Universidade de São Paulo
Instituto de Física

Estabilidade de vórtices em condensados de Bose-Einstein

Henrique Fabrelli Ferreira

Orientador: Prof. Dr. Arnaldo Gammal

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

Banca examinadora

Prof. Dr. Arnaldo Gammal (IFUSP)
Prof. Dr. Emanuel Alves de Lima Henn (IFSC/USP)
Prof. Dr. Valery Shchesnovich (UFABC)

São Paulo
2016

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

Ferreira, Henrique Fabrelli

Estabilidade de vórtices em condensados de Bose-Einstein.
São Paulo, 2016.

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

Orientador: Prof. Dr. Arnaldo Gammal.

Área de Concentração: Física.

Unitermos: 1. Condensado de Bose-Einstein; 2. Vórtices dos gases;
3. Métodos numéricos.

USP/IF/SBI-024/2016

University of São Paulo
Physics Institute

Stability of vortices in Bose-Einstein condensates

Henrique Fabrelli Ferreira

Supervisor: Prof. Dr. Arnaldo Gammal

Dissertation submitted to the Physics Institute
of University of São Paulo to obtain
the degree of Master in Science.

Examining Board

Prof. Dr. Arnaldo Gammal (IFUSP)

Prof. Dr. Emanuel Alves de Lima Henn (IFSC/USP)

Prof. Dr. Valery Shchesnovich (UFABC)

São Paulo
2016

“Esse trabalho contém muitas coisas novas e interessantes. Infelizmente, as coisas novas não são interessantes e as coisas interessantes não são novas”.

Lev D. Landau

Agradecimentos

O mais justo a se fazer aqui seria agradecer a todos os fatos e pessoas que, de maneira direta ou indireta, contribuíram para este trabalho. Infelizmente serei pragmático e talvez injusto nos agradecimentos, pois devo respeitar o espaço. Devo, portanto, limitar-me aos fatos e pessoas que diretamente contribuíram para este trabalho. A todos os outros, resumidamente, manifesto minha mais profunda gratidão.

Primeiramente agradeço ao meu orientador, professor Arnaldo Gammal, por toda a atenção, paciência, compreensão e ensinamentos passados. Eu não tenho palavras para expressar minha gratidão por sua generosidade em me acolher em seu grupo. Durante o árduo caminho da graduação foram os trabalhos de Iniciação Científica e seus conselhos sempre bem-vindos que me motivaram a seguir em frente e não me abater perante aos desafios.

À minha família, em especial minha mãe, Leda Salette Fabrelli, por todo amor, auxílio e paciência ao longo de todos esses anos. A todos os tios e inúmeros primos por todas as alegrias e pelo companheirismo, tanto nos bons quanto nos maus momentos.

Ao meu velho amigo Dr. José Norberto Ramos Leite pela significativa influência exercida para que eu firmasse minha opção em cursar Física e também pelas animadas e proveitosas conversas sobre Física, Epistemologia, Psiquiatria, Neurociência, História, etc.

Aos meus amigos do grupo, Eduardo George Khamis, Karine Piacentini Coelho da Costa, Kishor Kumar Ramavarmaraja e Robinson Junior Pinho Pompeu, por toda ajuda e inúmeros ensinamentos passados. A todos os demais amigos do IFUSP, dos quais não citarei nomes para evitar a injustiça de esquecer algum.

Aos professores Antônio Fernando Ribeiro de Toledo Piza e Emerson José Veloso de Passos pelas semanais discussões em nosso Journal Club, a partir das quais venho obtendo boa parte do meu conhecimento em condensados de Bose-Einstein. Sinto-me muito honrado por ter a oportunidade de receber tais ensinamentos desses professores.

Aos professores Boris A. Malomed e Radha Ramaswamy, e à J. B. Sudharsan pela colaboração no trabalho de estabilização de vórtices em condensados de Bose-Einstein atrativos.

A todos os funcionários da Comissão de Pós-Graduação por todo o auxílio e eficiência em seus serviços e no esclarecimento de dúvidas. Ao técnico Sergio Korogui por cuidar da “saúde” de nossos computadores.

À Edi, secretária do departamento de Física Experimental, por toda a ajuda e persistência com os problemas burocráticos da minha visita à *Newcastle University*.

Aos demais funcionários do IFUSP, especialmente à Simone e à Silvia, proprietárias da cantina, por toda a alegria e pelos deliciosos doces, salgados e bolachas, que me mantiveram bem alimentado para a realização deste trabalho.

Ao professor Nikolaos P. Proukakis por me receber em seu grupo na *Newcastle University*, pelos ensinamentos passados, sugestões a esse trabalho e pela oportunidade de iniciar uma colaboração. À Fabrizio Larcher e Paolo Comaron pela amizade e auxílio durante minha estada em Newcastle. *Grazie per tutto!*

Por último, mas não menos importante, agradeço à Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) e ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) pelo auxílio financeiro.

Resumo

Neste trabalho de mestrado é estudada a estabilidade de vórtices em condensados de Bose-Einstein com interação atrativa entre os átomos através da solução numérica da equação de Gross-Pitaevskii. Inicialmente são reproduzidos resultados da literatura, nos quais são estudados vórtices em condensados bidimensionais atrativos com potencial interatômico homogêneo em todo o condensado. A estabilidade de tais sistemas é inferida através da solução numérica das equações de Bogoliubov-de Gennes e da evolução temporal dos vórtices. Demonstra-se que esses vórtices são estáveis, até um certo número crítico de átomos, apenas para valores de vorticidade $S = 1$. Em seguida, foi proposto um modelo no qual o potencial de interação entre os átomos é espacialmente modulado. Neste caso, é possível demonstrar que vórtices com valores de vorticidade de, pelo menos, $S = 6$ são estáveis. Finalmente, é estudada a estabilidade de vórtices em condensados tridimensionais atrativos, novamente com potencial interatômico homogêneo em todo o condensado. Assim como no caso bidimensional, observa-se que tais vórtices são estáveis para valores de vorticidade de $S = 1$. Espera-se em breve estudar a estabilidade de vórtices em condensados tridimensionais com potencial de interação espacialmente modulado.

Palavras chave: Condensados de Bose-Einstein, vórtices, estabilidade.

Abstract

In this work we study the stability of vortices in attractive Bose-Einstein condensates by solving numerically the Gross-Pitaevskii equation. Initially we reproduce some results from the literature, in which vortices in two-dimensional attractive Bose-Einstein condensates with homogeneous interatomic potential are studied. The stability of these systems is determined by solving numerically the Bogoliubov-de Gennes equations and by studying the time evolution of these vortices. We demonstrate that these vortices are stable, up to a certain critical number of atoms, just for the value of vorticity $S = 1$. After, we propose a model in which the interatomic potential is spatially modulated. In this case, it is possible to verify that vortices with values of vorticity, at least, $S = 6$ are stable. Finally, we study the stability of vortices in three-dimensional attractive condensates, again with a homogeneous interatomic potential. As in the two-dimensional case, we show that vortices in these systems are stable to values of vorticity $S = 1$. The next step in this work is study the stability of vortices in three-dimensional condensates with spatially modulated interatomic potential.

Keywords: Bose-Einstein condensates, vortices, stability.

