará no mesmo valor ($\mu \approx 1$). Podemos ver que para baixos valores de N , a transição do sistema não fica tão clara, mas quando aumentamos drasticamente N , temos um comportamento que chamamos de pseudotransição. Conforme mencionado anteriormente, apesar não ser uma descontinuidade, fica claro que para $N \rightarrow \infty$ a derivada de μ em T_c varia abruptamente. Analisando a ampliação podemos ver que para quanto maior o número de partículas, mais próximo do valor de $T_c = 0,78T_0$ vamos ter a transição do potencial, confirmando assim o resultado obtido na eq.(2.18).

A Fig 2.3 nos mostra a ocupação do estado fundamental para os casos calculados, assim como a curva proveniente da aproximação teórica (eq.(2.18)). Podemos ver novamente que para N grande e na região de T_c vamos ter uma pseudotransição, isto é, uma mudança no comportamento da propriedade (nesse caso a ocupação), mas sem termos uma real descontinuidade na curva, motivo pelo qual adicionamos o prefixo "pseudo" ao falarmos da transição de estado.

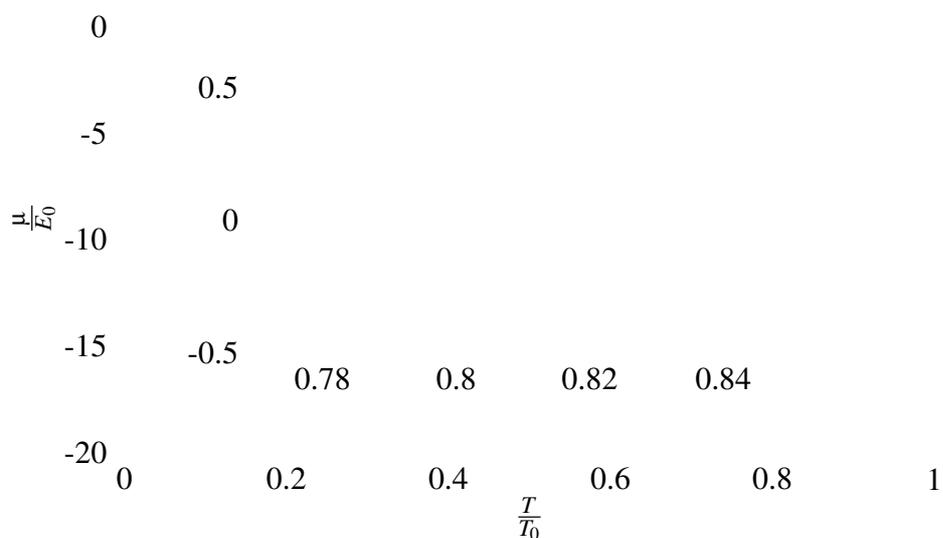


Figura 2.2: Potencial químico (normalizado pela energia do estado fundamental) em função da temperatura normalizada por T_0 referente ao OH isotrópico e com ampliação da região perto de $T_c = 0,78T_0$. Linha sólida representa sistema com 10 partículas, linha tracejada representa 100 partículas e linha traço-ponto 10000 partículas

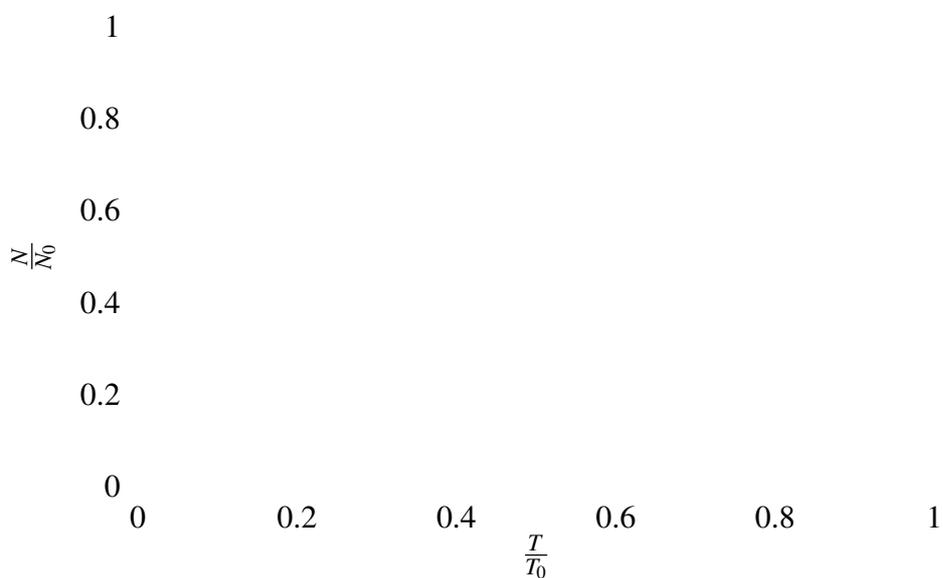


Figura 2.3: Ocupação do estado fundamental normalizado pelo número de partículas do sistema em função da temperatura normalizada por T_0 para o caso do OH isotrópico. Linha sólida representa sistema com 10 partículas, linha tracejada 100 partículas, linha traço-ponto 10000 partículas e linha pontilhada a previsão teórica (limite termodinâmico $N \rightarrow \infty$)

2.3.2 OH Anisotrópico

Tendo visto o caso acima, vamos agora analisar o sistema bidimensional, mas com uma anisotropia nas frequências utilizadas. Tal mudança pode a princípio parecer simples, mas dependendo da escolha que fizermos para os respectivos ω 's, (razão entre si racional ou irracional) vamos ter um sistema que apresenta ou não degenerescência, e assim poderemos ver justamente qual será a influência dessa característica no caso do OH. Seja, portanto, um OH bidimensional cujo Hamiltoniano e níveis de energia são dados por:

$$H = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{\omega_x^2 x^2}{2} + \frac{p_y^2}{2m} + \frac{\omega_y^2 y^2}{2} \quad e \quad E_{n_x, n_y} = \hbar\omega_x n_x + \hbar\omega_y n_y. \quad (2.19)$$

Podemos definir as constantes $\tilde{\omega} = \sqrt{\omega_x \omega_y}$ e $\gamma = \sqrt{\frac{\omega_x}{\omega_y}}$, de tal maneira que podemos reescrever os níveis de energia como:

$$E_{n_x, n_y} = \hbar\tilde{\omega}\gamma \left(n_x + \frac{n_y}{\gamma^2} \right) + \frac{\hbar\tilde{\omega}\gamma}{2} \left(\frac{\gamma^2 + 1}{\gamma} \right). \quad (2.20)$$

De maneira análoga ao procedimento utilizado na eq.(2.10) definimos um T_0 , que no caso anisotrópico será dado por:

$$T_0 = \frac{\hbar\tilde{\omega}\sqrt{N}}{k_B}. \quad (2.21)$$

Tendo essas alterações em mente podemos reescrever a distribuição de BE da seguinte forma:

$$N = \sum_{n_x, n_y=0}^{\infty} \frac{1}{e^{\frac{T_0\gamma}{T\sqrt{N}} \left(n_x + \frac{n_y}{\gamma^2} \right) + \alpha} - 1}, \quad (2.22)$$

sendo $\alpha = -\beta\mu + \frac{T_0}{2\sqrt{NT}} \frac{\gamma^2 + 1}{\gamma}$. Diferentemente do caso anterior, não podemos trabalhar com a expressão inteira da distribuição, pois não podemos juntar os dois somatórios em um. Sendo assim, teremos que separar nossa equação em quatro partes, sendo elas:

$$\begin{aligned}
N' = & \frac{\overbrace{1}^{N_0}}{e^\alpha - 1} + \sum_{\substack{n_x=1 \\ (n_y=0)}}^{\infty} \frac{1}{e^{\frac{T_0}{T\sqrt{N}}\gamma n_x + \alpha} - 1} + \sum_{\substack{n_y=1 \\ (n_x=0)}}^{\infty} \frac{1}{e^{\frac{T_0}{T\sqrt{N}}\frac{n_y}{\gamma^2} + \alpha} - 1} + \\
& + \sum_{n_x, n_y=1}^{\infty} \frac{1}{e^{\frac{T_0}{T\sqrt{N}}\left(n_x + \frac{n_y}{\gamma^2}\right) + \alpha} - 1} \quad (2.23)
\end{aligned}$$

Dessa maneira explicitamos o estado fundamental, assim como os termos que contem n_x ou n_y iguais a zero, restando apenas um termo que acopla os dois índices. Como pretendemos escrever essas somas em função das Integrais de Bose, precisamos primeiramente reescrevê-las de maneira que a soma comece no índice zero. Definimos então as seguintes constantes:

$$\tau = \frac{T_0\gamma}{T\sqrt{N}}, \quad a = \tau + \alpha, \quad b = \frac{\tau}{\gamma^2} + \alpha, \quad c = \tau \left(1 + \frac{1}{\gamma^2}\right) + \alpha. \quad (2.24)$$

Aplicando então o limite de $N \rightarrow \infty$, e com isso aproximando as somas da eq.(2.24) por integrais (utilizamos novamente a aproximação $\omega \rightarrow 0$, $\Delta E = \frac{T_0}{T\sqrt{N}} \ll E$) e fazendo as substituições propostas acima teremos a seguinte aproximação:

$$N \approx N_0 + \int_0^\infty \frac{dx}{e^{\tau x + a} - 1} + \int_0^\infty \frac{dy}{e^{\tau \frac{y}{\gamma^2} + b} - 1} + \int_0^\infty \int_0^\infty dx dy \frac{1}{e^{\tau \left(x + \frac{y}{\gamma^2}\right) + \alpha} - 1}. \quad (2.25)$$

Fazendo uma mudança de variáveis para explicitar as Integrais de Bose, temos:

$$N \approx N_0 + \frac{1}{\tau} \int_0^\infty \frac{du}{e^{u+a} - 1} + \frac{\gamma^2}{\tau} \int_0^\infty \frac{du}{e^{u+b} - 1} + \frac{1}{\tau} \int_0^\infty \int_0^\infty du dy \frac{1}{e^{u + \frac{\tau y}{\gamma^2} + c} - 1}. \quad (2.26)$$

Tendo em vista a eq.(2.14), é fácil reescrever as integrais acima em função da série que é sua solução. No caso da integral dupla, utilizamos tal procedimento somente na integral referente a variável x, temos então que:

$$N \approx N_0 + \frac{1}{\tau} \sum_{p=1}^{\infty} \frac{e^{-ap}}{p} + \frac{\gamma^2}{\tau} \sum_{p=1}^{\infty} \frac{e^{-bp}}{p} + \frac{1}{\tau} \sum_{p=1}^{\infty} \frac{e^{-cp}}{p} \int_0^\infty e^{-\frac{\tau y p}{\gamma^2}} dy. \quad (2.27)$$

Resolvendo a última integral e realizando uma aproximação nos primeiros termos, vamos ter que:

$$N \approx N_0 - \frac{1}{\tau} \ln(1 - e^{-a}) - \frac{\gamma^2}{\tau} \ln(1 - e^{-b}) + \frac{\gamma^2}{\tau^2} \sum_{p=1}^{\infty} \frac{e^{-cp}}{p^2}. \quad (2.28)$$

Como $\tau \propto 1/\sqrt{N}$ no limite termodinâmico, somente o último termo será importante e, portanto:

$$N \approx \frac{T^2 N}{T_0^2} \sum_{p=1}^{\infty} \frac{e^{-cp}}{p^2}, \quad (2.29)$$

onde

$$c = -\beta\mu + \frac{T_0\gamma}{T\sqrt{N}} \left(1 + \frac{1}{\gamma^2}\right) + \alpha = -2\beta\mu + \frac{3T_0\gamma}{2T\sqrt{N}} \left(1 + \frac{1}{\gamma^2}\right). \quad (2.30)$$

Na temperatura crítica $\mu \approx 0$ e estando no limite termodinâmico, c também tende a esse valor ($c \propto 1/\sqrt{N}$). Portanto a eq.(2.29) pode ser escrita como:

$$1 \approx \frac{T_c^2}{T_0^2} \sum_{p=1}^{\infty} \frac{1}{p^2} \quad \longrightarrow \quad T_c \approx \sqrt{\frac{1}{\zeta(2)}} T_0. \quad (2.31)$$

A partir da eq.(2.28) podemos calcular a ocupação do estado fundamental para temperaturas abaixo de T_c e que estão no limite termodinâmico. Obtemos assim:

$$\frac{N_0}{N} \approx 1 - \frac{T^2}{T_0^2} \sum_{p=1}^{\infty} \frac{e^{-cp}}{p^2} = 1 - \left(\frac{T}{\zeta(2)T_0}\right)^2 = 1 - \left(\frac{T}{T_c}\right)^2. \quad (2.32)$$

Apesar de termos chegado ao mesmo valor limite para T_c e a mesma função para a ocupação do estado fundamental, as aproximações e expansões que não estavam presentes no caso isotrópico podem alterar o comportamento do sistema, fazendo que não seja o mesmo do caso isotrópico. Para ilustrar essas diferenças temos a figura (2.4), onde vemos que com o mesmo número de partículas no sistema o caso anisotrópico apresenta valores mais distantes do resultado teórico em comparação ao sistema isotrópico. Tal conclusão pode ser vista ao analisar o quão perto de $0,78T_0$ ficou a T_c para os diferentes casos e, no caso da ocupação, ver qual dos sistemas tem uma mudança mais abrupta quando aumentamos a quantidade de partículas.

2.3.3 Caixa Bidimensional

Faremos agora a análise da caixa bidimensional. O sistema consiste de uma caixa quadrada com suas arestas medindo "L". Considerando as massas das partículas iguais a um em unidades arbitrárias, os níveis serão dados por:

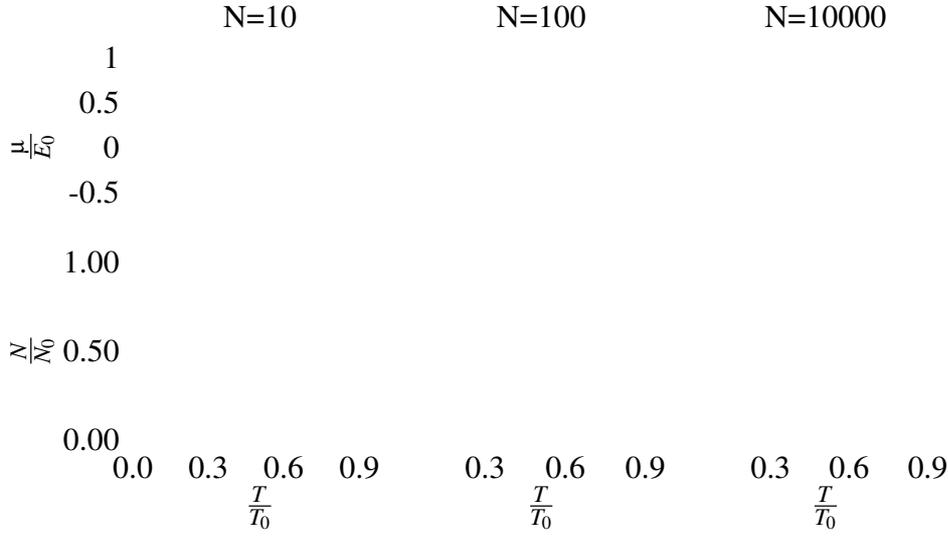


Figura 2.4: Comparação da ocupação do estado fundamental normalizada pelo número de partículas do sistema e da variação do potencial químico (normalizado pela energia do estado fundamental), ambos em função da temperatura normalizada por T_0 , entre o OH isotrópico e anisotrópico. Cada coluna corresponde a casos com diferentes números de partículas no sistema. Para o potencial químico foi evidenciada a abcissa para que se possa ver mais claramente a T_c (temperatura para qual $\mu = 0$). A linha sólida representa o caso isotrópico e a linha tracejada o anisotrópico. Para esses cálculos $\gamma = \sqrt[4]{\frac{2}{0,1}}$.

$$E_{n_x, n_y} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2L^2} (n_x^2 + n_y^2). \quad \text{Para } n_x, n_y = 1, 2, 3, \dots \quad (2.33)$$

Se tentarmos resolver esse sistema pelos mesmos métodos utilizados anteriormente veremos que as integrais de Bose sempre divergem. Portanto, para termos uma estimativa das propriedades, iremos adotar o procedimento utilizado por Ketterle em [5]. Uma propriedade importante para os cálculos é a densidade de estados do sistema $d(E)$ (e o seu inverso, que é o espaçamento médio dos níveis) que nesse caso é dado por:

$$d(E) = \frac{L^2}{2\pi \hbar^2} = \frac{1}{\bar{S}}. \quad (2.34)$$

Com a substituição $n_x^2 + n_y^2 = n^2$ e a densidade, podemos escrever a energia como $E = \frac{\pi n^2}{4d(E)}$ e,

expandindo em série a eq.(2.3), podemos escrever:

$$N = \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} z^j e^{-j\beta E_i}, \quad (2.35)$$

onde $z = e^{\beta\mu}$ é a fugacidade, $\beta = 1/k_B T$ e μ o potencial químico. Podemos aproximar a soma em i por uma integral. Normalmente integraríamos diretamente no(s) índice(s) que compõem os autovalores de energia, mas nesse caso iremos utilizar a densidade dos níveis de energia, de maneira que podemos reescrever a eq.(2.35) como

$$N - N_0 = \sum_{j=1}^{\infty} z^j \int d(E) e^{-j\beta E} dE. \quad (2.36)$$

Ketterle também propõe que não se faça a integral na energia considerando o estado fundamental ou o primeiro nível, mas sim uma integral sobre os estados excitados do potencial. Sendo assim a integral será feita entre o espaçamento médio dos níveis de energia (eq.(2.34)) e infinito:

$$N - N_0 = -\frac{d(E)}{\beta} \sum_{j=1}^{\infty} \frac{z^j}{j} e^{-j\beta E} \Big|_{\bar{s}}^{\infty} = \frac{d(E)}{\beta} \sum_{j=1}^{\infty} \frac{z^j}{j} e^{-j\beta \bar{s}}. \quad (2.37)$$

É fácil verificar que a soma em j da eq.(2.37) se refere a uma expansão em séries de potências.

