Universidade de São Paulo
Instituto de Física

Sistemas não-lineares aplicados a condensados atômicos com interações dependentes do tempo

Hedhio Luiz Francisco da Luz

Orientador: Prof. Dr. Lauro Tomio

Dissertação de mestrado apresentada ao Instituto de Física da Universidade de São Paulo para a obtenção do título de Mestre em Ciências.

Comissão Examinadora:

Prof. Dr. Lauro Tomio (IFT/UNESP)
Prof. Dr. Marcelo Martinelli (IF-USP)
Prof. Dr. Marcelo Takeshi Yamashita (UNESP/Itapeva)

São Paulo
2008

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

Luz, Hedhio Luiz Francisco da

Sistemas não-lineares aplicados a condensados atômicos com interações dependentes do tempo - São Paulo, 2008.

Dissertação (Mestrado) - Universidade de São Paulo. Instituto de Física, Depto. de Física Experimental

Orientador: Prof. Dr. Lauro Tomio (IFT-UNESP)

Área de Concentração: Física

Unitermos: 1. Condensado de Bose-Einstein; 2. Átomos; 3. Física Atômica; 4. Física Molecular.

USP/IF/SBI-027/2008

"From a certain temperature on, the molecules condense without attractive forces, that is, they accumulate at zero velocity. The theory is pretty but is there also some truth to it ?" - Albert Einstein

Sumário

Agradecimentos **xi**

Resumo **xiii**

Abstract **xv**

1 Motivação e objetivos **1**

2 Introdução **5**

2.1 Histórico 5

2.2 Equação de Gross-Pitaevskii 7

2.3 Sólitons 7

2.4 Fenômenos de interesse em nossos estudos 8

2.4.1 Oscilações de Bloch 8

2.4.2 Isolantes de Mott 8

2.4.3 Ressonância de Feshbach 9

3 Métodos Numéricos **11**

3.1 Método de Crank-Nicolson 11

3.1.1 Decomposição LU 13

3.1.2 Solução de "potenciais" por *Split-Step* 15

3.2 Exemplos unidimensionais 17

3.2.1 Expansão livre de uma gaussiana 17

3.2.2 Estado coerente do oscilador harmônico 20

3.2.3 Propagação de um sóliton 23

3.3 O Método de Peaceman-Rachford (ADI) 25

3.4 Método de Relaxação 26

3.4.1 Método da relaxação aplicada à equação de Gross-Pitaevskii . . . 27

3.5 Oscilador Harmônico 2D 28
3.6 Método de Runge-Kutta para sistemas de equações diferenciais 32

4 Sólitons em Redes Ópticas Não-Lineares 35
4.1 O modelo 35
4.2 Sistema conservativo 38
4.3 Sóliton 2D com dissipação e não-linearidade 1D 40
4.4 Sóliton 2D em uma combinação de redes ópticas lineares e não-lineares . 42

5 Resultados numéricos e discussão 45
5.1 Condensado atrativo ($\tilde{\gamma}_0 = \gamma_1 + 1/2$) 45
5.2 Condensados repulsivos, com $\tilde{\gamma}_0 < 0$ ($\tilde{\gamma}_0 = \gamma_1 - 1/2$). 50
5.3 Evolução de um sóliton 2D sob uma não-linearidade periódica e dissipação 56
5.4 Evolução de um sóliton 2D sob redes ópticas lineares e não-lineares . . . 60

6 Conclusões 63

A Gás Ideal Quântico 65
A.1 Lei de distribuição de Bose-Einstein 66

B Dedução alternativa das eqs. (4.32a) à (4.32e) 69

Bibliografia 73

Lista de Figuras

2.1 Imagem famosa da distribuição de velocidades em átomos de rubídio, no experimento do grupo de Wieman e Cornell [21]. O quadro da esquerda corresponde a um gás à temperatura imediatamente antes da condensação; o quadro do meio, imediatamente após o aparecimento da condensação; no quadro da direita, a amostra, após evaporação, é quase um condensado puro. 6

2.2 Mecanismo da ressonância de Feshbach(vide texto). 9

3.1 Densidade de probabilidade em função do espaço. Solução numérica da expansão livre da gaussiana no tempo, para $\alpha = 1$. As diferentes curvas mostram diferentes instantes de tempo. Resultados em valores adimensionais. 19

3.2 Densidade de probabilidade em função do espaço. Comparação entre o resultado numérico e o exato para $t = 5s$, com $\alpha = 1$. No detalhe, o gráfico ampliado mostra a diferença entre os valores numéricos e exatos. O erro possui um valor máximo de $5{,}61 \times 10^{-05}$. Resultados em valores adimensionais. 20

3.3 Densidade de probabilidade em função do espaço. Simulação da evolução temporal de um estado coerente do oscilador harmônico, com $x_0 = 1{,}4$. As diferentes curvas mostram diferentes instantes de tempo, com valores numéricos (linhas sólidas). A linha tracejada expressa a solução exata para $t = 8$. No detalhe, o gráfico ampliado mostra a diferença entre os valores numérico e exato para $t = 8$. Resultados em valores adimensionais. 22

3.4 Posição média da gaussiana em função do tempo em valores adimensionais. A posição inicial é em $x = 1{,}4$. 23

3.5 Densidade de probabilidade em função do espaço. Simulação da propagação de uma onda solitária (sóliton). Resultados em valores adimensionais, numéricos (tracejado) e exatos (pontilhados), para diferentes instantes de tempo. 24

3.6 Densidade de probabilidade inicial, $|\psi(x, y, 0)|^2$, em função do espaço (em duas dimensões), centrada na posição $(2, 0)$ e obtida pelo método de relaxação. Resultados em valores adimensionais. 30

3.7 Valor esperado de x (linha preta) e y (linha vermelha) em função do tempo. Conforme o esperado, a densidade de probabilidade permanece centrada na direção y, oscilando apenas na direção x. Resultados em valores adimensionais. 31

3.8 Densidade de probabilidade em função do espaço. Cortes nas direções y (à esquerda) e x (à direita) da densidade de probabilidade, em $t = 5$, na altura dos valores médios de $< x >= -1{,}69$ e $< y >= 0$, respectivamente. Valores numéricos (linha sólida) e exatos (linha tracejada) com erro de $\sim 4{,}98 \times 10^{-04}$. Resultados em valores adimensionais. 32

5.1 Resultados inteiramente numéricos da amplitude da densidade de probabilidade em função do tempo. Considerando um condensado 2D com uma rede não-linear 1D ($\gamma_0 = 1/2$ e $\gamma_2 = 0$). $\delta = 0{,}01$ (linha sólida) e $\delta = -0{,}01$ (linha tracejada), sendo $A_0 = (1 + \delta)R_\nu^{\kappa=2}$. Reprodução da figura 1(b) de Sivan [42]. 46

5.2 Caso atrativo, com $\tilde{\gamma}_0 = 1$ e $\gamma_1 = 0{,}5$. Resultados para o potencial químico (μ) em função de N, obtidos utilizando uma abordagem variacional e cálculos numérico exatos completos. 47

5.3 Caso atrativo, com $\tilde{\gamma}_0 = 1$ e $\gamma_1 = 0{,}5$. Resultados para N em função de a_1, obtidos utilizando uma abordagem variacional e cálculos numérico exatos completos. O parâmetro variacional para a largura, a_1, e o raio quadrático médio, $\sqrt{\langle x^2 \rangle}$, estão relacionados por $a_1 = \sqrt{2\langle x^2 \rangle}$ [Na verdade, os observáveis físicos dependem de k por (4.5) e (4.17)]. 48

5.4 Caso atrativo, com $\tilde{\gamma}_0 = 1$ e $\gamma_1 = 0{,}5$. Resultados variacionais para o potencial químico (μ) em função de N. Os resultados são dados para μ próximo a zero, considerando três valores diferentes de freqüência: $\omega = 0$ (linha sólida), 0,01 (linha tracejada) e 0,045 (linha pontilhada). 49

5.5 Caso atrativo, com $\tilde{\gamma}_0 = 1$ e $\gamma_1 = 0{,}5$. Resultados variacionais para N em função de a_1. Os resultados são dados para μ próximo a zero, considerando três valores diferentes de freqüência: $\omega = 0$ (linha sólida), 0,01 (linha tracejada) e 0,045 (linha pontilhada). 50

5.6 Caso repulsivo, com $\tilde{\gamma}_0 = -0,1$ e $\gamma_1 = 0,4$, para μ em função de N. Temos os resultados variacionais para $\omega = 0$, 0,07, 0,1 e 0,3, e também estão indicados os resultados exatos 'EDP' para $\omega = 0$ (onde o sistema é instável) e $\omega = 0,3$ (onde o sistema estável). No último caso, próximo da região onde o cálculo variacional apresenta um pequeno trecho instável ($22 < N < 25$), os cálculos numéricos exatos são mostrados apenas para $N > 24$. 52

5.7 Caso repulsivo, com $\tilde{\gamma}_0 = -0,1$ e $\gamma_1 = 0,4$, para N em função de a_1. Temos os resultados variacionais para $\omega = 0$, 0,07, 0,1 e 0,3. 53

5.8 Resultados variacionais de μ em função de $N/N(a_1 = 0)$, para o caso repulsivo, com $\tilde{\gamma}_0 = -0{,}1$, $\omega = 0{,}07$ e $\gamma_1 = 0{,}35$, 0,4, 0,45 e 0,5. 54

5.9 Resultados variacionais de $N/N(a_1 = 0)$ em função de a_1, para o caso repulsivo, com $\tilde{\gamma}_0 = -0{,}1$, $\omega = 0{,}07$ e $\gamma_1 = 0{,}35$, 0,4, 0,45 e 0,5. 55

5.10 Os perfis do sóliton na região estável predita pelo critério de VK, para $\omega = 0{,}3$, $\tilde{\gamma}_0 = -0{,}1$, $\gamma_1 = 0{,}4$, $\mu = 0{,}1$, $N \approx 33$ no tempo $t = 50$. A linha sólida corresponde à direção x e a linha tracejada à direção y. 56

5.11 Resultados para a amplitude em função de τ, usando uma abordagem variacional (com solução numérica de EDO's) e cálculos numéricos completos (com solução numérica de EDP), no caso de um condensado atrativo ($\gamma_0 = \gamma_1 = 0{,}5$). Para ambos, temos o valor de $\mu = 1$ fixo para o mesmo valor de $\tau = 0$, o que implica em um pequeno deslocamento da amplitude inicial, $A(0)$. 57

5.12 Resultados inteiramente numéricos da amplitude em função de τ, mostrando o comportamento do colapso para $\kappa = 4\pi$. A dissipação possui o valor fixo de $\gamma_2 = 0{,}0025$, e δ varia entre 0,02 e 0,5. 58

5.13 Estabilização da amplitude do sóliton no tempo (τ) pelo efeito de compressão, com $\tau_c = 5$ e $\alpha = 0{,}018$ na equação (4.11). Os demais parâmetros são $\gamma_2 = 0{,}006$, $\delta = 0{,}01$ e $\kappa = 4\pi$. 59

5.14 Resultados dos cálculos inteiramente numéricos de μ em função de N para um condensado repulsivo ($\tilde{\gamma}_0 = -0{,}1$ e $\gamma_1 = 0{,}4$), com diferentes valores de v_0. Consideramos $\lambda = 1{,}5$ e $\phi = \pi/2$. Dois pontos são indicados no gráfico, um instável $\mu = -0{,}1111$ (círculo) e um estável $\mu = -0{,}3333$ (estrela). 60

5.15 Resultados dos cálculos inteiramente numéricos de N em função de a_1 para um condensado repulsivo ($\tilde{\gamma}_0 = -0{,}1$ e $\gamma_1 = 0{,}4$), com diferentes valores de v_0. Consideramos $\lambda = 1{,}5$ e $\phi = \pi/2$. Dois pontos são indicados no gráfico, um instável $\mu = -0{,}1111$ (círculo) e um estável $\mu = -0{,}3333$ (estrela). 61

5.16 Perfis do sóliton no tempo $t = 50$ para $\mu = -0{,}3333$. (região estável). O sóliton está centrado em um mínimo da rede óptica linear (quando se leva em consideração a direção y). 62

Agradecimentos

Primeiramente agradeço a Deus, que me conduziu por toda minha vida até o presente momento.

Agradeço muito aos meus pais, Audécio e Vanilde, e aos meus irmãos, João e Geovana, por todo amor, carinho e dedicação a mim dispensados. Também agradeço a minha namorada Roberta por seu amor, companheirismo e apoio durante a etapa final desse trabalho.

Um agradecimento especial ao professor Lauro Tomio, por ter aceitado me orientar, pela amizade e pelo tempo a mim dispensado. Também agradeço muito ao professor Arnaldo Gammal, pela co-orientação extra-oficial, por todos os (muitos) esclarecimentos, pelo apoio e pela amizade. E ao professor Fatkhulla Abdullaev(*"thanks for everything professor"*) por todas as contribuições fundamentais dadas durante a realização do presente trabalho.

Aos colegas de grupo, pelo companheirismo, amizade e contribuições valorosas durante o período em que trabalhamos juntos.

A todos aqueles que não foram mencionados aqui, mas que, de uma forma ou de outra, contribuíram para este trabalho.

E por fim, a FAPESP - Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo, pelo apoio financeiro que possibilitou a realização deste projeto.

Resumo

No presente trabalho foi estudada a dinâmica de um sistema de muitas partículas no regime de temperaturas ultra-baixas. Realizamos um estudo dinâmico de sistemas condensados bidimensionais em uma rede óptica não-linear em uma direção e também na presença de uma armadilha harmônica assimétrica. Investigamos alguns aspectos sobre a estabilização e propagação de sólitons em condensados de Bose-Einstein. O colapso da função de onda é evitado pela não-linearidade periódica dissipativa, no caso de um meio com campo de fundo positivo (com sistemas atômicos atrativos). A variação adiabática do comprimento de espalhamento de fundo leva a existência de sólitons de onda de matéria metaestáveis. Um sóliton dissipativo pode existir no meio atrativo bidimensional (2D) com uma não-linearidade periódica unidimensional (1D), quando um mecanismo de alimentação atômica é utilizado. Um sóliton estável pode existir no caso de condensados repulsivos, em um campo de fundo negativo, com uma armadilha harmônica em uma direção e uma rede óptica não-linear na outra direção. Os resultados inteiramente numéricos, para a equação de Gross-Pitaevskii 2D, confirmam as simulações da abordagem variacional.

Palavras-chave: Condensação de Bose-Einstein. Equação de Gross-Pitaevskii. Sólitons. Crank-Nicolson. Simulação numérica.

Abstract

In this work the dynamics of a system of many particles in a ultra-low temperature regime was studied. We performed a dynamic study of two-dimensional condensate systems into a nonlinear optical lattice in one direction and also in the presence of an asymmetrical harmonic trap. We investigated some aspects of the stabilization and spread of solitons in a Bose-Einstein condensate. In the case of positive background field media (with attractive atomic systems), the collapse of the wave-packet is arrested by the dissipative periodic nonlinearity. The adiabatic variation of the background scattering length leads to metastable matter-wave solitons. When the atom feeding mechanism is used, a dissipative soliton can exist in an attractive bidimensional (2D) media with unidimensional (1D) periodic nonlinearity. In the case of repulsive condensates, with a negative background field, a stable soliton may exist when we have an harmonic trap in one direction and a nonlinear optical lattice in the other. Variational approach simulations are confirmed by full numerical results for the 2D Gross-Pitaevskii equation.

Keywords: Bose-Einstein condensation. Gross-Pitaevskii equation. Solitons. Crank-Nicolson. Numerical simulation.

Capítulo 1

Motivação e objetivos

O objetivo do trabalho consistiu em estudar a dinâmica e estabilidade de condensados de Bose-Einstein, levando em conta a propagação de sólitons 2D com não-linearidade 1D por combinações de redes ópticas lineares e não-lineares. Estes sistemas são descritos por equações do tipo Schrödinger, com não-linearidade cúbica. Os estudos apresentados nesta dissertação resultaram em um artigo publicado no periódico "Physical Review A" [1].

Foram utilizadas técnicas numéricas para soluções de equações diferenciais parciais de segunda ordem, com duas dimensões espaciais e uma temporal. Adicionando termos lineares e não-lineares, descrevemos sistemas conservativos e não-conservativos, e adaptamos os códigos às nossas necessidades. Procuramos determinar as situações mais adequadas para se obter maior estabilidade do condensado, considerando as interações existentes entre os átomos, assim como a interação externa aplicada. Os diferentes tipos de interações utilizadas levaram em conta possíveis situações experimentais.

O estudo numérico de equações de Schrödinger não-lineares aplicado a condensados de Bose-Einstein é muito importante devido ao seu vasto campo de aplicação, principalmente junto à óptica e a estudos de ondas de matéria. Estudamos a influência de uma rede óptica na dinâmica e estabilidade de um sistema de muitas partículas no regime de temperaturas ultra-baixas.

A rede óptica, motivada pelas possibilidades experimentais, pode ser descrita tanto pela inclusão de um termo linear, ou pela inclusão de um termo não-linear (nesse último caso é realizada experimentalmente pela modulação do comprimento de espalhamento de dois corpos através da ressonância de Feshbach). Foi sugerido recentemente que se podem gerar redes ópticas não-lineares em condensados de Bose-Einstein por meio de dois feixes de laser se propagando em direções contrárias próximo à ressonância óptica

induzida de Feshbach [2, 3]. A variação espacial da intensidade óptica leva à variação periódica espacial do comprimento de espalhamento atômico. Por isso, nos últimos anos, vem sendo dada atenção especial ao estudo de condensados de Bose-Einstein em redes ópticas, devido ao interesse, tanto teórico quanto experimental, em diferentes fenômenos físicos como a formação e propagação de sólitons, transições de Mott, oscilações de Bloch, etc. [4–7].

Também a dinâmica de ondas de matéria não-linear é muito estudada em condensados de Bose-Einstein, seja na forma de sólitons ou de ondas periódicas, e possuem aplicações em diversos campos além da física, como a oceanografia e as telecomunicações [6,8].

Do ponto de vista experimental, redes ópticas lineares foram usadas recentemente em experimentos com condensados de Bose-Einstein, sendo observados os fenômenos de oscilações de Bloch [9], transições de fase quânticas em isolantes de Mott [10] e a formação de sólitons [7, 8]. A manipulação periódica espacial em condensados de Bose-Einstein é possível por meio do comprimento de espalhamento de dois corpos utilizando técnicas de ressonância de Feshbach opticamente induzida [11–13].

As investigações sobre sólitons de ondas ópticas e de matéria ocorrem sobre diferentes tipos de manipulação de parâmetros [4], modulando a partir da dispersão e da não-linearidade, ambos no espaço ou no tempo. O estudo das modulações fortes e rápidas da dispersão no tempo são interessantes, devido às muitas vantagens de se ter sólitons controlados por dispersão, por sua aplicação a comunicações óticas e armazenamento de informação [14].

As modulações temporais da não-linearidade são importantes nos lasers de fibra e nos condensados de Bose-Einstein [15]. No caso específico de sistemas condensados, foram previstos que tais modulações não lineares levam à supressão do colapso (assim como a existência de sólitons multidimensionais estáveis em condensados atrativos) e a geração do padrão periódico de ondas de matéria [16]. Em óptica, sólitons não-lineares controlados já foram observados [17].

A abordagem que seguiremos nessa dissertação é a seguinte:

Na introdução (capítulo 2) serão apresentadas algumas informações teóricas básicas e aspectos históricos pertinentes ao trabalho.

No capítulo 3 serão apresentados os métodos numéricos que foram utilizados nesse projeto. Exemplos de aplicação dos métodos numéricos a problemas com soluções exatas também foram desenvolvidos, com um objetivo didático e para serem analisados os erros de truncamento de cada um dos métodos.

O capítulo 4 é dedicado ao desenvolvimento teórico da dissertação. No início deste

capítulo definiremos o modelo utilizado. A partir disso analisaremos, com uma abordagem variacional, diferentes casos, a fim de obter conjuntos de equações acopladas para os observáveis físicos pertinentes.

Para o capítulo 5 está reservada a apresentação dos resultados obtidos com a simulação inteiramente numérica, com a análise numérica das equações acopladas dos observáveis (abordagem variacional), e a discussão dos mesmos. Também serão analisados os limites das equações encontradas pela abordagem variacional.

E por fim, no capítulo 6 são feitas as considerações finais e propostas futuras investigações do mesmo problema.

Capítulo 2

Introdução

2.1 Histórico

Einstein previu, em 1925, que partículas em uma nuvem de gás, a baixas temperaturas, estariam todas em um mesmo estado quântico, exibindo fenômenos quânticos em larga escala. Seguindo o trabalho de Bose [18] sobre estatística de fótons, Einstein considerou um gás de bósons massivos, não-interagente e concluiu que abaixo de certa temperatura, uma fração finita dessas partículas estaria ocupando o estado de mais baixa energia de uma partícula única [19]. No apêndice A procuramos esclarecer a teoria de um gás ideal quântico, com um objetivo apenas didático, chegando à lei de distribuição de Bose-Einstein. Diversos livros de mecânica quântica e de mecânica estatística fazem deduções parecidas, em particular citamos a referência [20], uma apostila de um curso de verão ministrado pelo professor Piza no IFUSP em 2002. Esse estado gasoso peculiar, um condensado de Bose-Einstein ('Bose-Einstein condensate' ou simplesmente 'BEC'), foi produzido somente em 1995 (portanto, 70 anos após sua previsão) em laboratórios de Física Atômica, graças às novas técnicas de vácuo e resfriamento atômico utilizando feixes a laser, que foram empregadas em armadilhas magnéticas com gases diluídos de diferentes espécies atômicas. O grupo de pesquisa da Universidade de Colorado, em Boulder, utilizou um gás de átomos de $^{87}\mathrm{Rb}$ [21](na figura 2.1 vemos a primeira imagem divulgada de um condensado de Bose-Einstein obtido em laboratório), na Universidade de Rice, em Houston, foi obtido o condensado de átomos de $^{7}\mathrm{Li}$ [22], e no M.I.T., em Cambridge, foi obtido o condensado de átomos $^{23}\mathrm{Na}$ [23]. Em 2001, o prêmio Nobel de física foi dividido igualmente por E.A. Cornell, W. Ketterle e C.E. Wieman "pela obtenção da condensação de Bose-Einstein em

gases de átomos alcalinos diluídos e pelos estudos iniciais fundamentais das propriedades dos condensados[1]".

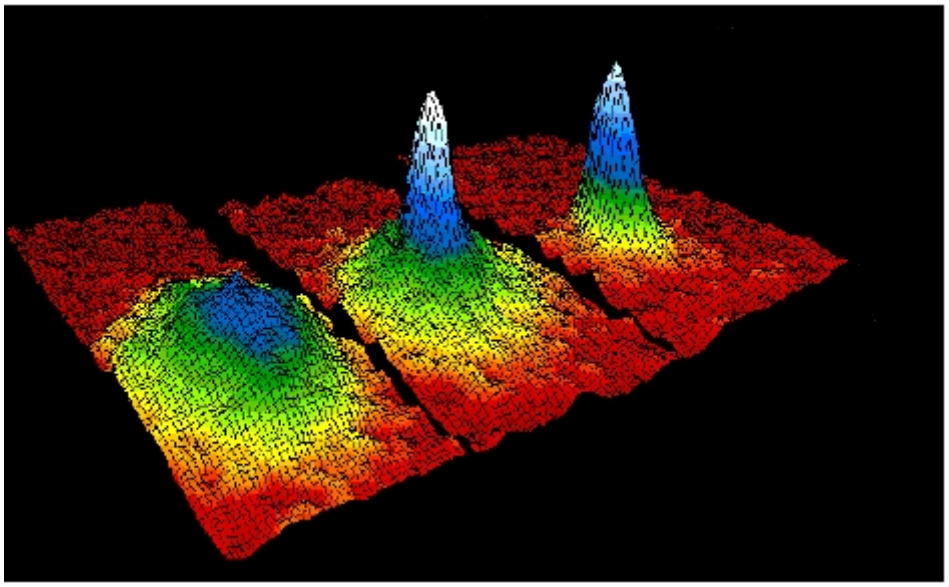


Figura 2.1: Imagem famosa da distribuição de velocidades em átomos de rubídio, no experimento do grupo de Wieman e Cornell [21]. O quadro da esquerda corresponde a um gás à temperatura imediatamente antes da condensação; o quadro do meio, imediatamente após o aparecimento da condensação; no quadro da direita, a amostra, após evaporação, é quase um condensado puro.

[1]em tradução livre. Obtido em http://nobelprize.org/.

2.2 Equação de Gross-Pitaevskii

A equação de Gross-Pitaevskii(GP) nada mais é que a equação de Schrödinger com um termo cúbico não-linear. É uma equação de campo médio aplicada a um sistema de N bósons formando um condensado. Ela foi derivada, independentemente, pela primeira vez por Gross(1961) e por Pitaevskii(1961) [24, 25]. Sendo $\Psi(\vec{r}, t)$ a função de onda do sistema condensado, a equação é dada por:

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(\vec{r},t)}{\partial t} = \left[H_{\text{oh}} + \frac{4\pi N\hbar^2 a}{m}|\Psi(\vec{r},t)|^2\right]\Psi(\vec{r},t) \ , \tag{2.1}$$

com

$$H_{\text{oh}} \equiv -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \frac{m}{2}\sum_{i=1}^{3}\omega_i^2 x_i^2 \ , \tag{2.2}$$

onde H_{oh} é o operador hamiltoniano do oscilador harmônico com uma partícula de massa m e ω_i a freqüência da armadilha harmônica na direção x_i $[r = \sqrt{(x_1^2 + x_2^2 + x_3^2)}]$. A constante a é o comprimento de espalhamento da interação de dois corpos que, como veremos adiante, pode ser alterada no condensado, tanto no tempo como no espaço, usando técnicas conhecidas como "ressonância de Feshbach".

2.3 Sólitons

Sólitons, também conhecidos como ondas solitárias, são soluções de equações diferenciais não-lineares do tipo da Gross-Pitaevskii, sem a armadilha harmônica ($\omega_i = 0$), que representam ondas com forma constante, que são localizáveis e que podem interagir fortemente com outros sólitons, mas que permanecem as mesmas após a colisão, a não ser talvez por uma mudança na fase [26].

Uma onda solitária é causada por um equilíbrio entre efeitos não-lineares e dispersivos em um meio. John Scott Russell foi quem, em 1834, descreveu primeiramente uma onda solitária, ao observar o movimento de um barco no canal de Edimburgo-Glasgow. Um outro exemplo de sóliton é o fenômeno da pororoca que ocorre na Amazônia Brasileira.