Sumário

1	Introdução	1
1.1	Uma breve história da condensação de Bose-Einstein	1
1.2	Vórtices em condensados de Bose-Einstein	4
1.3	Sobre este trabalho	5
2	Condensados de Bose-Einstein	7
2.1	Equação de Gross-Pitaevskii	7
2.2	Sólitons	11
2.3	Vórtices	13
2.3.1	Definições	13
2.3.2	Vórtices em condensados de Bose-Einstein	13
2.4	Pequenas oscilações em um condensado	15
2.5	Comprimento de espalhamento	17
2.6	Ressonância de Feshbach	17
3	Métodos numéricos	21
3.1	<i>Split-Step</i>	21
3.2	Algoritmo de relaxação	23
3.3	Métodos de Crank-Nicolson e D'yakonov	24
3.4	Discretização das equações Bogoliubov de-Gennes	28
4	Resultados	31
4.1	Vórtices em condensados atrativos bidimensionais - g constante	31
4.1.1	Potencial químico e energia	31
4.1.2	Estabilidade	33
4.1.3	Evolução temporal dos vórtices	34
4.2	Vórtices em condensados atrativos bidimensionais - g espacialmente modulado	36
4.2.1	Potencial químico e energia	36
4.2.2	Estabilidade	39
4.2.3	Evolução temporal dos vórtices	40
4.3	Vórtices em condensados atrativos tridimensionais - g constante	42
4.3.1	Potencial químico e energia	42
4.3.2	Estabilidade	46

5	Conclusões e perspectivas	49
5.1	Perspectivas	50
A	Reescalonamento da equação de Gross-Pitaevskii e ordens de grandeza	51
A.1	Reescalonamento	51
A.2	Ordens de grandeza	52
B	Limite assintótico da equação de Gross-Pitaevskii	55
C	Método variacional	59
C.1	Cálculos variacionais para vórtices bidimensionais	59
C.2	Cálculos variacionais para vórtices tridimensionais	61
C.3	Método numérico para solução de sistemas de equações não-lineares	63

Capítulo 1

Introdução

1.1 Uma breve história da condensação de Bose-Einstein

No ano de 2015 foram comemorados os aniversários de 90 anos do início da formulação teórica e de 20 anos das primeiras realizações experimentais de uma das mais ativas e promissoras áreas de pesquisa da Física na atualidade: a condensação de Bose-Einstein.

A concepção desta área se dá em meados de 1924, quando o físico indiano Satyendra Nath Bose apresenta uma derivação alternativa à estatística de fótons e à fórmula de radiação de corpo negro, primeiramente deduzida pelo físico alemão Max Planck. Sendo seu trabalho rejeitado para a publicação na *Philosophical Magazine*, Bose recorre ao físico alemão Albert Einstein para que este interceda na publicação no periódico *Zeitschrift für Physik*. Reconhecendo a importância do trabalho, Einstein atende ao pedido de Bose e acrescenta nas considerações finais que “a dedução de Bose para a fórmula de Planck representa um importante avanço. O método aqui utilizado produz também uma teoria quântica do gás ideal, como discutirei mais detalhadamente em outro artigo” [1,2].

Em 1925, Einstein escreve uma série de três artigos no qual faz uso das técnicas apresentadas por Bose para o tratamento estatístico-quântico de gases ideais. Em seus trabalhos, Einstein utiliza a ideia de *ondas de matéria*, introduzidas pelo físico francês Louis de Broglie, argumentando que, tendo os constituintes do gás comportamento ondulatório tal como os fótons, aos mesmos se aplica a estatística de Bose. Curiosamente, o físico austríaco Erwin Schrödinger toma conhecimento das ideias de de Broglie, cruciais na sua formulação da equação que leva seu nome, através dessa série de artigos de Einstein [3].

No segundo trabalho da série, Einstein demonstra que o aumento da densidade, à temperatura constante, em um gás sujeito à estatística de Bose ocasiona uma tendência em seus constituintes de ocupar o estado quântico fundamental. Esta, em suas palavras, corresponde à uma fração *condensada* do gás, enquanto os outros constituintes que estão distribuídos em outros níveis de energia correspondem à uma fração *saturada* do gás [2]. Portanto, desse trabalho surge o conceito da *Condensação de Bose-Einstein*.

Ainda em seu segundo tratado, Einstein demonstrou que no limite termodinâmico, isto é, para o número de constituintes e volume do sistema tendendo ao infinito, mantendo-se a densidade constante, o calor específico em um gás de bósons apresenta uma descontinuidade na temperatura crítica, o que caracteriza uma transição de fase de segunda ordem. Entretanto o físico holandês George Eugene Uhlenbeck contestou tal resultado, argumentando que o mesmo não seria válido para sistemas finitos. Transições de fase de segunda ordem ainda não eram bem compreendidas e, aparentemente, até mesmo Einstein aceitou os argumentos de Uhlenbeck [3]. Embora tenha sido a origem do ceticismo da teoria,

o comportamento do calor específico de um gás de bósons inspirou o físico alemão Fritz London a desenvolver uma teoria sobre a superfluidez do ^4He em 1938.

O ^4He foi liquefeito pela primeira vez pelo físico holandês Heike Kamerlingh Onnes em 1908 [4]. Em 1911, Onnes e seus colaboradores descobriram o fenômeno da supercondutividade no mercúrio [5] e também observaram que a densidade do hélio líquido atingia um valor máximo em uma temperatura um pouco acima de 2K [6].

Em 1924 Onnes observou o aumento abrupto do calor específico do hélio líquido em torno da temperatura de 2.17K. Esta medida foi confirmada, em 1930, pelo físico holandês William Hendrik Keeson, que observou uma descontinuidade na curva do calor específico na temperatura de 2.17K. Keeson sugeriu que tal descontinuidade corresponderia a existência de um ponto triplo no hélio, isto é, a coexistência das fases sólida, líquida e gasosa a esta temperatura. Esta hipótese, no entanto, não foi confirmada quando o físico holandês Krijn Wrbren Taconis, em 1932, submeteu o hélio líquido abaixo de 2.17K a raios X com o objetivo de observar estruturas cristalinas. Não sendo observadas tais estruturas, Keeson propôs como alternativa a coexistência de duas fases líquidas no hélio, sendo as mesmas denominadas He I e He II [7].

Nota-se que a curva do calor específico do hélio líquido assemelha-se a letra grega *lambda* (λ). Por este motivo, o físico austríaco Paul Ehrenfest, em um trabalho de 1933 [8], nomeou a transição entre as fases He I e He II de *ponto- λ* .

Em 1936 e 1937 o físico soviético Lev Davidovich Landau apresentou suas ideias acerca da transição de fase do hélio líquido [9–11]. Em seus trabalhos, Landau argumenta que a transição de fase do ponto- λ é uma transição de fase de segunda ordem, onde o estado entre as fases é o mesmo e suas temperaturas são diferentes [7].

No ano de 1938 os físicos canadenses John Frank Allen e Don Misener e, independentemente, o físico soviético Pyotr Leonidovich Kapitza publicaram na mesma edição da revista *Nature* [12,13] seus resultados experimentais sobre a viscosidade do He II. Segundo os autores, a viscosidade do He II é da ordem de $10^{-9}P$, em contraste com o hidrogênio no estado gasoso que, na época, era o fluido com menor valor de viscosidade conhecido, da ordem de $10^{-5}P$. Em analogia com as correntes em um supercondutor, Kapitza nomeia o fenômeno da baixa viscosidade do He II de *superfluidez*.

Ainda em 1938, London, tendo conhecimento dos resultados de diversos experimentos realizados com o hélio líquido, em especial os resultados que demonstravam um pico na curva do calor específico, propôs a existência de uma conexão entre o comportamento do He II e o fenômeno da condensação de Bose-Einstein. Em seus cálculos, London demonstrou que a expressão para a temperatura crítica de um gás de Bose ideal fornece uma boa estimativa para a temperatura de ponto- λ ($T_0 = 3.09K$) [14–16].

London expôs suas ideias ao físico húngaro László Tisza, o que inspirou o mesmo na criação de um modelo de dois fluidos para explicar o comportamento do hélio líquido considerando as fases normal (He I) e superfluida (He II), e supondo que a fase He II é descrita pela estatística de um gás de Bose ideal. Tisza ainda previu a existência de oscilações de temperatura em um superfluido, sendo posteriormente denominadas por Landau de *segundo som* [3, 17, 18].

Em um artigo de 1941 [19], Landau critica o tratamento de Tisza ao problema alegando que, devido as interações entre os átomos de hélio, a estatística de Bose-Einstein de um gás ideal não deve ser aplicada. Além disso, no modelo de Tisza os átomos na fase He I se movem sem fricção. Com isso, o modelo de dois fluidos proposto por Landau considera a interação entre os átomos e trata o problema introduzindo operadores de momento e densidade.