Podemos então reescrevê-la como a função que deu origem a expansão (2.37):

$$N - N_0 = \frac{d(E)}{\beta} \ln \left(\frac{1}{1 - ze^{-\frac{\beta}{d(E)}}} \right) = -d(E)k_B T \ln \left(1 - ze^{-\frac{1}{k_B T d(E)}} \right). \quad (2.38)$$

Podemos agora determinar a T_c , e para isso consideramos $\mu = 0$ (e portanto $z = 1$) e $N_0 = 0$.

Substituindo na equação anterior, vamos ter

$$N = -d(E)k_B T_c \ln \left(1 - e^{\frac{1}{k_B T_c d(E)}} \right). \quad (2.39)$$

Podemos ainda expandir a exponencial (para $(k_B T_c d(E))^{-1} \ll 1$) de maneira que chegamos à:

$$N = -d(E)k_B T_c \ln \left(1 - 1 + \frac{1}{k_B T_c d(E)} \right) = d(E)k_B T_c \ln (d(E)k_B T_c). \quad (2.40)$$

Substituindo $d(E)$ podemos colocar a eq.(2.40) na mesma notação que [5], de maneira que

temos

$$N = \frac{L^2}{\lambda_r^2} \ln \frac{L^2}{\lambda_r^2}, \quad (2.41)$$

onde $\lambda_r = \left(\frac{2\pi\hbar^2 \ln N}{k_B T_0} \right)^{\frac{1}{2}}$ que é o comprimento de onda térmico de de Broglie, onde:

$$T_0 = \frac{2\pi\hbar^2 N}{L^2 k_B}. \quad (2.42)$$

Vale notar que a T_c obtida para a caixa bidimensional é a mesma do OH unidimensional como visto em [5]. Isso se deve ao fato de ambos não terem dependência em E na densidade dos níveis de energia. Também é importante citar que o mesmo procedimento pode ser utilizado em outros sistemas. Ketterle [5] mostra que com esse enfoque, onde se utiliza somente a densidade dos níveis, se obtêm para o OH, exatamente as mesmas expressões para a ocupação do estado fundamental e a T_c que nós obtemos levando em conta o conhecimento dos níveis de energia.

3 CBE para confinamentos bidimensionais caóticos

Como descrito no capítulo 2, usamos um método de suavização para potenciais bidimensionais que torna possível definir uma pseudo-transição de fase para sistemas com um número finito de partículas. Trabalhamos detalhadamente com o oscilador harmônico e a caixa bidimensional, sistemas classicamente integráveis onde as equações de movimento podem ser resolvidas e quanticamente solúveis, no sentido que as respectivas expressões analíticas para os autovalores de energia podem ser facilmente escritas.

Nosso principal objetivo nessa dissertação, no entanto, é a investigação das propriedades da CBE para sistemas bidimensionais com contraparte clássica caótica. Uma questão que pode ser investigada sob a luz da Fórmula do Traço de Gutzwiller [15], que relaciona densidade de energia com grandezas clássicas do sistema clássico análogo.

3.1 Limite Semiclássico: caos clássico e caologia quântica

O entendimento das propriedades estatísticas do espectro quântico produzido por sistemas não-integráveis é um dos problemas mais fundamentais da teoria do caos quântico. De acordo com a Teoria de Matrizes Aleatórias [14], as estatísticas das flutuações quânticas são universais e refletem somente as propriedades de simetria do sistema.

Há uma conjectura de Bohigas-Giannoni-Schmidt (BGS) [28] que diz que sistemas quânticos com dois graus de liberdade com análogo clássico integrável apresentam estatísticas espectrais descritas por distribuições Poissonianas, enquanto que sistemas quânticos com análogos

clássicos caóticos são descritos pelos ensembles gaussianos, sendo GOE (Gaussian Orthogonal Ensemble - Ensemble Gaussiano Ortogonal) para Hamiltonianas com simetria de reversão temporal ou GUE (Gaussian Unitary Ensemble - Ensemble Gaussiano Unitário) para Hamiltonianas sem simetria de reversão temporal, que poderia ser o caso de sistemas sujeitos a campos magnéticos, por exemplo. A estatística mais didática e também mais conhecida na área é a distribuição de primeiros vizinhos, que nada mais é que a distribuição dos *gaps* de energia entre níveis consecutivos. Um dos resultados mais fascinantes da conjectura de BGS é o fato de que os níveis de energia de estados quânticos associados com movimento classicamente caótico mostram muitos *avoided crossings* ou repulsões de níveis de energia, enquanto que a probabilidade de níveis degenerados em sistemas classicamente integráveis é relativamente alta. As distribuições espectrais de Poisson, GOE e GUE, como foram definidas em [29], podem ser visualizadas na figura 3.1.

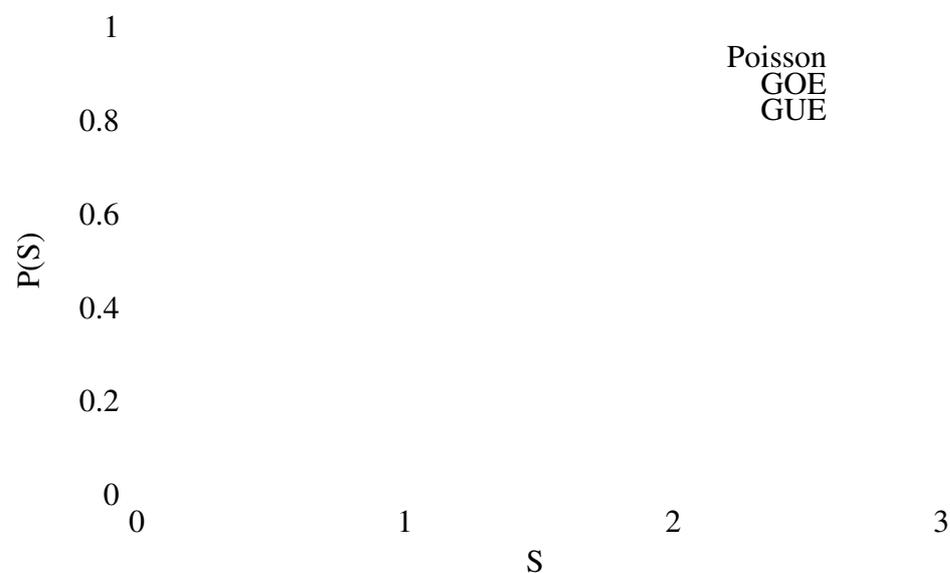


Figura 3.1: Visualização das distribuições espectrais do espaçamento entre níveis consecutivos, onde a linha sólida representa a distribuição de Poisson - $P(s) = e^{-s}$ - a tracejada a distribuição Gaussiana Ortogonal - $P(s) = \frac{\pi s}{2} e^{-\frac{\pi}{4}s^2}$ - e a pontilhada a distribuição Gaussiana Unitária - $P(s) = \frac{32s^2}{\pi^2} e^{-\frac{4}{\pi}s^2}$.

Considerando que a maioria das estimativas analíticas para o número de ocupação são feitas no limite semiclássico, dependendo explicitamente da densidade de energia (ver capítulo 2), a

pergunta a que nos propusemos a responder é se haveria algum vestígio de caos na CBE em confinamentos classicamente caóticos. O elo entre a CBE e o caos quântico é a Fórmula do Traço de Gutzwiller [15], uma aproximação semiclássica obtida entre 1969 e 1971, que relaciona a densidade de energia com grandezas clássicas. O método semiclássico é baseado na hipótese que quando a constante de Planck (de um Hamiltoniano escalonado) vai à zero, as grandezas quânticas podem ser expressas através de grandezas calculadas na Mecânica Clássica. O método *WKB* unidimensional serve como um bom exemplo deste tipo de aproximação. Em mais de um grau de liberdade, o método *WKB* padrão só pode ser generalizado para os chamados sistemas integráveis, para os quais todas as trajetórias clássicas permanecem em toros invariantes. Porém, para sistemas genéricos, uma parte finita das trajetórias clássicas cobrem regiões de dimensionalidade maior que a dos toros invariantes. Em particular, para sistemas ergódicos, quase todas as trajetórias clássicas espalham-se uniformemente sobre toda a superfície de energia [12]. Nestes casos, o único método semiclássico geral é a Fórmula do Traço de Gutzwiller.

De acordo com essa Fórmula do Traço de Gutzwiller, a densidade de estados de um sistema bidimensional, no limite de $\hbar \rightarrow 0$, tem a seguinte aproximação:

$$d(E) \stackrel{def}{=} \sum_n \delta(E - E_n) \approx \bar{d}(E) + d^{osc}(E), \quad (3.1)$$

onde $\bar{d}(E)$ é a parte suavizada, ou média, da densidade de níveis, sendo a parte principal dada pelo termo de Weyl:

$$\bar{d}(E) = \int \frac{d\vec{p}d\vec{q}}{(2\pi\hbar)^2} \delta[E - H(\vec{p}, \vec{q})], \quad (3.2)$$

e $d^{osc}(E)$ é a parte oscilante que pode ser formalmente expressa como uma soma sobre todas as órbitas periódicas p com uma dada energia E :

$$d^{osc}(E) = \sum_p \sum_{n=1}^{\infty} A_p(E, n) \cos \left[n \left(\frac{S_p(E)}{\hbar} - \frac{\pi \nu_p}{2} \right) \right], \quad (3.3)$$

onde

$$A_p(E, n) = \frac{T_p(E)}{\pi\hbar \sqrt{|Det(M_p^n - 1)|}}, \quad (3.4)$$

sendo:

$$S_p(E) = \oint \vec{p} \cdot d\vec{q} \text{ a ação clássica calculada ao longo da órbita periódica primitiva } p,$$

$$T_p(E) = \frac{\partial S_p(E)}{\partial E} \text{ é o período da órbita periódica primitiva,}$$

v_p é uma fase adicional que surge devido à existência de pontos focais na órbita periódica p onde a aproximação semiclássica deve ser modificada, M_p é a matriz monodromia 2×2 , cujo determinante vale

$$\sqrt{|\text{Det}(M_p^n - 1)|} = \begin{cases} 2 \sinh(v_n/2) & \text{para órbita hiperbólica direta} \\ 2 \cosh(v_n/2) & \text{para órbita hiperbólica inversa,} \\ 2 \sin(u_n/2) & \text{para órbita elíptica} \end{cases}$$

onde v_n e u_n são os autovalores da matriz monodromia M e a soma em n leva em conta as repetições da órbita primitiva p .

3.2 Potenciais de confinamento

Para estudar os possíveis efeitos do caos na CBE, estudamos dois potenciais classicamente não-integráveis: o Potencial Nelson e o Potencial Quártico. Em ambos os casos, assumimos um bóson de massa unitária carregado sujeito à um campo magnético B_0 perpendicular à superfície xy , cuja Hamiltoniana (em unidades arbitrárias) é dada por:

$$H = \frac{1}{2} \left(P_x - \frac{B}{2} y \right)^2 + \frac{1}{2} \left(P_y + \frac{B}{2} x \right)^2 + V(x, y), \quad (3.5)$$

onde $B = eB_0/2c$, e é a carga da partícula e c a velocidade da luz, os potenciais $V(x, y)$ são dados por:

$$V(x, y) = \left(y - \frac{x^2}{2} \right)^2 + \mu x^2 \quad \text{e} \quad (3.6)$$

$$V(x, y) = \alpha x^4 + \beta y^4 + \frac{\gamma}{2} (xy)^2. \quad (3.7)$$

A eq.(3.6) representa o Potencial Nelson e a eq.(3.7) representa o Potencial Quártico. Os parâmetros μ , α , β e γ serão mantidos constantes nesta dissertação, mas nos valeremos da variação do campo magnético B , para estudarmos os sistemas em diferentes regimes clássicos. Esses potenciais foram devidamente escolhidos por se tratarem de potenciais bem conhecidos tanto clássica quanto quanticamente [8, 30] (e as referências contidas nestas), e principalmente por suas similaridades (em baixas energias) com os sistemas simples e muito bem conhecidos, sendo eles, respectivamente, o OH bidimensional anisotrópico e a caixa bidimensional.

3.2.1 Dinâmica clássica dos potenciais

Para visualizarmos a dinâmica do sistema no espaço de fase, sendo ele quadridimensional, recorreremos às seções de Poincaré. Fixamos então uma energia específica e constante para o sistema, criando assim um vínculo para uma das coordenadas. Com isso já podemos trabalhar com um sistema tridimensional, e estudamos então o problema através das coordenadas de ângulo, onde podemos definir toros invariantes, sendo cada toro a representação da evolução do sistema para uma condição inicial diferente.

Num sistema integrável não teremos caos, e um corte nos toros mostraria formas circulares (ou elípticas) concêntricas em relação a um ponto fixo elíptico. Caso nós introduzíssemos uma perturbação no sistema, o toro apesar de se modificar, manteria suas propriedades toroidais, mas em um sistema caótico tal perturbação, se suficientemente forte, poderia quebrar o toro em um número igual de pontos elípticos e hiperbólicos. O teorema Kolmogorov-Arnold-Moser (Teorema KAM) [12] nos mostra o quão forte deve ser a perturbação para que o toro sobreviva.

Analisando as seções do nosso sistema podemos identificar diversas famílias de órbitas periódicas. Para definir com precisão cada família precisamos de dois parâmetros: a energia que o sistema está submetido e o seu período. Portanto, em uma seção de Poincaré específica (energia fixa) podemos diferenciar as famílias pelo período de suas órbitas. Fazendo a análise inversa, olhando uma família de período específico e variando (aumentando) a energia do sistema, teremos determinados pontos onde essa família apresentará uma bifurcação, que gera novas famí-

lias, sendo elas elípticas ou hiperbólicas, e sempre com um período que é um múltiplo inteiro da original. Tal método pode ser entendido como a aplicação de uma perturbação no sistema, que vai aumentando sua influência e eventualmente destrói um dos toros mencionados, com isso gerando uma nova família elíptica geralmente de período maior, sendo ele um múltiplo inteiro do período original.

O Potencial Nelson

$$V(x,y)$$

x y

Figura 3.2: Representação gráfica das linhas equipotenciais do potencial Nelson

O sistema consiste em um potencial parabólico que apresenta uma paridade na coordenada x , e sendo assim, uma simetria no eixo- y . Como já mencionamos, esse potencial não-linear é não-integrável e apresenta um caos suave (*soft-chaos*) no sentido que o espaço de fases exibe regiões regulares e caóticas para a mesma energia. O valor mais baixo apresentado por ele está localizado na origem, onde toda a energia do sistema é cinética ($V(0,0) = 0$). Por sempre apresentar valores positivos, teremos que para uma energia fixa as coordenadas do sistema estarão limitadas a um volume finito do espaço de fase ($\frac{1}{2}(P_y^2 + P_x^2) \geq E \geq V(x,y)$). O potencial Nelson em baixas energias se assemelha ao OH bidimensional anisotrópico, estando portanto em um regime regular onde esperamos ver (na seção de Poincaré) somente famílias elípticas

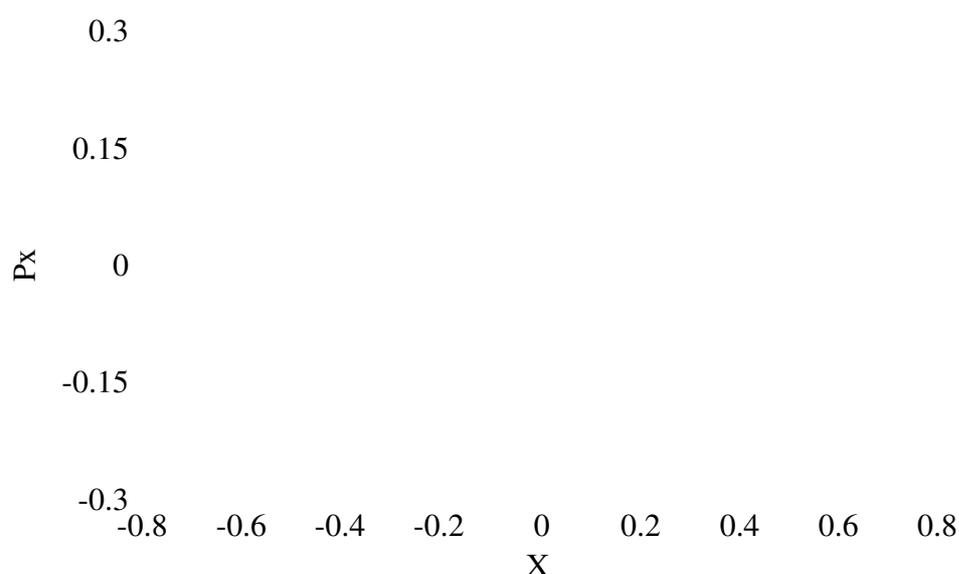


Figura 3.3: Seção de Poincaré $X \times P_x$ para o potencial Nelson para $E=0,05$ (correspondendo ao caso de $\hbar = 0,01$) e campo magnético nulo, para $y = 0$ e $P_y > 0$.

concêntricas em relação a algum ponto fixo. À medida que aumentamos a energia do sistema, a não linearidade do sistema vai se tornando mais importante, e quando essa perturbação satisfizer o teorema KAM [12], os primeiros toros serão destruídos. Nos resultados numéricos, o parâmetro μ foi fixado em 0,1, em acordo com os resultados na literatura [8]. Estudos sobre as órbitas periódicas e suas bifurcações (do potencial Nelson), foram feitos com detalhes em [31–33]. Para baixas energias a dinâmica do sistema é regular, pois como já foi explicado o efeito do acoplamento não-linear dos osciladores precisa de um valor mínimo de energia para que tenha uma influência significativa no sistema. Essas análises são feitas para um sistema sem campo magnético aplicado, e vamos agora fazer um breve resumo da influência do campo nesse potencial.