Os sólitons estudados no trabalho aparecem como uma solução especial da equação de Schrödinger Não-Linear:

$$i\hbar\frac{d\Psi}{dt} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi + g|\Psi|^2\right]\Psi \ . \tag{2.3}$$

Os sólitons podem ser: brilhantes, um pacote de ondas elevado se propagando; ou escuros: buracos se movendo em um fundo de matéria; sendo diferenciados no caráter atrativo ou repulsivo das interações atômicas pelo sinal de g, negativo ou positivo respectivamente, do termo não-linear do condensado [4].

2.4 Fenômenos de interesse em nossos estudos

2.4.1 Oscilações de Bloch

Oscilações de Bloch se referem a um fenômeno bastante estudado na física do estado sólido previsto por Bloch em 1928 [27]. Ele descreve a oscilação no espaço, de uma partícula (um elétron) em um cristal (potencial periódico), tendo um campo elétrico estático agindo sobre ela. Este fenômeno nunca foi observado em cristais. Devido aos processos de relaxação (espalhamento em defeitos da rede, fônons, etc.) a coerência do sistema é destruída antes dos elétrons completarem um ciclo de Bloch. Por isso é de grande interesse procurar outros sistemas, em que o período de Bloch, que é inversamente proporcional à magnitude da força constante e do período da rede, seja menor do que o tempo de relaxação [28]. Um desses sistemas é o condensado de Bose-Einstein, onde as oscilações de Bloch aparecem como oscilações de pacotes de onda de matéria em uma rede periódica, que possuem como vantagem a possibilidade do controle experimental sobre os parâmetros do potencial periódico e do condensado, tornando possível alcançar regimes inacessíveis a outros sistemas [5].

2.4.2 Isolantes de Mott

Os isolantes de Mott são constituídos de um tipo especial de material, considerados condutores pela teoria de bandas convencional, mas que, na realidade, apresentam características de isolantes. Este efeito é resultado das interações elétron-elétron que não são consideradas na teoria de bandas tradicional. No caso dos condensados atômicos, o tratamento teórico da transição superfluido-isolante de Mott é feito pelo modelo de Bose-Hubbard, que é equivalente ao modelo utilizado em física do estado sólido, só que aplicado a partículas bosônicas (e não férmions, como os elétrons do modelo tradicional) em uma rede [5, 29].

2.4.3 Ressonância de Feshbach

A ressonância de Feshbach ocorre quando a energia de um estado ligado em um potencial inter-atômico é igual à energia cinética de uma colisão de um par de átomos. Na ressonância de Feshbach magneticamente induzida, a energia do estado ligado é colocada em ressonância por meio do efeito Zeeman, mudando o campo magnético aplicado [30].

Na figura 2.2 está ilustrado o mecanismo da ressonância de Feshbach. A curva inferior descreve o potencial de espalhamento entre dois átomos (canal aberto). A curva superior descreve o potencial de interação molecular (canal fechado). A linha referente ao estado ligado varia de imediatamente acima(a) ou abaixo(b) do limiar da ressonância onde ocorre o acoplamento entre os canais. Este acoplamento permite a transição entre pares de partículas nos dois canais. A ressonância de Feshbach é o aumento resultante no espalhamento de partículas no canal aberto [31].

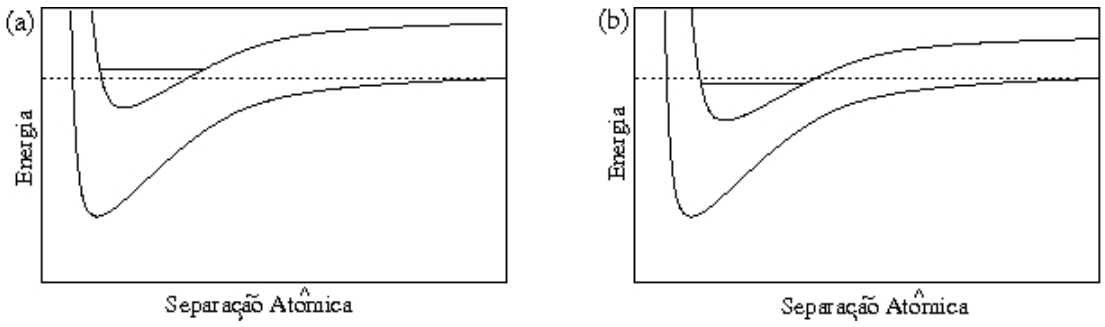


Figura 2.2: Mecanismo da ressonância de Feshbach(vide texto).

No entanto, podem-se utilizar redes ópticas (por meio de ajustes na amplitude e freqüência de lasers) para controlar a energia do estado ligado com a chamada ressonância de Feshbach opticamente induzida [24]. Estas ressonâncias ópticas possuem a vantagem de seus campos ópticos poderem ser ajustados rapidamente. Além disso, distribuições complexas de intensidades espaciais podem ser facilmente produzidas, o que resultam em padrões de comprimento de espalhamento correspondentes em toda a amostra. Transições ópticas estão sempre disponíveis, mesmo quando não existem ressonâncias magnéticas de Feshbach [12].

Capítulo 3

Métodos Numéricos

Nesse capítulo vamos explicitar os principais métodos numéricos utilizados para solucionar equações diferenciais parciais de segunda ordem. Primeiramente, os códigos foram aplicados a alguns sistemas lineares unidimensionais (1D), expansão livre de uma gaussiana e oscilador harmônico quântico, sendo depois estendidos para sistemas não-lineares 1D (como a propagação de sólitons). Em seguida, foi solucionado um sistema bidimensional (2D), oscilador harmônico, sendo desenvolvido um método de relaxação para encontrar o estado fundamental do mesmo sistema.

Neste trabalho, utilizamos o conjunto destes métodos para encontrar soluções da equação de Gross-Pitaevskii (que é uma equação não-linear) e suas extensões, com e sem termos dissipativos. Por fim, foi explicitado um método para solução de sistemas de equações diferencias ordinárias acopladas, que também foi utilizado no projeto.

3.1 Método de Crank-Nicolson

Queremos resolver uma equação diferencial parcial pelo método de Crank-Nicolson. Tomemos a equação de difusão em uma dimensão:

$$\frac{\partial u(x,t)}{\partial t} = \sigma \frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2} \ . \tag{3.1}$$

Vamos resolver a equação (3.1) para as condições de contorno e condição inicial:

$$u(x,0) = \phi(x) \quad , \quad 0 \leq x \leq 1 \; ; \tag{3.2}$$

$$u(0,t) = u(1,t) = 0 \quad , \quad t \geq 0 \; . \tag{3.3}$$

Para tanto, a região do espaço de soluções, $\Omega = (0,1) \times (0,t)$, correspondente às condições de contorno e inicial, será discretizada em n passos na direção temporal e m passos na direção espacial.

A equação (3.1) pode ser representada por:

$$u'(x,t) = f(u(x,t)) \; . \tag{3.4}$$

Integrando a equação anterior em um intervalo de tempo k, teremos:

$$u(x,t+k) - u(x,t) = \int_t^{t+k} f(u(x,t))dt \; . \tag{3.5}$$

Para um intervalo k suficientemente pequeno, pode-se resolver a integral pela regra do trapézio:

$$u(x,t+k) - u(x,t) = k\frac{f(u(x,t+k)) + f(u(x,t))}{2} \; . \tag{3.6}$$

Fazendo a discretização da malha muito pequena, trocamos $u(mh,nk)$ por U_m^n:

$$U_m^{n+1} - U_m^n = \frac{k\sigma}{2}\left[D_{xx}U_m^{n+1} + D_{xx}U_m^n\right] \; , \tag{3.7}$$

onde $D_{xx}U_m^n$ representa o operador $\frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2}$ já discretizado. $\frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2}$ pode ser substituído por $[u(x+h,t) - 2u(x,t) + u(x-h,t)]/h^2$. Utilizando a discretização da malha neste último, tomando $r = k\sigma/h^2$ e introduzindo na equação (3.7), temos:

$$U_m^{n+1} - U_m^n = \frac{r}{2}\left[\left(U_{m+1}^{n+1} - 2U_m^{n+1} + U_{m-1}^{n+1}\right) + \left(U_{m+1}^n - 2U_m^n + U_{m-1}^n\right)\right] \; .$$

Arranjando a equação, de modo a ter o próximo instante de tempo $(n+1)$ do lado esquerdo e o instante anterior (n) do lado direito:

$$U_m^{n+1} - 0.5r\left[U_{m+1}^{n+1} - 2U_m^{n+1} + U_{m-1}^{n+1}\right] = U_m^n + 0.5r\left[U_{m+1}^n - 2U_m^n + U_{m-1}^n\right] \ , \quad (3.8)$$

válido para $m = 1, 2, 3...M-1, M$ e $n > 0$.

Tendo em vista as condições de contorno, teremos $U_0^n = U_M^n = 0$ e $U_0^{n+1} = U_M^{n+1} = 0$. Precisamos então resolver o sistema de equações:

$$\begin{bmatrix} 1+r & -\frac{r}{2} & 0 & . & . & 0 \\ -\frac{r}{2} & 1+r & -\frac{r}{2} & 0 & . & 0 \\ 0 & . & . & . & . & . \\ . & . & 0 & -\frac{r}{2} & 1+r & -\frac{r}{2} \\ 0 & . & . & . & -\frac{r}{2} & 1+r \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U_1^{n+1} \\ U_2^{n+1} \\ . \\ . \\ U_{M-1}^{n+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1-r & +\frac{r}{2} & 0 & . & . & 0 \\ +\frac{r}{2} & 1-r & +\frac{r}{2} & 0 & . & 0 \\ 0 & . & . & . & . & . \\ . & . & 0 & +\frac{r}{2} & 1-r & +\frac{r}{2} \\ 0 & . & . & . & +\frac{r}{2} & 1-r \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U_1^n \\ U_2^n \\ . \\ . \\ U_{M-1}^n \end{bmatrix} .$$

Como as matrizes são tridiagonais, é possível encontrar a solução do sistema pelo método de decomposição de matrizes LU [32].

3.1.1 Decomposição LU

A decomposição LU é utilizada para reescrever a matriz tridiagonal **A**, que possui apenas a diagonal principal e as diagonais imediatamente acima e abaixo da diagonal principal, no produto da matriz triangular inferior (**L**) e da matriz triangular superior (**U**).

Sendo **A** a matriz tridiagonal $(M-1) \times (M-1)$:

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} b_1 & c_1 & & & & \\ a_2 & b_2 & c_2 & & & \\ & . & . & . & & \\ & & . & . & . & \\ & & & a_{M-2} & b_{M-2} & c_{M-2} \\ & & & & a_{M-1} & b_{M-1} \end{bmatrix} ,$$

é possível reescrevê-la como o produto das matrizes:

$$
\mathbf{L} = \begin{bmatrix} 1 & & & & \\ l_2 & 1 & & & \\ & \cdot & \cdot & & \\ & & \cdot & \cdot & \\ & & & \cdot & \cdot \\ & & & l_{M-1} & 1 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{U} = \begin{bmatrix} u_1 & v_1 & & & \\ & u_2 & v_2 & & \\ & & \cdot & \cdot & \\ & & & \cdot & \cdot \\ & & & \cdot & \cdot \\ & & & & u_{M-1} \end{bmatrix},
$$

onde os elementos das matrizes **L** e **U** podem ser obtidos pelas seguintes relações de recorrência:

$$
\begin{gathered} u_1 = b_1, \quad v_i = c_i, \quad i = 1, 2, 3, \ldots, M-1; \\ l_j = a_j / u_{j-1}, \quad u_j = b_j - l_j c_{j-1}, \quad j = 2, 3, \ldots, M-1. \end{gathered} \tag{3.9}
$$

Temos então o seguinte sistema representando a equação (3.8):

$$
\mathbf{A}.U_m^{n+1} = \mathbf{B}.U_m^n \ . \tag{3.10}
$$

As matrizes **A** e **B** são fornecidas pelo método de Crank-Nicolson e dependem apenas de r. A matriz coluna U_m^n no instante de tempo n é conhecida para todos os valores de m. Sendo assim, é possível calcular diretamente o lado direito da equação anterior, que resulta em uma matriz coluna $C_m = \mathbf{B}.U_m^n$.

Decompondo a matriz **A**:

$$
\mathbf{A}.U_m^{n+1} = \mathbf{L}.(\mathbf{U}.U_m^{n+1}) = \mathbf{L}.X_m = C_m \ , \tag{3.11}
$$

onde a matriz coluna X_m representa o produto entre a matriz **U** e a matriz coluna U_m^{n+1}. A matriz coluna X_m pode então ser determinada por uma interação para frente:

$$
\begin{bmatrix} 1 & & & & \\ l_2 & 1 & & & \\ & \cdot & \cdot & & \\ & & \cdot & \cdot & \\ & & & \cdot & \cdot \\ & & & l_n & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} X_1 \\ X_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ X_{M-2} \\ X_{M-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C_1 \\ C_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ C_{M-2} \\ C_{M-1} \end{bmatrix} .
$$

É fácil perceber que $X_1 = C_1$. Usando esse resultado, é possível determinamos

$X_2 = C_2 - X_1.l_2$ e assim sucessivamente até encontrarmos X_{M-1}. Agora basta lembrar que $\mathbf{U}.U_m^{n+1} = X_m$, e encontrar a matriz coluna U_m^{n+1}, executando uma interação para trás:

$$\begin{bmatrix} u_1 & v_1 & & & & \\ & u_2 & v_2 & & & \\ & & . & . & & \\ & & & . & . & \\ & & & & . & . \\ & & & & & u_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U_1^{n+1} \\ U_2^{n+1} \\ . \\ . \\ U_{M-2}^{n+1} \\ U_{M-1}^{n+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} X_1 \\ X_2 \\ . \\ . \\ X_{M-2} \\ X_{M-1} \end{bmatrix} .$$

Também é fácil perceber que $U_{M-1}^{n+1} = X_{M-1}/u_n$. Usando esse resultado, é possível determinarmos $U_{M-2}^{n+1} = (X_{M-2} - U_{M-1}^{n+1}.v_{n-1})/u_{n-1}$, e assim sucessivamente até encontrarmos U_1^{n+1}.

Deste modo, determinamos a matriz coluna U_m^{n+1} que representa o valor, em qualquer ponto m do espaço, da nossa função de onda no instante temporal $n + 1$.

O método de Crank-Nicolson é um método poderoso para a solução de equações do tipo difusão. Ele é considerado um método implícito pois um ponto m da malha no instante $n + 1$ não depende somente dos pontos da malha no instante anterior (n), mas também dos pontos $m + 1$ e $m - 1$ do instante $n + 1$, ainda não computados, ao contrário do que ocorre com o método explícito, por exemplo, onde os pontos do instante $n + 1$ só dependem dos pontos do instante n (já conhecidos). A vantagem do método está no fato de ele ser incondicionalmente estável. Ao contrário do que ocorre no método explícito, onde temos a condição de que $r \leq 0,5$ para que ocorra a convergência do mesmo. O erro do método de Crank-Nicolson é $\mathcal{O}(h^2 + k^2)$. No método explícito o erro de truncamento é $\mathcal{O}(h^2 + k)$ [32].

O próximo passo será incluir um potencial na equação a ser resolvida.

3.1.2 Solução de "potenciais" por *Split-Step*

Este método numérico complementa o método de Crank-Nicolson, permitindo a solução de uma equação diferencial de segunda ordem sujeita a um potencial (como o harmônico, por exemplo). Além disso, partindo do mesmo princípio, podemos tratar um termo não-linear como um "potencial" e, utilizando o mesmo procedimento, encontrar soluções

de equações não-lineares (como a equação de Gross-Pitaevskii e suas extensões, que é nosso objetivo principal).

Queremos resolver a equação de Schrödinger sujeita a um potencial $V(x)$:

$$(\mathbf{T}+\mathbf{V})\psi(x,t) \equiv -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x)\psi(x,t) = i\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t} \ , \tag{3.12}$$

cuja solução é:

$$\psi(x,t) = e^{-i(\mathbf{T}+\mathbf{V})\frac{t-t_0}{\hbar}}\psi(x,t_0) = e^{-i(\mathbf{T}+\mathbf{V})\frac{\Delta t}{\hbar}}\psi(x,t_0) \ . \tag{3.13}$$

Pelo fato de não conhecermos o operador $e^{-i(\mathbf{T}+\mathbf{V})\frac{\Delta t}{\hbar}}$, é preciso separá-los em um produto dos operadores $e^{-i\mathbf{T}\frac{\Delta t}{\hbar}}e^{-i\mathbf{V}\frac{\Delta t}{\hbar}}$ Porém devido ao fato de $\mathbf{T}$ e $\mathbf{V}$ não comutarem, temos que fazer uma aproximação:

$$e^{\lambda(A+B)} = 1 + \lambda(A+B) + \frac{\lambda^2}{2!}(A+B)^2\ldots \ , \tag{3.14}$$

$$e^{\lambda A}e^{\lambda B} = \left[1+\lambda A + \frac{\lambda^2}{2!}A^2\ldots\right]\left[1+\lambda B + \frac{\lambda^2}{2!}B^2\ldots\right] \ . \tag{3.15}$$

Comparando as expressões anteriores, é possível verificar que:

$$e^{\lambda(A+B)} = e^{\lambda A}e^{\lambda B} - \frac{\lambda^2}{2!}[A,B] + \mathcal{O}(\lambda^3) \ , \tag{3.16}$$

que, caso A e B não comutem, possui um erro da ordem de λ^2. Para melhorar a aproximação vamos escrever a exponencial da seguinte forma:

$$e^{\lambda\frac{A}{2}}e^{\lambda B}e^{\lambda\frac{A}{2}} = \left[1+\lambda\frac{A}{2} + \frac{\lambda^2}{2!}\left(\frac{A}{2}\right)^2\ldots\right]\left[1+\lambda B + \frac{\lambda^2}{2!}B^2\ldots\right]\left[1+\lambda\frac{A}{2} + \frac{\lambda^2}{2!}\left(\frac{A}{2}\right)^2\ldots\right] \ . \tag{3.17}$$

Comparando as equações (3.14) e (3.17) teremos um erro da ordem de λ^3 na aproximação. Fazendo $A = \mathbf{V}$, $B = \mathbf{T}$ e $\lambda = -i\Delta t/\hbar$ temos:

$$e^{-i(\mathbf{T}+\mathbf{V})\frac{\Delta t}{\hbar}} = e^{-i\frac{\mathbf{V}}{2}\frac{\Delta t}{\hbar}}e^{-i\mathbf{T}\frac{\Delta t}{\hbar}}e^{-i\frac{\mathbf{V}}{2}\frac{\Delta t}{\hbar}} + \mathcal{O}(\Delta t^3) \ , \tag{3.18}$$

que nos dá um erro pequeno para o "split-step", da ordem de $\mathcal{O}(\Delta t^3)$. Agora a solução da equação de Schrödinger para o potencial $V(x)$:

$$\psi(x,t) = e^{-i\frac{\mathbf{V}}{2}\frac{\Delta t}{\hbar}} e^{-i\mathbf{T}\frac{\Delta t}{\hbar}} e^{-i\frac{\mathbf{V}}{2}\frac{\Delta t}{\hbar}} \psi(x,t_0) \ , \tag{3.19}$$

é calculada numericamente em três etapas, sendo $\psi(x,t) = \psi(x, t_0 + \Delta t)$ a solução após uma evolução de um instante de tempo (Δt).

Primeiramente, obtém-se $\psi' = e^{-i\frac{\mathbf{V}}{2}\frac{\Delta t}{\hbar}} \psi(x,t_0)$ aplicando o operador $e^{-i\frac{\mathbf{V}}{2}\frac{\Delta t}{\hbar}}$. Como conhecemos o valor do potencial $\mathbf{V}$ em qualquer ponto do espaço, aplicar este operador nada mais é que simplesmente multiplicar o valor da função $\psi(x,t_0)$ em cada ponto do espaço por $e^{-i\frac{\mathbf{V}}{2}\frac{\Delta t}{\hbar}}$, que possui um valor específico para cada ponto do espaço.

Na segunda etapa, resolve-se $\psi'' = e^{-i\mathbf{T}\frac{\Delta t}{\hbar}} \psi'$. Aplicar $e^{-i\mathbf{T}\frac{\Delta t}{\hbar}}$ à função ψ' é o mesmo que evoluir a função ψ' por um intervalo de Δt. Utilizamos aqui o método de Crank-Nicolson.

Por fim, temos o resultado final $\psi(x,t) = e^{-i\frac{\mathbf{V}}{2}\frac{\Delta t}{\hbar}} \psi''$ por outra simples multiplicação. Este procedimento é válido pelo fato de que $\psi(x,t)$ varia lentamente para este caso. O método é chamado de "*Split-Step*" pois o potencial é resolvido em dois passos separados, antes e depois de se aplicar o operador correspondente ao método de Crank-Nicolson.

3.2 Exemplos unidimensionais

A seguir, exemplificaremos a utilização dos métodos solucionando numericamente problemas simples de mecânica quântica, comparando seus resultados numéricos com as conhecidas soluções exatas em uma dimensão.

3.2.1 Expansão livre de uma gaussiana

Começaremos com um problema linear bem simples: uma função gaussiana centrada na origem sem nenhum potencial aplicado. A dinâmica do sistema é resolvida pelo método de Crank-Nicolson, nos fornecendo o resultado em função do tempo.

Temos a equação de Schrödinger em uma dimensão com potencial nulo:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2} = i\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t} \ . \tag{3.20}$$

Fazendo as mudança de variáveis:

$$\begin{aligned} \kappa\tilde{x} = 2kx, \quad \tilde{t} = \tfrac{4w_R t}{\kappa^2}, \\ w_R = \tfrac{E_R}{\hbar}, \quad E_R = \tfrac{\hbar^2 k^2}{2m}, \end{aligned} \tag{3.21}$$

retirando os índices $(\sim)$ e simplificando a notação, temos:

$$i\psi_t + \psi_{xx} = 0 \ , \tag{3.22}$$

onde os índices t e xx referem-se às derivadas primeira no tempo e segunda no espaço.

Considerando as condições de contorno $\psi(-\infty, t) = \psi(\infty, t) = 0$ e a condição inicial:

$$\psi(x', 0) = \frac{\alpha^{1/4}}{\pi^{1/4}} e^{-\frac{\alpha x'^2}{2}} \ . \tag{3.23}$$

Um modo conhecido [33] de resolver este problema é utilizando funções de Green:

$$\psi(x, t) = \int dx' G(x, t; x', 0)\psi(x', 0) \ , \tag{3.24}$$

$$\psi(x, t) = \int dx' \frac{e^{i\left[\frac{(x-x')^2}{4t}\right]}}{\sqrt{4\pi i t}} \frac{\alpha^{1/4}}{\pi^{1/4}} e^{-\frac{\alpha x'^2}{2}} \ . \tag{3.25}$$

A solução $\psi(x, t)$ da equação para a expansão livre da gaussiana, bem como sua densidade de probabilidade $|\psi(x, t)|^2$ são [33]:

$$\psi(x, t) = \frac{\alpha^{1/4}}{\pi^{1/4}} \sqrt{\frac{1}{2\alpha i t + 1}} \exp\left[\frac{-\frac{\alpha}{2}x^2 + i\alpha^2 x^2 t}{1 + 4\alpha^2 t^2}\right] \ ; \tag{3.26}$$

$$|\psi(x, t)|^2 = \frac{1}{\pi^{1/2}} \left(\frac{\alpha}{1 + 4\alpha^2 t^2}\right)^{1/2} \exp\left[\frac{-\alpha x^2}{1 + 4\alpha^2 t^2}\right] \ . \tag{3.27}$$

Considerando a constante $\alpha = 1$ e utilizando a discretização $h = 0{,}1$ e $k = 0{,}01$, geramos numericamente as figuras a seguir:

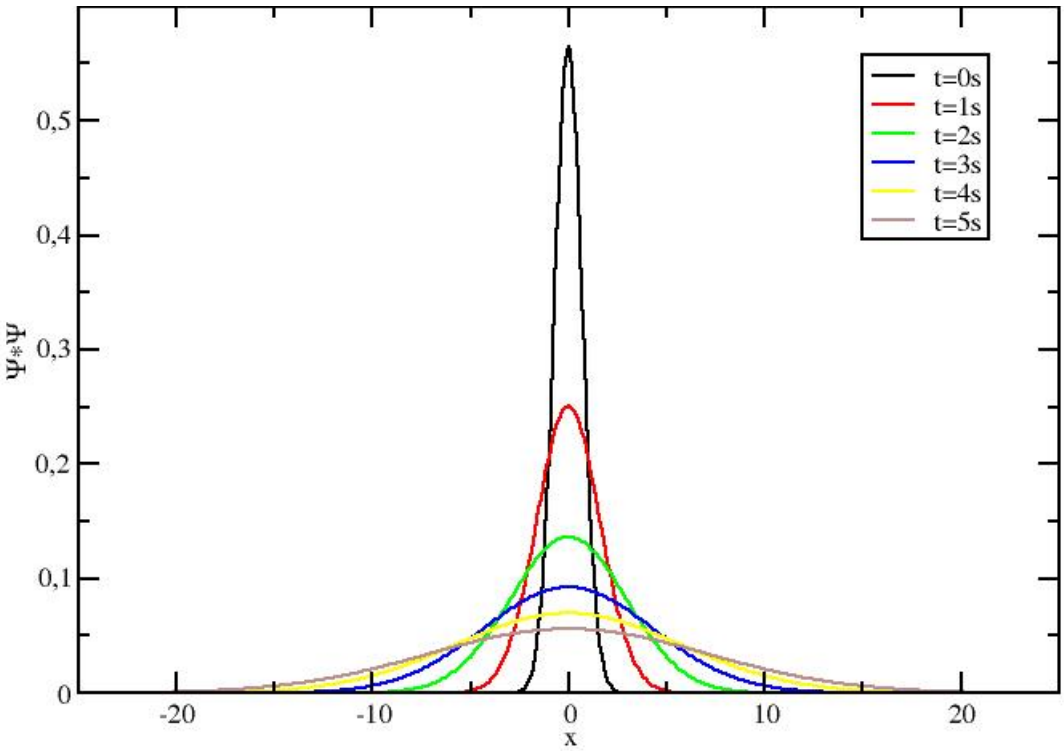


Figura 3.1: Densidade de probabilidade em função do espaço. Solução numérica da expansão livre da gaussiana no tempo, para $\alpha = 1$. As diferentes curvas mostram diferentes instantes de tempo. Resultados em valores adimensionais.