Ainda nesse trabalho, Landau desenvolve uma descrição quantitativa do espectro de energia do He II (mais detalhada em um trabalho posterior de 1947 [20]), na qual propõe que as excitações elementares de baixa energia do fluido são fônons. Para energias maiores, o espectro, até então linear devido a relação de dispersão dos fônons, exibe um mínimo ao qual Landau atribui a outro tipo de excitação elementar, denominada *róton*. Tal excitação elementar foi erroneamente associada a existência de vórtices no hélio líquido. O conceito de segundo som, anteriormente descrito por Tisza, também é abordado no trabalho de Landau.

Entre as décadas de 1940 e 1950, Landau e o físico soviético Isaak Markovich Khalatnikov deram segmento ao desenvolvimento da teoria da superfluidez. Ainda atualmente [3] a teoria de Landau-Khalatnikov é comumente usada para descrever a superfluidez [21,22].

Embora a teoria de Landau-Khalatnikov tenha seu sucesso, a mesma não era capaz de descrever o fenômeno da turbulência e formação de vórtices no He II, observados por Kapitza em 1941 [23], uma vez que a teoria prediz que superfluidos são irrotacionais. Devido à aparente inconsistência no modelo, o químico norueguês Lars Onsager propôs, em 1949, que as linhas de vórtices em um superfluido são quantizadas em unidades de $\hbar/m$ [7,24].

Em 1947, o físico soviético Nikolai Nikolaievich Bogoliubov apresenta um novo modelo que descreve um gás de bósons fracamente interagentes [25], do qual se obtém uma expressão da relação de dispersão para excitações elementares [26]. Entretanto, tal teoria não conquistou reconhecimento imediato, uma vez que se utiliza do formalismo de segunda quantização, pouco familiar entre os físicos da matéria condensada da época. Apenas em 1957, com o desenvolvimento da teoria BCS da supercondutividade [27], a qual também se utiliza do formalismo da segunda quantização e apresenta analogias com o tratamento de Bogoliubov, seu trabalho começou a alcançar popularidade [3].

Entre os anos de 1953 e 1958, o físico norte-americano Richard Phillips Feynman desenvolve uma série de trabalhos sobre o hélio líquido [28], nos quais considera a existência de linhas de vórtices quantizadas no He II, tal como sugerido por Onsager. Vale ressaltar que linhas de vórtice semelhantes as identificadas no He II também são observadas nos chamados supercondutores de tipo-II [29].

No ano de 1956, Onsager e o físico inglês Oliver Penrose apresentam um artigo onde propõem um critério para a ocorrência da condensação de Bose-Einstein. Segundo esse critério, a condensação de Bose-Einstein ocorre em um sistema se o maior autovalor de sua matriz densidade for da ordem de seu número de constituintes [30]. Nesse trabalho argumentam que a condensação não deve ser esperada em um sólido, mesmo em $T = 0K$. Entretanto, demonstram através de um cálculo simples de um gás de esferas duras que, em temperatura nula, a fração de átomos condensados no hélio líquido é de cerca de 8% [31]. Atualmente a maioria dos cálculos à temperatura e pressão nulas predizem um valor de cerca de 10% para a fração condensada no hélio líquido [26].

No final da década de 1950 a meados da década de 1960 outros trabalhos a respeito da existência e natureza de vórtices no hélio ou, de maneira mais geral, em gases de Bose não-ideais foram publicados, em especial, pelos físicos soviéticos Vitaly Lazarevich Ginzburg e Lev Petrovich Pitaevskii, e pelo físico norte-americano Eugene Gross.

Em 1961 Gross e Pitaevskii apresentam, independentemente, em seus estudos de vórtices em hélio líquido, uma equação derivada de um formalismo de campo médio que descreve um gás fracamente interagente à temperatura nula [32,33]. Essa equação, hoje conhecida com *equação de Gross-Pitaevskii* [26], é uma das principais ferramentas teóricas em uso na atualidade na descrição de condensados de Bose-Einstein, uma vez que apresenta boa

concordância com resultados experimentais de gases confinados em armadilhas ópticas.

A equação de Gross-Pitaevskii é uma equação de Schrödinger não-linear com um termo cúbico, possuindo análogos em óptica não-linear [34] e em supercondutores, no contexto da equação de Ginzburg-Landau [29].

Embora após a formulação da equação de Gross-Pitaevskii os estudos acerca das propriedades do hélio líquido e de gases bosônicos tenham seguido, poucos trabalhos teóricos alcançaram reconhecimento a nível de seus antecessores.

A partir da década de 1980 surgiram os principais avanços experimentais [35–41] que possibilitaram a realização de condensados atômicos de Bose-Einstein em gases atômicos diluídos através do resfriamento de átomos neutros.

Em tais técnicas, a velocidade dos átomos em um gás é reduzida pela interação com fótons provenientes de lasers. Além disso, são utilizados campos magnéticos e outros arranjos de lasers para confinar, comprimir e evaporar gases atômicos. A discussão de técnicas de resfriamento de gases atômicos foge ao escopo deste trabalho. Entretanto a descrição detalhada de tais técnicas pode ser encontrada nas referências [42, 43].

Os primeiros condensados de Bose-Einstein em gases atômicos diluídos foram realizados em 1995 pelos grupos do *Joint Institute for Laboratory Astrophysics* (JILA), liderado pelos físicos norte-americanos Eric Allin Cornell e Carl Wieman, e independentemente, pelo grupo do *Massachusetts Institute of Technology* (MIT), liderado pelo físico alemão Wolfgang Ketterle.

O condensado produzido pelo JILA era constituído de um gás de ^{87}Rb com densidade de, aproximadamente, 2.5×10^{12} átomos/ cm^3 e resfriado a temperatura de 170 nK [44]. O grupo do MIT produziu um condensado com ^{23}Na cuja densidade era da ordem de 10^{14} átomos/ cm^3 , na temperatura de $2 \mu\text{K}$ [45]. Por esses trabalhos Cornell, Ketterle e Wieman foram os vencedores do Prêmio Nobel de 2001. Desde então, a condensação de Bose-Einstein vem sendo realizada utilizando gases diluídos de diferentes espécies [46–49] e enúmeros são os esforços teóricos e experimentais para elucidar seus fenômenos peculiares e surpreendentes.

1.2 Vórtices em condensados de Bose-Einstein

A formação de vórtices em condensados foi demonstrada pela primeira vez em 1999 por Matthews *et al.* [50] em um gás formado por duas misturas hiperfinas de ^{87}Rb , onde observou-se a formação de apenas um vórtice nos experimentos.

No ano seguinte, Madison *et al.* [51] relataram a observação de vórtices em um condensado de ^{87}Rb , desta vez constituído de apenas uma componente. Neste experimento, foram produzidos condensados em rotação através da utilização de uma armadilha assimétrica e da aplicação de um laser externo para produzir uma agitação no condensado (do inglês *laser stirring*) [52]. Observou-se que o aumento da frequência de rotação do condensado está relacionado com a criação de um ou mais vórtices. O arranjo de tais vórtices no condensado é semelhante àquele observado no ^4He superfluido em rotação [53].

Posteriormente, Abo-Shaeer *et al.* [54] observaram a formação de redes triangulares de vórtices em condensados, semelhantes às redes formadas pelo fluxo de supercorrentes em um supercondutor de tipo-II (conhecidas na literatura como *redes de Abrikosov*) [55]. Ainda no contexto de redes triangulares de vórtices Coddington *et al.* [56] observaram oscilações de tais redes, também conhecidas como *oscilações de Tkachenko*, as quais foram primeiramente discutidas no contexto de fluidos incompressíveis irrotacionais [57, 58].

Atualmente uma intensa atividade teórica e experimental é realizada envolvendo vórtices em condensados com uma ou mais componentes e seus modos de oscilação coletiva. Uma boa revisão pode ser encontrada em [59]. Vórtices também têm se mostrado ingrediente essencial no estudo de turbulência quântica [60].