Uma análise qualitativa em termos de seção de Poincaré mostra também que a ação de um campo muito fraco, num primeiro momento, aumenta a caoticidade do sistema, pois a ação do campo perturba o sistema, quebrando alguns toros racionais, provocando assim bifurcações que dão origem a órbitas instáveis. Por outro lado, sabemos também que a ação de campos muito fortes é de regularizar o sistema, uma vez que o termo quadrático em B na Hamiltoniana acaba dominando os termos do potencial. Esse processo de regularização pode não ser tão simples,

uma vez que vem acompanhado de inúmeras bifurcações. Percebemos, então, que temos uma transição de regularidade para caoticidade, dependente do aumento da energia que é intrínseca do potencial e uma transição de caoticidade para regularidade dependente do campo, sendo a regularidade conseguida, neste caso, para campos relativamente muito fortes [8].

Potencial Quártico

$V(x,y)$

Y

X

Figura 3.4: Representação gráfica das linhas equipotenciais do potencial Quártico

O sistema consiste em um potencial que apresenta paridades nas coordenadas x e y , e sendo assim simétrico em relação aos eixos x e y e também apresenta um caos suave. O valor mais baixo apresentado por ele está localizado na origem, onde toda a energia do sistema é cinética ($V(0,0) = 0$). Por sempre apresentar valores positivos teremos que, para uma energia fixa, as coordenadas do sistema estarão limitadas a um volume finito do espaço de fase ($\frac{1}{2}(P_y^2 + P_x^2) \leq E \leq V(x,y)$). Para baixas energias, o fundo do potencial quártico se assemelha mais à caixa bidimensional (referindo-se no espaço de configuração), mas a analogia não é tão direta, pois a caixa bidimensional é integrável, enquanto que o potencial quártico já é bastante caótico mesmo para baixas energias. Trabalharemos com o potencial quártico com $\alpha = \frac{1}{4}$, $\beta = \frac{1}{4}$ e $\gamma = 6$, para os quais há resultados recentes na literatura [30]. Para efeito do estudo do caos

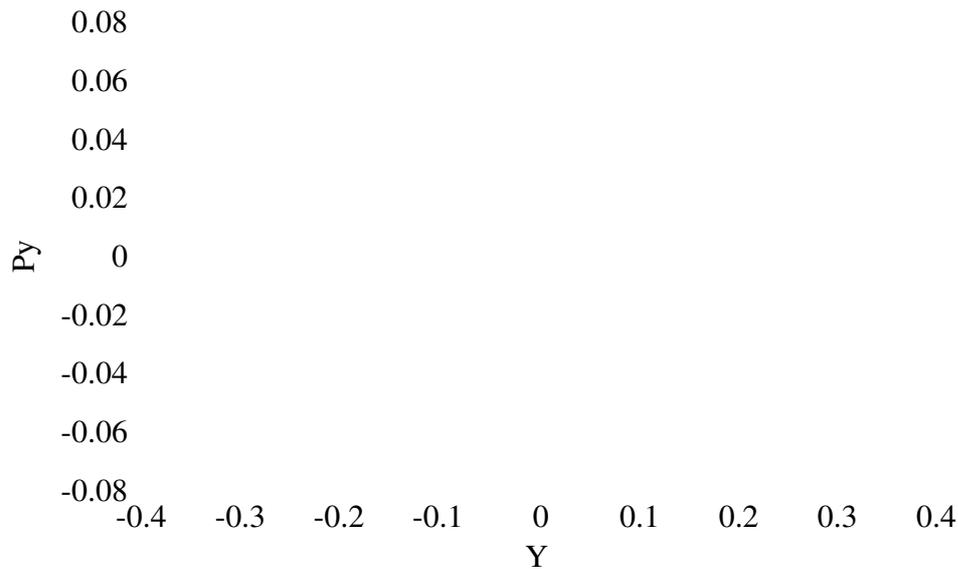


Figura 3.5: Seção de Poincaré $Y \times P_y$ para o potencial Quártico para $E=0,003$ e campo magnético nulo, para $x = 0$ e $P_x > 0$.

no sistema, variamos o campo magnético para regularizar o sistema. Isso acontece pois, uma partícula carregada sujeita a um campo magnético descreve trajetórias circulares com um raio ciclotrônico que diminui à medida que o campo aumenta. Para campos baixos, o raio das trajetórias é grande e a partícula interage com as "paredes" do potencial. Para campos muito altos, no entanto, o raio da trajetória é muito pequeno e a partícula praticamente não interage com as paredes do confinamento. Assim, a tendência para campos altos é de regularizar o sistema conforme figura 3.6.

3.2.2 A quantização dos potenciais

No sistema quântico temos que resolver a Equação de Schrödinger associada ao problema, para dessa maneira obter os autovalores dos dois sistemas em questão (tanto para o potencial Nelson quanto para o potencial quártico). Como visto acima, os potenciais são não-lineares e não-integráveis e o método utilizado para obter os autovalores é expandir o Hamiltoniano (3.8) na base dos operadores criação e destruição (eqs. (3.9) e (3.10)).

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + V(x,y) \right] \Psi(x,y) = E\Psi(x,y) \quad (3.8)$$

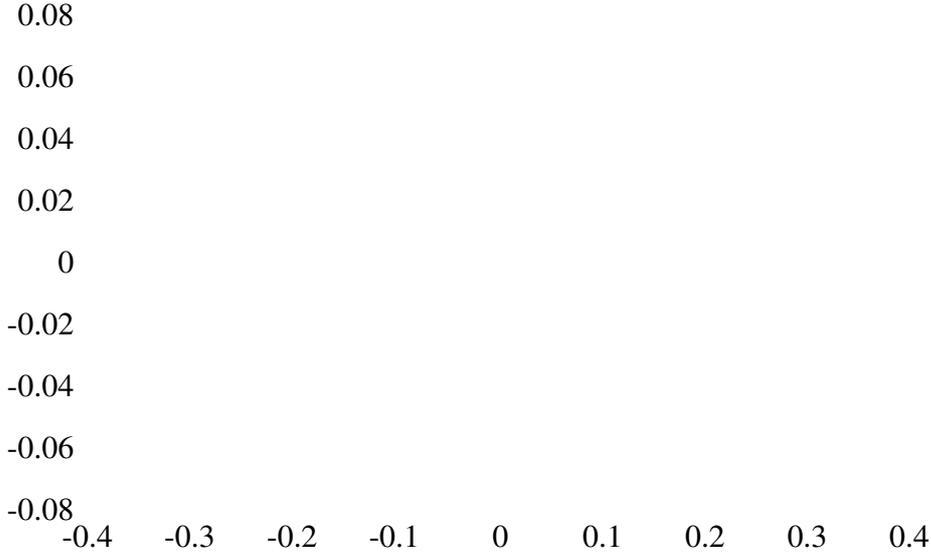


Figura 3.6: Seção de Poincaré $Y \times P_y$ para o potencial Quártico para $E=0,003$ e $\mathbf{B}=\mathbf{0,35}$, para $x = 0$ e $P_x > 0$

$$\hat{X} = \frac{1}{i\omega_x\sqrt{2m}}(a_+ - a_-) \quad \hat{Y} = \frac{1}{i\omega_y\sqrt{2m}}(b_+ - b_-) \quad (3.9)$$

$$\hat{P}_x = \sqrt{\frac{2}{m}}(a_+ + a_-) \quad \hat{P}_y = \sqrt{\frac{2}{m}}(b_+ + b_-), \quad (3.10)$$

onde os operadores, quando aplicados à função de onda, operam da seguinte forma:

$$a_+\Psi_{n_x,n_y} = i\sqrt{\hbar\omega_x(n_x+1)}\Psi_{n_x+1,n_y} \quad b_+\Psi_{n_x,n_y} = i\sqrt{\hbar\omega_y(n_y+1)}\Psi_{n_x,n_y+1} \quad (3.11)$$

$$a_-\Psi_{n_x,n_y} = -i\sqrt{\hbar\omega_x n_x}\Psi_{n_x-1,n_y} \quad b_-\Psi_{n_x,n_y} = -i\sqrt{\hbar\omega_y n_y}\Psi_{n_x,n_y-1}. \quad (3.12)$$

Dessa maneira obtemos os elementos da matriz Hamiltoniana, cuja diagonalização resultará nos autovalores do sistema. Como estamos trabalhando com um potencial que é um poço infinito, teremos de limitar a matriz a um tamanho em que o nível de energia E , sendo E o valor desejado a estudar, esteja dentro da região de autovalores não afetados pelo erro numérico.

A região não afetada pelo erro numérico é estimada com a diferença dos resultados obtidos com aqueles de uma matriz de ordem superior, uma diferença aceitável ($\pm 10^{-12}$ no nosso caso) delimita a região de autovalores que podemos usar com confiança. Vale notar que esse procedimento é extremamente lento, chegando a levar 17 dias para completar uma diagonaliza-

ção em um computador comum (cálculo para uma matriz complexa de ordem 5000, com dupla precisão), por isso decidimos utilizar os serviços do Centro Nacional de Supercomputação, o CESUP-RS. Uma matriz de ordem 10000 (matriz complexa com dupla precisão), era resolvida em apenas 2 horas no Cray, mas infelizmente para o nosso caso, a limitação do Cray se dá na memória que pode ser alocada, sendo essa (matriz complexa de ordem 10000 com dupla precisão) a maior matriz que pode-se resolver. Devido à necessidade de cotas com tempo de processamento, e a precisão que conseguíamos obter ao comparar com as matrizes de ordem 10000, optamos por usar matrizes de ordem 2000, que no Cray são resolvidas em apenas alguns minutos.

O procedimento de diagonalização é realizado para os dois potenciais escolhidos para valores de campo magnético variando de $B = 0$ a $B = 1$, sendo tal variação realizada adiabaticamente. Para variar as regiões de energia que nossos cálculos varrem, e com isso definir o regime do sistema (regular ou caótico), vamos fazer os cálculos para dois valores de \hbar , sendo eles $\hbar = 0,001$ e $\hbar = 0,01$. O primeiro valor corresponderá a uma região de baixa energia, e portanto, ao regime regular, enquanto que o segundo irá corresponder a valores mais elevados de energia e com isso ao regime caótico do sistema.

Já é bem conhecido [28], que o grau de regularidade ou caoticidade do sistema influi na distribuição dos níveis e, portanto, podemos esperar que os níveis do regime caótico não apresentem degenerescências como visto na figura 3.1. Sendo ambos potenciais não-integráveis, não teremos cruzamentos entre os níveis (exceto os cruzamentos acidentais), mesmo estando na região correspondente ao regime regular. A diferença obtida nos níveis de energia referente ao valor de \hbar utilizado, se dá pela acentuação da oscilação dos níveis, ou seja, *avoided crossings* mais ou menos evidentes.

Podemos ver nas figuras 3.7 a 3.10 que o oscilador sendo um sistema integrável mostra degenerescências, enquanto que o potencial Nelson apresenta *avoided crossings* pouco acentuados por ser bastante regular para baixas energias. O potencial Quártico no entanto, mostra *avoided crossings* mais acentuadamente.

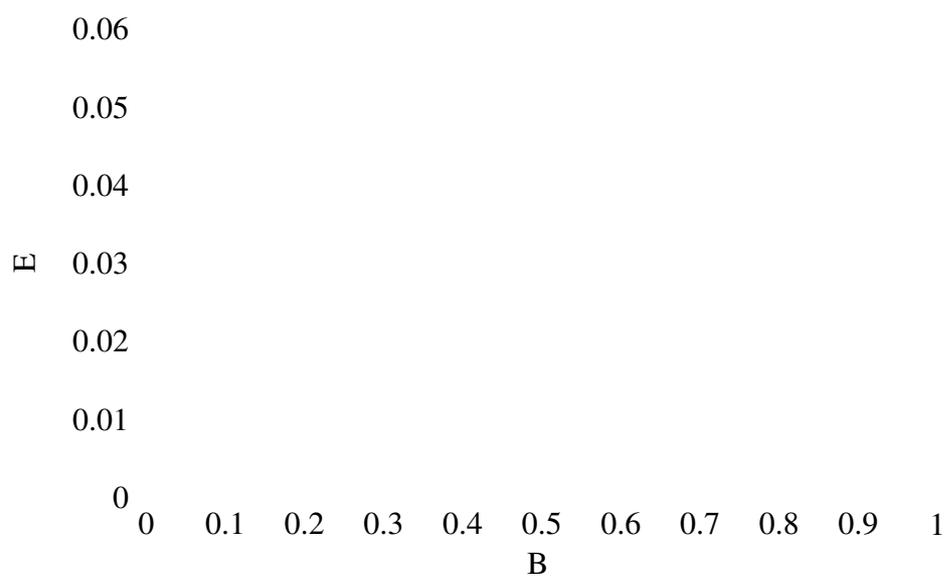


Figura 3.7: Representação da variação da energia em função do campo magnético dos 50 primeiros níveis do OH anisotrópico para $\hbar = 0,01$

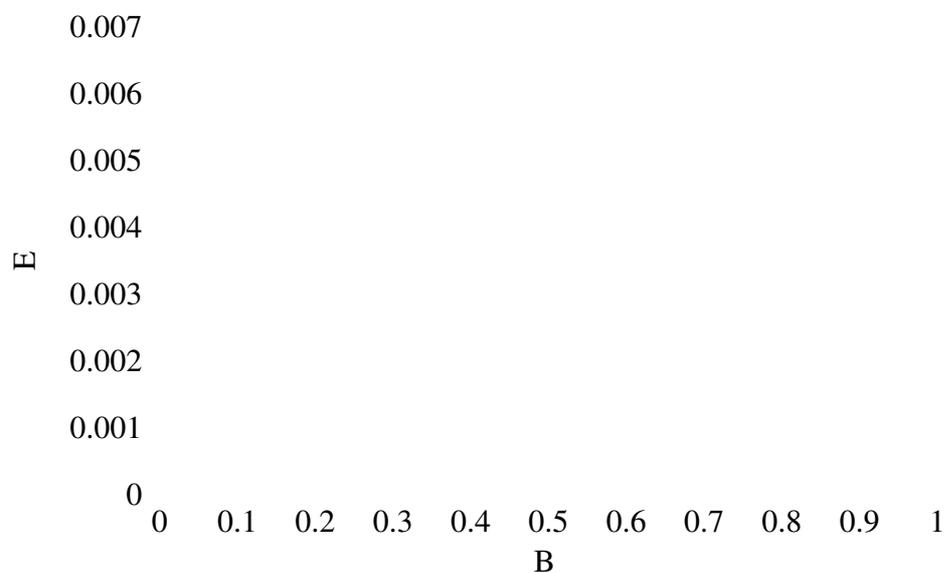


Figura 3.8: Representação da variação da energia em função do campo magnético dos 50 primeiros níveis do potencial Nelson para $\hbar = 0,001$

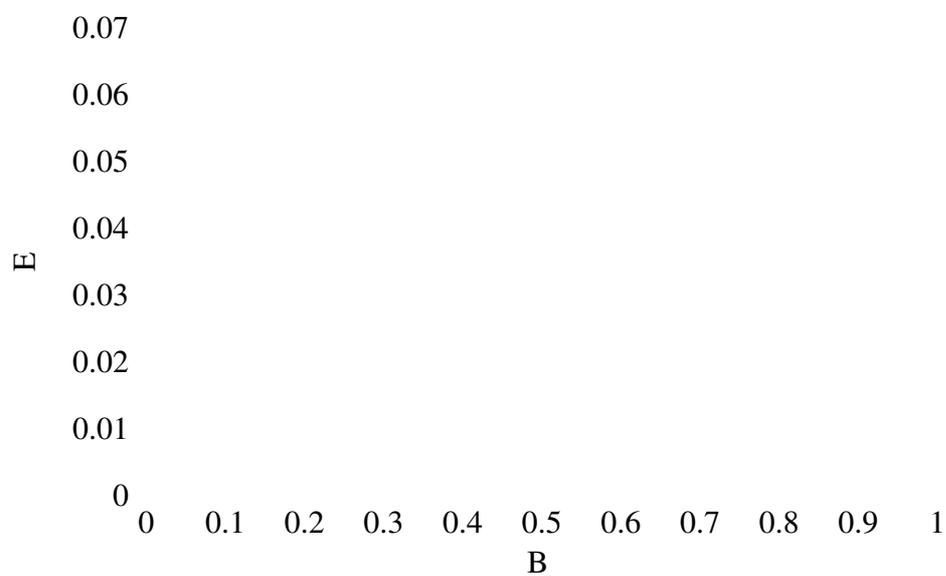


Figura 3.9: Representação da variação da energia em função do campo magnético dos 50 primeiros níveis do potencial Nelson para $\hbar = 0,01$

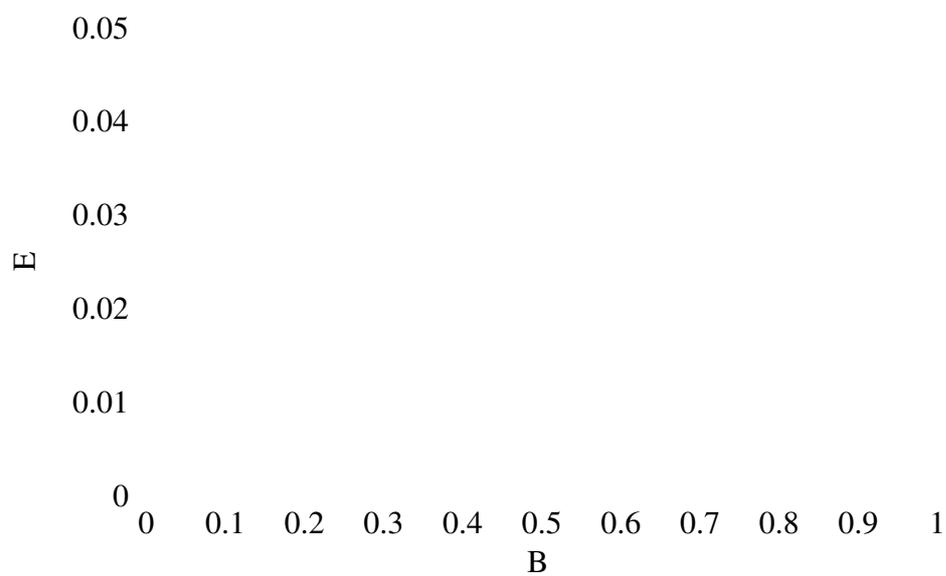


Figura 3.10: Representação da variação da energia em função do campo magnético dos 50 primeiros níveis do potencial Quártico para $\hbar = 0,01$

4 *Análise dos resultados*

Descreveremos nesta seção nossos principais resultados. Diferentemente do oscilador e da caixa bidimensionais tratados no capítulo 2, os potenciais Nelson e Quártico apresentam Hamiltonianas não-integráveis, e portanto, equações de movimento que não têm soluções analíticas (ver capítulo 3). Os níveis de energia foram obtidos numericamente, assim como as grandezas estudadas, a saber, potencial químico μ , número de ocupação do estado fundamental N_0 , calor específico C_v e variância do número de partículas do estado fundamental ΔN_0 . Para manter uma uniformidade nas notações, o estado fundamental é denotado pelo índice zero. Também ao contrário do que se usa comumente na literatura, não tomamos o estado fundamental com energia zero. Os resultados não dependem desse rescalonamento, obviamente, a não ser pelo fato que no nosso caso, μ poderá assumir valores positivos, uma vez que $\mu \leq E_0$, conforme já discutido no capítulo 1.