Podemos observar pela Figura 3.1 que o comportamento da gaussiana com o tempo ocorre como esperado. A Figura 3.2 nos mostra a eficácia do código, existindo apenas uma diferença mínima entre o valor numérico e o exato. O erro esperado pelo método de Crank-Nicolson é $\mathcal{O}(h^2 + k^2)$, ou seja, $1{,}01 \times 10^{-02}$, estando nosso erro dentro desse limite.

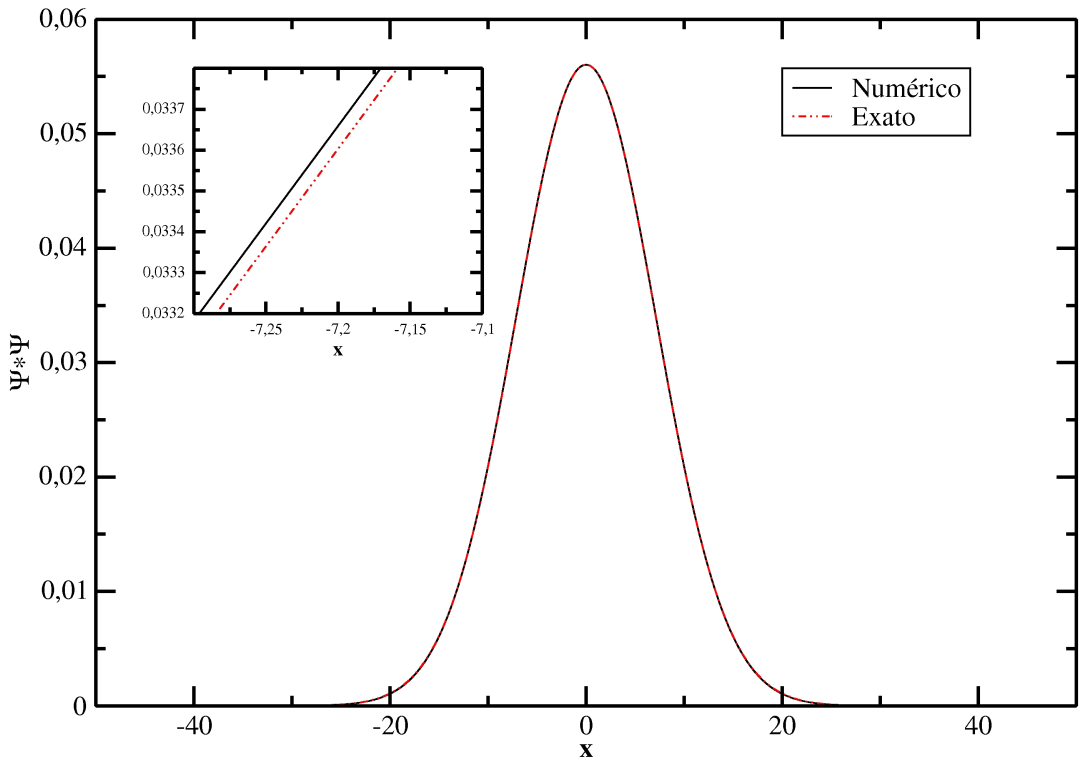


Figura 3.2: Densidade de probabilidade em função do espaço. Comparação entre o resultado numérico e o exato para $t = 5s$, com $\alpha = 1$. No detalhe, o gráfico ampliado mostra a diferença entre os valores numéricos e exatos. O erro possui um valor máximo de $5{,}61 \times 10^{-05}$. Resultados em valores adimensionais.

3.2.2 Estado coerente do oscilador harmônico

Vamos analisar outro problema linear bem conhecido, o oscilador harmônico quântico. Neste caso, utilizaremos também o método de "*Split-Step*" para resolver o potencial harmônico ao qual está sujeita a equação de Schrödinger.

Dada a equação de Schrödinger em uma dimensão para um potencial harmônico:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\psi(x,t) = i\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t} \ . \tag{3.28}$$

Faremos as seguintes mudanças de variáveis:

$$\begin{aligned} \tilde{x} = x/l_0 \ , \quad & 2\tilde{t} = \omega t \ , \\ l_0^2 = \tfrac{\hbar}{m\omega} \ , \quad & \tilde{\psi} = \psi\sqrt{l_0} \ , \end{aligned} \tag{3.29}$$

retirando então os índices ($\sim$) e simplificando a notação, temos:

$$-\psi_{xx} + x^2\psi = i\psi_t \ , \tag{3.30}$$

onde os índices t e xx referem-se às derivadas primeira no tempo e segunda no espaço.

Supondo a condição inicial normalizada:

$$\psi(x,0) = \left(\frac{1}{\pi}\right)^{1/4} \exp\left[-\frac{1}{2}(x-x_0)^2\right] \ . \tag{3.31}$$

A solução $\psi(x,t)$ da equação para o potencial do oscilador harmônico, bem como sua densidade de probabilidade $|\psi(x,t)|^2$ são [34]:

$$\psi(x,t) = \left(\frac{1}{\pi}\right)^{1/4} e^{-i\left(t+xx_0 \operatorname{sen} 2t - x_0^2 \operatorname{sen} 4t\right)} e^{-\frac{1}{2}(x-x_0\cos 2t)^2} \ , \tag{3.32}$$

$$|\psi(x,t)|^2 = \left(\frac{1}{\pi}\right)^{1/2} e^{-(x-x_0\cos 2t)^2} \ . \tag{3.33}$$

Utilizando a discretização $h = 0{,}05$ e $k = 0{,}001$, geraram-se numericamente as figuras a seguir:

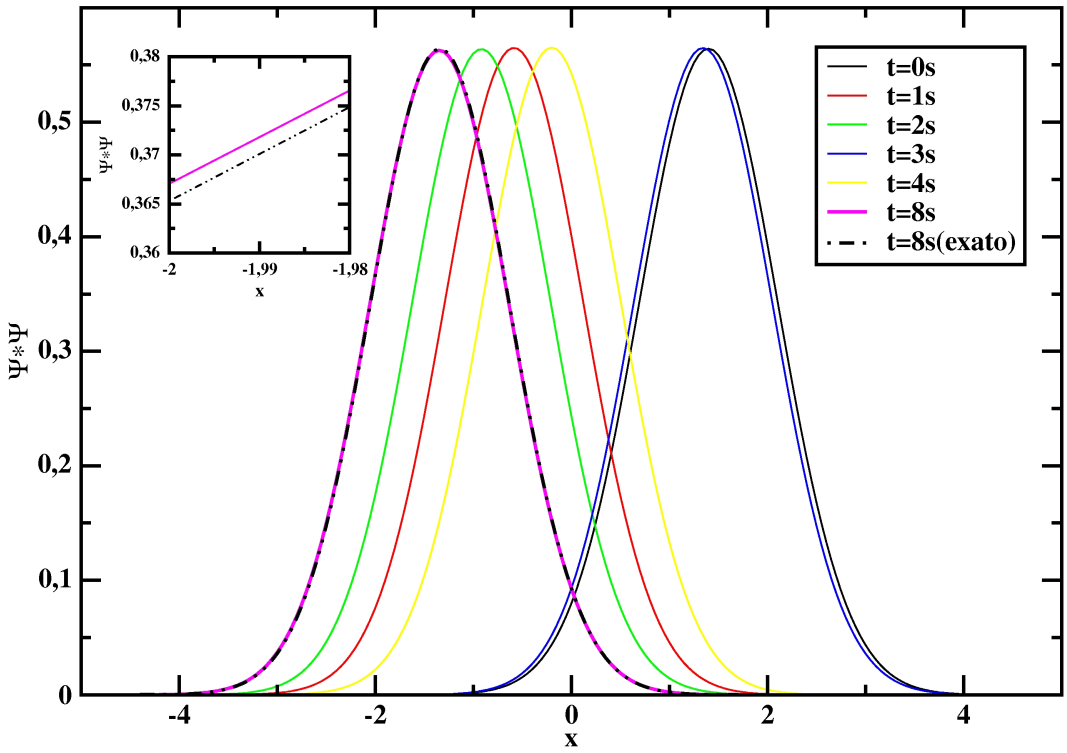


Figura 3.3: Densidade de probabilidade em função do espaço. Simulação da evolução temporal de um estado coerente do oscilador harmônico, com $x_0 = 1{,}4$. As diferentes curvas mostram diferentes instantes de tempo, com valores numéricos (linhas sólidas). A linha tracejada expressa a solução exata para $t = 8$. No detalhe, o gráfico ampliado mostra a diferença entre os valores numérico e exato para $t = 8$. Resultados em valores adimensionais.

O maior erro encontrado foi da ordem de $\sim 2{,}34 \times 10^{-03}$, e o erro do método é da ordem de $\sim 2{,}50 \times 10^{-03}$. Podemos observar pela Figura 3.4 que a função oscila com o tempo conforme esperado.

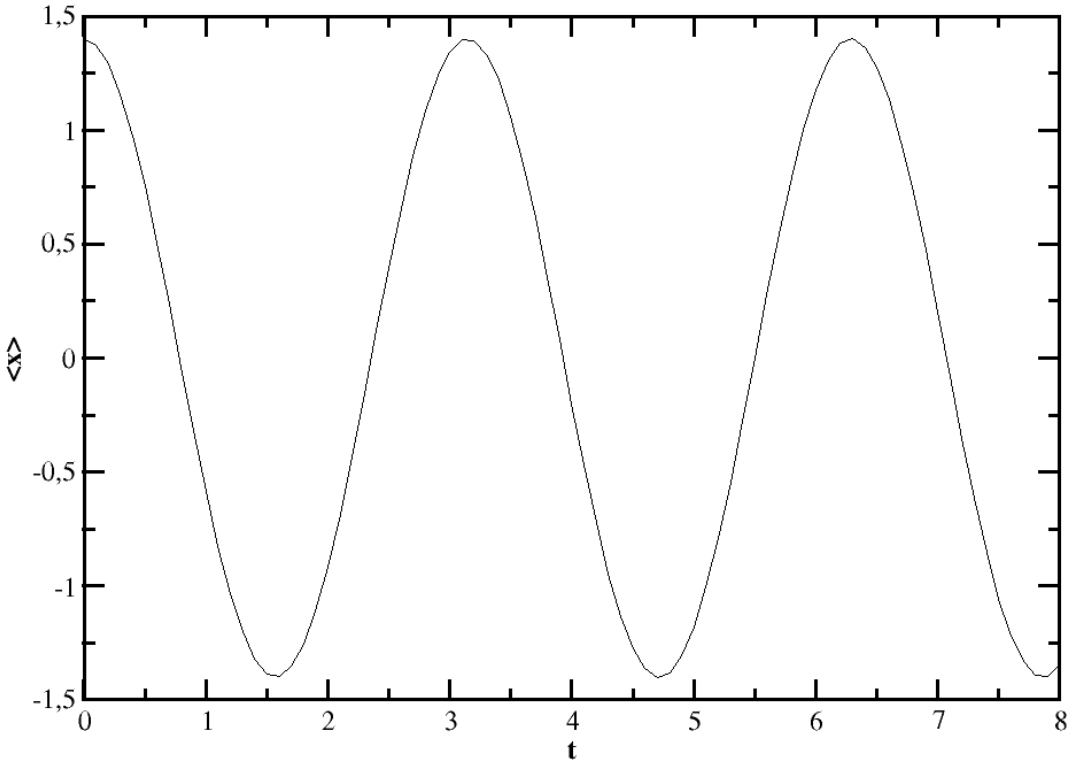


Figura 3.4: Posição média da gaussiana em função do tempo em valores adimensionais. A posição inicial é em $x = 1{,}4$.

3.2.3 Propagação de um sóliton

Analisaremos nosso primeiro problema não-linear, a propagação de um sóliton. Ele é representado por uma equação de Schrödinger com um termo não-linear cúbico.

$$i\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2} + g|\psi(x,t)|^2\psi(x,t) = 0 \ . \tag{3.34}$$

Utilizando uma notação simplificada e substituindo a função de onda $\psi(x,t)$ por uma função adimensional $u(x,t)$, temos:

$$iu_t + u_{xx} + |u|^2 u = 0 \ , \tag{3.35}$$

onde os índices t e xx referem-se às derivadas primeira no tempo e segunda no espaço. Procuramos uma solução do tipo onda-viajante no formato:

$$u(x,t) = r(x-ct)e^{i[\theta(x-ct)+nt]} \ , \tag{3.36}$$

com r e θ funções reais e c e n constantes reais. Para este problema existe uma solução de

onda solitária particular [26]:

$$u(x,t) = ae^{i\left\{\frac{1}{2}c(x-ct)+nt\right\}} \operatorname{sech}\left\{\frac{a(x-ct)}{\sqrt{2}}\right\}, \tag{3.37}$$

para todo $a^2 = 2\left(n - \frac{1}{4}c^2\right) > 0$.

Utilizando como condição inicial a função de onda normalizada:

$$u(x,t) = ae^{i\left\{\frac{1}{2}cx\right\}} \operatorname{sech}\left\{\frac{ax}{\sqrt{2}}\right\}, \tag{3.38}$$

com $c = 1$, $n = \frac{1}{2}$ e $a = \frac{1}{\sqrt{2}}$, e discretização $h = 0{,}02$ e $k = 0{,}001$, geramos a figura a seguir:

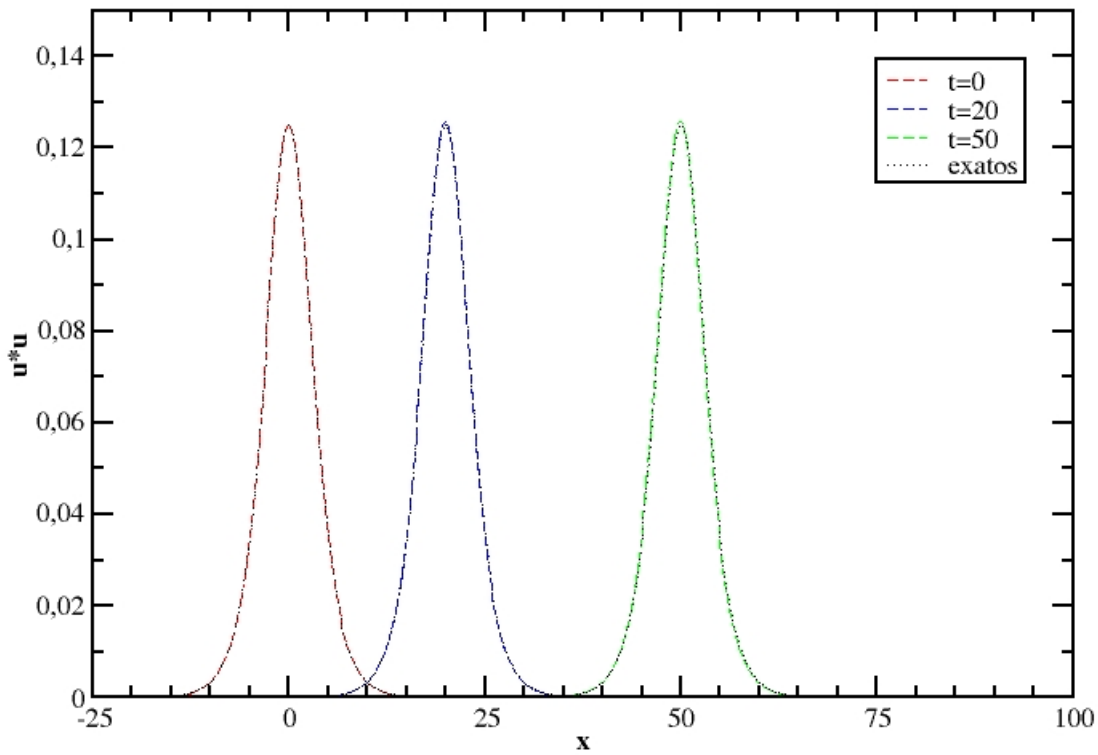


Figura 3.5: Densidade de probabilidade em função do espaço. Simulação da propagação de uma onda solitária (sóliton). Resultados em valores adimensionais, numéricos (tracejado) e exatos (pontilhados), para diferentes instantes de tempo.

Podemos observar pela Figura 3.5 que a função inicial se propaga para a direita, mantendo sua forma. O erro numérico foi da ordem de $\sim 2{,}80 \times 10^{-03}$.

3.3 O Método de Peaceman-Rachford (ADI)

Para se resolver a equação de Schrödinger em duas dimensões, utilizamos o método de Peaceman-Rachford, que é um método de alternância de sentido implícito(*"**Alternating Direction Implicit** method"*). É possível resolver equações em duas dimensões utilizando métodos inteiramente implícitos, como por exemplo o próprio método de Crank-Nicolson. Porém, seria necessário resolver $(M-1)^2$ equações lineares a cada passo no tempo. Ao invés disso, utilizamos um método ADI que, onde o próprio nome já diz, é composto de passos implícitos alternados nas duas direções. Neste método temos que resolver apenas $2(M-1)$ equações lineares a cada passo no tempo, utilizando um método implícito na direção x com um explícito na direção y para termos uma solução intermediária, e finalmente um implícito na direção y com um explícito na direção x [32].

O método de Peaceman-Rachford é dado por:

$$\begin{aligned} (i) \quad V_{m,l}^{n+1/2} &= U_{m,l}^{n} + 0.5r[D_{xx}V_{m,l}^{n+1/2} + D_{yy}U_{m,l}^{n}] \ , \\ (ii) \quad U_{m,l}^{n+1} &= V_{m,l}^{n+1/2} + 0.5r[D_{xx}V_{m,l}^{n+1/2} + D_{yy}U_{m,l}^{n+1}] \ . \end{aligned} \tag{3.39}$$

Ou podemos reescrevê-lo como:

$$\begin{aligned} (i) \quad (1-0.5rD_{xx})V_{m,l}^{n+1/2} &= (1+0.5rD_{yy})U_{m,l}^{n} \ , \\ (ii) \quad (1-0.5rD_{yy})U_{m,l}^{n+1} &= (1+0.5rD_{xx})V_{m,l}^{n+1/2} \ , \end{aligned}$$

onde m e l correspondem a passos nas direções espaciais, n corresponde a passos na direção temporal, D_{ii} , $i = x, y$, é a derivada segunda na direção correspondente e $r = ik/h_x h_y$. A solução $V_{m,l}^{n+1/2}$ é uma solução intermediária, e sem significado físico, entre as soluções reais $U_{m,l}^{n}$ e $U_{m,l}^{n+1}$ nos instantes de tempo n e $n+1$, respectivamente. O método de Peaceman-Rachford possui erro de truncagem $\mathcal{O}(h_x^2+h_y^2+k^2)$, sendo incondicionalmente estável [35].

3.4 Método de Relaxação

O método de relaxação é utilizado para solucionar uma equação elíptica, como a equação de Poisson, tipo:

$$\mathcal{L}u = \rho \ , \tag{3.40}$$

sendo $\mathcal{L}$ o operador Laplaciano. Vamos analisar uma equação de difusão na forma de:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \mathcal{L}u - \rho \ . \tag{3.41}$$

Conforme evolui no tempo, a solução da equação (3.41) "relaxa" para (3.40). Ou seja, quando $t \to \infty$ a derivada no tempo tende a desaparecer, com o sistema chegando no equilíbrio [36].

A equação de Schrödinger é uma equação do tipo difusão, sendo possível utilizar o método de relaxação para atingir o seu estado fundamental, um mínimo de energia. Partindo da equação de Schrödinger:

$$i\frac{\partial \Psi}{\partial t} = H\Psi \ , \tag{3.42}$$

com $\hbar = 1$ e H um hamiltoniano independente do tempo. Sendo $\Psi(x,t)$ a solução da equação (3.42), é possível desenvolvê-la na forma de auto-estados:

$$\Psi = \sum_{i=0}^{\infty} a_i \Phi_i \ . \tag{3.43}$$

Substituímos t por $-i\alpha$ e reescrevendo a equação (3.42), obtemos:

$$\frac{\partial \Psi(\alpha)}{\partial \alpha} = -H\Psi(\alpha) \ . \tag{3.44}$$

Com isso, a solução da equação anterior é:

$$\Psi(\alpha) = e^{-H\alpha}\Psi(0) \ . \tag{3.45}$$

Para encontrarmos o estado fundamental Φ_0, basta evoluir no tempo imaginário ($\alpha \to \infty$). Fazendo isso, temos a expressão:

$$\frac{a_0}{|a_0|}\Phi_0 = \lim_{\alpha\to\infty} \frac{\Psi(\alpha)}{\langle \Psi(\alpha)|\Psi(\alpha)\rangle^{1/2}} \ . \tag{3.46}$$

Se tivermos uma solução não-nula para o estado fundamental Φ_0 ($a_0 \neq 0$), podemos escrever a energia média como:

$$E(\alpha) \equiv \frac{\langle \Psi(\alpha)|H|\Psi(\alpha)\rangle}{\langle \Psi(\alpha)|\Psi(\alpha)\rangle} \ , \tag{3.47a}$$

$$= \frac{E_0 + \sum_{i=1}^{\infty} E_i e^{-2\alpha(E_i - E_0)}|a_i/a_0|^2}{1 + \sum_{i=1}^{\infty} e^{-2\alpha(E_i - E_0)}|a_i/a_0|^2} \ , \tag{3.47b}$$

$$= E_0 + \frac{\sum_{i=1}^{\infty}(E_i - E_0) e^{-2\alpha(E_i - E_0)}|a_i/a_0|^2}{1 + \sum_{i=1}^{\infty} e^{-2\alpha(E_i - E_0)}|a_i/a_0|^2} \ , \tag{3.47c}$$

$$E(\alpha) \geq E_0 \ , \tag{3.47d}$$

com $E(\alpha)$ tendendo a E_0 quando $\alpha \to \infty$ [37].

3.4.1 Método da relaxação aplicada à equação de Gross-Pitaevskii

Queremos aplicar o método de relaxação para a obtenção de estados fundamentais da equação de Gross-Pitaevskii. Existem procedimentos diferentes para a relaxação. No presente trabalho utilizamos o esquema C descrito na referência [38].

O termo cúbico da equação de Gross-Pitaevskii pode fazer com que ocorram duas soluções estacionárias diferentes para um mesmo valor negativo de comprimento de espalhamento ($\eta < 0$). A primeira, em um mínimo de energia, e a segunda em um máximo, conhecida como solução hiperbólica [38].

Partimos da equação não-linear:

$$-\frac{\partial \psi(x,\tau)}{\partial \tau} = [-\nabla^2 + V + 8\pi\eta|\psi(x,\tau)|^2 - 2\mu]\psi(x,\tau) \ , \tag{3.48}$$

onde definimos o tempo imaginário $\tau \equiv -i\omega t/2$. Já V é o potencial do oscilador e μ o potencial químico adimensional. E finalmente $\eta \equiv Na/l_\omega$, sendo $l_\omega \equiv \sqrt{\hbar/m\omega}$.

Os passos necessários do esquema de relaxação utilizado são:

$$
\begin{aligned}
\psi_{n+1/3} &\leftarrow \psi_n + \frac{\Delta\tau}{2}\left[2\mu - V - 8\pi\eta_n|\psi_n|^2\right]\psi_n \ ; \\
\psi_{n+2/3} &\leftarrow \mathcal{O}_{\text{CN}}\psi_{n+1/3} \ ; \\
\psi_{n+1} &\leftarrow \psi_{n+2/3} + \frac{\Delta\tau}{2}\left[2\mu - V - 8\pi\eta_n|\psi_n|^2\right]\psi_n \ ; \\
\eta_{n+1} &\leftarrow \eta_n\left[\int d^3x|\psi_{n+1}|^2\right]^{-1} \ ; \\
\psi_{n+1} &\leftarrow \psi_{n+1}\left[\int d^3x|\psi_{n+1}|^2\right]^{-1} \ ,
\end{aligned}
$$

onde n é o n-ésimo passo no tempo. Na segunda linha, o operador $\mathcal{O}_{\text{CN}}$ refere-se à evolução temporal de ∇^2 pelo método de Crank-Nicolson em um passo no tempo ($\Delta\tau$). Os três primeiros passos correspondem a um procedimento parecido com o utilizado no método "*Split-Step*", um Crank-Nicolson entre duas operações algébricas simples. Na quarta etapa é determinado o novo valor de η. E na última é feita a renormalização da solução, sendo todo o procedimento repetido em n vezes.

3.5 Oscilador Harmônico 2D

Utilizando as técnicas numéricas descritas neste capítulo, resolveremos um problema bidimensional, o oscilador harmônico quântico. O primeiro passo foi estabelecer como condição inicial uma função tipo caixa (com $\psi(x, y) = 1$ em uma pequena área quadrada e valor nulo no restante), normalizada e centrada a uma distância, x_0 e y_0, da origem. A segunda etapa foi encontrar o estado fundamental do oscilador harmônico, uma espécie de curva gaussiana em duas dimensões centrada na posição (x_0,y_0). Não é necessário a condição inicial ser normalizada, pois a relaxação renormaliza a função a cada passo, ou mesmo centrada na posição (x_0,y_0), desde que o potencial harmônico esteja deslocado para essa posição durante a relaxação $\left(V(x, y) = \frac{1}{2}m(x - x_0)^2(y - y_0)^2\right)$.