Foi demonstrado teoricamente que em sistemas com interação atrativa os vórtices podem se tornar instáveis para um número suficientemente grande de átomos. Essa instabilidade produz um *modo de respiro* (*breathing mode*) com a quebra do vórtice em duas partes e reconexão sucessiva [61]. Em um trabalho posterior, mostrou-se que a origem da instabilidade era o aparecimento de um modo de Bogoliubov instável com momento angular $L = 2$ [62]. No nosso grupo também foram estudados sistemas de vórtices contragirantes em duas espécies interagentes [63]. Neste último trabalho foi possível construir um diagrama de instabilidade onde ficou evidenciado que modos com momento angular $L = 1, 2, 3$ ou 4 dominante correspondiam a instabilidade com quebra em uma, duas, três ou quatro partes, respectivamente.

1.3 Sobre este trabalho

O objetivo inicial deste trabalho foi o estudo da estabilidade de vórtices em condensados bidimensionais com interação atrativa entre os átomos, reproduzindo os resultados da referência [62]. Para isso foram estudadas numericamente as soluções da equação de Gross-Pitaevskii para um condensado em confinamento harmônico, sendo a interação atrativa constante ao longo do condensado. A estabilidade desse sistema foi determinada a partir da solução das equações de Bogoliubov-de Gennes e pela análise da evolução temporal dos vórtices. Tais resultados demonstram que vórtices em condensados atrativos são estáveis para um certo número de átomos no sistema apenas se o valor de sua vorticidade, também conhecida na literatura como *carga*, for igual a um ($S = 1$). Nesses sistemas demonstra-se que vórtices com $S > 1$ são instáveis para qualquer número de átomos.

Em seguida, foi proposto um modelo no qual a interação entre os átomos é também atrativa, porém espacialmente modulada em um formato gaussiano sendo, portanto, mais intensa no centro do vórtice e menor em sua borda. Com isso, foi possível demonstrar que tais condensados são estáveis em duas dimensões para $S = 6$, no mínimo. Esses resultados nunca foram observados experimentalmente ou preditos teoricamente, de modo que os mesmos foram recentemente publicados no periódico *Physical Review A* [64].

Por último, estudou-se a estabilidade de vórtices em condensados tridimensionais com interação atrativa e homogênea, reproduzindo os resultados da referência [65]. Da mesma forma que nas etapas anteriores desse trabalho, foram encontradas as soluções da equação de Gross-Pitaevskii e a estabilidade do sistema foi estudada através das equações de Bogoliubov-de Gennes. No entanto, a análise da evolução temporal dos vórtices em três dimensões está em andamento.

Este trabalho é dividido como se segue. No Capítulo 2 é apresentada a derivação da equação de Gross-Pitaevskii e suas soluções do tipo sóliton e vórtice são discutidas. Outro tópico do capítulo diz respeito às pequenas oscilações em um condensado, que têm papel fundamental no estudo da estabilidade e são descritas pelas equações de Bogoliubov-de Gennes. Finalmente, é feita uma breve discussão sobre o comprimento de espalhamento entre os átomos e ressonância de Feshbach.

No Capítulo 3 são apresentados os métodos numéricos empregados na solução da equação de Gross-Pitaevskii e a discretização das equações de Bogoliubov-de Gennes.

Os resultados do trabalho são discutidos no Capítulo 4. Inicialmente são exibidos os resultados de potencial químico e energia do condensado em função do número de átomos para um condensado bidimensional com interação atrativa e homogênea entre os átomos. A estabilidade do condensado é discutida através da análise dos autovalores das equações de Bogoliubov-de Gennes e comparada com os resultados provenientes da evolução temporal dos vórtices. Em seguida a mesma análise é feita para condensados bidimensionais com interação atômica espacialmente modulada. No caso tridimensional, novamente com interação atrativa e homogênea entre os átomos, são apresentados os resultados de potencial químico e energia do condensado em função do número de átomos e a análise dos autovalores das equações de Bogoliubov-de Gennes.

A conclusão do trabalho se dá no Capítulo 5, onde é feita uma discussão final acerca dos resultados, das perspectivas e projetos futuros no estudo de vórtices em condensados atrativos. A análise dimensional, estudo assintótico da equação de Gross-Pitaevskii e métodos variacionais estão presentes nos Apêndices.

Capítulo 2

Condensados de Bose-Einstein

Neste capítulo é apresentado o formalismo teórico da condensação de Bose-Einstein utilizado neste trabalho. Na primeira seção a equação de Gross-Pitaevskii é derivada, bem como a expressão para a energia de um condensado. Em seguida, na segunda seção, é feita uma breve discussão a respeito de sólitons na equação de Gross-Pitaevskii. A teoria de vórtices em condensados de Bose-Einstein é descrita na terceira seção, bem como a forma adimensional da equação de Gross-Pitaevskii utilizada neste trabalho. Na quarta seção discute-se acerca de pequenas oscilações em um condensado de Bose-Einstein e as equações de Bogoliubov-de Gennes para a estabilidade de um condensado são derivadas. Finalmente, na quinta e na sexta seção, está presente uma breve discussão sobre comprimento de espalhamento e ressonância de Feshbach.

2.1 Equação de Gross-Pitaevskii

O hamiltoniano de um sistema de bósons com interação entre pares é dado, na forma de operadores de campo, por

$$\hat{H} = \int \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}, t) \hat{H}_0 \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r} + \frac{1}{2} \int \int \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}', t) V(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \hat{\Psi}(\mathbf{r}', t) \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r}' d\mathbf{r}, \quad (2.1)$$

onde $\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{ext}(\mathbf{r})$ é o hamiltoniano de uma partícula, sendo $V_{ext}(\mathbf{r})$ um potencial externo, e $V(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ um potencial de interação entre duas partículas.

Por simplicidade, seja $\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) \equiv \hat{\Psi}$, $\hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}, t) \equiv \hat{\Psi}^\dagger$, $\hat{\Psi}(\mathbf{r}', t) \equiv \hat{\Psi}'$ e $\hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}', t) \equiv \hat{\Psi}'^\dagger$ de forma que a equação (2.1) é escrita como

$$\hat{H} = \int \hat{\Psi}^\dagger \hat{H}_0 \hat{\Psi} d\mathbf{r} + \frac{1}{2} \int \int \hat{\Psi}^\dagger \hat{\Psi}'^\dagger V(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \hat{\Psi}' \hat{\Psi} d\mathbf{r}' d\mathbf{r}. \quad (2.2)$$

As relações de comutação para operadores bosônicos são

$$[\hat{\Psi}, \hat{\Psi}'^\dagger] = \delta(\mathbf{r}, \mathbf{r}'), \quad (2.3)$$

e

$$[\hat{\Psi}, \hat{\Psi}'] = [\hat{\Psi}^\dagger, \hat{\Psi}'^\dagger] = 0. \quad (2.4)$$

Pela equação de Heisenberg

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \hat{\Psi}}{\partial t} &= [\hat{\Psi}, \hat{H}] \\ &= [\hat{\Psi}, \hat{\mathcal{H}}] + [\hat{\Psi}, \hat{\mathcal{G}}], \end{aligned} \quad (2.5)$$

onde $\hat{H} = \hat{\mathcal{H}} + \hat{\mathcal{G}}$, com

$$\hat{\mathcal{H}} = \int \hat{\Psi}^\dagger \hat{H}_0 \hat{\Psi} d\mathbf{r}, \quad (2.6)$$

e

$$\hat{\mathcal{G}} = \frac{1}{2} \int \hat{\Psi}^\dagger \left[\int \hat{\Psi}'^\dagger V(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \hat{\Psi}' d\mathbf{r}' \right] \hat{\Psi} d\mathbf{r}. \quad (2.7)$$