Enfim, para estudarmos a CBE, o primeiro passo foi a obtenção dos níveis de energia via diagonalização de matrizes para ambos os potenciais. Uma vez obtidos os níveis, usamos um procedimento numérico para obter μ que depende de um modo nada trivial da temperatura e dos níveis de energia, conforme será descrito a seguir.

4.1 O potencial químico

Como ponto de partida usamos a distribuição de Bose-Einstein

$$N(E_i) = \frac{1}{e^{\beta(E_i - \mu)} - 1} = \frac{ze^{-\beta E_i}}{1 - ze^{-\beta E_i}}. \quad (4.1)$$

onde $z = \exp(\beta\mu)$ é a chamada fugacidade do sistema, sendo $\beta = 1/kT$, k a constante de Boltzmann e T a temperatura. Para determinarmos o potencial químico, impomos o vínculo

$$\sum_{i=0}^{\infty} N(E_i) = N. \quad (4.2)$$

sendo N o número total de partículas confinadas. Esse número é conservado ao longo do processo, pois não há trocas de partículas com nenhum reservatório e tampouco criação ou destruição das mesmas.

Pode-se antecipar das eq.(4.1) e eq.(4.2) que a determinação de μ , não é nada trivial, mesmo para sistemas em que os autovalores de energia sejam conhecidos, como por exemplo, o oscilador harmônico. Para complicar ainda mais, somente depois do cálculo (em geral, numérico) de μ , pode-se determinar as outras grandezas termodinâmicas que estudamos. Dessa forma, calculamos numericamente o potencial químico para diversos valores de N , onde utilizamos o método da bissecção descrito no capítulo 2.

Para melhor ilustrarmos o potencial químico em um gráfico, temos que normalizá-lo pela energia do estado fundamental. Essa normalização facilita a comparação dos resultados para os diversos valores de N utilizados, uma vez que, no limite termodinâmico e abaixo da temperatura crítica, μ tende justamente ao valor de E_0 . Estando o potencial químico normalizado, ainda temos que normalizar a temperatura, pois se tratando de sistemas distintos, temos que achar uma escala em comum entre eles para podermos compará-los. Como visto no capítulo 3, o potencial Nelson é similar ao OH anisotrópico, portanto iremos normalizar as temperaturas pelas definições de T_0 do OH como visto na eq.(2.21). Os gráficos do potencial Quártico, no entanto, estão normalizados pela definição da temperatura crítica, que pode ser obtida usando a expressão da densidade média para o potencial Quártico (eq.(4.12)), obtemos então:

$$T_c = \frac{\pi^{1/3} \hbar^{4/3}}{\left(\frac{2}{\alpha+1}\right)^{2/3} \zeta(3/2)^{2/3} K\left(\sqrt{\frac{\alpha-1}{\alpha+1}}\right)} N^{2/3}, \quad (4.3)$$

onde K representa uma integral elíptica completa.

Embora o potencial quártico seja bidimensional, a situação aqui é similar ao caso da caixa

bidimensional e do OH unidimensional. Tanto a caixa 2D quanto o OH 1D tem a densidade média de energia independente de E e, portanto, a mesma dependência em relação a N em T_c . A densidade média de energia para o potencial quártico é proporcional a \sqrt{E} (eqs 4.11 e 4.12) assim como a densidade média de energia para o cubo, portanto a temperatura crítica deve escalar do mesmo modo em relação a N .

Nas figuras 4.1, 4.2 e 4.3 podemos ver o potencial químico em regime de alta e baixa energia do potencial Nelson ($\hbar = 0,01$ e $\hbar = 0,001$ respectivamente) comparado ao OH anisotrópico. Entre as figuras variamos o campo magnético em que os sistemas eram submetidos, e podemos assim ver que ao aplicar o campo, o potencial Nelson em regime de alta energia e número de partículas ($N=100$), se diferencia levemente dos outros.

Na figura 4.4 podemos ver o potencial químico em função da temperatura do potencial Quártico e da caixa bidimensional para $N=10, 25$ e 50 . Podemos ver também na figura 4.5 o potencial Quártico submetido aos campos $B=0,5$ e $1,0$, onde não se observa nenhuma mudança significativa no potencial químico para sistemas submetidos a campos magnéticos diferentes. Em todos os outros cálculos e figuras, vimos que quanto maior for N , mais perto do limite termodinâmico estaremos, e portanto mais drástica seria a mudança de fase, e no caso de N tender ao infinito, teríamos descontinuidades nas propriedades analisadas causadas pela transição de fase a um novo estado, isso pode ser visto em todas as figuras do potencial químico aqui apresentadas (figuras 4.1 a 4.5).

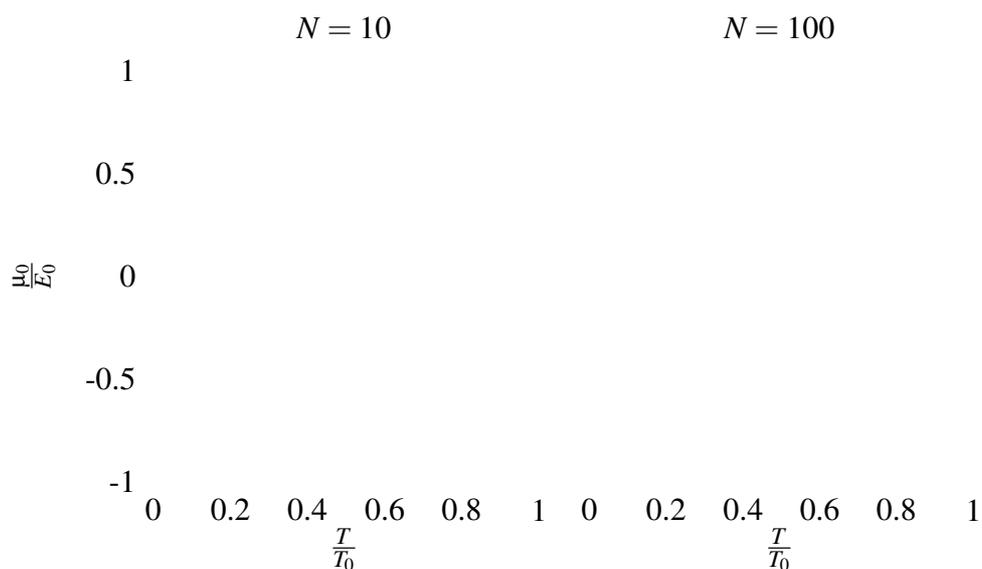


Figura 4.1: Potencial químico normalizado pela energia do estado fundamental em função da temperatura normalizada por T_0 (sem campo magnético aplicado) para os sistemas: Nelson com $\hbar = 0,001$ (linha sólida), Nelson com $\hbar = 0,01$ (linha tracejada) e OH anisotrópico (triângulos). O gráfico à esquerda foi feito com $N=10$ enquanto o gráfico à direita com $N=100$

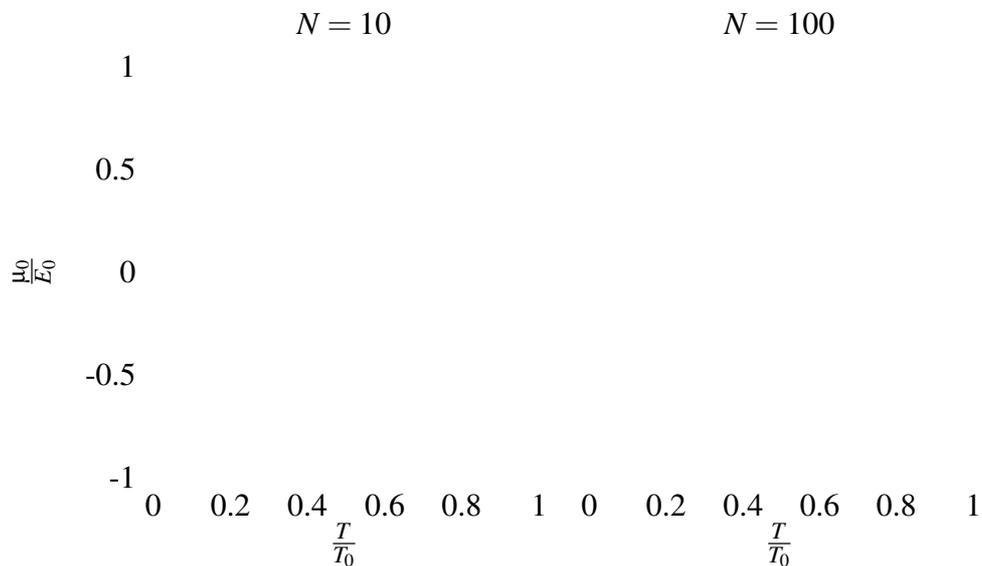


Figura 4.2: Potencial químico normalizado pela energia do estado fundamental em função da temperatura normalizada por T_0 (submetido a um campo magnético de intensidade $\mathbf{B}=\mathbf{0},5$) para os sistemas: Nelson com $\hbar = 0,001$ (linha sólida), Nelson com $\hbar = 0,01$ (linha tracejada) e OH anisotrópico (triângulos). O gráfico à esquerda foi feito com $N=10$ enquanto o gráfico à direita com $N=100$

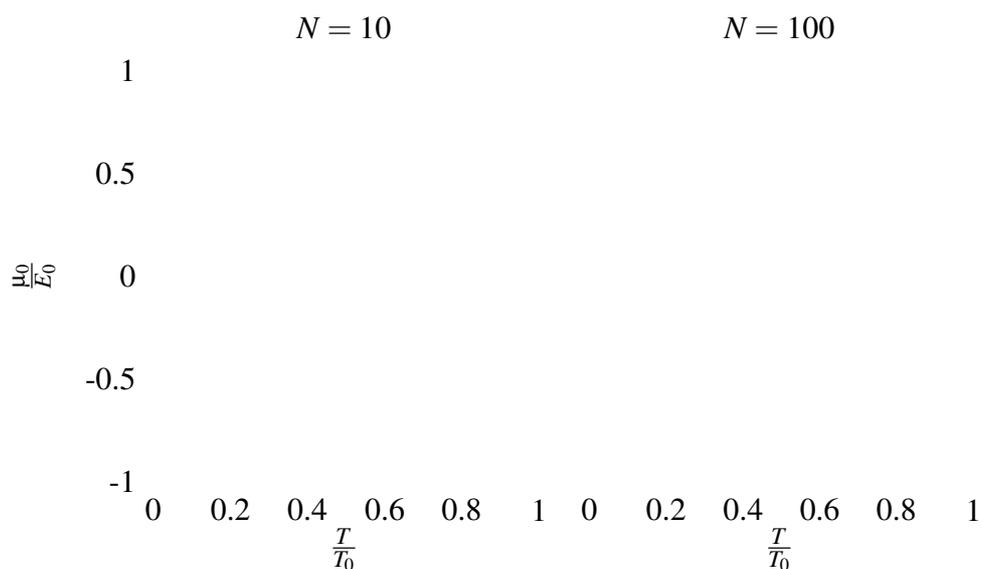


Figura 4.3: Potencial químico normalizado pela energia do estado fundamental em função da temperatura normalizada por T_0 (submetido a um campo magnético de intensidade $\mathbf{B}=\mathbf{1},\mathbf{0}$) para os sistemas: Nelson com $\hbar = 0,001$ (linha sólida), Nelson com $\hbar = 0,01$ (linha tracejada) e OH anisotrópico (triângulos). O gráfico à esquerda foi feito com $N=10$ enquanto o gráfico à direita com $N=100$

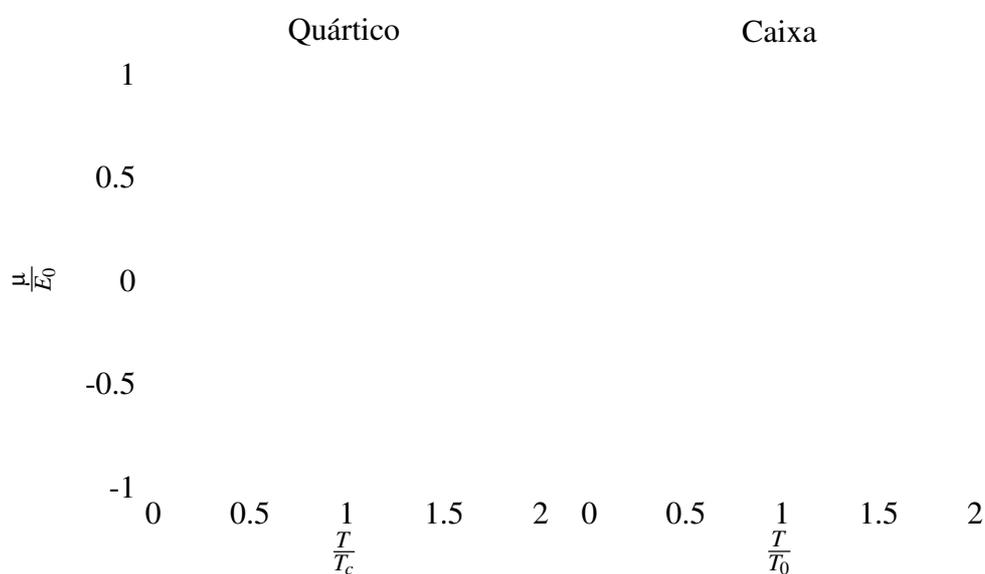


Figura 4.4: Comparação do potencial químico do potencial Quártico com a caixa. Gráfico esquerdo corresponde ao potencial quártico e o direito a caixa bidimensional. Linha sólida corresponde a um sistema com $N=10$, linha tracejada a um sistema com $N=25$ e os triângulos $N=50$

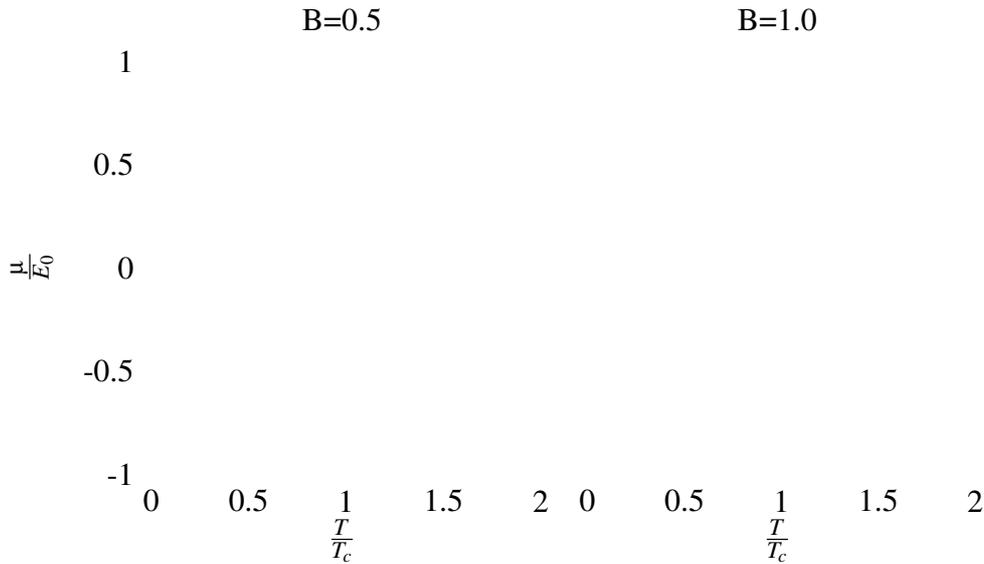


Figura 4.5: Comparação do potencial químico do potencial Quártico submetidos a campos magnéticos de intensidade diferentes, $\mathbf{B}=\mathbf{0,5}$ para a figura à esquerda e $\mathbf{B}=\mathbf{1,0}$ para a figura à direita. Linha sólida corresponde a um sistema com $N=10$, linha tracejada a um sistema com $N=25$ e os triângulos $N=50$

Para analisarmos as figuras do potencial químico em função da temperatura para os diferentes sistemas, precisamos analisarmos a eq.(4.2) com um certo cuidado. Nós adotaremos aqui o procedimento de Ketterle et al [5] e primeiramente, escrevemos a eq.(4.1) como uma soma de exponenciais para então reescrevermos a eq.(4.2) como uma soma dupla, ou seja,

$$N = \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} z^j e^{-j\beta E_i}. \quad (4.4)$$

A população do estado fundamental é separada da soma sobre os estados excitados e a soma na eq.(4.4) é substituída pela integral:

$$N - N_0 = \sum_{j=1}^{\infty} z^j \int_0^{\infty} d(E) e^{-j\beta E} dE. \quad (4.5)$$

Esse procedimento é justificado, pois além da soma envolver somente os estados excitados, normalmente se trabalha na situação de um número grande de partículas e temperaturas para as quais o espaçamento médio em energia é muito menor que $k_B T$. Na eq.(4.5), $d(E)$ representa a densidade de estados comumente aproximada pelo termo de Weyl [eq.(3.2)]. O termo de Weyl é também chamado de densidade média e pode em alguns casos, ser calculado analiticamente.