Partindo da equação de Schrödinger em duas dimensões sujeita a um potencial harmônico:

$$
-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2\psi(x,y,t)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi(x,y,t)}{\partial y^2}\right) + \frac{1}{2}m\omega^2(x^2+y^2)\psi(x,y,t) = i\hbar\frac{\partial\psi(x,y,t)}{\partial t} \ , \quad (3.49)
$$

faremos as seguintes mudanças de variáveis:

$$\begin{aligned} &\tilde{x} = x/l_0, \quad \tilde{y} = y/l_0, \quad 2\tilde{t} = \omega t, \\ &l_0^2 = \tfrac{\hbar}{m\omega}, \quad \tilde{\psi} = \psi\sqrt{l_0}\ . \end{aligned} \tag{3.50}$$

Retirando os índices ($\sim$) e simplificando a notação, temos:

$$-(\psi_{xx} + \psi_{yy}) + (x^2 + y^2)\psi = i\psi_t\ , \tag{3.51}$$

onde o índice t refere-se à derivada primeira no tempo e xx e yy referem-se às derivadas segundas no espaço. E supondo uma condição inicial centrada em $x_0 = 2$ e $y_0 = 0$, como sendo a seguinte função:

$$\psi(x,y) = \begin{cases} 1, & \text{se} \quad x \in [1.5\,,\,2.5] \quad \text{e} \quad y \in [-0.5\,,\,0.5]\ ; \\ 0, & \text{caso contrário}\ . \end{cases} \tag{3.52}$$

A solução $\psi(x,y,t)$ da equação de Schrödinger sujeita a um potencial harmônico em duas dimensões pode ser obtida a partir da equação (3.32) e do princípio da superposição [39]. A função $\psi(x,y,t)$ e a densidade de probabilidade $|\psi(x,y,t)|^2$ são:

$$\psi(x,y,t) = \left(\frac{1}{\pi}\right)^{1/4} e^{-i(2t + xx_0 \operatorname{sen} 2t - x_0^2 \operatorname{sen} 4t + yy_0 \operatorname{sen} 2t - yy_0^2 \operatorname{sen} 4t)} e^{-\frac{1}{2}[(x - x_0\cos 2t)^2 + (y - y_0 \cos 2t)^2]}\ , \tag{3.53}$$

$$|\psi(x,y,t)|^2 = \left(\frac{1}{\pi}\right)^{1/2} e^{-[(x - x_0\cos 2t)^2 + (y - y_0 \cos 2t)^2]}\ . \tag{3.54}$$

Para obter os resultados numéricos utilizamos a discretização $h_x = h_y = 0{,}02$ e $k = 0{,}001$. O tempo imaginário necessário para a função atingir o seu estado fundamental foi $t = 5$, suficiente pois a condição inicial estava próxima do estado fundamental. Este estado será nossa função inicial, $\psi(x,t,0)$. A densidade de probabilidade desta função está ilustrada na figura 3.6:

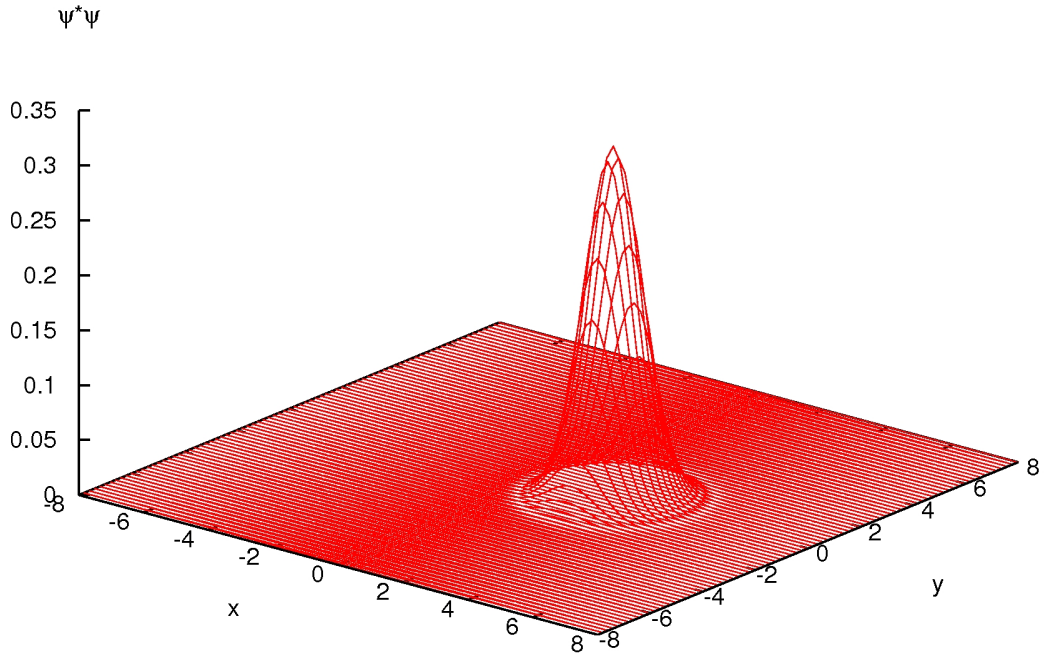


Figura 3.6: Densidade de probabilidade inicial, $|\psi(x, y, 0)|^2$, em função do espaço (em duas dimensões), centrada na posição $(2, 0)$ e obtida pelo método de relaxação. Resultados em valores adimensionais.

A partir desta função inicial, obtida pelo método de relaxação, foi iniciada a dinâmica do sistema, com sua evolução temporal até t=5 (evolução no tempo real e não mais imaginário) feita a partir do método ADI de Peaceman-Rachford para duas dimensões e pelo método "Split-Step" aplicado ao potencial harmônico. Nas figuras 3.7 e 3.8 estão indicados respectivamente, a evolução temporal, de $< x >$ e $< y >$, e os cortes laterais, em x e em y da densidade de probabilidade em $t = 5$.

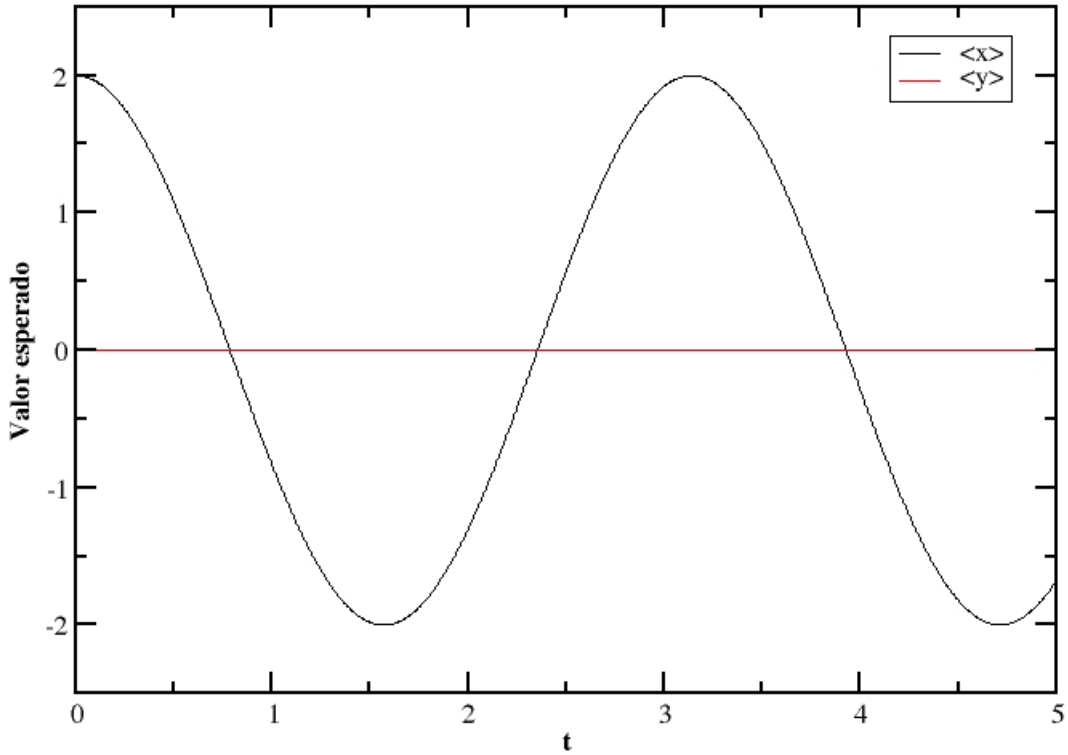


Figura 3.7: Valor esperado de x (linha preta) e y (linha vermelha) em função do tempo. Conforme o esperado, a densidade de probabilidade permanece centrada na direção y, oscilando apenas na direção x. Resultados em valores adimensionais.

Os métodos numéricos se mostraram eficientes, com um erro de aproximadamente $\sim 4{,}98 \times 10^{-04}$, descrevendo o comportamento esperado para um oscilador harmônico em duas dimensões.

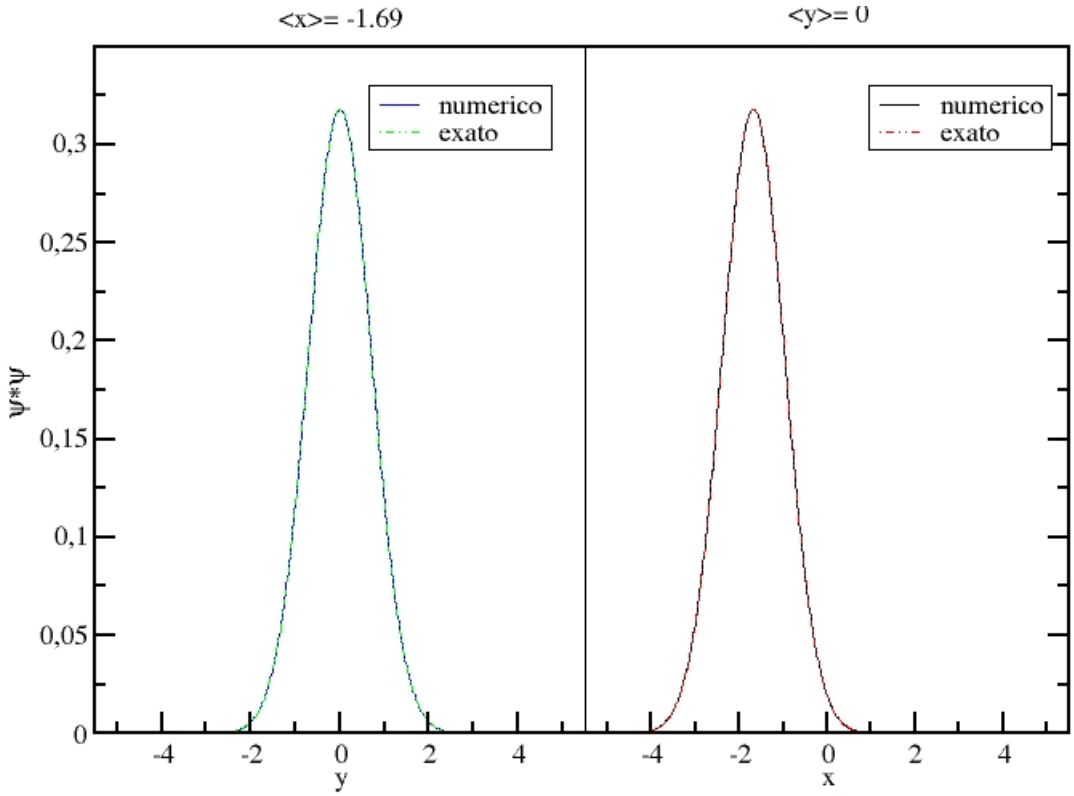


Figura 3.8: Densidade de probabilidade em função do espaço. Cortes nas direções y (à esquerda) e x (à direita) da densidade de probabilidade, em $t = 5$, na altura dos valores médios de $< x >= -1{,}69$ e $< y >= 0$, respectivamente. Valores numéricos (linha sólida) e exatos (linha tracejada) com erro de $\sim 4{,}98 \times 10^{-04}$. Resultados em valores adimensionais.

3.6 Método de Runge-Kutta para sistemas de equações diferenciais

Para resolvermos o sistema de equações diferenciais ordinárias ('EDO') obtidas pelo método variacional, capítulo 4, utilizamos o método de Runge-Kutta de 4ª ordem para problemas de valor inicial [40].

Temos um sistema de ordem n de problemas de valor inicial de primeira ordem do tipo:

$$
\begin{aligned}
\frac{du_1}{dt} &= f_1(t, u_1, u_2, \ldots, u_n) \ , \\
\frac{du_2}{dt} &= f_2(t, u_1, u_2, \ldots, u_n) \ , \\
&\vdots \\
\frac{du_n}{dt} &= f_n(t, u_1, u_2, \ldots, u_n) \ ,
\end{aligned} \tag{3.55}
$$

para $a \leq t \leq b$, com condições iniciais:

$$
u_1(a) = \alpha_1, \ u_2(a) = \alpha_2, \ldots, \ u_n(a) = \alpha_n \ . \tag{3.56}
$$

Pretendemos encontrar n funções $u_1, \ u_2, \ldots, \ u_n$ que satisfaçam cada uma das equações diferenciais juntas com todas as condições iniciais.

Supondo um número inteiro $N > 0$, tal que o intervalo de tempo $[a, b]$ seja subdividido em N intervalos com discretização $h = (b - a)/N$, temos:

$$
t_j = a + jh, \qquad \text{para } j = 0, 1, \ldots \ , N \ . \tag{3.57}
$$

Utilizando a notação $y_{i,j}$ para cada $j = 0, 1, \ldots \ , N$ e $i = 1, 2, \ldots \ , n$, para denotar uma aproximação de $u_i(t_j)$. Ou seja, $y_{i,j}$ aproxima a i-ésima solução $u_i(t)$ da equação (3.55) no j-ésimo ponto da malha t_j. Para as condições iniciais teremos:

$$
y_{1,0} = \alpha_1, \ y_{2,0} = \alpha_2, \ldots, \ y_{n,0} = \alpha_n \ . \tag{3.58}
$$

Vamos supor que os valores de $y_{1,j}, \ y_{2,j}, \ldots \ , \ y_{n,j}$ foram computados. Obteremos $y_{1,j+1}, \ y_{2,j+1}, \ldots \ , \ y_{n,j+1}$ ao calcular:

$$k_{1,i} = hf_i(t_j,\ y_{1,j},\ y_{2,j}, \dots\ ,\ y_{n,j})\ , \qquad \text{para cada } i = 1, 2, \dots, n; \tag{3.59}$$

$$k_{2,i} = hf_i\left(t_j + \frac{h}{2},\ y_{1,j} + \frac{1}{2}k_{1,1},\ y_{2,j} + \frac{1}{2}k_{1,2}, \dots\ ,\ y_{n,j} + \frac{1}{2}k_{1,n}\right)\ , \tag{3.60}$$

para cada $i = 1, 2, \dots, n$;

$$k_{3,i} = hf_i\left(t_j + \frac{h}{2},\ y_{1,j} + \frac{1}{2}k_{2,1},\ y_{2,j} + \frac{1}{2}k_{2,2}, \dots\ ,\ y_{n,j} + \frac{1}{2}k_{2,n}\right)\ , \tag{3.61}$$

para cada $i = 1, 2, \dots, n$;

$$k_{4,i} = hf_i(t_j + h,\ y_{1,j} + k_{3,1},\ y_{2,j} + k_{3,2}, \dots\ ,\ y_{n,j} + k_{3,n})\ , \tag{3.62}$$

para cada $i = 1, 2, \dots, n$; e finalmente:

$$y_{i,j+1} = y_{i,j} + \frac{1}{6}(k_{1,i} + 2k_{2,i} + 2k_{3,i} + k_{4,i})\ , \tag{3.63}$$

para cada $i = 1, 2, \dots, n$.

Note que todos os valores de $k_{1,1},\ k_{1,2}, \dots\ ,\ k_{1,n}$ devem ser calculados antes de qualquer termo do tipo $k_{2,i}$ ser determinado. De forma geral, cada $k_{l,1},\ k_{l,2}, \dots\ ,\ k_{l,n}$ deve ser computado antes de qualquer expressão do tipo $k_{l+1,i}$.

Capítulo 4

Sólitons em Redes Ópticas Não-Lineares

Neste capítulo será mostrado o desenvolvimento teórico do trabalho. Na primeira parte apresentaremos o modelo básico utilizado e suas possíveis variações. Nosso objetivo é investigar a dinâmica e a estabilidade de sólitons em redes ópticas não-lineares, quanto à influência de uma rede dissipativa. Tal dissipação é importante para a existência dos sólitons em redes multidimensionais, pois é conhecido o fato de que uma dissipação homogênea não-linear pode evitar o colapso na equação de Schrödinger não-linear cúbica multidimensional [41].

Um estudo do potencial (1D) periódico não-linear em uma equação de Schrödinger não-linear (2D), mostrou que os sólitons largos são instáveis. Sólitons estreitos, centrados no máximo do potencial da rede, foram verificados como sendo estáveis apenas em uma região muito pequena. Dessa forma, foi concluído que seriam instáveis fisicamente [42].

Pretendemos investigar melhor estes aspectos e também a influência do termo dissipativo na estabilidade dos sólitons.

4.1 O modelo

Partiremos da equação de Gross-Pitaevskii(GP) para a função de onda $\psi \equiv \psi(x_1, x_2, t)$:

$$i\hbar\frac{d\psi}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{d^2\psi}{dx_1^2} + \beta\frac{d^2\psi}{dx_2^2}\right) - g(x_1, x_2)|\psi|^2\psi \ , \tag{4.1}$$

onde

$$g(x_1, x_2) \equiv \frac{g_0}{2} + (g_1 + ig_2)\left[\cos^2(kx_1) + \delta_0 \cos^2(kx_2)\right] \ . \tag{4.2}$$

A constante g_0 está relacionada com o comprimento de espalhamento de onda de dois corpos a_s(onda-s, com momento angular $l = 0$), $g_0 \equiv -(4\pi\hbar^2/m)a_s$ com $g_0 > 0$ ($g_0 < 0$) para condensados atrativos (repulsivos); $g_1(>0)$ está relacionado com a intensidade óptica; e g_2 parametriza os efeitos dissipativos. β e δ_0 parametrizam diferentes situações que podem ser consideradas. Temos geometria 1D quando $\beta = \delta_0 = 0$. Caso anisotrópico 2D, quando $\beta = 1$, $\delta_0 = 0$ (com a rede óptica apenas na direção x_1). E por fim, o isotrópico 2D, quando $\beta = \delta_0 = 1$.

O comprimento de espalhamento opticamente induzido e o coeficiente da taxa de colisão inelástica K_{inel}(proporcional à parte imaginária de a_s) são descritos por [12, 43]:

$$\mathrm{Re}(a_s) = a_{s0} + \frac{1}{2k_i}\left[\frac{\Gamma_{stim}(x)\Delta}{\Delta^2 + (\Gamma_{spon}/2)^2}\right] \ , \tag{4.3}$$

$$K_{inel} = \frac{2\pi\hbar}{m}\frac{1}{k_i}\left[\frac{\Gamma_{stim}(x)\Gamma_{spon}}{\Delta^2 + (\Gamma_{spon}/2)^2}\right] \propto \mathrm{Im}(a_s) \ , \tag{4.4}$$

onde a_{s0} é o comprimento de espalhamento de fundo, Δ está associado ao ajuste da freqüência de ressonância e $\hbar k_i$ é o momento relativo da colisão. Γ_{stim} é a taxa de transição entre o estado contínuo e o estado molecular e é proporcional à intensidade laser $I(x)$, com Γ_{spon} sendo a taxa de decaimento espontâneo do estado molecular excitado. Longe da ressonância, a parte imaginária do comprimento de espalhamento é pequena, sendo $\mathrm{Im}(a) \ll \mathrm{Re}(a)$.

Em um experimento com ^{87}Rb foram obtidos uma grande variedade de comprimentos de onda diferentes [12]. A intensidade do laser utilizado foi de 460 W/cm^2 e a_s ficou com valores entre $10a_0$ e $190a_0$ (com $a_{s0} = 100a_0$ e a_0 o raio de Bohr).

Introduzindo na equação (4.1) as seguintes mudanças variáveis:

$$\kappa x = 2kx_1 \ , \quad \kappa y = 2kx_2 \ , \quad \tau = \frac{4w_R t}{\kappa^2} \ , \tag{4.5}$$

$$w_R = \frac{E_R}{\hbar} \ , \quad E_R = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \ , \quad \gamma_{i=0,1,2} = \frac{g_i}{2|g_0|} \ , \tag{4.6}$$

obtemos a equação de GP adimensional:

$$iu_\tau + u_{xx} + \beta u_{yy} + \gamma(x,y)|u|^2 u = 0 \ , \tag{4.7}$$

com

$$\gamma(x,y) \equiv \gamma_0 + (\gamma_1 + i\gamma_2)\left[1 + \delta_0 + \cos(\kappa x) + \delta_0 \cos(\kappa y)\right] \ . \tag{4.8}$$

A função de onda também é redefinida para:

$$u \equiv u(x,y,\tau) = \sqrt{\frac{\kappa^2 |g_0|}{4E_R}}\psi. \tag{4.9}$$

Das equações (4.5) à (4.9) temos que $\gamma_0 = +1/2 (= -1/2)$ para condensados atrativos(repulsivos). Dos diferentes casos que podemos analisar, focaremos no caso 2D anisotrópico ($\beta = 1$ e $\delta_0 = 0$). Ainda há a possibilidade de se introduzir uma armadilha harmônica ($m\omega_2^2 x_2^2/2$) na direção y. Definindo uma freqüência ω adimensional, teremos:

$$\omega \equiv \kappa^2 \frac{\omega_2}{8w_R}, \quad \frac{m}{2}\omega_2^2 x_2^2 = \left(\frac{4E_R}{\kappa^2}\right)\omega^2 y^2 \ . \tag{4.10}$$

O nosso estudo pode ser estendido adicionando-se um termo correspondente a uma compressão. Este efeito de compressão pode ser atingido por uma variação temporal adiabática do valor de fundo do comprimento de espalhamento(a_{s0}) [44]. Para tanto modificamos γ_0 de modo que:

$$\gamma_0 \to \gamma_0(\tau) = \gamma_0 \exp\left[2\alpha\left(\tau - \tau_c\right)\theta(\tau - \tau_c)\right] \ , \tag{4.11}$$

onde $\theta(\tau - \tau_c)$ é a função de Heaviside $[\theta(x) = 0(1)$ para $x < 0(x > 0)]$. τ_c é o tempo onde começa a compressão que está inicialmente desligada.

O efeito de compressão também pode ser atingido por processo de alimentação, descrito por um termo adicional $i\alpha_f u$ [1] na equação de Gross-Pitaevskii [45]. Porém, se a modulação da não-linearidade no tempo é induzida por um aumento na freqüência da armadilha na direção y, é necessário multiplicar todo o termo não-linear por $\exp(2\alpha_f \tau)$. Com essa mudança, a equação (4.7) se torna:

$$iu_\tau = -u_{xx} - u_{yy} - \gamma(x,\tau)|u|^2 u + \omega^2 y^2 u + i\alpha_f u \ , \tag{4.12}$$

onde

[1] Devemos considerar $\alpha_f = 0$ quando $\alpha \neq 0$ na equação (4.11) pois os dois parâmetros têm um papel análogo no modelo.

$$\gamma(x,\tau) \equiv \gamma_0(\tau) + (\gamma_1 + i\gamma_2)\left[1 + \cos(\kappa x)\right] \ . \tag{4.13}$$

4.2 Sistema conservativo

Faremos primeiramente um estudo da estabilidade de sólitons no caso conservativo ($\gamma_2 = 0$) utilizando o método variacional. Um estudo similar feito para o caso unidimensional é encontrado na referência [3]. Segue a abordagem variacional para o caso 2D com uma rede óptica não-linear 1D.

Partindo da equação (4.12) com α_f, α e γ_2 igual a zero, e redefinindo a função de onda $u(x,y,\tau) \equiv v(x,y)\exp(-\mathrm{i}\mu\tau)$, temos:

$$\mu v = -v_{xx} - v_{yy} - \left[\tilde{\gamma}_0 + \gamma_1 \cos(\kappa x)\right] v^3 + \omega^2 y^2 v \ , \tag{4.14}$$

redefinindo γ_0 para $\tilde{\gamma}_0 \equiv \gamma_0 + \gamma_1$.

Observando as definições de γ_i em (4.6), definimos os valores de $\tilde{\gamma}_0 = \gamma_1 + 1/2$ ($=\gamma_1 - 1/2$) para condensados atrativos(repulsivos).

O sinal de $\tilde{\gamma}_0$ define o sinal do campo de fundo. Com isso, teremos situações com o mesmo $\tilde{\gamma}_0 \geq 0$ se referindo a condensados atrativos ou repulsivos. Por exemplo:
$\tilde{\gamma}_0 = 1$ com $\gamma_1 = 1/2$ e $\gamma_0 = +1/2$ (atrativo);
$\tilde{\gamma}_0 = 1$ com $\gamma_1 = 3/2$ e $\gamma_0 = -1/2$ (repulsivo).

Embora estas duas situações pareçam diferentes, elas possuem resultados similares. Sendo assim analisaremos apenas o caso atrativo para campo de fundo positivo e também o caso repulsivo para campo de fundo negativo, que ocorre quando $0 < \gamma_1 < 1/2$ ($0 > \tilde{\gamma}_0 \geq -1/2$).

O Lagrangeano médio L e a densidade Lagrangeana $\mathcal{L}$ são definidos como:

$$2\,\mathcal{L} = \mu\, v^2 - |v_x|^2 - |v_y|^2 + \frac{\tilde{\gamma}_0 + \gamma_1 \cos(\kappa x)}{2} v^4 - \omega^2 y^2 v^2 \ . \tag{4.15}$$

$$L \ = \ \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy\, \mathcal{L} \ , \tag{4.16}$$

Podemos redefinir algumas variáveis em função de κ e mostrar que os observáveis

obtidos a partir das equações acima, como por exemplo os raios quadráticos médios nas direções x e y, potenciais químicos, freqüências e energia, obedecem a um escalonamento. Os novos observáveis (representados por uma "barra"), com $\bar{x} \equiv \kappa x$ e $\bar{y} \equiv \kappa y$, se tornam independentes de κ.