Calculando o comutador de $\hat{\Psi}'$ com $\hat{\mathcal{H}}$ tem-se que

$$\begin{aligned} [\hat{\Psi}', \hat{\mathcal{H}}] &= \hat{\Psi}' \hat{\mathcal{H}} - \hat{\mathcal{H}} \hat{\Psi}' = \int \hat{\Psi}' \hat{\Psi}^\dagger \hat{H}_0 \hat{\Psi} d\mathbf{r} - \int \hat{\Psi}^\dagger \hat{H}_0 \hat{\Psi} \hat{\Psi}' d\mathbf{r} = \int (\hat{\Psi}' \hat{\Psi}^\dagger - \hat{\Psi}^\dagger \hat{\Psi}') \hat{H}_0 \hat{\Psi} d\mathbf{r} \\ &= \int \delta(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \hat{H}_0 \hat{\Psi} d\mathbf{r} = \hat{H}_0' \hat{\Psi}'. \end{aligned} \quad (2.8)$$

Considerando que o sistema seja um gás de bósons fracamente interagente e em baixa temperatura, o comprimento de onda de de Broglie $\lambda_{dB} = \sqrt{2\pi\hbar^2/mk_B T}$, onde m é a massa de um bóson e T a temperatura do sistema, é muito maior que o alcance do potencial de interação. Desse modo, o potencial de interação entre os átomos pode ser aproximado a um potencial de contato na forma $V(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \equiv g\delta(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$, onde g , denominada *constante de acoplamento*, é linearmente proporcional ao comprimento de espalhamento entre os átomos, conforme demonstrado na Seção 2.5. Deste modo, na equação (2.7),

$$\hat{\mathcal{G}} = \frac{g}{2} \int \hat{\Psi}^\dagger \left[\int \hat{\Psi}'^\dagger \delta(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \hat{\Psi}' d\mathbf{r}' \right] \hat{\Psi} d\mathbf{r} = \frac{g}{2} \int \hat{\Psi}^\dagger \hat{\Psi}'^\dagger \hat{\Psi}' \hat{\Psi} d\mathbf{r}. \quad (2.9)$$

Com isso

$$\begin{aligned} [\hat{\Psi}', \hat{\mathcal{G}}] &= \hat{\Psi}' \hat{\mathcal{G}} - \hat{\mathcal{G}} \hat{\Psi}' = \frac{g}{2} \int (\hat{\Psi}' \hat{\Psi}^\dagger \hat{\Psi}'^\dagger \hat{\Psi}' \hat{\Psi} - \hat{\Psi}^\dagger \hat{\Psi}'^\dagger \hat{\Psi}' \hat{\Psi} \hat{\Psi}') d\mathbf{r} = \frac{g}{2} \int (\hat{\Psi}' \hat{\Psi}^\dagger \hat{\Psi}'^\dagger - \hat{\Psi}^\dagger \hat{\Psi}'^\dagger \hat{\Psi}') \hat{\Psi} \hat{\Psi} d\mathbf{r} \\ &= \frac{g}{2} \int (\hat{\Psi}' \hat{\Psi}^\dagger \hat{\Psi}'^\dagger - \hat{\Psi}'^\dagger \hat{\Psi}^\dagger \hat{\Psi}' + \hat{\Psi}^\dagger \hat{\Psi}' \hat{\Psi}'^\dagger - \hat{\Psi}'^\dagger \hat{\Psi}' \hat{\Psi}'^\dagger) \hat{\Psi} \hat{\Psi} d\mathbf{r} \\ &= \frac{g}{2} \int ([\hat{\Psi}', \hat{\Psi}^\dagger] \hat{\Psi}'^\dagger + \hat{\Psi}'^\dagger [\hat{\Psi}', \hat{\Psi}^\dagger]) \hat{\Psi} \hat{\Psi} d\mathbf{r} \\ &= g \int \delta(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \hat{\Psi}^\dagger \hat{\Psi}' \hat{\Psi} d\mathbf{r} = g \hat{\Psi}'^\dagger \hat{\Psi}' \hat{\Psi}'. \end{aligned} \quad (2.10)$$

Assim, substituindo (2.8) e (2.10) em (2.5)

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \hat{\Psi}}{\partial t} &= (\hat{H}_0 + g \hat{\Psi}^\dagger \hat{\Psi}) \hat{\Psi} \\ &= \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{ext} + g \hat{\Psi}^\dagger \hat{\Psi} \right) \hat{\Psi}. \end{aligned} \quad (2.11)$$

Sejam os operadores de campo $\hat{\Psi}$ escritos na base das funções de onda de partícula única. Desse modo

$$\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) = \sum_k \psi_k(\mathbf{r}) a_k(t), \quad (2.12)$$

e

$$\hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}, t) = \sum_k \psi_k^*(\mathbf{r}) a_k^\dagger(t), \quad (2.13)$$

onde $\psi_k(\mathbf{r})$ são funções de onda de partícula única do k -ésimo orbital. $a_k^\dagger(t)$ e $a_k(t)$ são, respectivamente, os operadores de criação e aniquilação de uma partícula no estado correspondente ao orbital $\psi_k(\mathbf{r})$, sendo que

$$a_k^\dagger(t) = e^{-i\hat{H}t/\hbar} a_k^\dagger(0) e^{i\hat{H}t/\hbar} \quad \text{e} \quad a_k(t) = e^{i\hat{H}t/\hbar} a_k(0) e^{-i\hat{H}t/\hbar}. \quad (2.14)$$

Para um conjunto de vetores $\{|n_0, n_1, \dots, n_\infty\rangle\}$ no espaço dos números de ocupação que obedecem as relações de ortonormalidade

$$\langle n'_0, n'_1, \dots, n'_\infty | n_0, n_1, \dots, n_\infty \rangle = \delta_{n_0, n'_0} \delta_{n_1, n'_1} \dots \delta_{n_\infty, n'_\infty}, \quad (2.15)$$

completeza

$$\sum_{n_0, n_1, \dots, n_\infty} |n_0, n_1, \dots, n_\infty\rangle \langle n_0, n_1, \dots, n_\infty| = 1, \quad (2.16)$$

e produto direto

$$|n_0, n_1, \dots, n_\infty\rangle = |n_0\rangle |n_1\rangle \dots |n_\infty\rangle, \quad (2.17)$$

segue, junto às relações de comutação (por simplicidade, $a_k^\dagger \equiv a_k^\dagger(0)$ e $a_k \equiv a_k(0)$),

$$[a_k, a_{k'}^\dagger] = \delta_{k, k'}, \quad (2.18)$$

e

$$[a_k, a_{k'}] = [a_k^\dagger, a_{k'}^\dagger] = 0, \quad (2.19)$$

onde $\delta_{k, k'}$ é o delta de Kronecker, que

$$a_k^\dagger a_k |n_k\rangle = n_k |n_k\rangle, \quad (2.20)$$

$$a_k |n_k\rangle = (n_k)^{1/2} |n_k - 1\rangle, \quad (2.21)$$

e

$$a_k^\dagger |n_k\rangle = (n_k + 1)^{1/2} |n_k + 1\rangle, \quad (2.22)$$

onde $n_k = 0, 1, 2, \dots, \infty$ indica o número partículas no estado k .

A expressão (2.12) pode ser convenientemente escrita na forma

$$\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) = \psi_0(\mathbf{r}) a_0(t) + \sum_{k \neq 0} \psi_k(\mathbf{r}) a_k(t), \quad (2.23)$$

onde os termos correspondentes ao estado fundamental $\Psi_0(\mathbf{r}, t)$ e aos estados excitados $\Psi_k(\mathbf{r}, t)$ foram separados.

A média sobre o operador $\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t)$ consiste em

$$\langle \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\substack{n_1, \dots, n_\infty \\ \sum_i n_i = N}} \langle n_0, n_1, \dots, n_\infty | e^{-\beta \hat{H}} \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) | n_0, n_1, \dots, n_\infty \rangle, \quad (2.24)$$

sendo $Z = \sum e^{-\beta \hat{H}}$ a função de partição.