Para os sistemas que estamos trabalhando, temos:

$$\bar{d}(E) = \frac{1}{\hbar\omega} \quad (4.6)$$

para o OH unidimensional

$$\bar{d}(E) = \frac{E}{\sqrt{\omega_x\omega_y}\hbar^2} \quad (4.7)$$

para o OH bidimensional,

$$\bar{d}(E) = \frac{E}{\sqrt{2\mu}\hbar^2} \quad (4.8)$$

para o Potencial Nelson (ver eq.(3.6)),

$$\bar{d}(E) = \frac{L^2}{2\pi\hbar^2} \quad (4.9)$$

para a caixa bidimensional de lado L

$$\bar{d}(E) = \frac{2L^3}{\hbar^3\pi^2}\sqrt{8E} \quad (4.10)$$

para o cubo de lado L , e finalmente

$$\bar{d}(E) = \frac{2}{\pi\hbar^2}K\left(\sqrt{\frac{1-\alpha}{2}}\right)\sqrt{E} \quad (4.11)$$

se $-1 < \alpha \leq 1$ ou

$$\bar{d}(E) = \frac{2}{\pi\hbar^2}\frac{2}{\alpha+1}K\left(\sqrt{\frac{\alpha-1}{\alpha+1}}\right)\sqrt{E} \quad (4.12)$$

se $\alpha \geq 1$, para o Potencial Quártico (ver eq.(3.7)). K denota uma integral elíptica completa. Vale lembrar que as densidades listadas são para partículas com massa $m = 1$ e estão em unidades arbitrárias.

Para estudarmos o efeito do caos na CBE, ao invés de aproximarmos a densidade somente com a densidade de Weyl, usamos também o termo oscilante d^{osc} , que no limite semiclássico, é dado pela Fórmula do Traço de Gutzwiller, conforme a eq.(3.3). Com esse procedimento reescrevemos (4.5) para obtermos:

$$N - N_0 = \sum_{j=1}^{\infty} z^j \int_0^{\infty} \bar{d}(E) e^{-j\beta E} dE + \sum_{j=1}^{\infty} z^j \int_0^{\infty} d^{osc}(E) e^{-j\beta E} dE \quad (4.13)$$

sendo d^{osc} o termo que carrega informação da dinâmica clássica conforme explicado no capítulo 3, eq.(3.3).

O comportamento descrito pelo segundo termo à direita na eq.(3.3) pode não ser nada trivial: para temperaturas altas, o amortecimento da exponencial é lento e a integral em energia deve ser feita num intervalo de energia relativamente grande tendendo, em média, a zero. Para temperaturas baixas, o amortecimento da exponencial é mais rápido havendo assim possibilidade de que alguma contribuição de órbita periódica venha a emergir. Por outro lado, isso deve acontecer para temperaturas realmente baixas, para as quais, o nível fundamental torna-se macroscopicamente populado e $N - N_0$ fica, então, muito pequeno. Não se espera, portanto, a detecção de oscilações significativas do potencial químico para o Nelson no regime regular $\hbar = 0,001$ e caótico $\hbar = 0,01$, conforme pode-se observar nas figuras 4.1 a 4.3, sendo a diferenciação na figura 4.3, muito sutil para ser considerada. Também, nenhuma oscilação é qualitativamente constatada para o potencial químico em função do campo magnético para o potencial quártico como se observa nas figuras 4.4 e 4.5.

4.2 O número de ocupação do estado fundamental

Para obtermos a ocupação do estado fundamental, basta usarmos $E_i = E_0$ em (4.1), uma vez conhecido μ . Os gráficos 4.6 a 4.10 ilustram a ocupação do estado fundamental para diferentes N como função da temperatura. Observa-se que para temperaturas relativamente altas, $N_0/N \rightarrow 0$ e para temperaturas relativamente baixas, $N_0/N \rightarrow 1$. A ocupação do estado fundamental torna-se mais singular ou abrupta à medida que N aumenta. Quanto maior N mais fácil fica falar em uma temperatura crítica, T_c , tal que para $T < T_c$, o estado fundamental é macroscopicamente populado. T_c é, por definição, a temperatura na qual μ assume seu valor máximo e $N_0 = 0$. Vale aqui a mesma argumentação da seção 4.1, de forma que não se espera que a temperatura crítica dependa (pelo menos de modo qualitativamente expressivo) de alguma informação da dinâmica do equivalente sistema clássico.

As figuras 4.6 e 4.7 ilustram o número de ocupação do estado fundamental N_0 normalizado

por N , em função da temperatura normalizada por T_0 para o potencial Nelson. Utilizamos a mesma definição de T_0 que utilizamos na eq (2.21), de maneira que a razão $\frac{T_c}{T_0}$ prevista teoricamente é dada por:

$$\frac{T_c}{T_0} = 0,78. \quad (4.14)$$

A densidade média para o potencial Nelson não depende do campo magnético [8], de forma que os resultados numéricos confirmam a previsão de nenhuma dependência da dinâmica clássica, assim como nenhuma dependência de campo magnético. Observa-se, no entanto, para $N=100$ e $B=1,0$ (figura 4.8) algum desvio nos resultados para $\frac{T}{T_0} > 0,5$. Para N grande e temperaturas mais altas, os níveis de maior energia, que estão numa região de energia na qual a dinâmica é mais caótica, podem ter uma participação mais efetiva e o termo da densidade oscilante poderá ter alguma contribuição significativa.

Na figura 4.9 ilustramos a ocupação do estado fundamental em função da temperatura para o potencial Quártico com campo nulo e para a caixa bidimensional. Para a caixa $T_0 = \frac{2N\pi\hbar^2}{L^2k_B}$ e para o potencial quártico usamos a definição da eq.(4.3). A dependência de $\frac{N_0}{N}$ em função de N é a esperada, quanto maior N mais próximo de um comportamento descontínuo fica N_0 . O interessante é observar a dependência de $\frac{N_0}{N}$ com o campo magnético B . As figuras 4.9 (à esquerda) e as figuras 4.10 mostram que a ocupação tende a depender menos de N para campos altos ($B = 1,0$), situação na qual o sistema tende a ser regularizado. A dependência de $\frac{T_c}{T_0}$ com o campo magnético para o potencial Nelson é ilustrada na figura 4.11, e a dependência com o número de partículas em 4.12. A temperatura crítica depende mais fortemente do campo no regime de energia mais altas ($\hbar = 0,01$) e, portanto no regime caótico. Na figura 4.13 podemos ver como a T_c do potencial Quártico varia em função do campo magnético, e podemos ver que para N grande, a dependência com o campo magnético é menor. Analisando a variação da T_c em função do número de partículas na figura 4.14, para três diferentes campos magnéticos ($B=0, 0,5$ e $1,0$), podemos ver novamente que para N pequeno, o campo influi de maneira mais pronunciada, explicitando a diferença entre os casos, mas a medida que N aumenta os resultados começam a ficar cada vez mais próximos entre si.

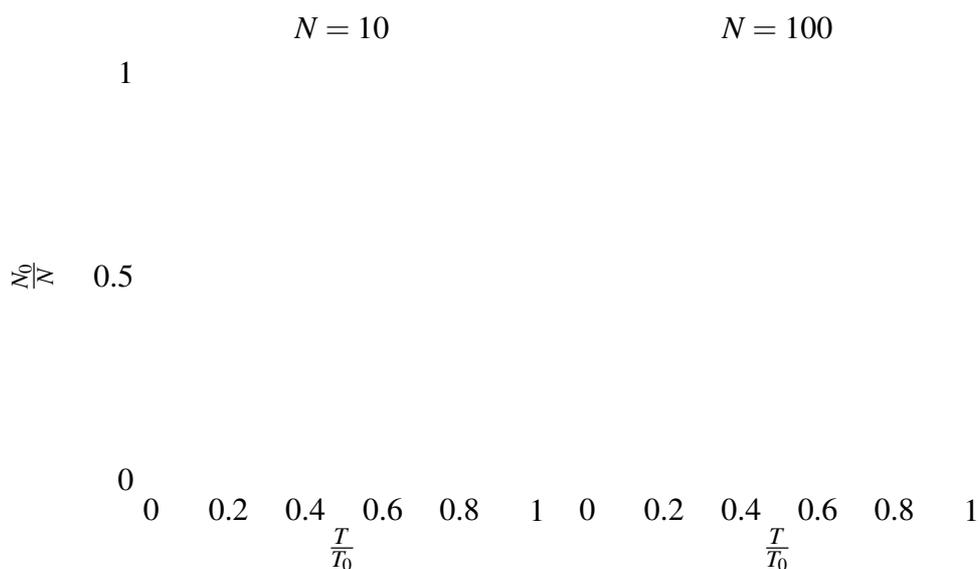


Figura 4.6: Ocupação do estado fundamental normalizado pelo número de partículas em função da temperatura normalizada por T_0 (sem campo magnético aplicado) para os sistemas: Nelson com $\hbar = 0,001$ (linha sólida), Nelson com $\hbar = 0,01$ (linha tracejada) e OH anisotrópico (triângulos)

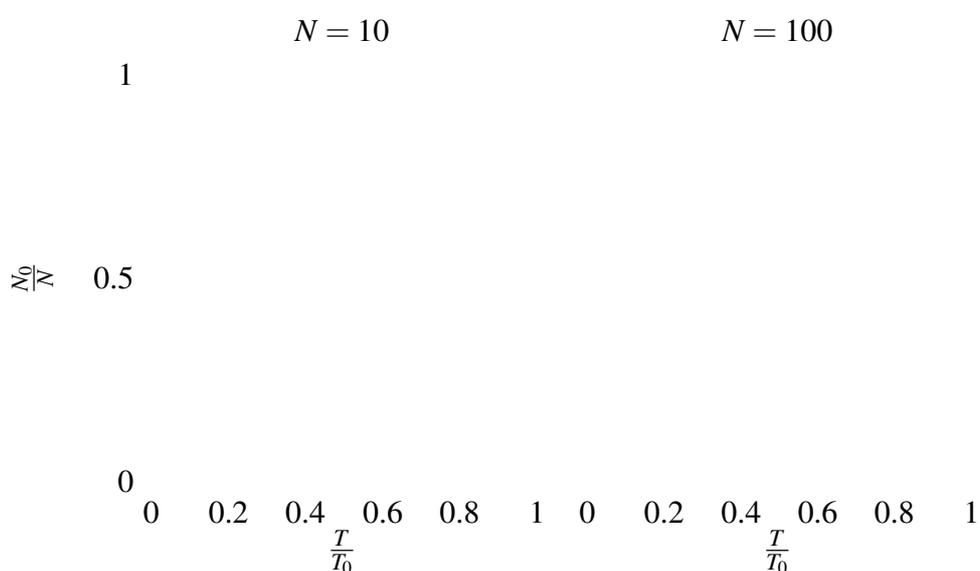


Figura 4.7: Ocupação do estado fundamental normalizado pelo número de partículas em função da temperatura normalizada por T_0 (submetido a um campo magnético de intensidade $\mathbf{B}=\mathbf{0,5}$) para os sistemas: Nelson com $\hbar = 0,001$ (linha sólida), Nelson com $\hbar = 0,01$ (linha tracejada) e OH anisotrópico (triângulos)

4.3 O calor específico

Uma das questões mais freqüentes quando se fala em CBE em sistemas de baixa dimensionalidade, uma e duas dimensões, é justamente se a ocupação macroscópica do estado fundamental

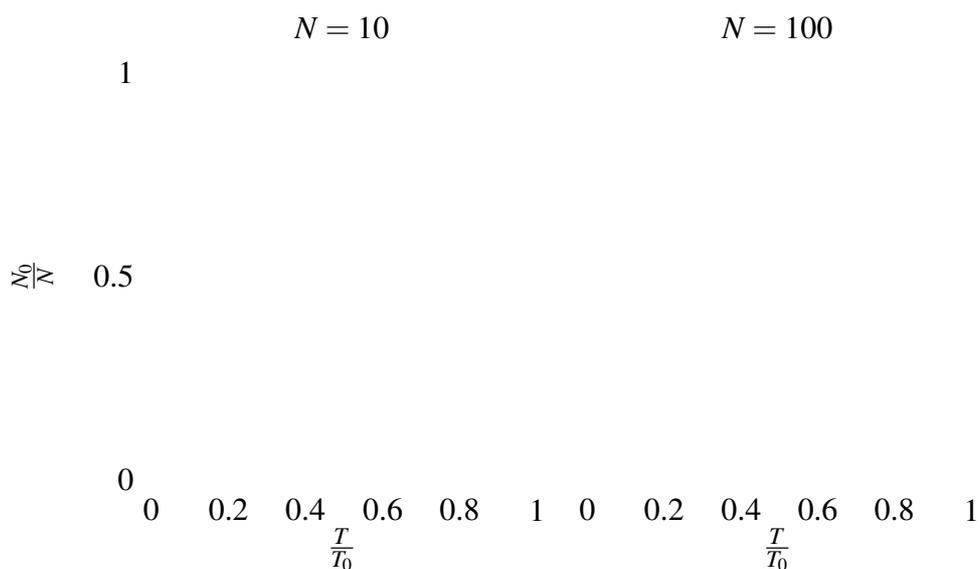


Figura 4.8: Ocupação do estado fundamental normalizado pelo número de partículas em função da temperatura normalizada por T_0 (submetido a um campo magnético de intensidade $\mathbf{B}=\mathbf{1},\mathbf{0}$) para os sistemas: Nelson com $\hbar = 0,001$ (linha sólida), Nelson com $\hbar = 0,01$ (linha tracejada) e OH anisotrópico (triângulos)

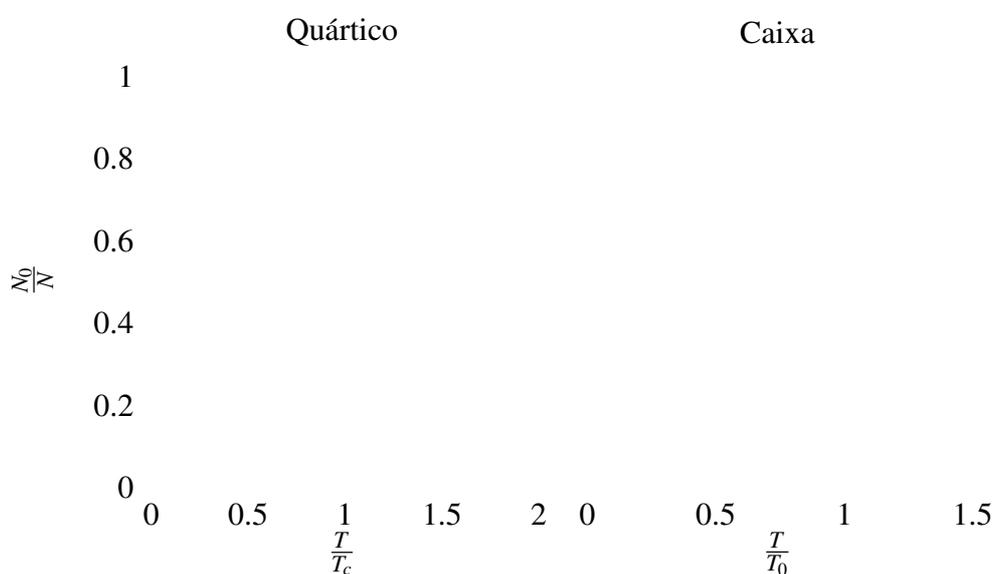


Figura 4.9: Comparação da ocupação do estado fundamental do potencial Quártico com a caixa sem campo magnético aplicado. Gráfico esquerdo corresponde ao potencial quártico e o direito a caixa bidimensional. Linha sólida corresponde a um sistema com $N=10$, linha tracejada a um sistema com $N=25$ e os triângulos $N=50$

é um indicador suficiente para a CBE ou se outras grandezas termodinâmicas deveriam ser também consideradas como critério para se falar em CBE [17]. Essa preocupação tem sua origem