Este escalonamento essencialmente implica em considerar $\kappa \equiv 1$ em todas as equações. No final, os observáveis serão dados pelas relações (4.5) (com $\kappa = 1$). Por exemplo, no caso dos raios quadráticos médios nós temos:

$$\langle x_1^2 \rangle = \frac{\langle x^2 \rangle}{4k^2} \quad \text{e} \quad \langle x_2^2 \rangle = \frac{\langle y^2 \rangle}{4k^2} \ . \tag{4.17}$$

Considerando um "ansatz" gaussiano na abordagem variacional:

$$v(x,y) = A \exp\left(-\frac{x^2}{2a_1^2} - \frac{y^2}{2a_2^2} \right) , \tag{4.18}$$

onde A é a amplitude e $a_i (i = 1, 2)$ são as larguras correspondentes nas direções x e y respectivamente. Com normalização da equação (4.18) sendo $N = \pi a_1 a_2 A^2$, o Lagrangeano médio fica:

$$\begin{aligned} L &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy \ \mathcal{L} = \frac{N}{2} \left[\mu - \left(\frac{1}{2a_1^2} + \frac{1}{2a_2^2} \right) \right. \\ &- \left. \frac{\omega^2 a_2^2}{2} + \frac{N}{4\pi a_1 a_2} \left(\tilde{\gamma}_0 + \gamma_1 e^{-\kappa^2 a_1^2/8} \right) \right] \ . \end{aligned} \tag{4.19}$$

Das equações de Euler-Lagrange para os parâmetros, $\partial L / \partial N = 0$ e $\partial L / \partial a_{i=1,2} = 0$, obtemos:

$$2\mu = \frac{1}{a_1^2} + \frac{1}{a_2^2} - \frac{N}{\pi a_1 a_2} \left(\tilde{\gamma}_0 + \gamma_1 e^{\frac{-\kappa^2 a_1^2}{8}} \right) + \omega^2 a_2^2 \ , \tag{4.20}$$

$$N = \frac{4\pi a_2}{a_1 [\tilde{\gamma}_0 + \gamma_1 e^{-\kappa^2 a_1^2/8} (1 + \frac{\kappa^2 a_1^2}{4})]} \ , \tag{4.21}$$

$$\omega^2 a_2^4 + \frac{a_2^2}{a_1^2} \frac{\left(\tilde{\gamma}_0 + \gamma_1 e^{-\kappa^2 a_1^2/8} \right)}{[\tilde{\gamma}_0 + \gamma_1 e^{-\kappa^2 a_1^2/8} (1 + \frac{\kappa^2 a_1^2}{4})]} - 1 = 0 \ . \tag{4.22}$$

Para o caso em que $\omega = 0$ neste conjunto de equações, as variáveis μ, N, e a_2 podem ser expressas em função de a_1:

$$\mu_0 = -\frac{1}{a_1^2}\left(\frac{\tilde{\gamma}_0 + \gamma_1 e^{-\kappa^2 a_1^2/8}\left[1 - \frac{\kappa^2 a_1^2}{8}\right]}{\tilde{\gamma}_0 + \gamma_1 e^{-\kappa^2 a_1^2/8}\left[1 + \frac{\kappa^2 a_1^2}{4}\right]}\right) , \tag{4.23}$$

$$a_{2,0} \equiv a_1\sqrt{\frac{\tilde{\gamma}_0 + \gamma_1 e^{-\kappa^2 a_1^2/8}(1 + \frac{\kappa^2 a_1^2}{4})}{\tilde{\gamma}_0 + \gamma_1 e^{-\kappa^2 a_1^2/8}}} , \tag{4.24}$$

$$N_0 = \frac{4\pi}{\sqrt{\left[\tilde{\gamma}_0 + \gamma_1 e^{-\kappa^2 a_1^2/8}(1 + \frac{\kappa^2 a_1^2}{4})\right]\left[\tilde{\gamma}_0 + \gamma_1 e^{-\kappa^2 a_1^2/8}\right]}} . \tag{4.25}$$

Para o caso em que $\omega \neq 0$, a relação para a_2 em função de a_1 pode ser obtida de (4.22) e (4.24), sendo:

$$a_2 = \frac{1}{\omega a_{2,0}}\sqrt{\left[\sqrt{\frac{1}{4} + \omega^2 a_{2,0}^4} - \frac{1}{2}\right]} . \tag{4.26}$$

As equações (4.26), (4.20) e (4.21) são o conjunto de equações para $\omega \neq 0$.

4.3 Sóliton 2D com dissipação e não-linearidade 1D

Voltando à equação (4.12), consideraremos agora uma rede óptica não-linear com o termo $\gamma_2 \neq 0$. Na abordagem variacional também iremos considerar "um ansatz" tipo gaussiana (4.18), incluindo os parâmetros relacionados a efeitos dissipativos e condição inicial. Para um sóliton brilhante, o "ansatz" é descrito como:

$$\begin{aligned} u &= A\exp\left[-\frac{(x-x_0)^2}{2a_1^2} - \frac{y^2}{2a_2^2}\right] \times \\ &\times \exp\left[ib_1(x-x_0)^2 + ib_2 y^2 + i\phi(\tau)\right] , \end{aligned} \tag{4.27}$$

onde b_i (i =1,2) estão relacionados a efeitos dissipativos, com x_0 e a fase ϕ relacionados à condição inicial.

A densidade Lagrangeana para a equação (4.12) é:

$$\mathcal{L}(x,\tau) = \frac{i}{2}(u_\tau u^* - u_\tau^* u) - |u_x|^2 - |u_y|^2 + \frac{\gamma(x)}{2}|u|^4 \ , \tag{4.28}$$

onde $\gamma(x)$ é dado por (4.13). A partir do "ansatz" (4.27), obtemos o Lagrangeano médio:

$$\begin{aligned} L &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy \mathcal{L} \\ &= -\frac{\pi}{2} A^2 a_1 a_2 \left[a_1^2 (b_{1\tau} + 4b_1^2) + \frac{1}{a_1^2} + a_2^2 (b_{2\tau} + 4b_2^2) \right. \\ &+ \left. \frac{1}{a_2^2} + 2\phi_\tau - \frac{A^2}{2} \left(\tilde{\gamma}_0 + \gamma_1 \cos(\kappa x_0) e^{-\kappa^2 a_1^2/8} \right) \right] \ . \end{aligned} \tag{4.29}$$

As equações para os parâmetros do sóliton $\eta_i = [A, a, b, \phi]$ são derivadas, na abordagem variacional, pela equação:

$$\frac{\partial L}{\partial \eta_i} - \frac{d}{d\tau} \frac{\partial L}{\partial \eta_{i,\tau}} = \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy \left[R \frac{\partial u^*}{\partial \eta_i} + R^* \frac{\partial u}{\partial \eta_i} \right] \ , \tag{4.30}$$

onde o termo perturbativo R é:

$$R = -i\gamma_2 (1 + \cos(\kappa x)) |u|^2 u + \mathrm{i}\alpha_f u \ , \tag{4.31}$$

que leva em consideração o termo de amplificação linear (α_f), que descreve a alimentação de átomos. Um procedimento similar é desenvolvido na referência [46].

Das equações acima derivamos as cinco equações diferencias ordinárias ('EDO') acopladas a serem resolvidas numericamente para determinar os parâmetros variacionais:

$$
\begin{aligned}
(A^2 a_1 a_2)_\tau &= -\gamma_2 A^4 a_1 a_2 e^{-\kappa^2 a^2/8}\cos(\kappa x_0) - \gamma_2 A^4 a_1 a_2 + 2\alpha_f A^2 a_1 a_2 \ , && (4.32a)\\
(A^2 a_1^3 a_2)_\tau &= 8A^2 a_1^3 a_2 b_1 + 2\alpha_f A^2 a_1^3 a_2 \\
&- \frac{\gamma_2}{2} A^4 a_1^3 a_2 \left[1 + \frac{1}{4}\cos(\kappa x_0)(4-\kappa^2 a_1^2) e^{-\kappa^2 a_1^2/8}\right] \ , && (4.32b)\\
(A^2 a_1 a_2^3)_\tau &= 8A^2 a_1 a_2^3 b_2 + 2\alpha_f A^2 a_1 a_2^3 \\
&- \frac{\gamma_2}{2} A^4 a_2^3 a_1 \left[1 + e^{-\kappa^2 a_1^2/8}\cos(\kappa x_0)\right] \ , && (4.32c)\\
b_{1\tau} &= \frac{1}{a_1^4} - 4b_1^2 - \frac{\tilde{\gamma}_0 A^2}{4a_1^2} - \frac{\gamma_1 A^2}{4a_1^2}\cos(\kappa x_0) e^{-\kappa^2 a_1^2/8}\left(1 + \frac{\kappa^2 a_1^2}{4}\right), && (4.32d)\\
b_{2\tau} &= \frac{1}{a_2^4} - 4b_2^2 - \frac{\tilde{\gamma}_0 A^2}{4a_2^2} - \frac{\gamma_1 A^2}{4a_2^2}\cos(\kappa x_0) e^{-\kappa^2 a_1^2/8} \ . && (4.32e)
\end{aligned}
$$

Levando em conta que a norma $N = \pi A^2 a_1 a_2$, com $i, j = 1{,}2$ ($i \neq j$), temos:

$$
\begin{aligned}
N_\tau &= -\frac{\gamma_2 N^2}{\pi a_1 a_2}\left[1 + e^{-\kappa^2 a_1^2/8}\cos(\kappa x_0)\right] + 2\alpha_f N \ , && (4.33)\\
(a_i^2)_\tau &= 8a_i^2 b_i + \frac{\gamma_2 N a_i}{2\pi a_j}\left[1 + e^{-\kappa^2 a_1^2/8}\cos(\kappa x_0)\left(1 + \delta_{i,1}\frac{\kappa^2 a_1^2}{4}\right)\right] \ , && (4.34)\\
b_{i,\tau} &= \frac{1}{a_i^4} - 4b_i^2 - \frac{N}{4\pi a_i^3 a_j} \\
&\times \left\{\gamma_0 + \gamma_1\left[1 + e^{-\kappa^2 a_1^2/8}\cos(\kappa x_0)\left(1 + \delta_{i,1}\frac{\kappa^2 a_1^2}{4}\right)\right]\right\} \ . && (4.35)
\end{aligned}
$$

Nota importante: O conjunto das equações (4.32a) à (4.32e) também foram encontrados utilizando o *método dos momentos*. É um método alternativo com o qual é possível checar independentemente os resultados obtidos pelo método variacional. O procedimento está descrito no **apêndice B**.

4.4 Sóliton 2D em uma combinação de redes ópticas lineares e não-lineares

Outro caso que começamos a investigar é a inclusão de uma rede linear na direção y. Esta rede deve fazer um papel similar a armadilha harmônica na estabilização dos sólitons. Diferentemente das redes não-lineares, que se utilizam da ressonância de Feshbach, as

redes ópticas lineares interagem com os átomos do condensado por meio do efeito Stark [5].

Partindo novamente da equação de Gross-Pitaevskii do tipo:

$$iu_\tau = -u_{xx} - u_{yy} + \mathrm{v}_0 \cos(\lambda y + \phi)u - \gamma(x,\tau)|u|^2 u \ , \tag{4.36}$$

onde

$$\gamma(x,\tau) \equiv \gamma_0(\tau) + (\gamma_1 + i\gamma_2)\left[1 + \cos(\kappa x)\right] \ , \tag{4.37}$$

temos que determinar a influência dos parâmetros v_0, λ e ϕ na estabilidade dos sólitons. Inicialmente, faremos uma análise inteiramente numérica de um condensado repulsivo, com $\tilde{\gamma}_0 = -0{,}1$ e $\gamma_1 = 0{,}4$, sob uma combinação de redes ópticas não-linear conservativa ($\gamma_2 = 0$), na direção x, e linear na direção y, respectivamente.

Capítulo 5

Resultados numéricos e discussão

No presente capítulo serão apresentados os resultados encontrados, utilizando uma abordagem numérico exata, com a resolução de equações diferenciais parciais ('EDP'), assim como através de uma abordagem variacional aplicada ao sistema de equações diferenciais ordinárias ('EDO'), que resulta da utilização dos diferentes parâmetros variacionais no sistema.

Em primeiro lugar destacamos os resultados para um sistema sem dissipação ($\gamma_2 = 0$) onde consideramos os casos de sistemas atrativos, com $\tilde{\gamma}_0 = \gamma_1 + \frac{1}{2} > 0$, e repulsivos, com $\tilde{\gamma}_0 = \gamma_1 - \frac{1}{2} < 0$, separadamente.

5.1 Condensado atrativo ($\tilde{\gamma}_0 = \gamma_1 + 1/2$)

Quando temos $\gamma_0 = 1/2$ e $\gamma_1 > 0$ estamos lidando com um condensado atrativo.

Utilizando cálculos numéricos exatos para o caso 2D com uma rede óptica não-linear 1D os autores da referência [42] consideraram uma não-linearidade de fundo atrativa ($\tilde{\gamma}_0 > 0$). Reproduzimos este resultado, considerando $\gamma_2 = 0$. Na figura 5.1, δ refere-se à condição inicial $A_0 = (1+\delta)R_\nu^{\kappa=2}$ descrita na referência [42]. Temos $\mu = -\nu$ pela nossa abordagem e δ é um pequeno desvio na amplitude inicial.

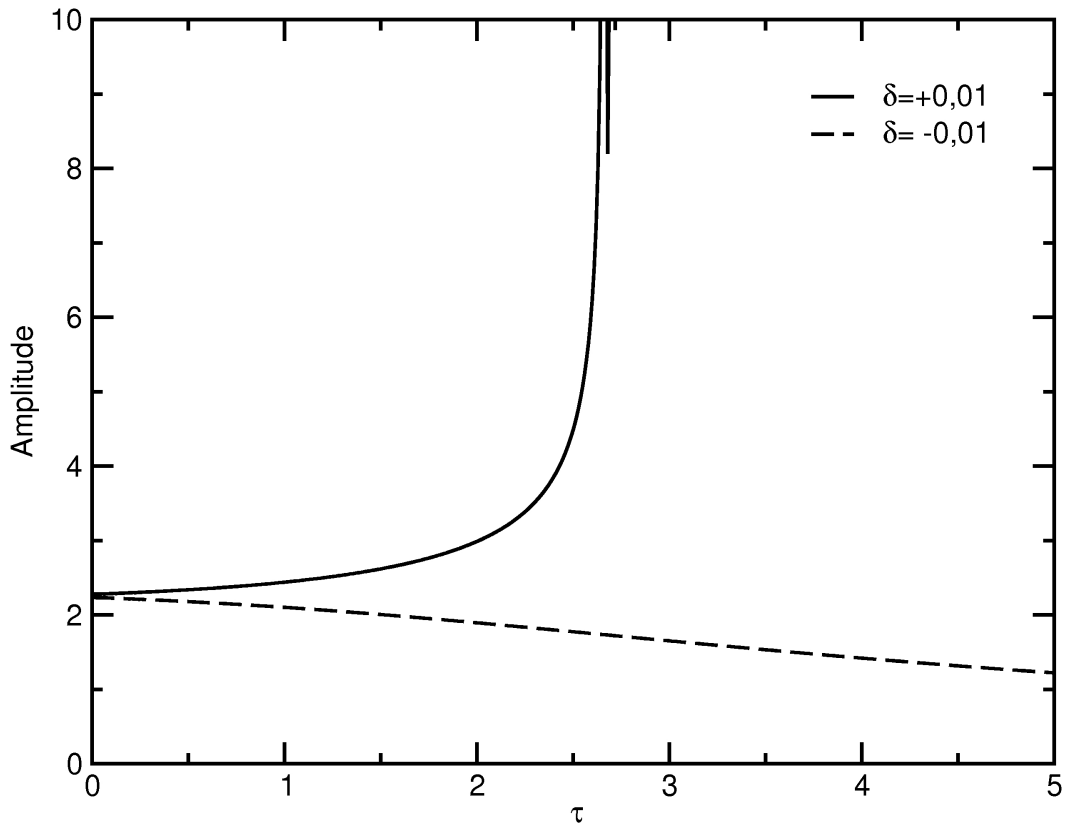


Figura 5.1: Resultados inteiramente numéricos da amplitude da densidade de probabilidade em função do tempo. Considerando um condensado 2D com uma rede não-linear 1D ($\gamma_0 = 1/2$ e $\gamma_2 = 0$). $\delta = 0{,}01$ (linha sólida) e $\delta = -0{,}01$ (linha tracejada), sendo $A_0 = (1+\delta)R_\nu^{\kappa=2}$. Reprodução da figura 1(b) de Sivan [42].

Se $\omega = 0$, utilizaremos o conjunto de equações (4.23), (4.25) e (4.24). Se considerarmos o caso mais geral, com $\omega \neq 0$, devemos utilizar as equações (4.20), (4.21), e (4.26).

Analisando os casos limites das expressões variacionais para $\omega = 0$:

$$
\begin{aligned}
a_{2,0} &\rightarrow a_1, \text{ para } a_1 << 1 \text{ e } a_1 >> 1 \; ; \\
\mu_0 &\rightarrow -1/a_1^2, \text{ para } a_1 << 1 \text{ e } a_1 >> 1 \; ; \\
N_0 &\rightarrow \frac{4\pi}{\tilde{\gamma}_0 + \gamma_1} = \frac{4\pi}{2\gamma_1 + 1/2}, \text{ para } a_1 = 0 \; ; \\
N_0 &\rightarrow \frac{4\pi}{\tilde{\gamma}_0} = \frac{4\pi}{\gamma_1 + 1/2}, \text{ para } a_1 \rightarrow \infty \; .
\end{aligned}
$$

Agora quando temos $\omega \neq 0$:

$$
\begin{aligned}
a_2 &\rightarrow \begin{cases} a_1, \ \text{ para } \ a_1 << 1 \ ; \\ 1/\sqrt{\omega}, \ \text{ para } \ a_1 >> 1 \ ; \end{cases} \\
\mu &\rightarrow \begin{cases} -1/a_1^2, \ \text{ para } \ a_1 << 1 \ ; \\ -2/a_1^2 + \omega \rightarrow \omega, \ \text{ para } \ a_1 >> 1 \ ; \end{cases} \\
N &\rightarrow \frac{4\pi}{\tilde{\gamma}_0 + \gamma_1}, \ \text{ para } \ a_1 = 0 \ ; \\
N &\rightarrow \frac{4\pi a_2}{\tilde{\gamma}_0 a_1} \rightarrow 0, \ \text{ para } \ a_1 \rightarrow \infty \ .
\end{aligned}
$$

Na figura 5.2 estão os resultados para o potencial químico (μ) em função de N e na figura 5.3 estão os resultados de N em função de a_1. As soluções numéricas para os resultados 'EDP' foram encontrados pelos métodos descritos no capítulo 3.

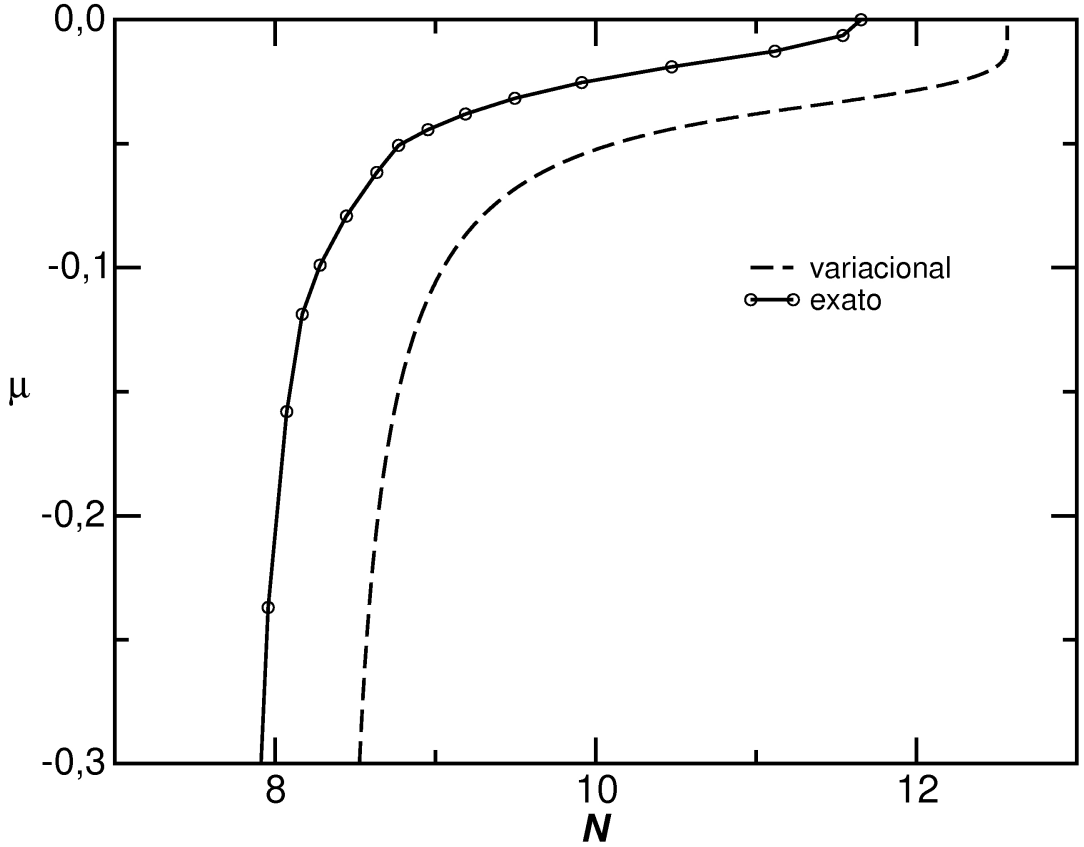


Figura 5.2: Caso atrativo, com $\tilde{\gamma}_0 = 1$ e $\gamma_1 = 0{,}5$. Resultados para o potencial químico (μ) em função de N, obtidos utilizando uma abordagem variacional e cálculos numérico exatos completos.

De acordo com o critério de Vakhitov-Kolokolov (VK) [47] para a estabilidade de sólitons, $d\mu/dN < 0$, ao analisar as curvas da figura 5.2, notamos que os sólitons são instáveis. Este resultado concorda com as predições da referência [42].

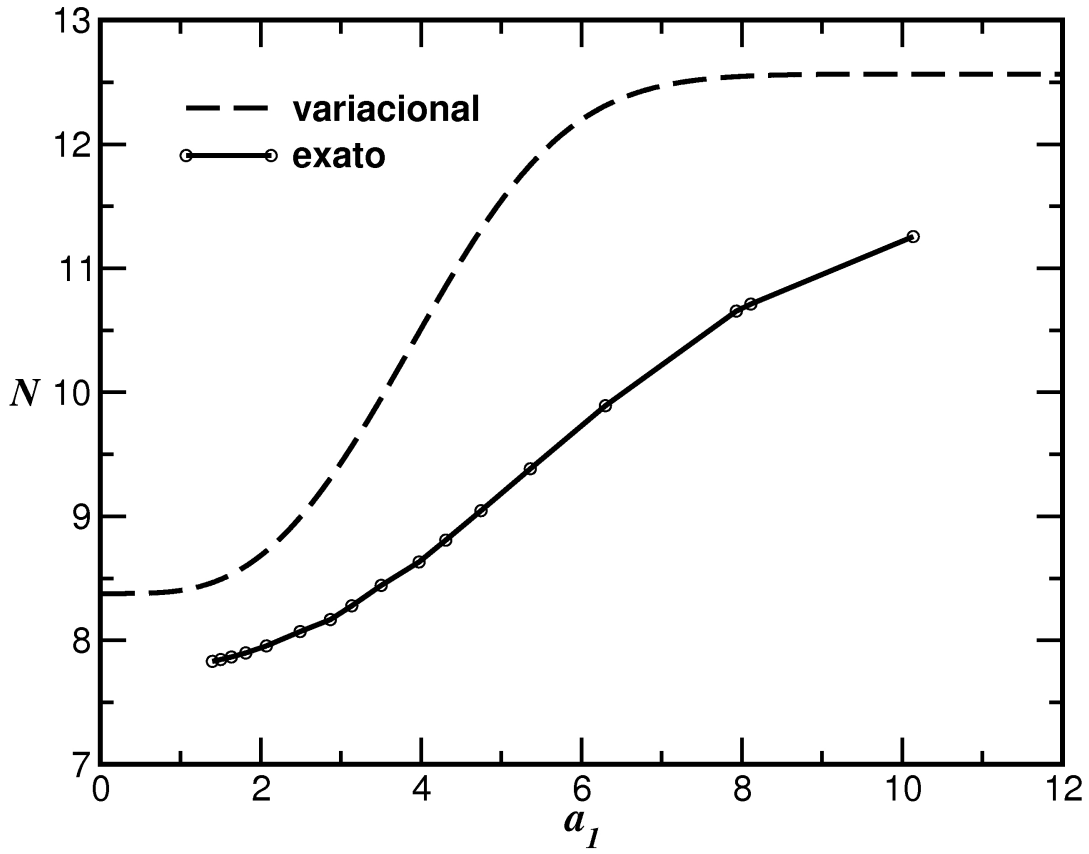


Figura 5.3: Caso atrativo, com $\tilde{\gamma}_0 = 1$ e $\gamma_1 = 0{,}5$. Resultados para N em função de a_1, obtidos utilizando uma abordagem variacional e cálculos numérico exatos completos. O parâmetro variacional para a largura, a_1, e o raio quadrático médio, $\sqrt{\langle x^2 \rangle}$, estão relacionados por $a_1 = \sqrt{2\langle x^2 \rangle}$ [Na verdade, os observáveis físicos dependem de k por (4.5) e (4.17)].

Porém, olhando os resultados variacionais, percebemos que, no limite para a_1 grande, o sistema mostra uma tendência a estabilizar, sugerindo que um pequeno potencial de armadilhamento é o suficiente para a ocorrência de uma região de estabilidade. Este comportamento é mostrado nos resultados variacionais das figuras 5.4 e 5.5. Quando comparamos os resultados numérico exatos com a abordagem variacional, obtemos um bom resultado qualitativo, apesar do pequeno deslocamento já esperado. Se alguém estiver mais preocupado em encontrar regiões de estabilidade a resultados quantitativos, a abordagem variacional provém resultados bons e confiáveis.

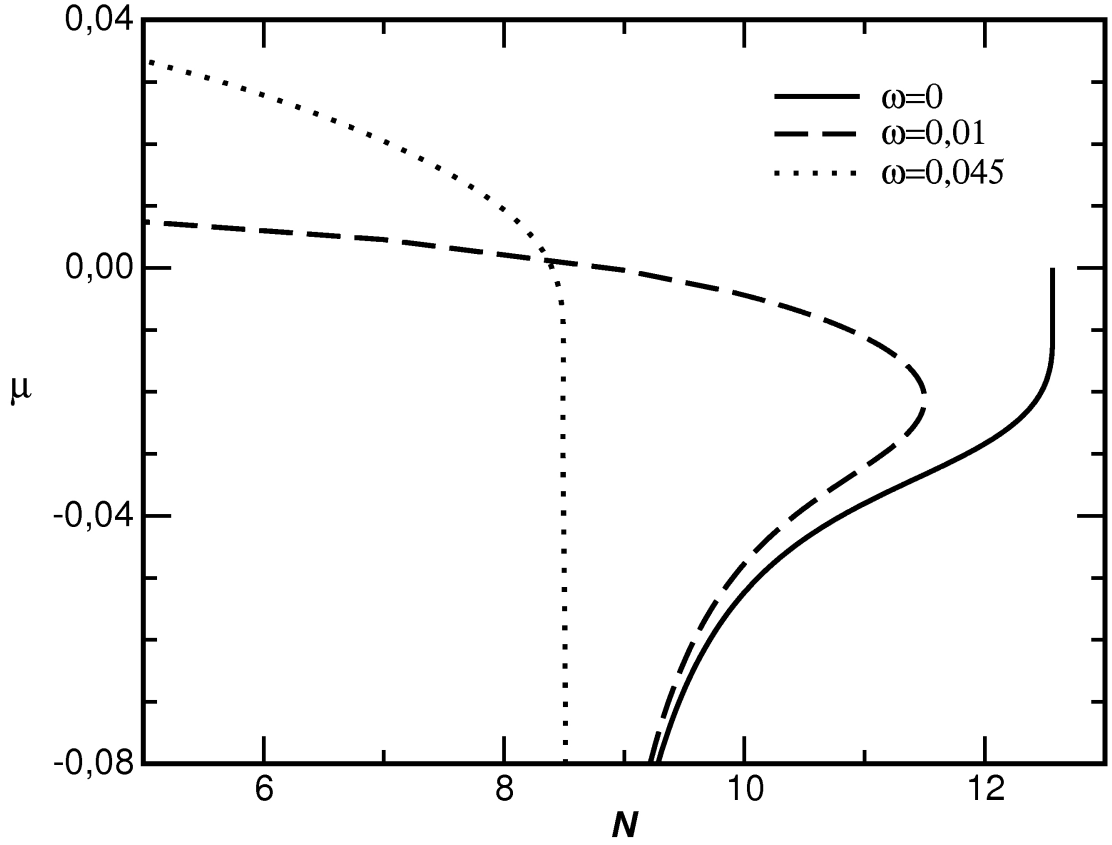


Figura 5.4: Caso atrativo, com $\tilde{\gamma}_0 = 1$ e $\gamma_1 = 0{,}5$. Resultados variacionais para o potencial químico (μ) em função de N. Os resultados são dados para μ próximo a zero, considerando três valores diferentes de freqüência: $\omega = 0$ (linha sólida), 0,01 (linha tracejada) e 0,045 (linha pontilhada).