Supondo que o sistema esteja a uma temperatura muito baixa, de modo que a probabilidade de ocupação do estado fundamental é, aproximadamente, igual a um. Então, a média (2.24), utilizando (2.23) e (2.18), é dada por

$$\begin{aligned} \langle \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) \rangle &= \psi_0(\mathbf{r}) \langle n_0 | a_0(t) | n_0 + 1 \rangle + \sum_{k \neq 0} \psi_k(\mathbf{r}) \langle n_k | a_k(t) | n_k + 1 \rangle \\ &= (n_0 + 1)^{1/2} \Psi_0(\mathbf{r}, t) + \sum_{k \neq 0} (n_k + 1)^{1/2} \Psi_k(\mathbf{r}, t). \end{aligned} \quad (2.25)$$

Definindo

$$\delta \Psi(\mathbf{r}, t) = \sum_{k \neq 0} (n_k + 1)^{1/2} \Psi_k(\mathbf{r}, t), \quad (2.26)$$

então a expressão (2.25) pode ser escrita de maneira mais compacta como

$$\langle \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) \rangle = \Psi(\mathbf{r}, t) + \delta \Psi(\mathbf{r}, t), \quad (2.27)$$

onde, por simplicidade, $(n_0 + 1)^{1/2} \Psi_0(\mathbf{r}, t) \equiv \Psi(\mathbf{r}, t)$.

Utilizando a expressão (2.27) para a média do operador $\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t)$ na equação (2.11) obtém-se que

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (\Psi + \delta \Psi) &= \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{ext} + g (\Psi^* + \delta \Psi^*) (\Psi + \delta \Psi) \right] (\Psi + \delta \Psi) \\ &= \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{ext} \right] (\Psi + \delta \Psi) + g (|\Psi|^2 + \Psi^* \delta \Psi + \Psi \delta \Psi^* + |\delta \Psi|^2) (\Psi + \delta \Psi). \end{aligned} \quad (2.28)$$

Supondo que, para baixas temperaturas, quase todos os átomos do sistema estão no estado fundamental ($N \approx n_0 + 1 \approx n_0$) os termos da ordem de $\delta \Psi^2$ e superiores podem ser desprezados, de modo que,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (\Psi + \delta \Psi) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{ext} \right] (\Psi + \delta \Psi) + g (|\Psi|^2 \Psi + \Psi^2 \delta \Psi^* + 2|\Psi|^2 \delta \Psi). \quad (2.29)$$

Isolando os termos Ψ e $\delta \Psi$ são obtidas as equações

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{ext}(\mathbf{r}) + g |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 \right] \Psi(\mathbf{r}, t), \quad (2.30)$$

e

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \delta \Psi(\mathbf{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \delta \Psi(\mathbf{r}, t) + V_{ext}(\mathbf{r}) \delta \Psi(\mathbf{r}, t) + 2g |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 \delta \Psi(\mathbf{r}, t) + g \Psi^2(\mathbf{r}, t) \delta \Psi^*(\mathbf{r}, t). \quad (2.31)$$

A equação (2.30) é conhecida como *equação de Gross-Pitaevskii* dependente do tempo ou, de modo mais geral, como *equação de Schrödinger não-linear*, e descreve um sistema de N bósons a temperatura nula.

Através de (2.1) e (2.25) obtém-se que a energia do sistema é dada por

$$E = \int \left[\frac{\hbar^2}{2m} |\nabla \Psi(\mathbf{r}, t)|^2 + V(\mathbf{r}) |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 + \frac{g}{2} |\Psi(\mathbf{r}, t)|^4 \right] d\mathbf{r}. \quad (2.32)$$

Assumindo que todas as partículas do sistema estão no estado fundamental resulta que o segundo termo na expressão (2.25) é nulo. Utilizando (2.14) obtém-se que

$$\begin{aligned} \langle \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) \rangle &= \psi_0(\mathbf{r}) \langle n_0 | a_0(t) | n_0 + 1 \rangle \\ &= \psi_0(\mathbf{r}) \langle n_0 | e^{i\hat{H}t/\hbar} a_0(0) e^{-i\hat{H}t/\hbar} | n_0 + 1 \rangle \\ &= \sqrt{N} \psi_0(\mathbf{r}) e^{-i(E(n_0+1) - E(n_0))t/\hbar} \\ &= \sqrt{N} \psi_0(\mathbf{r}) e^{-i\mu t/\hbar}, \end{aligned} \quad (2.33)$$

sendo $\mu = E(n_0 + 1) - E(n_0) \sim \partial E / \partial N$ o potencial químico do sistema.

Nota-se portanto que, ao contrário de um sistema governado por uma equação de Schrödinger, a evolução temporal da função de onda estacionária não é dada pela energia, mas sim pelo potencial químico [26].

Utilizando (2.33) na equação de Gross-Pitaevskii (2.30) obtém-se a equação de Gross-Pitaevskii para estados estacionários na forma

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{ext}(\mathbf{r}) + g |\psi(\mathbf{r})|^2 \right] \psi(\mathbf{r}) = \mu \psi(\mathbf{r}). \quad (2.34)$$

2.2 Sólitons

No contexto de equações diferenciais parciais não-lineares, tais como as equações de Gross-Pitaevskii, Korteweg-de Vries, Sine-Gordon, entre outras, são estudadas soluções conhecidas como *sólitons* [66].

Embora existam definições matemáticas mais precisas, pode-se dizer que sólítos são soluções de equações diferenciais parciais não-lineares na forma de ondas caminantes, estáveis e aproximadamente localizadas em regiões finitas [67], as quais não sofrem alterações em sua amplitude e largura, podendo interagir com outros sólítos sem alterar suas características [66]. O primeiro relato da observação de tal fenômeno deve-se ao engenheiro naval escocês John Scott Russel que, em 1844, descreveu a criação de uma elevação pequena e bem localizada no nível da água de um canal após a parada de um barco. Tal elevação se propagou por quilômetros mantendo sua forma inicial antes de desaparecer. O relato completo da observação é encontrado na referência [68].

Quanto ao tipo, os sólítos podem ser divididos em *claros* (ou *brilhantes*) e *escuros*. O primeiro tipo corresponde a um pulso no qual, para grandes distâncias, seu valor tende a zero, enquanto seu pico possui um valor positivo e não nulo. O contrário ocorre para os sólítos escuros, ou seja, para grandes distâncias seu valor é positivo e não nulo, sendo o valor mínimo de sua intensidade igual a zero. Existem também os sólítos *cinzentos*, que são semelhantes aos sólítos escuros, porém o menor valor de sua intensidade é um número não nulo e positivo.

A equação de Gross-Pitaevskii em uma dimensão na ausência de potencial externo

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + g|\Psi|^2 \Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}, \quad (2.35)$$

admite soluções do tipo sóliton, as quais possuem expressões analíticas, tendo as mesmas interesse no estudo de condensados de Bose-Einstein.

Esta equação permite vários tipos de solução que dependem da escolha de suas constantes, especialmente g . Entretanto as soluções de interesse físico do tipos sóliton claro e escuro são obtidas, respectivamente, para $g < 0$ e $g > 0$.

Para sólitons claros, a solução analítica da equação (2.35) é dada por

$$\Psi(x, t) = A \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left[mc_0 x - \frac{1}{2} (gA^2 + mc_0^2) t \right] \right\} \frac{1}{\cosh \left[\frac{A\sqrt{-mg}}{\hbar} (x - c_0 t - x_0) \right]}, \quad (2.36)$$

onde A é a amplitude da onda, c_0 sua velocidade e x_0 sua posição inicial.

A solução do tipo sóliton escuro é dada por [67], [66]

$$\Psi(x, t) = A \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left[mc_0 x - \frac{1}{2} (gA^2 + mc_0^2) t \right] \right\} \tanh \left[\frac{A\sqrt{mg}}{\hbar} (x - c_0 t - x_0) \right]. \quad (2.37)$$

Na figura 2.1 estão representadas, respectivamente, as densidades de probabilidade para as funções de onda (2.36) e (2.37). Nota-se que a solução do tipo sóliton claro possui um máximo em A e converge a zero para $x \rightarrow \pm\infty$, enquanto a solução do tipo sóliton escuro converge a A no limite de $x \rightarrow \pm\infty$ e possui um mínimo em zero.