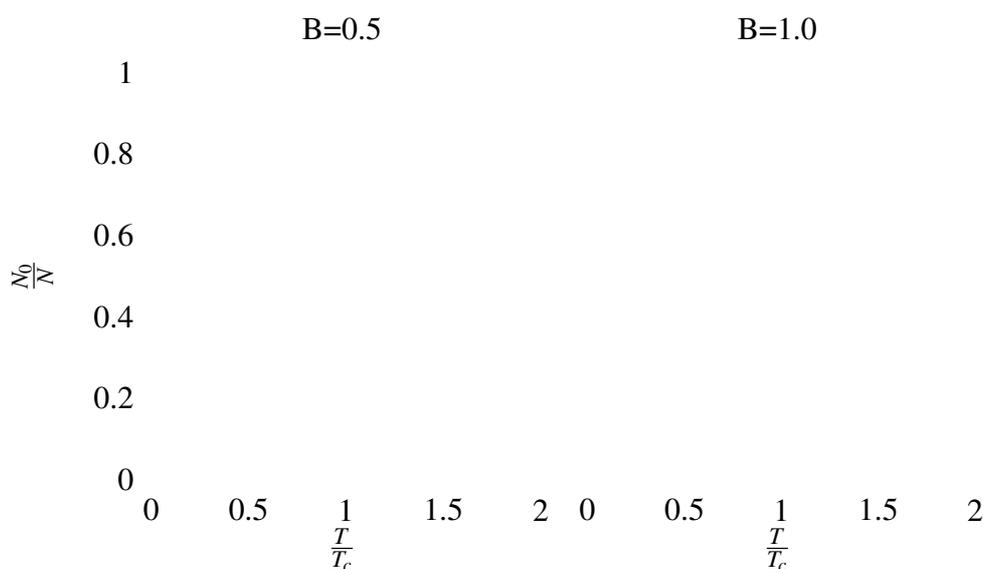


Figura 4.10: Comparação da ocupação do estado fundamental do potencial Quártico submetidos a campos magnéticos de intensidade diferentes, $\mathbf{B=0,5}$ para a figura à esquerda e $\mathbf{B=1,0}$ para a figura à direita. Linha sólida corresponde a um sistema com $N=10$, linha tracejada a um sistema com $N=25$ e os triângulos $N=50$

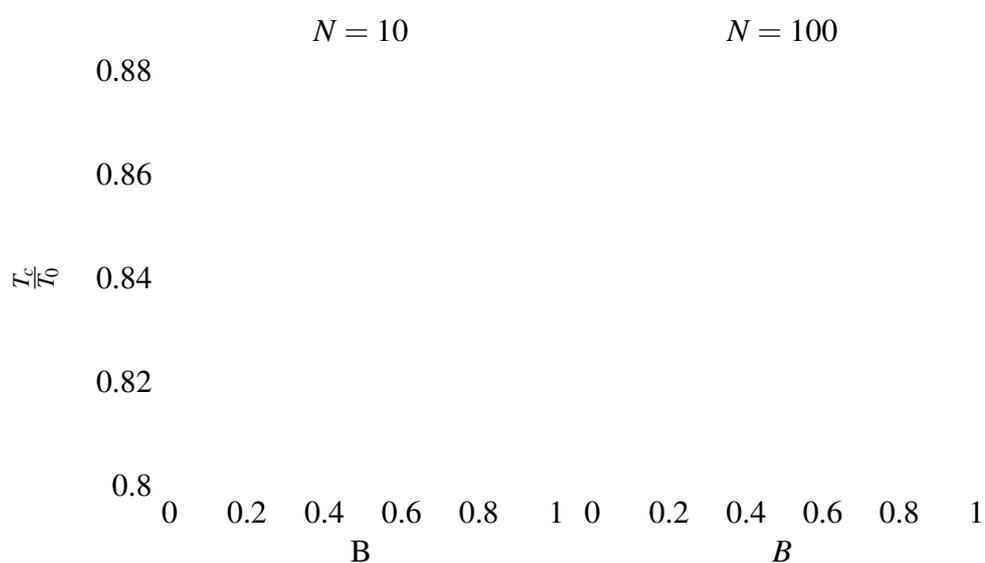


Figura 4.11: Variação da T_c normalizada por T_0 em função da intensidade B do campo magnético no potencial Nelson. A linha sólida representa $\hbar = 0,001$ e a linha tracejada $\hbar = 0,01$. Figuras realizadas para $N=10$ e $N=100$

no fato que para sistemas com maior número de dimensões, a ocupação macroscópica do estado fundamental é sempre acompanhada por alguma singularidade no calor específico, por exemplo.

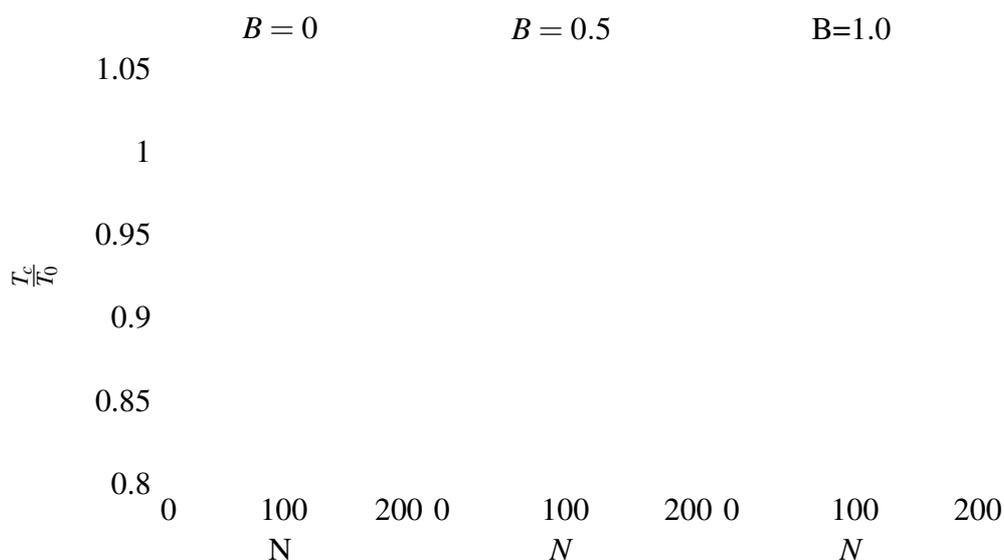


Figura 4.12: Variação da T_c normalizada por T_0 em função do número de partículas do sistema no potencial Nelson. A linha sólida representa $\hbar = 0,001$ e a linha tracejada $\hbar = 0,01$. Figuras realizadas para campos magnéticos de intensidade: $B=0$, $B=0,5$ e $B=1$

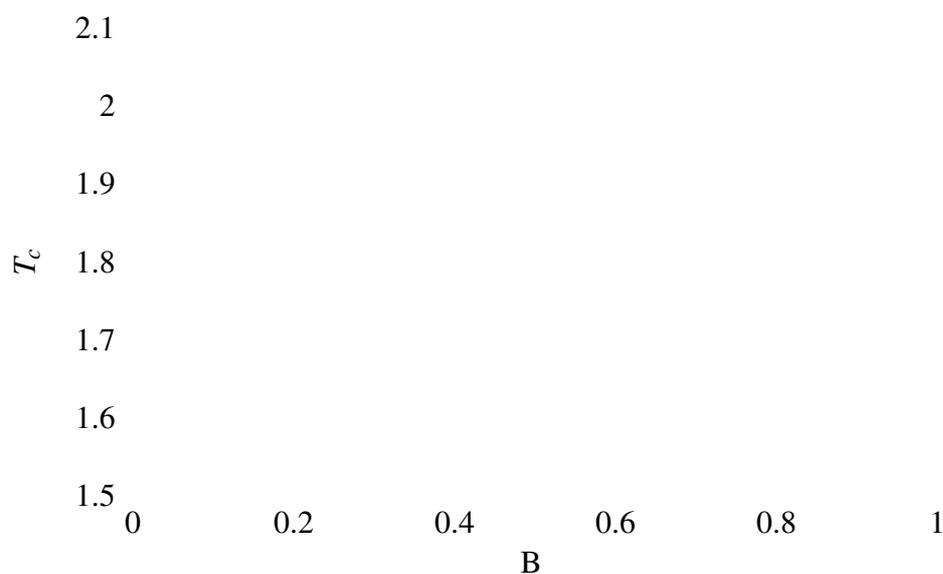


Figura 4.13: Variação da T_c em função do campo magnético aplicado no sistema para o potencial Quártico. A linha sólida representa $N = 10$ e a linha tracejada $N = 100$.

Assim sendo, vamos estudar o calor específico que pode ser obtido da energia interna U [16]

$$U = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} E_n z^j e^{-j\beta E_n} \quad (4.15)$$

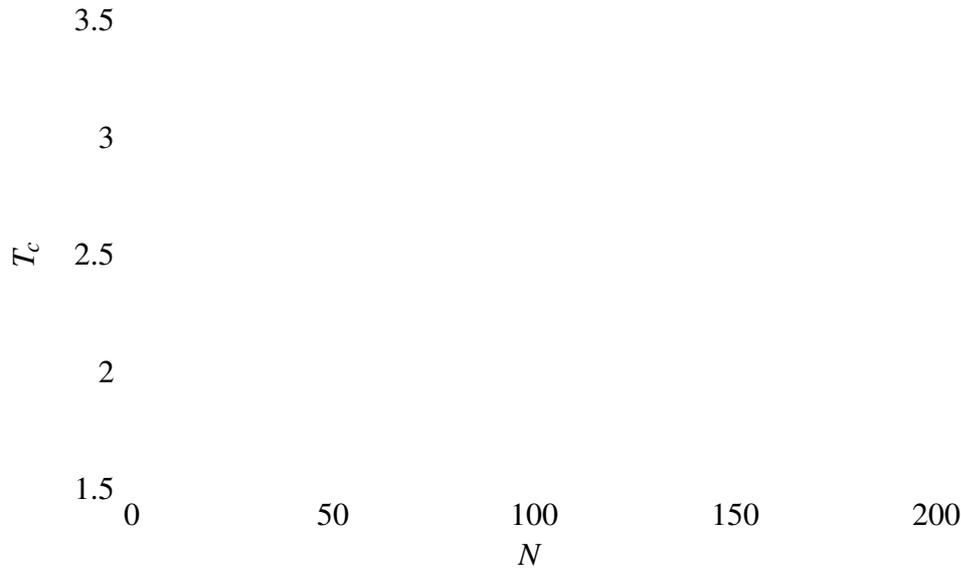


Figura 4.14: Variação da T_c em função do número de partículas do sistema no potencial Nelson. A linha sólida representa $B = 0$, a linha tracejada $B = 0,5$ e a linha pontilhada $B = 1,0$.

efetuando-se uma derivada parcial com relação à temperatura T , ou seja,

$$C_V = \frac{\partial}{\partial T} U \quad (4.16)$$

Novamente, podemos escrever C_V em termos da densidade de estados, conforme a equação:

$$C_V = k_B \beta \sum_{j=1}^{\infty} j z^j \left[\beta (E_0 - \mu) e^{-\beta E_0} + \int_0^{\infty} dE [d(E) + d^{osc}(E)] \beta (E - \mu) E e^{-\beta E} \right], \quad (4.17)$$

lembrando que $d(E) = \bar{d}(E) + d^{osc}(E)$, sendo que no limite semiclássico, d^{osc} é dada pela Fórmula do Traço de Gutzwiller, escrita em termos das órbitas periódicas do equivalente sistema clássico.

Aqui novamente, como a densidade $d(E)$ não depende da temperatura, nenhuma diferença qualitativa entre os resultados do calor específico do Potencial Nelson para os regimes regular e caótico fica realmente clara, como mostram as figuras 4.15 a 4.19. Mesmo com a exponencial decrescendo rapidamente com a energia, há o fator quadrático da energia que afeta a rapidez da convergência da integral na eq.(4.17). Ao integrarmos em um intervalo relativamente grande de energia, as contribuições da d^{osc} tornam-se ainda mais enfraquecidas em relação à contribuição

do estado fundamental e ao termo da densidade de Weyl.

A figura 4.15 mostra novamente que as principais diferenças entre o OH e o potencial Nelson nos regimes regular e caótico aparecem para N maiores. Isso é razoável, pois para N grande e temperaturas acima da temperatura crítica, os níveis de maior energia (mais caóticos) podem estar ocupados e podem, portanto, contribuir mais efetivamente para o C_v . Comparando as figuras à direita de 4.15, 4.16 e 4.17 podemos constatar que mesmo para N pequeno ($N = 10$), o efeito do campo pode ser observado na região de $\frac{T}{T_0} > 0,8$. Convém lembrar que a densidade de Weyl para o potencial Nelson, não depende do campo magnético.

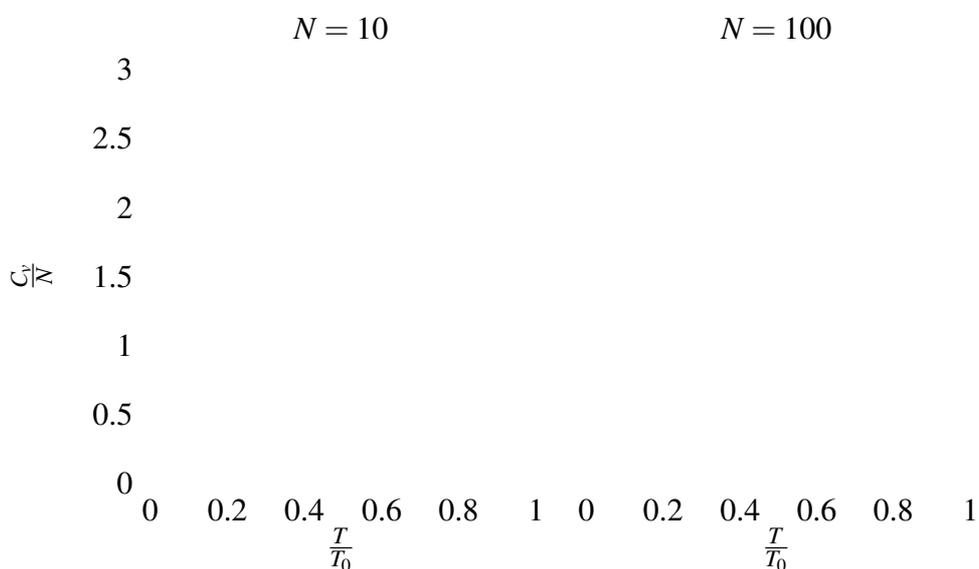


Figura 4.15: Variação do calor específico a volume constante (C_v) normalizado por N em função da temperatura normalizada por T_0 (sem campo magnético aplicado) para os sistemas: Nelson com $\hbar = 0,001$ (linha sólida), Nelson com $\hbar = 0,01$ (linha tracejada) e OH anisotrópico (triângulos)

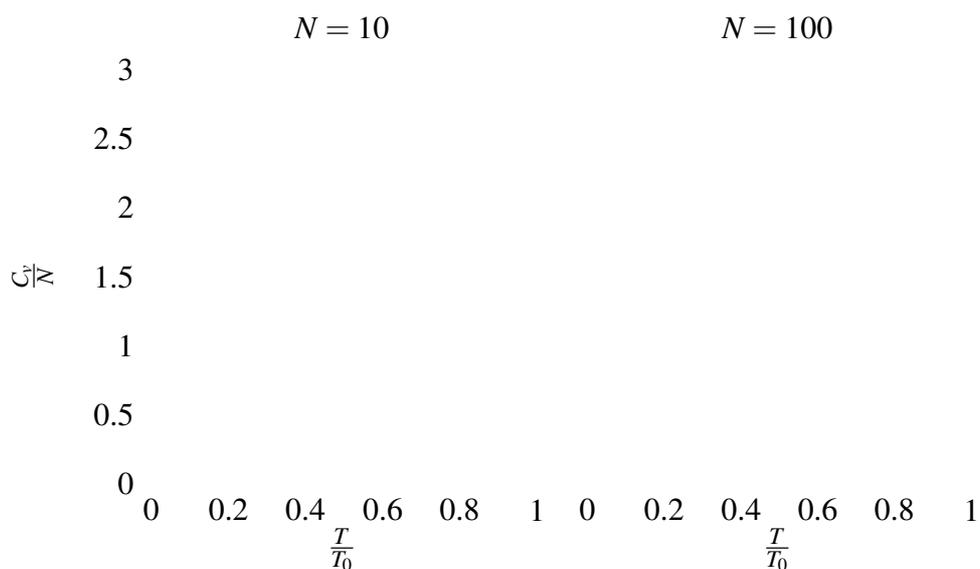


Figura 4.16: Variação do calor específico a volume constante (C_v) normalizado por N em função da temperatura normalizada por T_0 (submetido a um campo magnético de intensidade $\mathbf{B}=\mathbf{0,5}$) para os sistemas: Nelson com $\hbar = 0,001$ (linha sólida), Nelson com $\hbar = 0,01$ (linha tracejada) e OH anisotrópico (triângulos)