Em nossos cálculos variacionais, quando mantivemos ω fixo (seja zero ou não) e aumentamos os valores de γ_1, observamos que a estabilidade do sistema não apresentou mudanças. O que nos levou a concluir que não podemos aumentar a estabilidade simplesmente aumentando a amplitude da rede óptica nos condensados atrativos.

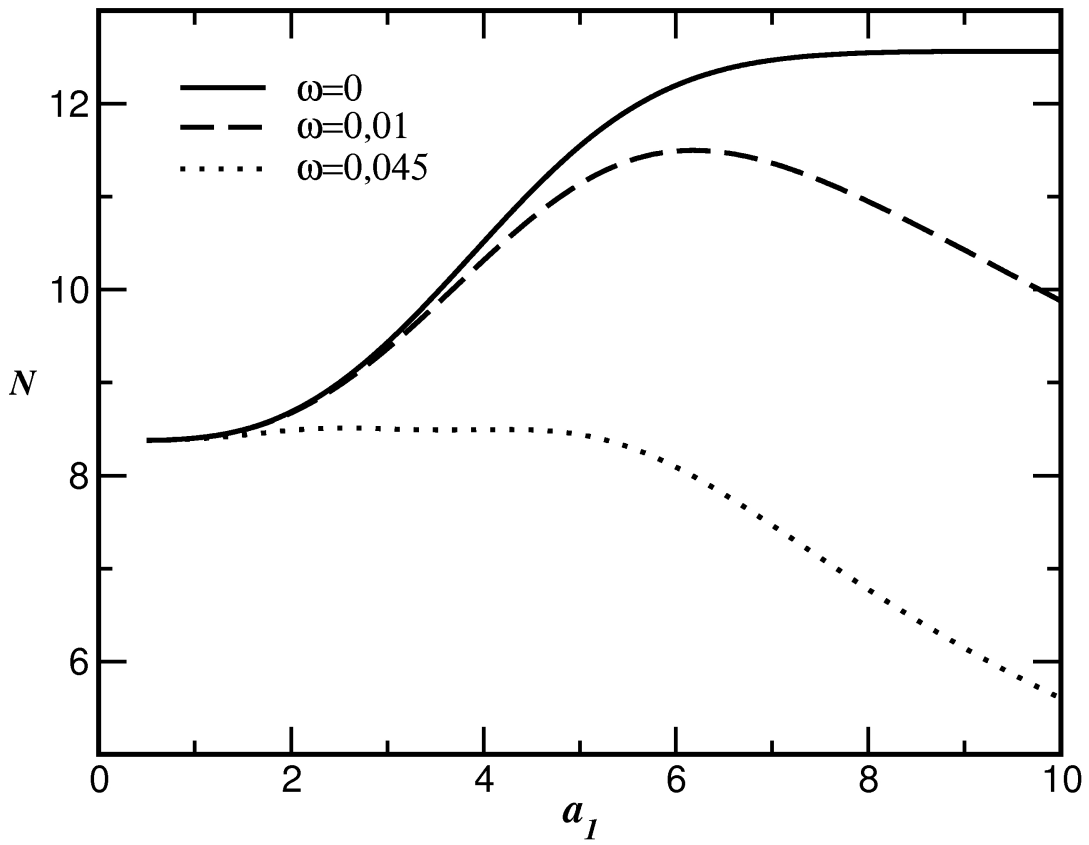


Figura 5.5: Caso atrativo, com $\tilde{\gamma}_0 = 1$ e $\gamma_1 = 0{,}5$. Resultados variacionais para N em função de a_1. Os resultados são dados para μ próximo a zero, considerando três valores diferentes de freqüência: $\omega = 0$ (linha sólida), 0,01 (linha tracejada) e 0,045 (linha pontilhada).

Na próxima seção analisaremos os casos em que $\tilde{\gamma}_0 < 0$.

5.2 Condensados repulsivos, com $\tilde{\gamma}_0 < 0$ ($\tilde{\gamma}_0 = \gamma_1 - 1/2$).

Os condensados são considerados repulsivos quando as partículas que formam seu sistema atômico possuem um comprimento de espalhamento de dois corpos positivo, ou seja, na equação (4.2) teremos $g_0 < 0$ ou $\gamma_0 = -1/2$. Sendo assim, dado γ_1 (parâmetro que regula a periodicidade espacial do comprimento de espalhamento atômico) temos $\tilde{\gamma}_0 = \gamma_1 - 1/2$. Porém, se considerarmos um fundo negativo, como quando $\tilde{\gamma}_0 < 0$, γ_1 estará restrito ao intervalo $0 < \gamma_1 < 1/2$.

Outras limitações nos parâmetros são o fato de que as larguras e o número de átomos (N) devem ter valores positivos. A relação entre as larguras a_2 e a_1, na equação (4.24) para

$\omega = 0$, também implica em um limite para os valores assumidos por a_1:

$$e^{-\frac{\kappa^2 a_1^2}{8}} \geq \frac{1}{2\gamma_1} - 1, \;\rightarrow\; a_{1,max}^2 = \frac{8}{\kappa^2} \ln\left(\frac{\gamma_1}{\frac{1}{2} - \gamma_1}\right). \tag{5.1}$$

Este limite, $a_{1,max}$, é necessário para se manterem a_2 e N com valores reais e positivos para qualquer valor de ω. Isto também irá restringir os valores γ_1 à 1/4< γ_1 <1/2. Os casos onde $\gamma_1 > 1/2$ também são permitidos, sem o limite superior para a_1. Contudo, estes casos correspondem a um campo de fundo positivo, $\tilde{\gamma}_0 > 0$, que já foram discutidos.

Tendo tudo isso em vista, vamos analisar os limites das equações variacionais encontradas. Para $\omega = 0$, temos:

$$a_{2,0} \;\rightarrow\; \begin{cases} a_1, & \text{para } a_1 << 1\,; \\ \infty, & \text{para } a_1 = a_{1,max}\,. \end{cases}$$

$$\mu_0 \;\rightarrow\; \begin{cases} -1/a_1^2, & \text{para } a_1 << 1\,; \\ 1/(2a_1^2), & \text{para } a_1 = a_{1,max}\,. \end{cases}$$

$$N_0 \;\rightarrow\; \begin{cases} 8\pi/(4\gamma_1 - 1), & \text{para } a_1 = 0\,; \\ \infty, & \text{para } a_1 = a_{1,max}\,. \end{cases}$$

E para $\omega \neq 0$:

$$a_2 \;\rightarrow\; \begin{cases} a_1, & \text{para } a_1 << 1\,; \\ 1/\sqrt{\omega}, & \text{para } a_1 = a_{1,max}\,. \end{cases}$$

$$\mu \;\rightarrow\; \begin{cases} -1/a_1^2, & \text{para } a_1 << 1\,; \\ 1/(2a_1^2) + \omega, & \text{para } a_1 = a_{1,max}\,. \end{cases}$$

$$N \;\rightarrow\; \begin{cases} 8\pi/(4\gamma_1 - 1), & \text{para } a_1 = 0\,; \\ 32\pi/[(1 - 2\gamma_1)\sqrt{\omega}\kappa^2 a_{1,max}^3], & \text{para } a_1 = a_{1,max}\,. \end{cases}$$

Nas figuras 5.6 e 5.7, temos o potencial químico (μ) em função de N e N em função de a_1, para $\tilde{\gamma}_0 = -0{,}1$ e $\gamma_1 = 0{,}4$, considerando quatro valores de ω (0, 0,07, 0,1 e 0,3) em um desenvolvimento variacional. Para o caso em que temos $\omega = 0$, também foram incluídos resultados de cálculos numéricos de 'EDP'.

Com o critério 'VK' para estabilidade, $d\mu/dN < 0$, notamos que regiões de estabilidade começam a aparecer com $\omega \approx 0{,}1$. Se $\omega > 0,3\kappa^2$ as regiões instáveis quase que desaparecem. Contudo, assim como pode ser observado no gráfico inferior, a largura a_1

está limitada devido à condição (5.1). Os observáveis, μ e a_i, dependem do parâmetro de onda, k, da variação periódica espacial do comprimento de espalhamento atômico pelas relações de escala (4.5) e (4.6), com $\kappa = 1$.

Contudo, contrariando o que está escrito na referência [42], valores específicos para o parâmetro k não afetam a estabilidade. Nos casos de sistemas conservativos, a estabilidade resulta dos efeitos combinados dos parâmetros $\tilde{\gamma}_0$, γ_1 e ω.

Nossa conclusão até aqui foi que, sem um potencial de armadilhamento (incluído na direção y), com $\omega = 0$, a rede óptica não pode estabilizar as soluções, seja em condensados atrativos ou repulsivos.

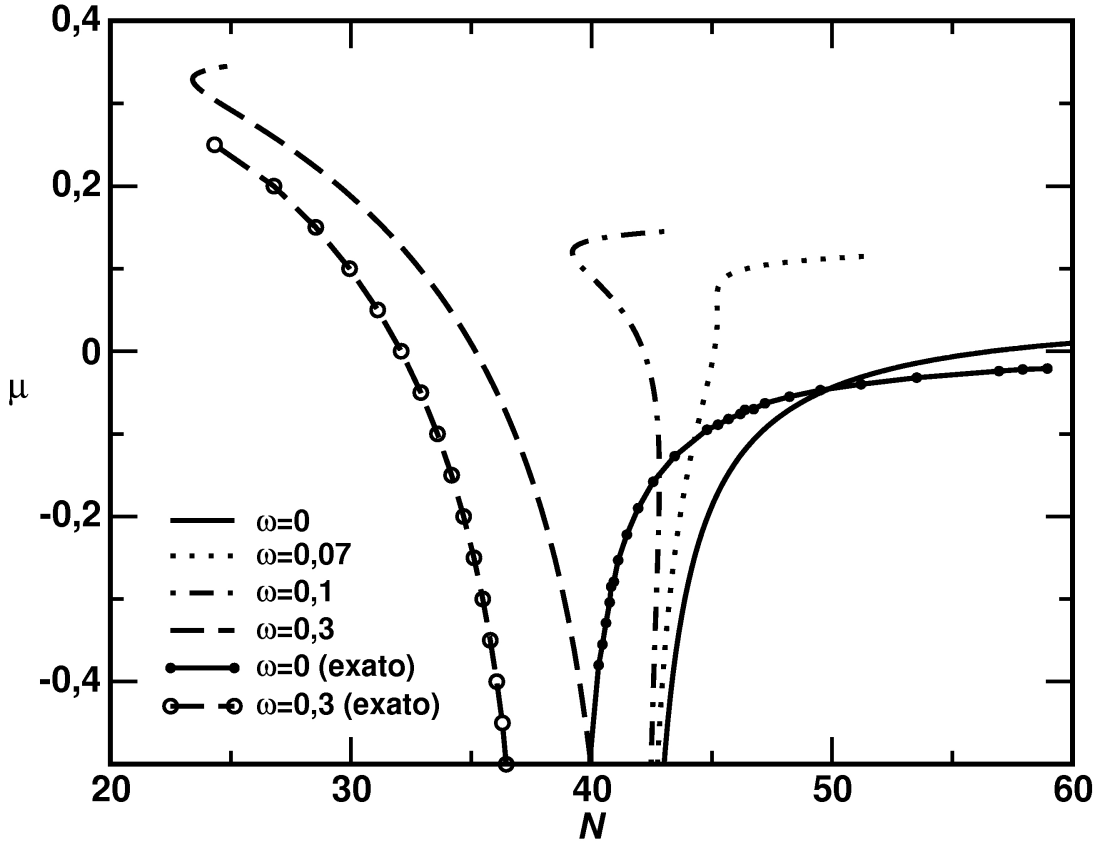


Figura 5.6: Caso repulsivo, com $\tilde{\gamma}_0 = -0,1$ e $\gamma_1 = 0,4$, para μ em função de N. Temos os resultados variacionais para $\omega = 0$, 0,07, 0,1 e 0,3, e também estão indicados os resultados exatos 'EDP' para $\omega = 0$ (onde o sistema é instável) e $\omega = 0,3$ (onde o sistema estável). No último caso, próximo da região onde o cálculo variacional apresenta um pequeno trecho instável ($22 < N < 25$), os cálculos numéricos exatos são mostrados apenas para $N > 24$.

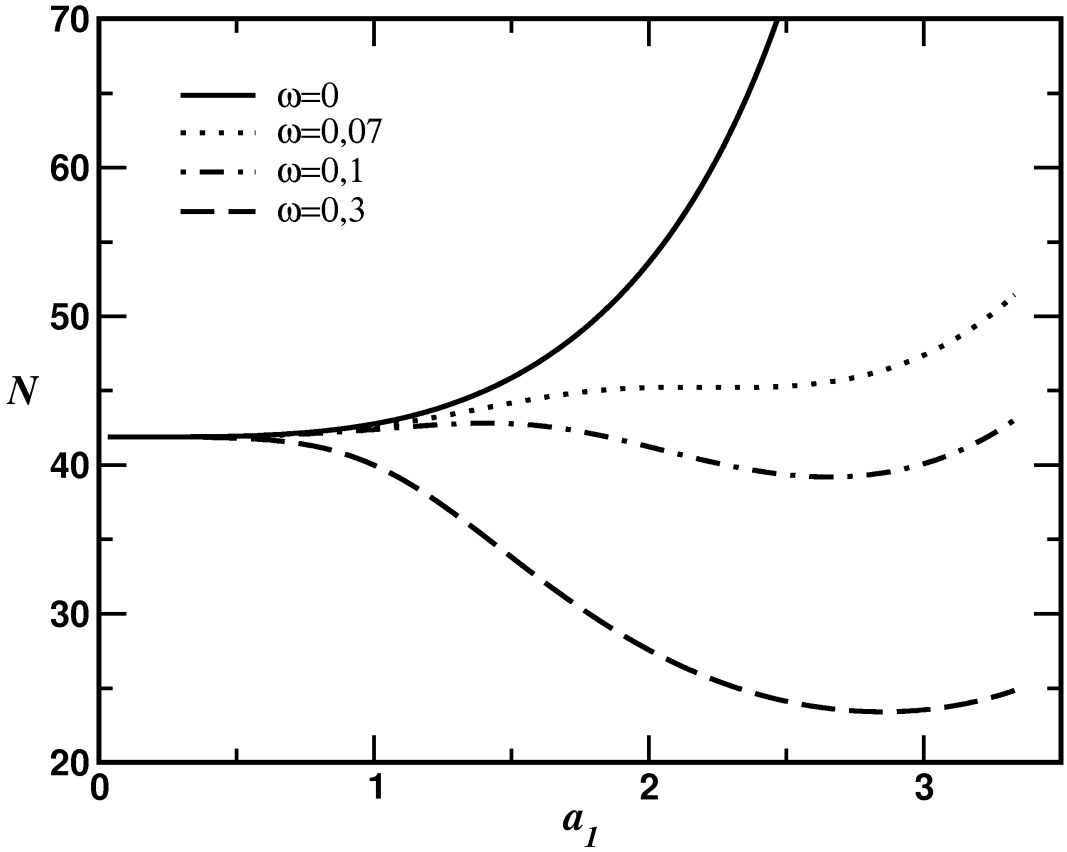


Figura 5.7: Caso repulsivo, com $\tilde{\gamma}_0 = -0,1$ e $\gamma_1 = 0,4$, para N em função de a_1. Temos os resultados variacionais para $\omega =$ 0, 0,07, 0,1 e 0,3.

Com o intuito de investigar melhor o papel das redes ópticas, para o caso repulsivo, também simulamos o caso com ω constante e diferentes valores de γ_1. A partir dos resultados mostrados na figura 5.6, para $\gamma_1 = 0{,}4$, achamos apropriado considerar $\omega = 0{,}07$, que possui uma pequena estabilidade próximo de $\mu \approx 0{,}05$.

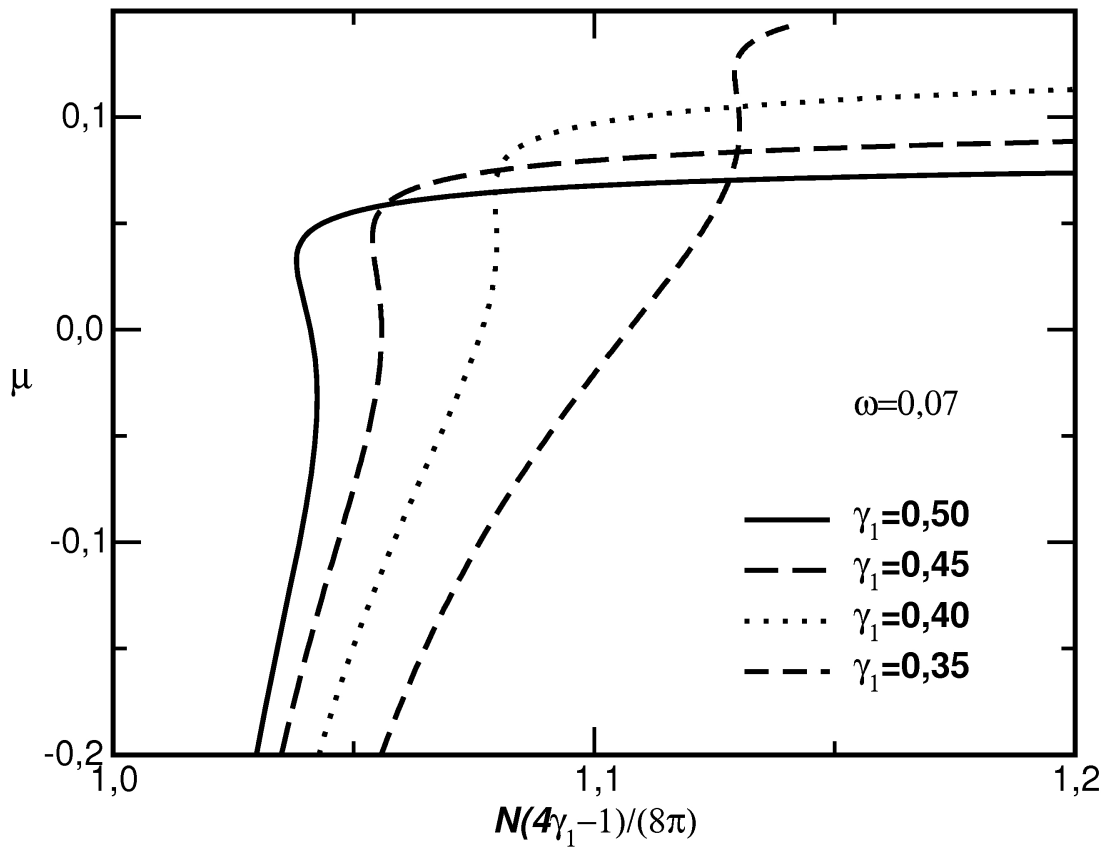


Figura 5.8: Resultados variacionais de μ em função de $N/N(a_1 = 0)$, para o caso repulsivo, com $\tilde{\gamma}_0 = -0{,}1$, $\omega = 0{,}07$ e $\gamma_1 = 0{,}35$, $0{,}4$, $0{,}45$ e $0{,}5$.

Os resultados estão indicados nas figuras 5.8, onde podemos observar que a estabilidade permanece pequena para os diferentes valores de potencial químico, e 5.9, onde um maior valor de γ_1 pode permitir que a largura a_1 aumente, ainda que limitada pela condição (5.1).

Para manter todas as curvas em um mesmo quadro nas figuras 5.8 e 5.9, para os diferentes valores de γ_1, normalizamos o número N para que fosse sempre igual a um quando a_1 fosse zero.

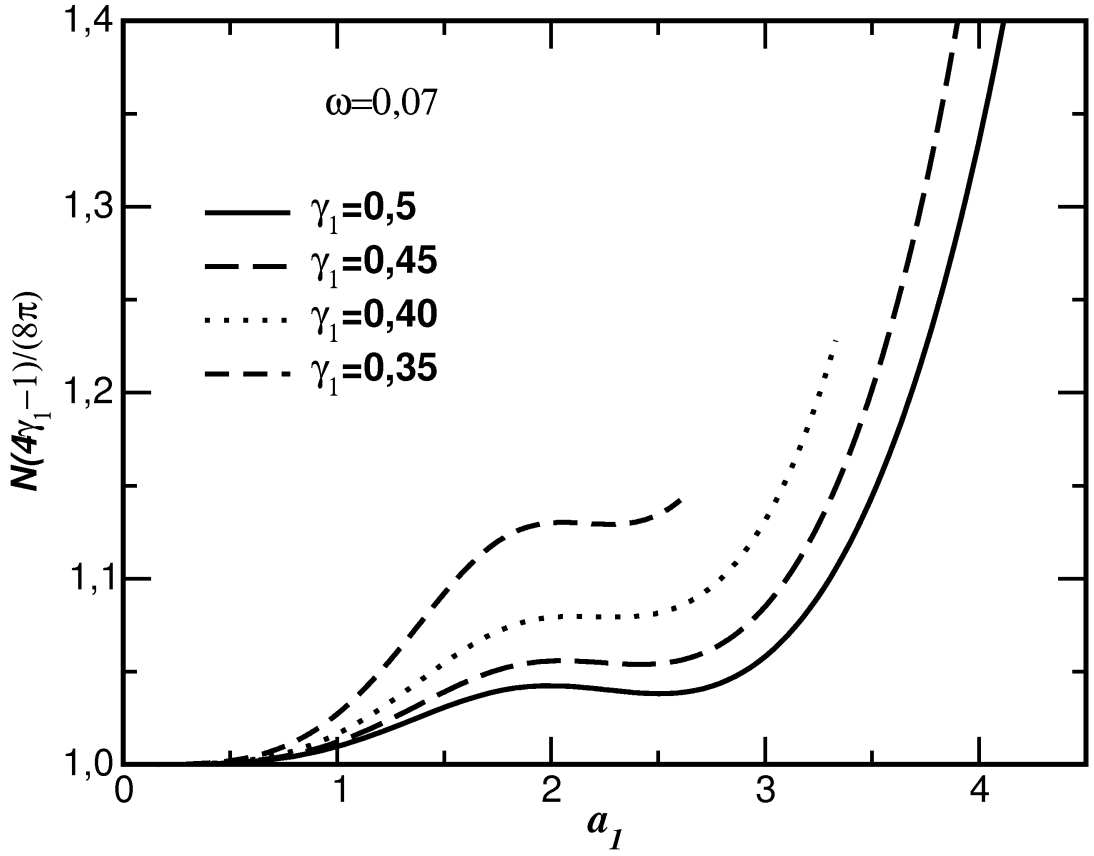


Figura 5.9: Resultados variacionais de $N/N(a_1 = 0)$ em função de a_1, para o caso repulsivo, com $\tilde{\gamma}_0 = -0{,}1$, $\omega = 0{,}07$ e $\gamma_1 = 0{,}35$, $0{,}4$, $0{,}45$ e $0{,}5$.

As curvas correspondentes a evolução dos perfis, para $\omega = 0{,}3$, estão na figura 5.10, confirmando a predição do critério de VK. Os perfis em $t = 50$ quase não se distinguem, mantendo a forma do sóliton inicial.

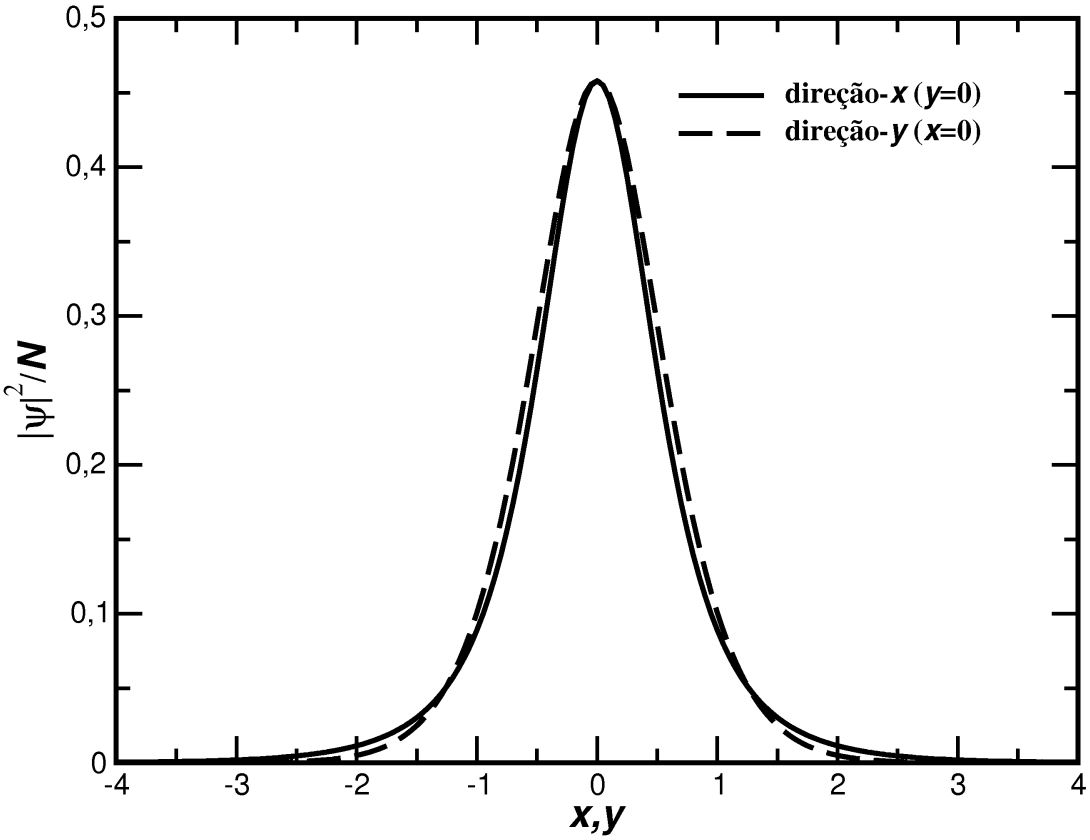


Figura 5.10: Os perfis do sóliton na região estável predita pelo critério de VK, para $\omega = 0{,}3$, $\tilde{\gamma}_0 = -0{,}1$, $\gamma_1 = 0{,}4$, $\mu = 0{,}1$, $N \approx 33$ no tempo $t = 50$. A linha sólida corresponde à direção x e a linha tracejada à direção y.