Figura 2.1: Representação das densidades de probabilidade $|\Psi(x, t)|^2$ para as soluções do tipo sóliton claro (a esquerda) e sóliton escuro (a direita) da equação de Gross-Pitaevskii unidimensional.

2.3 Vórtices

2.3.1 Definições

Dado um fluido onde é definido um campo de velocidades $\mathbf{v}(\mathbf{r})$ uma quantidade de interesse no estudo da rotação é denominada *circulação*, definida por

$$\Gamma = \oint_C \mathbf{v} \cdot d\mathbf{l}, \quad (2.38)$$

calculada ao longo de um contorno fechado C [22].

Utilizando o teorema de Stokes, a expressão acima pode ser escrita como

$$\Gamma = \int \int \nabla \times \mathbf{v} \cdot d\mathbf{S} = \int \int \boldsymbol{\xi} \cdot d\mathbf{S}, \quad (2.39)$$

onde $\boldsymbol{\xi} = \nabla \times \mathbf{v}$ é denominado *campo de vorticidade* ou, simplesmente, *vorticidade*.

Dessa definição é introduzido o conceito de *vórtice*. Um vórtice é um ponto em um fluido no qual o campo de vorticidade é singular. Uma linha no fluido tangente ao vetor vorticidade $\boldsymbol{\xi}$ é denominada *linha de vórtice* [69].

No contexto de fluidos clássicos, considerando um campo de velocidades de um corpo rígido $\mathbf{v} = \boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{r}$, sendo $\boldsymbol{\Omega}$ a velocidade angular, então

$$\boldsymbol{\xi} = \boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{r} = \boldsymbol{\Omega} \times \nabla \times \mathbf{r} = \nabla \times (-\Omega y, \Omega x, 0) = 2\boldsymbol{\Omega}. \quad (2.40)$$

Logo, sendo $\boldsymbol{\xi} \neq 0$ para um campo de velocidades de um corpo rígido, seu fluxo é dito ser *rotacional*. Em contrapartida, se $\boldsymbol{\xi} = 0$, o movimento do fluido é denominado *irrotacional*.

2.3.2 Vórtices em condensados de Bose-Einstein

Na discussão de vórtices em condensados de Bose-Einstein é necessário obter seu campo de velocidades. Primeiramente, multiplicando (2.30) por Ψ^* tem-se

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Psi^* \nabla^2 \Psi + V|\Psi|^2 + g|\Psi|^4 = i\hbar \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t}. \quad (2.41)$$

Subtraindo dessa equação o seu complexo conjugado

$$-\frac{\hbar^2}{2m} (\Psi^* \nabla^2 \Psi - \Psi \nabla^2 \Psi^*) - i\hbar \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \right) = 0, \quad (2.42)$$

e organizando os termos

$$\frac{\hbar}{2mi} \nabla \cdot (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*) + \frac{\partial n}{\partial t} = 0, \quad (2.43)$$

onde $n \equiv n(\mathbf{r}, t) = |\Psi|^2$.

A partir da expressão para a equação da continuidade

$$\nabla \cdot (n\mathbf{v}) + \frac{\partial n}{\partial t} = 0, \quad (2.44)$$

nota-se, em (2.43) que o campo de velocidades em um condensado é dado por

$$\mathbf{v}(\mathbf{r}, t) = \frac{\hbar}{2mi} \frac{(\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*)}{|\Psi|^2}. \quad (2.45)$$

Escrevendo a função de onda na forma

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \sqrt{n(\mathbf{r}, t)} e^{iS(\mathbf{r}, t)}, \quad (2.46)$$

onde $S(\mathbf{r}, t)$ corresponde à fase da função de onda, então, em (2.45)

$$\mathbf{v}(\mathbf{r}, t) = \frac{\hbar}{m} \nabla S(\mathbf{r}, t). \quad (2.47)$$

Nota-se, entretanto, ao se calcular o campo de vorticidade que

$$\boldsymbol{\xi} = \nabla \times \mathbf{v} = 0, \quad (2.48)$$

o que significa que o campo de velocidades do fluido é irrotacional, a menos que $S(\mathbf{r}, t)$ possua uma singularidade [42].

De modo geral, a expressão para o momento angular de um corpo é

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}, \quad (2.49)$$

enquanto que, na Mecânica Quântica, o momento angular é quantizado, e na direção z é dado por $L_z = S\hbar$, sendo S um número inteiro. Com isso

$$L_z = mvr = S\hbar, \quad (2.50)$$

e, portanto,

$$v_s = \frac{\hbar}{m} \frac{S}{r}. \quad (2.51)$$

Logo a circulação é dada por

$$\Gamma = \oint_C \mathbf{v} \cdot d\mathbf{l} = 2\pi \frac{\hbar}{m} S, \quad (2.52)$$

de onde se observa que tal grandeza é quantizada em unidades de $\hbar/m$ [26], como previsto por Onsager [24] e, posteriormente, descrito por Feynman [28].

De (2.39), (2.48) e (2.52) segue que

$$\boldsymbol{\xi} = \nabla \times \mathbf{v} = 2\pi \frac{\hbar}{m} S \delta(\mathbf{r}) \hat{\mathbf{z}}. \quad (2.53)$$

Logo o campo de vorticidade em um condensado de Bose-Einstein possui uma singularidade, o que caracteriza a existência de vórtices.

Para um sistema bidimensional, em coordenadas polares com funções de onda na forma

$$\psi(r, \theta) = R(r) e^{iS\theta}, \quad (2.54)$$

a equação de Gross-Pitaevskii independente do tempo é

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{\partial^2 R}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial R}{\partial r} - \frac{S^2}{r^2} R \right] + V(\mathbf{r})R + gR^3 = \mu R, \quad (2.55)$$

e a energia dada por

$$E = 2\pi \int_0^\infty \left\{ \frac{\hbar^2}{2m} \left[\left(\frac{\partial R}{\partial r} \right)^2 + \frac{S^2}{r^2} R^2 \right] + V(\mathbf{r})R^2 + \frac{g}{2} R^4 \right\} r dr. \quad (2.56)$$

Considerando um sistema em confinamento harmônico e empregando as transformações descritas no Apêndice A para expressar as equações na forma adimensional, então

$$-\frac{1}{2} \left[\frac{\partial^2 R}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial R}{\partial r} - \frac{S^2}{r^2} R \right] + \frac{1}{2} r^2 R + g R^3 = \mu R, \quad (2.57)$$

e

$$E = \pi \int_0^\infty \left\{ \left[\left(\frac{\partial R}{\partial r} \right)^2 + \frac{S^2}{r^2} R \right] + r^2 R^2 + g R^4 \right\} r dr. \quad (2.58)$$

Analogamente, para um sistema tridimensional, em coordenadas cilíndricas com funções de onda na forma

$$\psi(r, \theta, z) = R(r, z) e^{iS\theta}, \quad (2.59)$$

a equação de Gross-Pitaevskii independente do tempo na forma adimensional é

$$-\frac{1}{2} \left[\frac{\partial^2 R}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial R}{\partial r} + \frac{\partial^2 R}{\partial z^2} - \frac{S^2}{r^2} R \right] + \frac{1}{2} (r^2 + \Omega^2 z^2) R + g R^3 = \mu R, \quad (2.60)$$

e a energia é dada por

$$E = \pi \int_{-\infty}^\infty \int_0^\infty \left\{ \left[\left(\frac{\partial R}{\partial r} \right)^2 + \left(\frac{\partial R}{\partial z} \right)^2 + \frac{S^2}{r^2} R \right] + (r^2 + \Omega^2 z^2) R^2 + g R^4 \right\} r dr dz. \quad (2.61)$$

É importante mencionar que as equações (2.54) e (2.59) estão sujeitas a condições de contorno, nas quais $R \rightarrow 0$ para $r \rightarrow \infty$ e $|z| \rightarrow \infty$, $R \sim r^S$ para $r \rightarrow 0$, e $dR/dr = 0$ se $S = 0$.