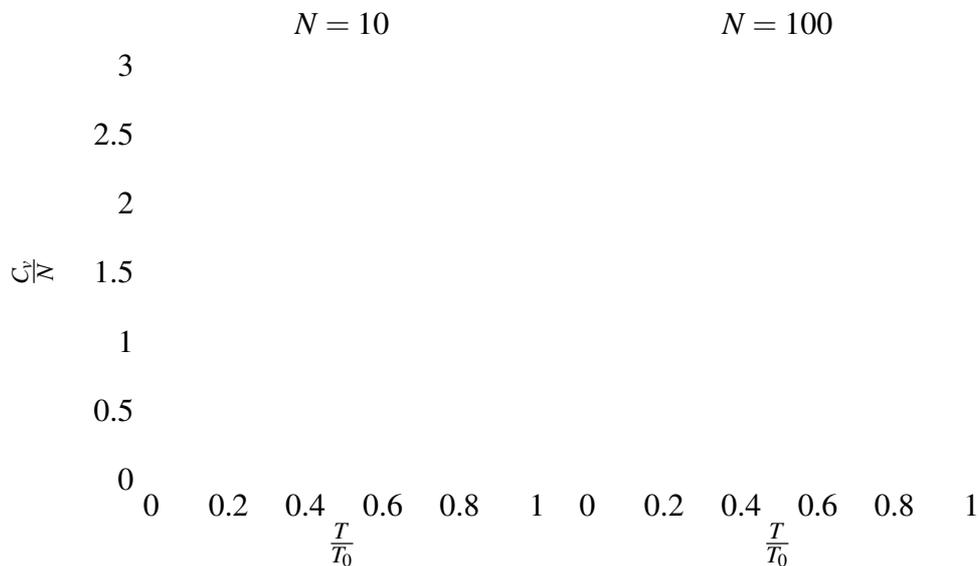


Figura 4.17: Variação do calor específico a volume constante (C_v) normalizado por N em função da temperatura normalizada por T_0 (submetido a um campo magnético de intensidade $\mathbf{B}=\mathbf{1,0}$) para os sistemas: Nelson com $\hbar = 0,001$ (linha sólida), Nelson com $\hbar = 0,01$ (linha tracejada) e OH anisotrópico (triângulos)

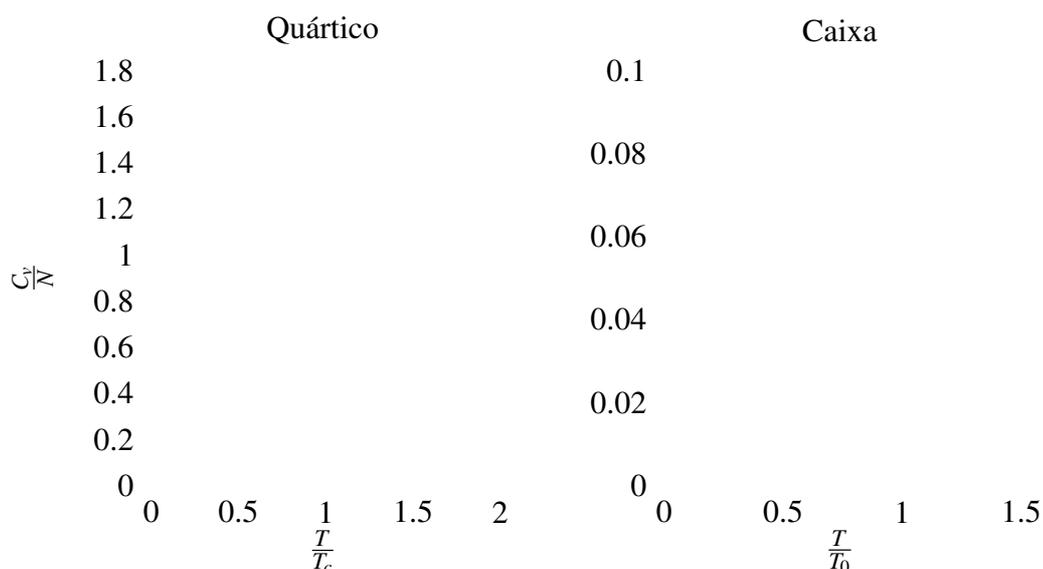


Figura 4.18: Comparação do calor específico a volume constante (C_v) referente ao potencial Quártico com a caixa sem campo magnético aplicado. Gráfico à esquerda corresponde ao potencial quártico e o à direita a caixa bidimensional. Linha sólida corresponde a um sistema com $N=10$, linha tracejada a um sistema com $N=25$ e os triângulos $N=50$

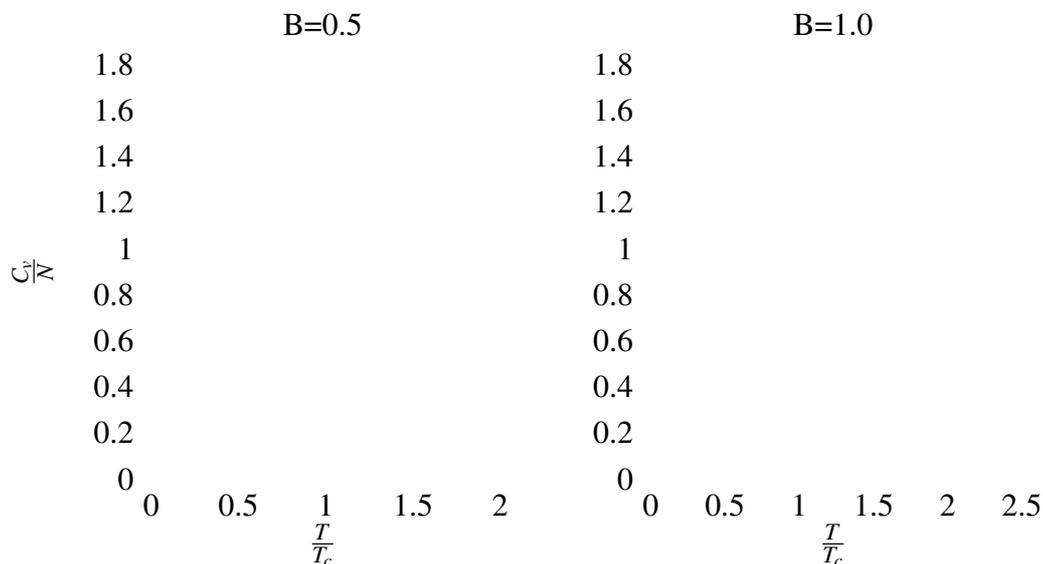


Figura 4.19: Comparação do calor específico a volume constante (C_v) referente ao potencial Quártico submetidos a campos magnéticos de intensidade diferentes, $B=0,5$ para a figura à esquerda e $B=1,0$ para a figura à direita. Linha sólida corresponde a um sistema com $N=10$, linha tracejada a um sistema com $N=25$ e os triângulos $N=50$

4.4 A variância do número de ocupação de partículas no estado fundamental

Com os resultados das seções anteriores (seção 4.1), podemos concluir que as grandezas analisadas dependem linearmente da densidade de estados e, portanto, não preservam, em geral, nenhuma informação substancial da dinâmica clássica do potencial, uma vez que a integral em energia se anula, em média, devido às oscilações das órbitas periódicas. Analisaremos agora, outra grandeza de interesse, a flutuação do número de partículas no estado fundamental do sistema, ΔN_0 , que acontece mesmo quando o número de partículas confinadas é fixo.

Em um gás ideal de bósons à temperatura zero, todas as partículas estarão no estado fundamental. Ao fornecermos uma certa energia de excitação para o sistema, essa energia poderá ser absorvida de diferentes maneiras, de forma que o número de bósons que permanece no estado fundamental não é fixo - o número flutua. Essas flutuações estão intrinsicamente ligadas à compressibilidade do sistema, que por sua vez, é determinada pelo tamanho dos átomos [34]. ΔN_0 já foi calculado para um gás ideal no potencial harmônico como função da energia de excitação e da temperatura por vários autores [34–38], mas há resultados conflitantes. Primeiramente, porque os formalismos canônico e grand-canônico não fornecem as mesmas previsões para o limite de baixas temperaturas. Não podemos deixar de citar aqui, o efeito chamado de "catástrofe grand-canônica". Tanto o EC quanto o EGC descrevem igualmente bem o crescimento dramático do número de ocupação no estado fundamental N_0 , contudo para temperaturas próximas da temperatura crítica T_c e abaixo, o formalismo grand-canônico dá resultados flagrantemente divergentes para a variância $\Delta N_0 = N_0(N_0 + 1)$, implicando que para $T \rightarrow 0$, $\Delta N_0 \rightarrow N^2$, o que não faz nenhum sentido [34, 39].

4.4.1 Cálculo numérico da variância

Para obtermos os resultados numéricos precisamos antes de tudo da função de partição do sistema de N partículas, Z_N , que pode ser obtida de forma recursiva da função de partição da

partícula única Z_1 [40]

$$Z_N = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N Z_1(n\beta) Z_{N-n}(\beta), \quad (4.18)$$

com $Z_0 = 1$ e

$$Z_1 = \sum_{j=0}^{\infty} e^{-\beta(E_j - \mu)}. \quad (4.19)$$

Essa fórmula recursiva torna o cálculo numérico para qualquer número de partículas bastante facilitado. Usando ainda os resultados de [40], aproveitamos a fórmula (4.18) para escrevermos o número de ocupação N_k para o k -ésimo nível de energia com energia E_k , de forma a obtermos:

$$N_k = \frac{1}{Z_N(\beta)} \sum_{m=1}^N e^{-m\beta E_k} Z_{N-m}(\beta). \quad (4.20)$$

Para os cálculos numéricos nos baseamos no trabalho [41], de maneira que utilizamos as seguintes expressões para os cálculos.

$$\langle N_k \rangle = \frac{1}{Z_N} \sum_{j=1}^N (\pm)^{j+1} x^{j\epsilon_k} Z_{N-j} \quad (4.21)$$

$$\langle N_k^2 \rangle = \frac{1}{Z_N} \sum_{j=1}^N (\pm)^{j+1} j x^{j\epsilon_k} Z_{N-j} + \frac{1}{Z_N} \sum_{j=1}^N \sum_{i=1}^{N-j} (\pm)^{i+j} x^{(i+j)\epsilon_k} Z_{N-i-j} \quad (4.22)$$

4.4.2 Variância em termos da Fórmula do Traço

Para estimativas analíticas usaremos uma forma mais conveniente para a variância do estado fundamental. ΔN_0 é formalmente definida em qualquer ensemble como [42]:

$$\Delta N_0 = \sum_k (\langle N^2 \rangle_k - \langle N_k \rangle^2) \quad (4.23)$$

onde a soma em k indica uma soma sobre todos os k -níveis ocupados em $T = 0$. Para um sistema de bósons não-interagentes $k = 0$.

Para uma estimativa semiclássica da variância do estado fundamental, analisamos qualitativamente a fórmula (4.23) com um porém: ao invés de estimarmos a variância do estado fundamental usando diretamente o nível $k = 0$, usamos o fato que o número de bósons confinados, N , é fixo e, portanto, a variância do estado fundamental pode ser obtida via o cálculo da variância dos estados excitados ou das partículas não-condensadas. Esse procedimento é amplamente

adotado na literatura [34, 40, 43] e mantém coerência com o procedimento padrão de se separar o estado fundamental nos cálculos até agora mostrados. Seja então N^* dado por [44],

$$N_* = \sum_{k \neq 0} N_k \quad (4.24)$$

escrevemos

$$\Delta N_0 = \Delta N_* = \langle N_*^2 \rangle - \langle N_* \rangle^2, \quad (4.25)$$

para obtermos

$$\Delta N_0 = \left\langle \sum_{k \neq 0} \sum_{l \neq 0} N_k N_l \right\rangle - \left\langle \sum_{k \neq 0} N_k \right\rangle^2 \quad (4.26)$$

onde $\langle \dots \rangle$ representa médias em ensembles de sistemas. Usamos novamente a aproximação semiclássica para efetuarmos a soma sobre os estados excitados, de forma que $\left\langle \sum_{k \neq 0} N_k \right\rangle$ é essencialmente o lado direito da eq.(4.13) para a qual, em média, não se espera observar contribuições de órbitas periódicas. Resta então, analisar o termo da soma dupla, para o qual podemos escrever:

$$\Delta N_0^{osc} \approx \sum_{j=1}^{\infty} \sum_{l=1}^{\infty} z^j z^l \int_{E_1}^{\infty} \int_{E_1}^{\infty} d^{osc}(\epsilon) d^{osc}(\epsilon) e^{-j\beta\epsilon} e^{-l\beta\epsilon} d\epsilon d\epsilon, \quad (4.27)$$

onde d^{osc} é dada em termos de órbitas periódicas de acordo com a eq.(3.3). Substituindo-se (3.3) em (4.27), podemos fazer uma análise dos termos com a maior contribuição semiclássica para obter:

$$\Delta N_0^{osc} \approx \sum_p \sum_n \sum_{j=1}^{\infty} \sum_{l=1}^{\infty} z^{l+j} \int_{E_1}^{\infty} dEA_p^2(E, n) e^{-\beta(j+l)E}, \quad (4.28)$$

onde p indexa a órbita periódica primitiva e n suas repetições. O ponto chave da eq.(4.28) é o fato que a amplitude $A_p(E, n)$ depende da estabilidade das órbitas periódicas.

Um cálculo quantitativo da influência das órbitas periódicas requer técnicas semiclássicas bastante apuradas, mas temos uma possível evidência numérica do efeito do caos na variância para o potencial quártico, como ilustram as figuras 4.20 a 4.25.

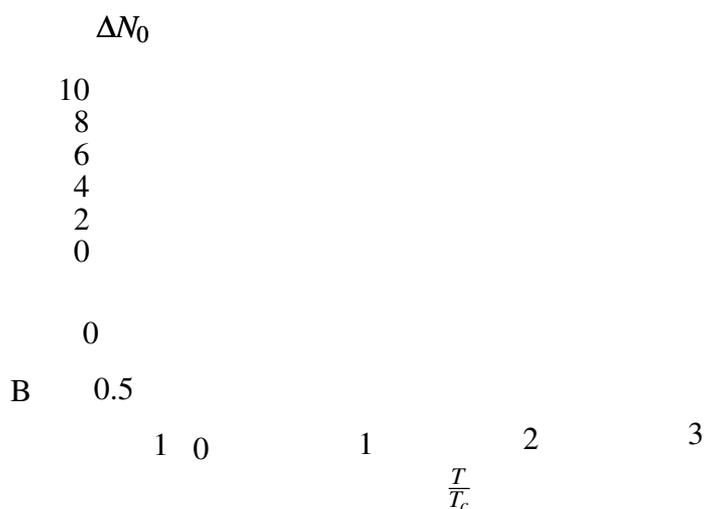


Figura 4.20: Variância em função da temperatura (normalizada por T_0) e campo magnético, $\Delta N_0(\frac{T}{T_c}, B)$, para o potencial Quártico com $N = 10$

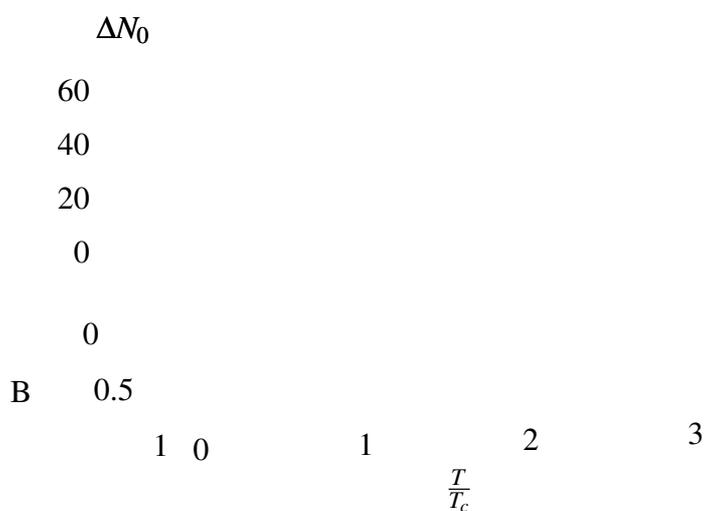


Figura 4.21: Variância em função da temperatura (normalizada por T_0) e campo magnético, $\Delta N_0(\frac{T}{T_c}, B)$, para o potencial Quártico com $N = 25$

Podemos ver que para o potencial Quártico, há uma variância anômala para temperaturas muito baixas, mas a medida que o campo aumenta, tal comportamento some. Isso acontece pois o campo magnético, alcança uma intensidade tal ($B \approx 0,355$) que regulariza o sistema, tal efeito pode ser visto na seção de Poincaré da figura 3.6.