5.3 Evolução de um sóliton 2D sob uma não-linearidade periódica e dissipação

A seguir, estão alguns resultados quando consideramos uma rede óptica não-linear com efeitos dissipativos. Considerando o escalonamento dos observáveis dado por κ, discutido para o sistema conservativo na seção 4.2, que também pode ser verificada nesse caso, temos a transformação $b_i \to b_i/\kappa^2$.

Na figura 5.11, temos os resultados das simulações numéricas completas ('EDP') para a evolução do pacote de onda de matéria em uma combinação de redes ópticas conservativa e dissipativa não-lineares para um condensado atrativo, $\gamma_0 = 1/2$. Como pode ser observado o colapso é evitado pela adição do termo dissipativo à rede óptica não-linear. Os resultados são comparados com a abordagem variacional ('EDO'). É observada uma boa concordância com os resultados numéricos exatos completos.

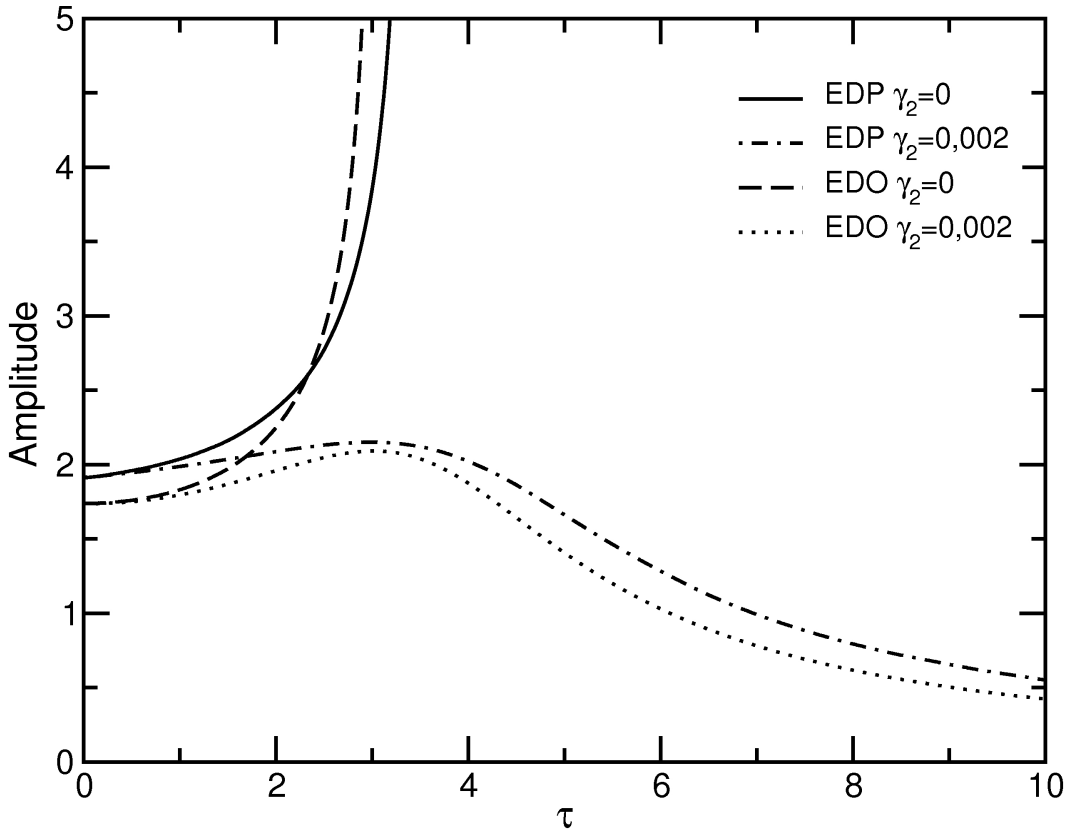


Figura 5.11: Resultados para a amplitude em função de τ, usando uma abordagem variacional (com solução numérica de EDO's) e cálculos numéricos completos (com solução numérica de EDP), no caso de um condensado atrativo ($\gamma_0 = \gamma_1 = 0{,}5$). Para ambos, temos o valor de $\mu = 1$ fixo para o mesmo valor de $\tau = 0$, o que implica em um pequeno deslocamento da amplitude inicial, $A(0)$.

Também investigamos o papel do desvio da norma, δ, da norma crítica no pacote de onda inicial: $A \rightarrow A(1+\delta)$. Os resultados das simulações numéricas completas estão apresentados na figura 5.12. Ao se aumentar o desvio δ da norma crítica, durante o colapso picos múltiplos que correspondem a tentativas do pacote de onda se recuperar. O número de picos aumenta quando o δ varia entre $0{,}02$ e $0{,}5$. Estes ciclos conectam a ação variação na periodicidade no espaço com as interações inelásticas de três corpos. Nas referências [48] e [49] essas oscilações foram estudadas, com interações de três corpos, em uma rede óptica linear conservativa e utilizando uma armadilha harmônica, respectivamente.

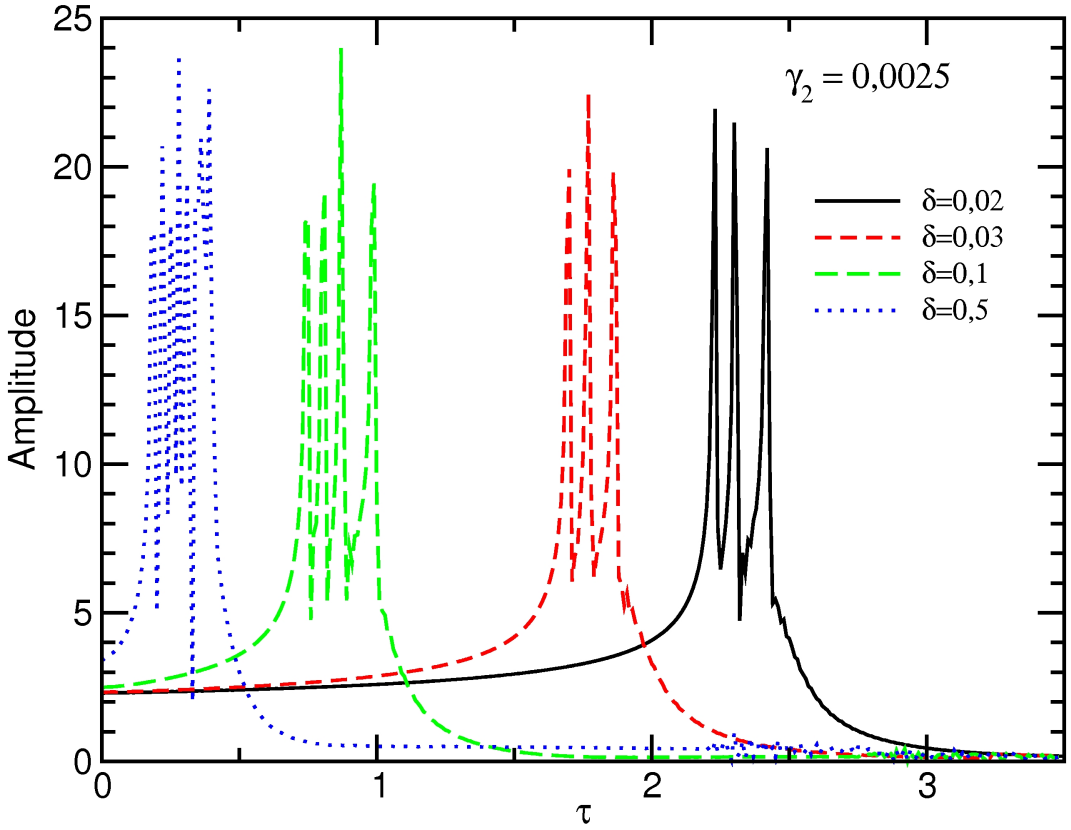


Figura 5.12: Resultados inteiramente numéricos da amplitude em função de τ, mostrando o comportamento do colapso para $\kappa = 4\pi$. A dissipação possui o valor fixo de $\gamma_2 = 0{,}0025$, e δ varia entre $0{,}02$ e $0{,}5$.

Como podemos observar na figura 5.11, depois que o colapso é evitado, ocorre o espalhamento da amplitude. Tal fenômeno pode ser compensado por uma variação no comprimento de espalhamento de fundo, descrito por uma variação em γ_0. Quando se considera um γ_0 dependente do tempo, assim como na equação (4.11), o parâmetro do termo de alimentação, α_f, deve ser zero, pois é possível demonstrar (ao se redefinir a função de onda) que eles possuem efeitos similares.

Na figura 5.13 estão os resultados dos cálculos numéricos completos que confirmam a estabilização do condensado após o colapso ser evitado. O mecanismo desta estabilidade é dado pelo correto ajuste entre os parâmetros α e τ_c da equação (4.11).

Ainda considerando os efeitos dissipativos da dinâmica apresentada nesta seção, é importante mencionar que efeitos da rede podem também ser observados em sistemas uniformes. A abordagem variacional pode descrever a dinâmica dissipativa entre sólitons estreitos e largos com relação ao espaçamento da rede $2\pi/\kappa$. No limite em que temos

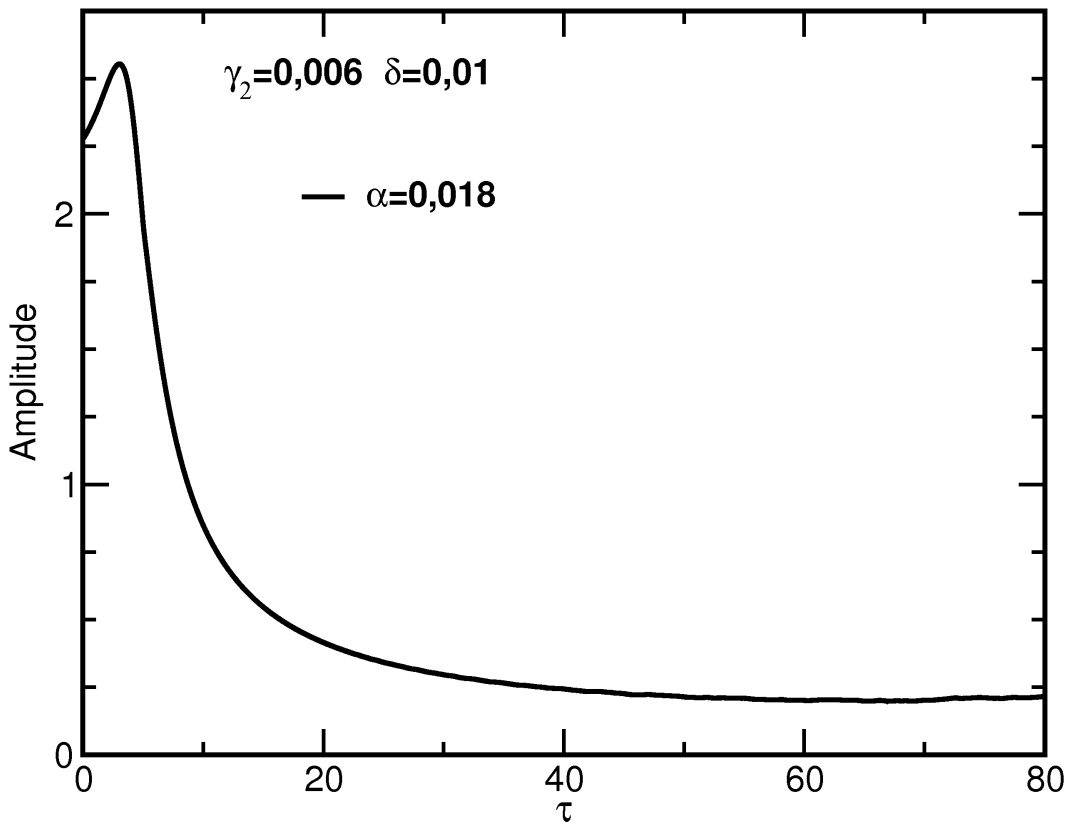


Figura 5.13: Estabilização da amplitude do sóliton no tempo (τ) pelo efeito de compressão, com $\tau_c = 5$ e $\alpha = 0{,}018$ na equação (4.11). Os demais parâmetros são $\gamma_2 = 0{,}006$, $\delta = 0{,}01$ e $\kappa = 4\pi$.

sólitons estreitos, temos um termo cúbico dissipativo. No limite oposto, de um sóliton largo, a equação de Gross-Pitaevskii média contém um termo imaginário de quinta ordem, resultando em uma dinâmica dissipativa diferente. Este efeito aparece com a troca de $i\gamma_2 \cos(\kappa x)|u|^2 u$ por $i\Gamma_3|\bar{u}|^4\bar{u}$, com $\Gamma_3 = 3\gamma_2^2/(2\kappa^2)$ e $\bar{u}$ um campo médio sobre as modulações rápidas. Devido à renormalização do parâmetro correspondente às perdas efetivas de três corpos, Γ_3 pode ser controlado pelos valores do período $2\pi/\kappa$ e da amplitude γ_2 das modulações não-lineares. O número de ciclos reduzem quando Γ_3 aumenta para valores altos do amortecimento, com o sóliton decaindo monotônicamente. Estas observações são confirmadas pela existência dos ciclos [49] no condensado de Bose-Einstein 3D em uma armadilha harmônica com processos inelásticos de dois e três corpos.

5.4 Evolução de um sóliton 2D sob redes ópticas lineares e não-lineares

Considerando um condensado repulsivo, com $\tilde{\gamma}_0 = -0{,}1$ e $\gamma_1 = 0{,}4$, e tendo uma combinação de redes ópticas não-linear conservativa ($\gamma_2 = 0$), na direção x, e linear na direção y, determinamos a estabilidade dos sólitons para diferentes valores de v_0, considerando a equação (4.36).

Os resultados da simulação inteiramente numérica (EDP) para μ em função de N estão na figura 5.14, e para N em função da largura a_1 estão na figura 5.15, com $\mathrm{v}_0 = 0$, $0{,}1$, $0{,}5$ e 1. Fixamos o valor de $\lambda = 1{,}5$ e de $\phi = \pi/2$. A rede realmente faz um papel similar a armadilha harmônica, proporcionando a estabilização dos sólitons em acordo com o que está predito pelo critério de VK.

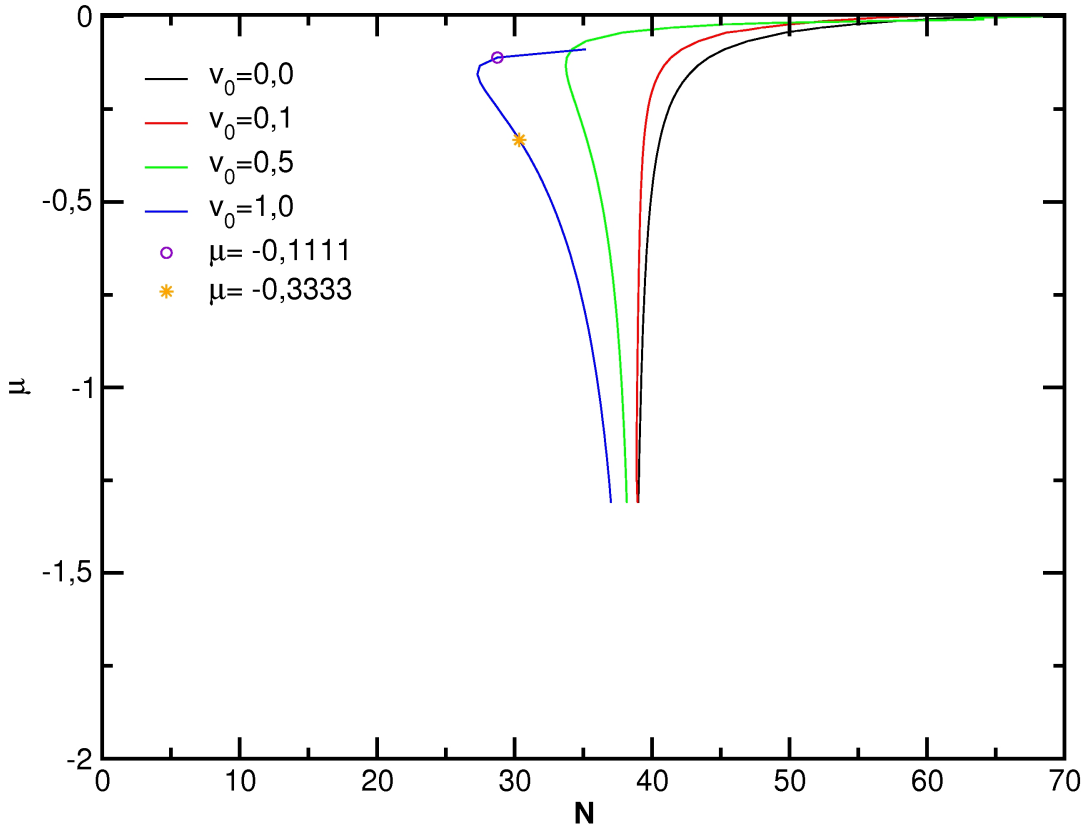


Figura 5.14: Resultados dos cálculos inteiramente numéricos de μ em função de N para um condensado repulsivo ($\tilde{\gamma}_0 = -0{,}1$ e $\gamma_1 = 0{,}4$), com diferentes valores de v_0. Consideramos $\lambda = 1{,}5$ e $\phi = \pi/2$. Dois pontos são indicados no gráfico, um instável $\mu = -0{,}1111$ (círculo) e um estável $\mu = -0{,}3333$ (estrela).

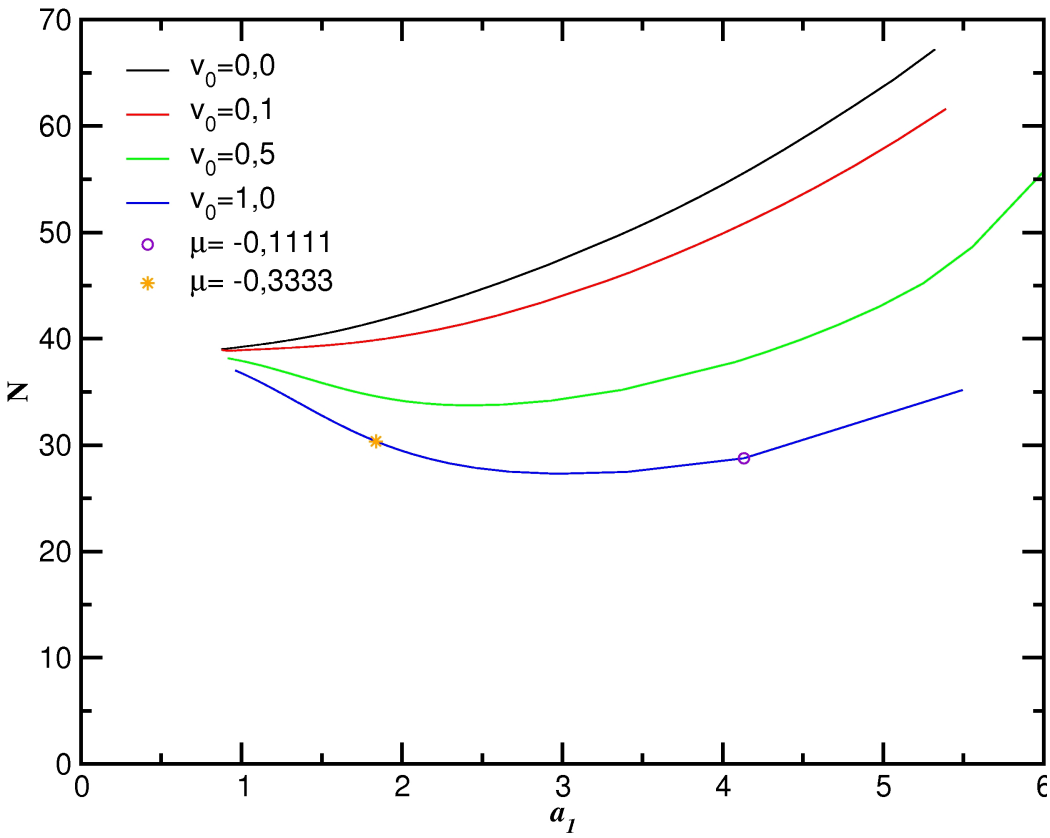


Figura 5.15: Resultados dos cálculos inteiramente numéricos de N em função de a_1 para um condensado repulsivo ($\tilde{\gamma}_0 = -0{,}1$ e $\gamma_1 = 0{,}4$), com diferentes valores de v_0. Consideramos $\lambda = 1{,}5$ e $\phi = \pi/2$. Dois pontos são indicados no gráfico, um instável $\mu = -0{,}1111$ (círculo) e um estável $\mu = -0{,}3333$ (estrela).

Também analisamos a evolução temporal do sistema para dois valores diferentes de potencial químico, $\mu = -0{,}1111$ (círculo) e $-0{,}3333$ (estrela), conforme indicado nas figuras 5.14 e 5.15. No primeiro caso (círculo) não ocorreu estabilização (conforme a previsão do critério de VK), mas no segundo (estrela) sim. O perfil do sóliton com $\mu = -0{,}3333$, para $t = 50$, está indicado na figura 5.16. Note que o sóliton se estabiliza fora da origem, mas no primeiro mínimo da rede linear na direção y.

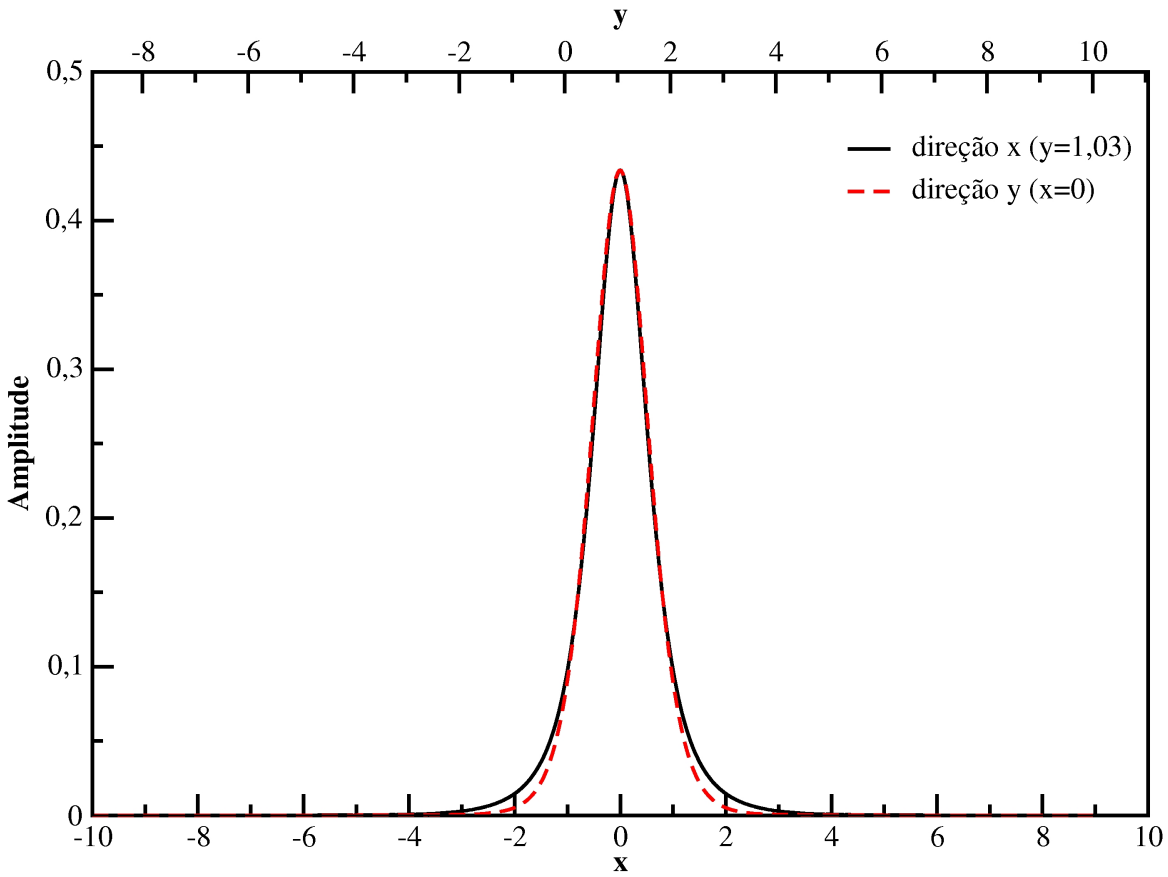


Figura 5.16: Perfis do sóliton no tempo $t = 50$ para $\mu = -0{,}3333$. (região estável). O sóliton está centrado em um mínimo da rede óptica linear (quando se leva em consideração a direção y).

Com uma combinação de redes ópticas linear, na direção y, e não-linear conservativa, na direção x, aparentemente podemos obter um sistema estável, em acordo com o critério de VK. Estes são resultados preliminares dos cálculos inteiramente numéricos ('EDP'). Caberia também uma análise variacional do problema, de modo análogo ao realizado nas outras seções, mas isso ficará para um projeto futuro. Porém, somente essas poucas simulações iniciais, já nos mostram que é muito interessante investigar melhor esse tipo de sistema, seja mudando os valores dos parâmetros, ou considerando sistemas de condensados atrativos.

Capítulo 6

Conclusões

Foram investigadas a dinâmica e estabilidade de sólitons de onda de matéria em uma mistura de redes ópticas não-lineares conservativas e dissipativas 1D em um condensado de Bose-Einstein 2D.