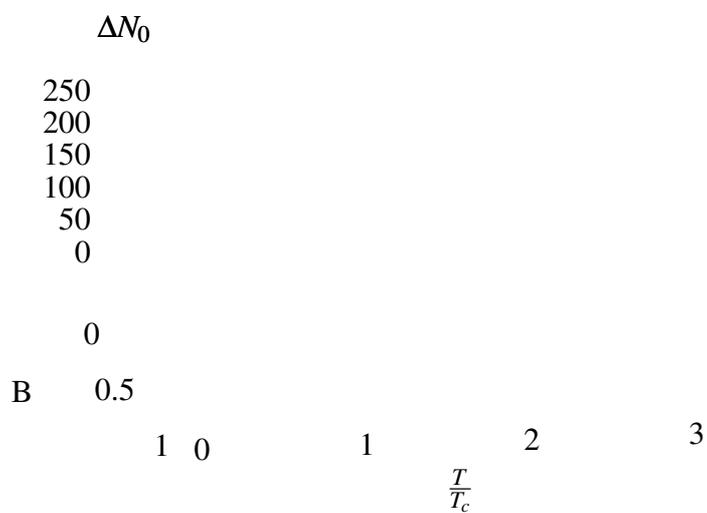


Figura 4.22: Variância em função da temperatura (normalizada por T_0) e campo magnético, $\Delta N_0(\frac{T}{T_c}, B)$, para o potencial Quártico com $N = 50$

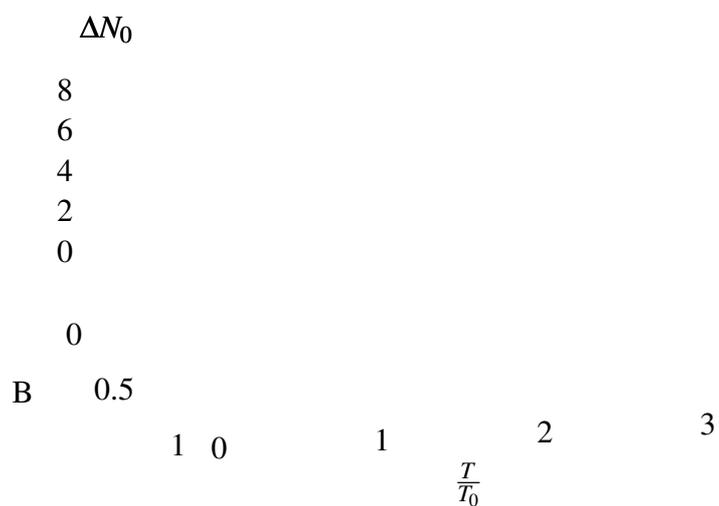


Figura 4.23: Variância em função da temperatura (normalizada por T_0) e campo magnético, $\Delta N_0(\frac{T}{T_0}, B)$, para o potencial Nelson com $N = 10$ e $\hbar = 0,01$

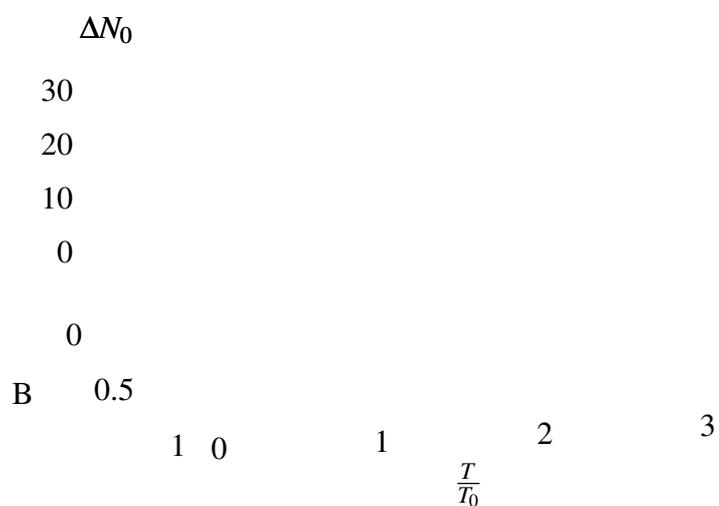


Figura 4.24: Variância em função da temperatura (normalizada por T_0) e campo magnético, $\Delta N_0(\frac{T}{T_0}, B)$, para o potencial Nelson com $N = 25$ e $\hbar = 0,01$

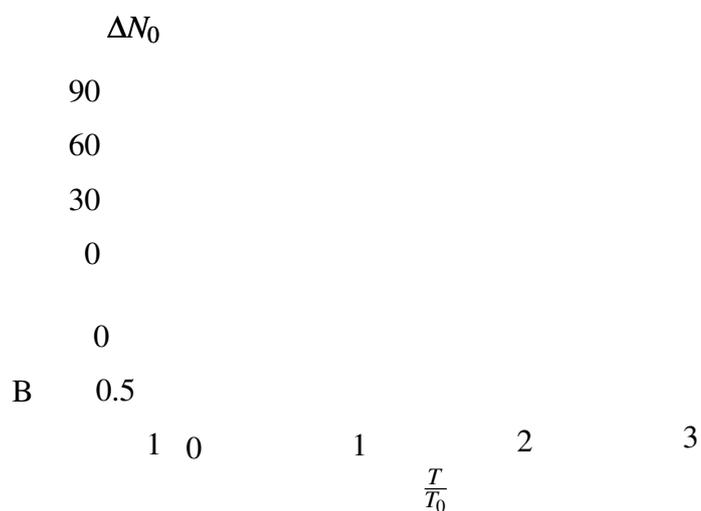


Figura 4.25: Variância em função da temperatura (normalizada por T_0) e campo magnético, $\Delta N_0(\frac{T}{T_0}, B)$, para o potencial Nelson com $N = 50$ e $\hbar = 0,01$

5 *Considerações finais*

Para estudar a CBE para um número finito de partículas, situação que foge ao tratamento formal do limite termodinâmico, em sistemas bidimensionais, para os quais, não se fala em transições de fase a rigor, usamos um mecanismo artificial de suavização do potencial, que nos possibilita falar de uma pseudo-transição de fase ou definir uma CBE em termos de uma ocupação macroscópica do estado fundamental. Em experimentos recentes, essa ocupação macroscópica do estado fundamental tem sido considerada como uma evidência da CBE [5] (e referências nesse artigo).

O procedimento mais comum na literatura descreve o sistema como um contínuo de estados mais o estado fundamental que é tratado separadamente, mas encontra muito criticismo na literatura mais recente. Essa é a chamada aproximação do espectro contínuo [45]. A justificativa para tal tratamento é que N é muito grande e em geral $k_B T \gg E_{i+1} - E_i$, de forma que a aproximação semiclássica se aplica. As críticas em relação à aproximação do espectro contínuo, devem se ao fato que o caráter discreto do espectro é ignorado. A questão levantada por Ketterle et al [5] é se essa aproximação descreveria as situações dos experimentos mais recentes com N finito e potenciais de baixa dimensionalidade. Aqui, até mesmo a precisão da aproximação da densidade média $\bar{d}(E)$ parece afetar as estimativas da temperatura crítica [17] (e referências nesse artigo).

No formalismo de Ketterle [5] que leva em conta o caráter discreto dos níveis, nenhuma atenção é dada ao estado fundamental e não há integrais divergentes. Não se pode afinal, relevar que tudo o que a partícula vê são os níveis de energia e seus espaçamentos [22]. Com potenciais suavizados e usando como base o artigo do Ketterle et al [5] para as análises qualitativas das

principais propriedades estudadas na literatura, concluímos que entre o potencial químico, a ocupação do estado fundamental, o calor específico e a variância do número de partículas do estado fundamental, somente esta última, por ser bilinear com relação à densidade de estados, deixa evidência mais clara de uma assinatura da dinâmica caótica do análogo clássico do potencial de confinamento. Essa contribuição, porém, não é tão direta ou facilmente quantificada. A análise semi-clássica deixa também indícios de que as bifurcações podem vir a ter contribuições significativas para a variância uma vez que as amplitudes de Gutzwiller divergem. A literatura mais recente sobre CBE em sistemas de baixa dimensionalidade vem aumentando rapidamente e entre as várias propriedades estatísticas do CBE, a variância do estado fundamental tem dominado muitos artigos, uma vez que a modelagem teórica ainda não é consenso [40–44].

A principal limitação do nosso trabalho está na convergência dos níveis de energia para os autovalores do potencial Nelson e do potencial Quártico. Conforme vimos no capítulo 3, os autovalores foram obtidos via diagonalização numérica de uma matriz, que em princípio, deveria ser infinita. Para evitar o uso de autovalores sem a precisão requerida (ver capítulo 3), trabalhamos com no máximo 100 bósons. Nossos resultados indicam, no entanto, que as divergências dos resultados numéricos em relação aos resultados teóricos tendem a aparecer para $N=100$. Assim, é bem possível que os nossos resultados possam ser mais expressivos em situações com um número de partículas finito mas relativamente maior.

O uso de um campo magnético uniforme permitiu investigar o grau de aproximação da aproximação do espectro contínuo usada na literatura. Tanto o potencial Nelson quanto o potencial Quártico tem suas densidades de Weyl independentes do campo, de forma que, não era de se esperar mudanças significativas nas propriedades termodinâmicas em função do campo. Há assim, indicações de que o termo de Weyl não parece ser uma aproximação suficiente para uma plena concordância dos valores teoricamente previstos com os resultados numéricos. Convém ressaltar que o termo de Weyl em si, é uma aproximação para a densidade média de energia e esses desvios, poderiam em princípio, não estarem associados ao caos subjacente do potencial clássico. Por outro lado, a dependência da temperatura crítica como função do número de partículas, para campos nulos, nos dois regimes (regular e caótico) do potencial Nelson

sugere efeitos do caos. A quantificação desse efeito pode ser, no entanto, uma tarefa matematicamente árdua. A variância no número de ocupação do estado fundamental parece ser, no entanto, entre as propriedades termodinâmicas estudadas, aquela onde resultados diretos da teoria semi-clássica para sistemas bidimensionais caóticos possam ser mais diretamente utilizados com resultados significativos.

Bibliografia

- [1] EINSTEIN, A. Quantentheorie des einatomigen idealen gases ii. Sitz. Ber. Preuss. Akad. Wissens., v. 3, 1925.
- [2] YUKALOV, V. I.; YUKALOVA, E. P.; BAGNATO, V. S. Non-ground-state Bose-Einstein condensates of trapped atoms. *Phys. Rev. A*, v. 56, n. 6, p. 4845–4854, Dec. 1997.
- [3] DURFEE, D. S.; KETTERLE, W. Experimental studies of Bose-Einstein condensation. *Opt. Express*, v. 2, n. 8, p. 299–313, Apr. 1998.
- [4] KETTERLE, W. Experimental studies of Bose-Einstein condensate in a gas. *Phys. Today*, v. 2, n. 20, p. 30–35, Dec. 1999.
- [5] KETTERLE, W.; DRUTEN, N. J. van. Bose-Einstein condensation of a finite number of particles trapped in one or three dimensions. *Phys. Rev. A*, v. 54, n. 1, p. 656–660, July 1996.
- [6] HOHENBERG, P. C. Existence of long-range order in one and two dimensions. *Phys. Rev.*, v. 158, n. 2, p. 383–386, June 1967.
- [7] MERMIN, N. D.; WAGNER, H. Absence of ferromagnetism or antiferromagnetism in one- or two-dimensional isotropic Heisenberg models. *Phys. Rev. Lett.*, v. 17, n. 22, p. 1133–1136, Nov. 1966.
- [8] PRADO, S. D. *Propriedades magnéticas de um gás de elétrons semiclássico*. Tese (Doutorado) — Unicamp, Instituto de Física "Gleb Wataghin", 1995.
- [9] BERRY, M. V. Quantizing a classically ergodic system: Sinai's billiard and the kkr method. *Ann. Phys.*, v. 131, n. 1, p. 163–216, Jan. 1981.
- [10] NAVEZ, P. et al. Fourth statistical ensemble for the Bose-Einstein condensate. *Phys. Rev. Lett.*, v. 79, n. 10, p. 1789–1792, Sep. 1997.
- [11] GUTZWILLER, M. C. Periodic orbits and classical quantization conditions. *J. Math. Phys.*, v. 12, n. 3, p. 343–358, Mar. 1981.
- [12] ALMEIDA, A. M. O. D. *Sistemas hamiltonianos: Caos e Quantização*. Campinas: Unicamp, 1987.
- [13] TEMPERE, J.; DEVREESE, J. T. Canonical Bose-Einstein condensation of interacting bosons in two dimensions. *Solid State Commun.*, v. 101, n. 9, p. 657–659, Mar. 1997.
- [14] MEHTA, M. L. *Random Matrices*. 3rd edition. ed. St. Louis: Academic Press, 2004.

- [15] GUTZWILLER, M. C. *Chaos in Classical and Quantum Mechanics*. New York: Springer, 1990.
- [16] HUANG, K. *Statistical Mechanics*. 2nd edition. ed. New York: John Wiley & Sons, 1987.
- [17] INGOLD, G.; LAMBRECHT, A. Thermodynamics of non-interacting bosons in low-dimensional potentials. *Eur. Phys. J. D.*, v. 1, n. 1, p. 29–32, Jan. 1998.
- [18] HUANG, K. *Statistical Mechanics*. 2nd edition. ed. New York: John Wiley & Sons, 1987.
- [19] PENROSE, O.; CHESTER, G. V. in *Lectures in Theoretical Physics*. Edited by K. T. Mahanthappa (Gordon and Breach, Science Publishers, Inc., New York, 1968), Vol. 11, p. 253.
- [20] CHESTER, G. V.; FISHER, M. E.; MERMIN, N. D. Absence of anomalous averages in systems of finite nonzero thickness or cross section. *Phys. Rev.*, v. 185, n. 2, p. 760–762, Sep. 1969.
- [21] PENROSE, O.; ONSAGER, L. Bose-Einstein condensation and liquid helium. *Phys. Rev.*, v. 104, n. 3, p. 576–584, Nov. 1956.
- [22] MULLIN, W. J. Bose-Einstein condensation in a harmonic potential. *J. Low Temp. Phys.*, v. 106, n. 5-6, p. 615–641, Mar. 1997.
- [23] OSBORNE, M. F. M. The Bose-Einstein condensation for thin films. *Phys. Rev.*, v. 76, n. 3, p. 396–399, Aug. 1949.
- [24] GROSSMANN, S.; HOLTHAUS, M. Bose-Einstein condensation in a cavity. *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter*, v. 97, n. 2, p. 319–326, June 1995.
- [25] MASUT, R.; MULLIN, W. J. Spatial Bose-Einstein condensation. *Am. J. Phys.*, v. 47, n. 6, p. 493–497, June 1979.
- [26] REHR, J. J.; MERMIN, N. D. Condensation of the rotating two-dimensional ideal Bose gas. *Phys. Rev. B*, v. 1, n. 7, p. 3160–3162, Apr. 1970.
- [27] BAGNATO, V.; KLEPPNER, D. Bose-Einstein condensation in low-dimensional traps. *Phys. Rev. A*, v. 44, n. 11, p. 7439–7441, Dec. 1991.
- [28] BOHIGAS, O.; GIANNONI, M. J.; SCHMIT, C. Characterization of chaotic quantum spectra and universality of level fluctuation laws. *Phys. Rev. Lett.*, v. 52, n. 1, p. 1–4, Jan. 1984.
- [29] GIANNONI, M. J.; VOROS, A.; ZINN-JUSTIN, J. (Ed.). *Lectures Notes - Chaos et physique quantique*. Amsterdam: North-Holland, 1991.
- [30] BRACK S N FEDOTKIN, A. G. M. M.; MEHTA, M. Analytical perturbative approach to periodic orbits in the homogeneous quartic oscillator potential. *J. Phys. A*, v. 56, n. 4, p. 1095–1110, Jan. 2003.
- [31] BARANGER, M.; DAVIES, K. T. R. Periodic trajectories for a two-dimensional nonintegrable hamiltonian. *Ann. Phys.*, v. 177, n. 2, p. 330–358, Aug. 1987.

- [32] AGUIAR, M. A. M. de; MALTA, M. B. C. P.; DAVIES, K. T. R. Bifurcations of periodic trajectories in non-integrable hamiltonian systems with two degrees of freedom: Numerical and analytical results. *Ann.Phys.*, v. 180, n. 2, p. 167–205, Dec. 1987.
- [33] AGUIAR, M. A. M. de; MALTA, C. P. Isochronous and period doubling bifurcations of periodic solutions of non-integrable hamiltonian systems with reflexion symmetries. *Phys. D*, v. 30, n. 3, p. 413–424, Apr. 1988.
- [34] WILKENS, M.; WEISS, C. Particle number fluctuations in an ideal Bose gas. *J. Mod.Opt.*, v. 44, n. 10, p. 1801–1814, Oct. 1997.
- [35] GROSSMANN, S.; HOLTHAUS, M. Microcanonical fluctuations of a Bose system's ground state occupation number. *Phys. Rev. E*, v. 54, n. 4, p. 3495–3498, Oct. 1996.
- [36] GROSSMANN, S.; HOLTHAUS, M. Fluctuations of the particle number in a trapped Bose-Einstein condensate. *Phys. Rev. Lett.*, v. 79, n. 19, p. 3557–3560, Nov. 1997.
- [37] GAJDA, M.; RZAZEWSKI, K. Fluctuations of Bose-Einstein condensate. *Phys. Rev. Lett.*, v. 78, n. 14, p. 2686–2689, Apr. 1997.
- [38] NAVEZ, P. et al. Fourth statistical ensemble for the Bose-Einstein condensate. *Phys. Rev. Lett.*, v. 79, n. 10, p. 1789–1792, Sep. 1997.
- [39] LANDAU, L. D.; LIFSHITZ, E. M. *Statistical Physics*. London: Pergamon Press, 1958. p. 350–357.
- [40] SCHMIDT, H. J.; SCHNACK, J. Investigations on finite ideal quantum gases. *Phys. A*, v. 260, n. 3-4, p. 479–489, Nov. 1998.
- [41] TRAN, M. N.; MURTHY, M. V. N.; BHADURI, R. K. Ground-state fluctuations in finite Fermi systems. *Phys. Rev. E*, v. 63, n. 3, p. 031105, Feb. 2001.
- [42] BHADURI, R. K.; MURTHY, M. V. N.; TRAN, M. N. Number fluctuation in an interacting trapped gas in one and two dimensions. *J. Phys. B*, v. 35, n. 12, p. 2817–2829, June 2002.
- [43] HOLTHAUS, M.; KALINOWSKI, E.; KIRSTEN, K. Condensate fluctuations in trapped Bose gases: Canonical vs. microcanonical ensemble. *Ann. Phys.*, v. 270, n. 1, p. 198–230, Nov. 1998.
- [44] ALEKSEEV, V. A. Distribution function of the number of particles in the condensate of an ideal Bose gas confined by a trap. *J. Exp. Theor. Phys.*, v. 92, n. 4, p. 608–616, Apr. 2001.
- [45] BAGNATO, V.; PRITCHARD, D. E.; KLEPPNER, D. Bose-Einstein condensation in an external potential. *Phys. Rev. A*, v. 35, n. 10, p. 4354–4358, May 1987.