Na primeira parte deste trabalho, os sistemas com redes ópticas não-lineares conservativas foram analisados para condensados atrativos e repulsivos. Foi também esclarecido o papel do escalonamento no cálculo dos observáveis físicos, como o potencial químico e as larguras. Chegamos à conclusão que um sistema 2D com uma rede óptica não-linear em uma direção não pode fornecer soluções estáveis, satisfazendo o critério de VK [47]. A periodicidade da rede na direção x não consegue compensar o efeito de colapso proveniente da outra dimensão. Foi verificado que, ao se introduzir uma armadilha harmônica na direção y, pode-se controlar esse colapso e conseguir uma solução estável. Para os condensados repulsivos, a estabilidade pode ser atingida pelo mesmo tipo de sistema 2D descrito, uma rede óptica não-linear na direção x e uma armadilha harmônica na direção y.

Na segunda parte do trabalho analisamos a dinâmica do mesmo sistema 2D, com a adição de um termo dissipativo à rede óptica não-linear (na direção x), sem uma armadilha harmônica na outra direção. Mostramos que o colapso pode ser evitado pela não-linearidade periódica dissipativa. Para estudar a evolução temporal do pacote de onda, aplicamos uma abordagem variacional dependente do tempo. Para compensar a expansão espacial do pacote de onda, foi utilizada uma variação temporal adiabática do com-

primento de espalhamento. Foi mostrado que sólitons dissipativos metaestáveis podem existir em um condensado 2D com uma não-linearidade periódica. As predições analíticas foram confirmadas por simulações inteiramente numérica da equação de Gross-Pitaevskii 2D.

Estes estudos foram divulgados em um artigo publicado no periódico "Physical Review A" [1].

Por fim, apresentamos os cálculos preliminares de um sistema de condensado repulsivo, similar ao sistema analisado anteriormente, sob uma combinação de redes ópticas lineares e não-lineares. Obtivemos uma região clara de estabilização pelo critério de VK e, iniciada a evolução temporal, comprovou-se a estabilidade por simulações numéricas, estando indicado, na figura 5.16, os perfis do sóliton para $t = 50$. Lembrando novamente que esta parte final da dissertação se refere a resultados preliminares que farão parte de um projeto futuro, que deverá ser implementado, onde vários mecanismos para estabilização do condensado em redes ópticas irão ser considerados.

Como perspectivas futuras na mesma linha pesquisa, temos o estudo da dinâmica, conduzindo à estabilização de sólitons em condensados de Bose-Einstein na presença de diferentes redes ópticas lineares e/ou não-lineares (conforme discutido no parágrafo anterior). Também é possível, considerando as experiências atuais com misturas de espécies atômicas nos laboratórios de átomos ultra-frios, o estudo de condensados com acoplamento de duas espécies atômicas, com a mesma estatística (Bóson-Bóson ou Férmion-Férmion) ou com estatística diferente (Bóson-Férmion), com o objetivo de verificar como obter estabilização de sistemas condensados para tempos macroscópicos. Um último ponto se refere a solução da equação de Schrödinger não-linear com um termo quíntico, que pode ser conservativo (proveniente da interação de três corpos) ou não-conservativo (que leva a perda de átomos no condensado devido a recombinação de três corpos), na presença de potenciais periódicos (tipo rede óptica).

Apêndice A

Gás Ideal Quântico

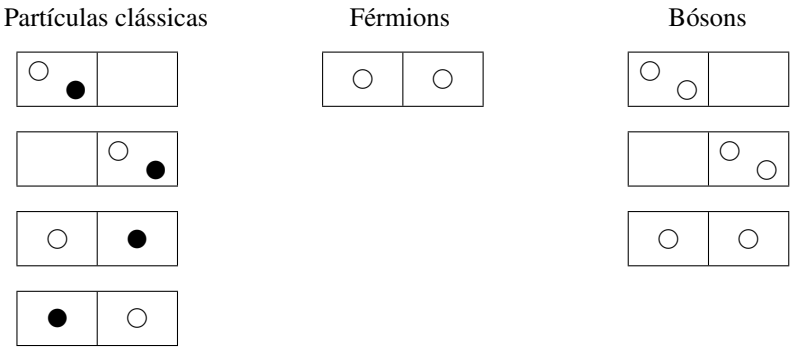
Para um sistema quântico, ao contrário do caso clássico, temos partículas indistinguíveis, limitando assim a quantidade de estados diferentes que este sistema pode apresentar. Somando isso às propriedades de simetria teremos três estatísticas diferentes:

- Maxwell-Boltzman, partículas clássicas;
- Bose-Einstein, partículas de spin inteiro (fótons, fônons, mágnons);
- Fermi-Dirac, partículas de spin semi-inteiro (elétrons, prótons, nêutrons);

Considerando um sistema simples de duas partículas não-interagentes teremos funções de onda, $\Psi(\overrightarrow{r_1}, \overrightarrow{r_2})$, características para cada uma das estatísticas, levando em conta que a função de onda da estatística de Bose-Einstein deve ser simétrica e a função de onda da estatística de Fermi-Dirac deve ser anti-simétrica quanto a troca de coordenadas entre as duas partículas.

$$\begin{aligned}
\Psi_{MB}(\overrightarrow{r_1}, \overrightarrow{r_2}) &= \psi_1(\overrightarrow{r_1})\psi_2(\overrightarrow{r_2}) \quad , \\
\Psi_{BE}(\overrightarrow{r_1}, \overrightarrow{r_2}) &= \tfrac{1}{\sqrt{2}}[\psi_1(\overrightarrow{r_1})\psi_2(\overrightarrow{r_2}) + \psi_2(\overrightarrow{r_1})\psi_1(\overrightarrow{r_2})] \quad , \\
\Psi_{FD}(\overrightarrow{r_1}, \overrightarrow{r_2}) &= \tfrac{1}{\sqrt{2}}[\psi_1(\overrightarrow{r_1})\psi_2(\overrightarrow{r_2}) - \psi_2(\overrightarrow{r_1})\psi_1(\overrightarrow{r_2})] \quad .
\end{aligned}$$

Neste sistema existe um numero específico de estados que estas duas partículas podem estar dependendo de qual estatística se está considerando. As diferentes "contagens" vêm do fato das partículas serem idênticas(indistinguíveis), ou não, e também das propriedades simétricas da função de onda que descreve o sistema [50].



Assim temos quatro estados possíveis para duas partículas clássicas que são distinguíveis, um estado possível para dois férmions, partículas idênticas, que não podem ocupar o mesmo estado de partícula única devido à propriedade anti-simétrica da função de onda (*princípio de exclusão de Pauli*) e três estados possíveis para dois bósons, que também são partículas idênticas.

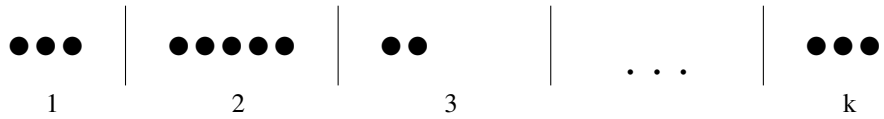
A.1 Lei de distribuição de Bose-Einstein

Vamos derivar a lei de distribuição de um sistema de elementos com funções de onda simétricas. Cada um deles pode ser colocado em um estado quântico único, sendo necessário determinar a quantidade de estados microscópicos total do sistema, sua pressão e energia.

O nosso sistema consistirá de n_k elementos indistinguíveis podendo assumir energias ϵ_k, existindo p_k elementos com uma mesma energia degenerada. A energia total do sistema será constante:

$$E = \sum_k n_k \epsilon_k \ . \tag{A.1}$$

Agora vamos determinar O_k que é o número de formas diferentes de se distribuir n_k elementos entre os p_k estados para cada grupo. Supondo p_k regiões diferentes, separadas por $p_k - 1$ partições, cada região correspondendo a um estado diferente. Queremos determinar o número de maneiras diferentes que podemos alocar n_k elementos idênticos em p_k regiões diferentes, que é o mesmo que organizar n_k elementos e $p_k - 1$ partições.



O número de combinações possíveis neste caso é $(n_k + p_k - 1)!$. Mas como tanto os elementos como as partições são indistinguíveis devemos dividir pelo número de arranjos possíveis.

$$O_k = \frac{(n_k + p_k - 1)!}{n_k!(p_k - 1)!} \ . \tag{A.2}$$

O número total de formas diferentes de se colocar n_1 elementos no primeiro grupo de p_1 estados diferentes com energia ϵ_1, n_2 elementos no primeiro grupo de p_2 estados diferentes com energia ϵ_2, e assim por diante, é o produto de todos O_k.

$$\mathbf{P} = \prod_k O_k \ , \tag{A.3}$$

$$\mathbf{P} = \prod_k \frac{(n_k + p_k - 1)!}{n_k!(p_k - 1)!} \ . \tag{A.4}$$

Utilizando a fórmula de Stirling, $\ln N! \simeq N \ln N - N$:

$$\ln \mathbf{P} = \sum_k (n_k + p_k) \ln(n_k + p_k) - (n_k + p_k) - n_k \ln n_k + n_k - p_k \ln p_k + p_k \ , \tag{A.5}$$

ou ainda,

$$\ln \mathbf{P} = \sum_k \left[n_k \ln\Big(1 + \frac{p_k}{n_k}\Big) + p_k \ln\Big(1 + \frac{n_k}{p_k}\Big) \right] \ . \tag{A.6}$$

Maximizando $\mathbf{P}$, ou seja, encontrando os n_k's para o estado mais provável do sistema, e lembrando-se que a energia total E é constante e sujeita ao vínculo $E = \sum_k n_k \epsilon_k$ temos:

$$\delta \left[\ln \mathbf{P} - \beta E \right] = 0 \ , \tag{A.7}$$

sendo β um multiplicador de Lagrange. Lembrando que p_k é constante,

$$\sum_k \left[\ln\Big(1 + \frac{p_k}{n_k}\Big) \delta n_k + n_k \Big(\frac{-p_k}{n_k}\Big) \frac{n_k}{n_k + p_k} \delta n_k + p_k \Big(\frac{1}{p_k}\Big) \frac{p_k}{n_k + p_k} \delta n_k - \beta \epsilon_k \delta n_k \right] = 0 \ , \tag{A.8}$$

desta forma temos que,

$$\sum_k \left[\ln\left(1 + \frac{p_k}{n_k}\right) - \beta\epsilon_k \right] \delta n_k = 0 \ , \tag{A.9}$$

Essa relação é válida para qualquer variação δn_k se

$$\ln\left(1 + \frac{p_k}{n_k}\right) - \beta\epsilon_k = 0 \ , \tag{A.10}$$

ou,

$$\bar{n}_k = \frac{n_k}{p_k} = \frac{1}{e^{\beta\epsilon_k} - 1} \ , \tag{A.11}$$

sendo $\bar{n}_k$ definido como o número de ocupação médio.

Apêndice B

Dedução alternativa das eqs. (4.32a) à (4.32e)

A equação (4.32a) pode ser obtida quando se calcula a taxa de mudança do número de átomos ($N = \pi A^2 a_1 a_2$):

$$\frac{dN}{d\tau} = \frac{d}{d\tau}\int d^2r|u|^2 = \int (u_\tau^* u + u^* u_\tau) d^2r \ . \tag{B.1}$$

Substituindo u_τ, da equação (4.12) (com $\omega = 0$), na equação B.1, obteremos a forma modificada da lei de conservação para o número de átomos:

$$\frac{dN}{d\tau} = 2\alpha_f N - 2\gamma_2 \int [1 + \cos(\kappa x)]|u|^4 d^2r \ . \tag{B.2}$$

Agora, substituindo o "ansatz"(4.27) na equação (B.2), obtemos a primeira equação do sistema (4.32).

Para deduzir as equações (4.32b) à (4.32e) usamos o método dos momentos. A equação (4.32b) pode ser calculada por:

$$\frac{d\langle x^2\rangle}{d\tau} = \int (u_\tau^* x^2 u + u^* x^2 u_\tau) d^2r \ . \tag{B.3}$$

Novamente substituindo u_τ (equação 4.12) e aplicando regras de comutação:

$$\begin{aligned} \frac{d\langle x^2\rangle}{d\tau} &= 4\mathrm{Im}\int u^*(x\hat{x}) \cdot \left(\hat{x}\frac{\partial}{\partial x}u\right) d^2r \\ &+ 2\alpha_f \int |u|^2 x^2 d^2r - 2\gamma_2 \int [1 + \cos(\kappa x)]|u|^4 x^2 d^2r \ . \end{aligned} \tag{B.4}$$

É necessário calcular os dois lados da equação, substituindo o "ansatz"(4.27). O lado esquerdo da equação se torna:

$$\frac{d\langle x^2\rangle}{d\tau} = x_0^2\pi(A^2a_1a_2)_\tau + \frac{\pi}{2}(A^2a_1^3a_2)_\tau \ . \tag{B.5}$$

Calculando também o lado direito e substituindo a equação (4.32a) na anterior, encontramos a equação (4.32b).

De modo análogo a equação (4.32c) pode ser calculada:

$$\frac{d\langle y^2\rangle}{d\tau} = \int (u_\tau^* y^2 u + u^* y^2 u_\tau) d^2r \ , \tag{B.6}$$

$$\begin{aligned}\frac{d\langle y^2\rangle}{d\tau} &= 4\mathrm{Im}\int u^*(y\hat{y})\cdot\left(\hat{y}\frac{\partial}{\partial y}u\right)d^2r \\ &+ 2\alpha_f\int |u|^2y^2d^2r - 2\gamma_2\int [1+\cos(\kappa x)]|u|^4y^2d^2r \ .\end{aligned} \tag{B.7}$$

A equação (4.32d) é a mais complexa de ser calculada, mas pode ser demonstrado que:

$$\begin{aligned}\frac{d\langle p_x^2\rangle}{d\tau} &= 2\mathrm{Im}\int\left(\hat{x}\frac{d}{dx}u^*\right)\cdot\hat{x}\frac{d}{dx}(V_1u)d^2r \\ &+ 2\mathrm{Re}\int\left(\hat{x}\frac{d}{dx}u^*\right)\cdot\hat{x}\frac{d}{dx}(V_2u)d^2r \ .\end{aligned} \tag{B.8}$$

onde $V_1 = -\{\gamma_0 + \gamma_1[1+\cos(\kappa x)]\}|u|^2$ e $V_2 = \alpha_f - \gamma_2[1+\cos(\kappa x)]|u|^2$. Substituindo o "ansatz"(4.27) no lado esquerdo obtemos:

$$\begin{aligned}\frac{d\langle p_x^2\rangle}{d\tau} &= \frac{\pi}{2}\frac{1}{a_1^2}(A^2a_1a_2)_\tau - \frac{\pi}{2}A^2\frac{a_2}{a_1^3}(a_1^2)_\tau \\ &+ 2\pi b_1^2(A^2a_1^3a_2)_\tau + 4\pi(A^2a_1^3a_2)b_1(b_1)_\tau \ .\end{aligned} \tag{B.9}$$

Agora, resolvendo o outro lado e substituindo as equações (4.32a), (4.32b) e (4.34)($i = 1$) obtemos a equação (4.32d).

A última equação, (4.32e), é obtida com o mesmo procedimento:

$$
\begin{aligned}
\frac{d\langle p_y^2\rangle}{d\tau} &= 2\mathrm{Im}\int\left(\hat{y}\frac{d}{dy}u^*\right)\cdot\hat{y}\frac{d}{dy}(V_1u)d^2r \\
&+ 2\mathrm{Re}\int\left(\hat{y}\frac{d}{dy}u^*\right)\cdot\hat{y}\frac{d}{dy}(V_2u)d^2r\ . \qquad \text{(B.10)}
\end{aligned}
$$

Com seu lado esquerdo sendo:

$$
\begin{aligned}
\frac{d\langle p_y^2\rangle}{d\tau} &= \frac{\pi}{2}\frac{1}{a_2^2}(A^2a_1a_2)_\tau - \frac{\pi}{2}A^2\frac{a_1}{a_2^3}(a_2^2)_\tau \\
&+ 2\pi b_2^2(A^2a_1a_2^3) + 4\pi(A^2a_1a_2^3)b_2b_{2\tau}\ . \qquad \text{(B.11)}
\end{aligned}
$$

Substituindo as equações (4.32a), (4.32c) e (4.34)($i = 2$), finalmente obtemos a equação (4.32e).

Uma descrição deste procedimento para uma equação de Gross-Pitaevskii (3D) com um potencial diferente pode ser encontrado na referência [46].

Referências Bibliográficas

[1] Abdullaev, F. Kh., Gammal, A., da Luz, H. L. F. e Tomio, L., *Dissipative dynamics of matter-wave solitons in a nonlinear optical lattice*, Phys. Rev. A **76**, 043611 (2007).

[2] Abdullaev, F. Kh. e Garnier, J., *Propagation of matter-wave solitons in periodic and random nonlinear potentials*, Phys. Rev. A **72**, 061605(R) (2005).

[3] Sakaguchi, H. e Malomed, B. A., *Matter-wave solitons in nonlinear optical lattices*, Phys. Rev. E **72**, 046610 (2005);
Two-dimensional solitons in the Gross-Pitaevskii equation with spatially modulated nonlinearity, Phys. Rev. E **73**, 026601 (2006).

[4] Abdullaev, F. Kh., Gammal, A., Kamchatnov, A. M. e Tomio, L., *Dynamics of bright matter wave solitons in a Bose-Einstein Condensate*, Int. J. of Mod. Phys. B **19**(22), 3415 (2005).

[5] Morsch, O. e Oberthaler, M., *Dynamics of Bose-Einstein condensates in optical lattices*, Rev. Mod. Phys. **78**, 179 (2006).

[6] Brazhnyi, V. A. e Konotop, V. V., *Theory of nonlinear matter waves in optical lattices*, Mod. Phys. Lett. B **18**(14), 627 (2004);
arXiv: cond-mat/0405334.

[7] Abdullaev, F. Kh., Baizakov, B. B., Darmanyan, S. A., Konotop, V. V. e Salerno, M., *Nonlinear excitations in arrays of Bose-Einstein condensates*, Phys. Rev. A **64**, 043606 (2001).

[8] Eiermann, B. *et al.*, *Bright Bose-Einstein Gap Solitons of Atoms with Repulsive Interaction*, Phys. Rev. Lett. **92**, 230401 (2004).

[9] Anderson, B. P. e Kasevich, M. A., *Macroscopic Quantum Interference from Atomic Tunnel Arrays*, Science **282**, 1686 (1998).

[10] Greiner, M. *et al.*, *Quantum phase transition from a superfluid to a Mott insulator in a gas of ultracold atoms*, Nature **415**, 39 (2002).

[11] Abdullaev, F. Kh., Gammal, A., e Tomio, L., *Dynamics of bright matter-wave solitons in a Bose-Einstein condensate with inhomogeneous scattering length*, J. Phys. B **37**, 635 (2004).

[12] Theis, M. *et al.*, *Tuning the Scattering Length with an Optically Induced Feshbach Resonance*, Phys. Rev. Lett. **93**, 123001 (2004).

[13] Courteille, Ph. W., Bagnato, V. S., Yukalov, V. I., *Bose-Einsein Condensation of Trapped Atomic Gases*, Laser Phys. **11**(6), 659 (2001).
arXiv: cond-mat/0109421.

[14] Gabitov, I. R. e Turitsyn, S. K., *Averaged pulse dynamics in a cascaded transmission system with passive dispersion compensation*, Opt. Lett. **21**(5), 327 (1996).

[15] Xu, Z. Y., Kartashov, Y. V. e Torner, L., *Soliton Mobility in Nonlocal Optical Lattices*, Phys. Rev. Lett. **95**, 113901 (2005).

[16] Abdullaev, F. Kh., Kamchatnov, A. M., Konotop, V. V. e Brazhnyi, V., *Adiabatic Dynamics of Periodic Waves in Bose-Einstein Condensates with Time Dependent Atomic Scattering Length*, Phys. Rev. Lett. **90**, 230402 (2003).

[17] Centurion, M., Porter, M. A., Kevrekidis, P. G. e Psaltis, D., *Nonlinearity Management in Optics: Experiment, Theory, and Simulation*, Phys. Rev. Lett. **97**, 033903 (2006).

[18] Bose, S. N., Zeitschrift für Physik **26**, 178 (1924).
Traduzido para o português por Caruso, F. e Oguri, V. em Rev. Bras. Ens. Fis. **27**(3), 463 (2005).

[19] Einstein, A., Sitzungsberichte der Preussischen Akademie der Wissenschaften **I**, 261 (1924); **I**, 3 (1925).
Traduzido para o português por Dahmen, S. R. em Rev. Bras. Ens. Fis. **27**(1), 113 (2005).

[20] Piza, A. F. R. de Toledo, *Condensados Atômicos de Bose-Einstein*, acessado em 19/02/2008, http://fma.if.usp.br/∼piza/notas_de_aula.html.

[21] Anderson, M. H., Ensher, J. R., Matthews, M. R., Wieman, C. E. e Cornell, E. A., *Observation of Bose-Einstein Condensation in a Dilute Atomic Vapor*, Science **269**, 198 (1995).

[22] Bradley, C. C., Sackett, C. A., Tollet, J. J. e Hulet, R. G., *Evidence of Bose-Einstein Condensation in an Atomic Gas with Attractive Interactions*, Phys. Rev. Lett. **75**, 1687 (1995).

[23] Davis, K.B., Mewes, M. O., Andrews, M. R., van Druten, N. J., Durfee, D. S., Kurn, D. M. e Ketterle, W., *Bose-Einstein Condensation in a Gas of Sodium Atoms*, Phys. Rev. Lett. **75**, 3969 (1995).

[24] Pitaevskii, L. e Stringari, S., *Bose-Einstein Condensation*, 1st ed., Oxford University Press, New York, 2003.

[25] Gross, E. P., *Structure of a Quantized Vortex in Boson Systems*, Il Nuovo Cim. **20**(3), 454 (1961).
Pitaevskii, L. P., *Vortex lines in an imperfect Bose gas*, Sov. Phys. JETP **13**, 451 (1961).

[26] Drazin, P. G. e Johnson, R. S., *Solitons: an introduction*. 1st ed., Cambridge University Press, Cambridge, 1996.

[27] Bloch, F., *Über die Quantenmechanik der Elektronen in Kristallgittern*, Z. Phys. **52**, 555 (1929).

[28] Kolovsky, A. R. e Ponomarev, A. V., *Damped Bloch oscillations of cold atoms in optical lattices*, Phys. Rev. A **66**, 053405 (2002).

[29] Bloch, I., *Exploring quantum matter with ultracold atoms in optical lattices*, J. Phys. B **38**(9), s629 (2005).

[30] Friedrich, H., *Theoretical Atomic Physics*, 2nd ed., Springer Press, New York, 1998.

[31] Braaten, E. e Hammer, H. W., *Universality in few-body systems with large scattering lenght*, Phys. Rep. **428**, 259 (2006).

[32] Quinney, D., *An Introduction to the Numerical Solution of Differential Equations*. Revised ed., Research Studies Press, England, 1987.

[33] Sakurai, J. J., *Modern Quantum Mechanics*. 2nd ed., Addison Wesley, 1994.

[34] Piza, A. F. R. de Toledo, *Mecânica Quântica*. 1st ed., edusp, São Paulo, 2002.

[35] DuChateau, P. e Zachmann, D. *Applied Partial Differential Equations*. Dover ed., Dover Publications, Inc., New York, 2002. (Republicação da 1st ed., Harper and Row, Inc., New York, 1986.)

[36] Press, W. H., Teukolsky, S. A., William, T. V. e Flannery, B. P., *Numerical Recipes in FORTRAN: The Art of Science Computing*. 2nd ed., Cambridge University Press, Cambridge, 1992.

[37] Suzuki, Y. e Varga, K., *Stochastic Variational Approach to Quantum-Mechanical Few-Body Problems*. 1st ed., Springer Press, Cambridge, 1996.

[38] Brtka, M., Gammal, A. e Tomio, L., *Relaxation algorithm to hyperbolic states in Gross-Pitaevskii equation*, Phys. Lett. A **359**, 339 (2006).

[39] Merzbacher, E., *Quantum Mechanics*, 2nd ed., John Wiley & Sons, Inc., New York, 1970.

[40] Burden, R. L. e Faires, J. D., *Numerical Analysis*, 8th ed., Thomson Brooks/Cole, Belmont, 2005.

[41] Fibich, G., *Self-Focusing in the Damped Nonlinear Schrödinger Equation*, SIAM J. Appl. Math. **61**, 1680 (2001).

[42] Fibich, G., Sivan, Y. e Weinstein, M. I., *Bound states of nonlinear Schrödinger equations with a periodic nonlinear microstructure*, Physica D **217**, 31 (2006);
Waves in Nonlinear Lattices: Ultrashort Optical Pulses and Bose-Einstein Condensates, Phys. Rev. Lett. **97**, 193902 (2006).

[43] Fedichev, P. O., Kagan, Y., Shlyapnikov, G. V. e Walraven, J. T. M., *Influence of Nearly Resonant Light on the Scattering Length in Low-Temperature Atomic Gases*, Phys. Rev. Lett. **77**, 2913 (1996).

[44] Abdullaev, F. Kh. e Salerno, M., *Adiabatic compression of soliton matter waves*, J. Phys. B **36**, 2851 (2003).

[45] Drummond P. D. e Kheruntsyan, K. V., *Asymptotic solutions to the Gross-Pitaevskii gain equation: Growth of a Bose-Einstein condensate*, Phys. Rev. A **63**, 013605 (2001).

[46] Filho, V. S., *Dinâmica Não-Linear em Sistemas Bosônicos com Interação Atrativa de Dois Corpos*. Tese (Doutorado), IFT-UNESP, São Paulo, 2001.

[47] Vakhitov, N. G. e Kolokolov, A. A., *Stationary solutions of the wave equation in a medium with nonlinearity saturation*, Radiophys. Quantum Electron. **16**, 783 (1973).

[48] Abdullaev, F. Kh. e Salerno, M., *Gap-Townes solitons and localized excitations in low-dimensional Bose-Einstein condensates in optical lattices*, Phys. Rev. A **72**, 033617 (2005).

[49] Saito, H. e Ueda, M., *Intermittent Implosion and Pattern Formation of Trapped Bose-Einstein Condensates with an Attractive Interaction* , Phys. Rev. Lett. **86**, 1406 (2001).

[50] Callen, H. B., *Thermodynamics and an Introduction to Thermostatistic*. 2nd ed., John Wiley and Sons, New York, 1985.