2.4 Pequenas oscilações em um condensado

Durante a derivação da equação de Gross-Pitaevskii obteve-se a equação (2.31), a qual descreve as excitações do condensado devido à pequenas oscilações.

Reescrevendo tal equação na forma adimensional para um potencial do tipo oscilador harmônico em duas dimensões obtém-se

$$\begin{aligned} \left\{ -\frac{1}{2} \left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{S^2}{r^2} \right] + \frac{1}{2} r^2 + 2g |\Psi(r, \theta, t)|^2 \right\} \delta \Psi(r, \theta, t) + \\ + g \Psi^2(r, \theta, t) \delta \Psi^*(r, \theta, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \delta \Psi(r, \theta, t). \end{aligned} \quad (2.62)$$

Considerando as soluções da equação de Gross-Pitaevskii na forma (2.54), deseja-se expandir as soluções $\delta \Psi$ da equação acima em componentes do momento angular na forma

$$\delta \Psi(r, \theta, t) = \left[\sum_L u_L(r) e^{iL\theta + i\omega_L t} + v_L^*(r) e^{-iL\theta - i\omega_L^* t} \right] e^{iS\theta - i\mu t}, \quad (2.63)$$

onde L é um número inteiro e positivo que caracteriza o modo da excitação e ω_L corresponde as frequências da oscilação [62, 65].

Inserindo (2.63) em (2.62) obtém-se o sistema de equações

$$\begin{cases} \omega_L u_L = \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{(S+L)^2}{r^2} \right) + \frac{1}{2} r^2 + 2g|R|^2 - \mu \right] u_L + gR^2 v_L \\ \omega_L v_L = - \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{(S-L)^2}{r^2} \right) + \frac{1}{2} r^2 + 2g|R|^2 - \mu \right] v_L - gR^{*2} u_L, \end{cases} \quad (2.64)$$

conhecidas na literatura como *Equações de Bogoliubov-de Gennes*. Este sistema de equações é empregado neste trabalho para o estudo de estabilidade das soluções da equação de Gross-Pitaevskii, como será visto adiante.

Para um condensado tridimensional em coordenadas cilíndricas a equação (2.31) pode ser escrita como

$$\begin{aligned} \left\{ -\frac{1}{2} \left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{S^2}{r^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] + \frac{1}{2} (r^2 + \Omega^2 z^2) + 2g|\Psi(r, \theta, z, t)|^2 \right\} \delta\Psi(r, \theta, z, t) + \\ + g\Psi^2(r, \theta, z, t) \delta\Psi^*(r, \theta, z, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \delta\Psi(r, \theta, z, t). \end{aligned} \quad (2.65)$$

Para soluções na forma (2.59), $\delta\Psi$ é dado por

$$\delta\Psi(r, \theta, z, t) = \left[\sum_L u_L(r, z) e^{iL\theta + i\omega_L t} + v_L^*(r, z) e^{-iL\theta - i\omega_L^* t} \right] e^{iS\theta - i\mu t}, \quad (2.66)$$

Inserindo (2.66) em (2.65) obtém-se o sistema de equações

$$\begin{cases} \omega_L u_L = \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{(S+L)^2}{r^2} \right) + \frac{1}{2} (r^2 + \Omega^2 z^2) + 2g|R|^2 - \mu \right] u_L + gR^2 v_L \\ \omega_L v_L = - \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{(S-L)^2}{r^2} \right) + \frac{1}{2} (r^2 + \Omega^2 z^2) + 2g|R|^2 - \mu \right] v_L - gR^{*2} u_L. \end{cases} \quad (2.67)$$

O sistema formado pelas equações (2.64) e (2.67) pode ser escrito na forma matricial

$$\begin{bmatrix} \hat{D}_+ & gR^2 \\ -gR^{*2} & -\hat{D}_- \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_L \\ v_L \end{bmatrix} = \omega_L \begin{bmatrix} u_L \\ v_L \end{bmatrix} \quad (2.68)$$

onde

$$\hat{D}_\pm = -\frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{(S \pm L)^2}{r^2} \right) + \frac{1}{2} r^2 + 2g|R|^2 - \mu, \quad (2.69)$$

no caso bidimensional e

$$\hat{D}_\pm = -\frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{(S \pm L)^2}{r^2} \right) + \frac{1}{2} (r^2 + \Omega^2 z^2) + 2g|R|^2 - \mu, \quad (2.70)$$

para um sistema tridimensional. Vale ressaltar que, tanto as equações (2.64) quanto (2.67) estão sujeitas a condições de contorno nas quais u e v decaem como $r^{|S \pm L|}$ para $r \rightarrow 0$.

A estabilidade do sistema é inferida através da análise de seus autovalores. Se todos os autovalores ω_L são números reais, então o sistema é estável. Entretanto, se ao menos um autovalor é um número complexo, o sistema é instável. Portanto, para estudar a estabilidade do sistema é necessário determinar seus autovalores.

2.5 Comprimento de espalhamento

Como mencionado durante sua derivação, a equação de Gross-Pitaevskii descreve um gás de bósons fracamente interagentes no qual são consideradas apenas as interações entre dois corpos.

No contexto de átomos ultrafrios tal aproximação é razoável uma vez que, experimentalmente, tais sistemas são gases diluídos. No centro de um condensado de Bose-Einstein a densidade é da ordem de $10^{13} - 10^{15}$ átomos/cm³, enquanto a densidade do ar sob condições normais de temperatura e pressão é da ordem de 10^{19} átomos/cm³ [42, 70].

Em Mecânica Quântica, o problema de espalhamento de dois corpos pode ser descrito pela *equação de Lippmann-Schwinger* [71, 72]. Em gases ultrafrios as interações entre os átomos são muito pequenas, de modo que apenas a contribuição das ondas-s é relevante para descrever o espalhamento.

Em primeira ordem, a equação de Lippmann-Schwinger é descrita pela *aproximação de Born* na forma

$$a = \frac{m_r}{2\pi\hbar^2} \int V_{int}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}, \quad (2.71)$$

onde a é o comprimento de espalhamento, $m_r = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$ é a massa reduzida do sistema de duas partículas com massas m_1 e m_2 , e $V_{int}(\mathbf{r})$ é o potencial de interação entre as duas partículas.

Para um sistema de bósons idênticos, de massa m , a expressão para a massa reduzida é $m_r = \frac{m}{2}$ e, conforme discutido durante a derivação da equação de Gross-Pitaevskii, o potencial de interação é da forma $V_{int}(\mathbf{r}) = g\delta(\mathbf{r})$. Logo

$$a = \frac{m}{4\pi\hbar^2} \int g\delta(\mathbf{r}) d\mathbf{r}, \quad (2.72)$$

e, portanto,

$$g = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m}. \quad (2.73)$$

Uma discussão mais aprofundada do problema do espalhamento entre duas partículas foge ao escopo desse trabalho. No que diz respeito à equação de Lippmann-Schwinger uma introdução pode ser encontrada na referência [72]. Detalhes sobre a derivação da seção de choque e da aproximação de Born são apresentados nas referências [42, 72].

2.6 Ressonância de Feshbach

Pela equação (2.73) nota-se que o potencial interatômico depende da magnitude do comprimento de espalhamento entre os átomos. Claramente, quanto menor o valor desse termo, mais próximo do comportamento de um gás de bósons ideal o sistema estará. Se $g > 0$ a interação entre os átomos é repulsiva enquanto que, para $g < 0$, a interação é atrativa.

De fundamental importância para o estudo das propriedades de condensados de Bose-Einstein é a manipulação do comprimento de espalhamento, sendo esta realizada experimentalmente através do fenômeno de *ressonância de Feshbach*.

A ressonância de Feshbach ocorre quando a energia de um estado ligado de um potencial interatômico (também denominado de *canal fechado*) é igual a energia correspondente ao espalhamento de dois átomos (denominado de *canal aberto*) [26, 73]. Considerando que os átomos no canal aberto possuam momento magnético diferente daqueles no canal fechado,

então a energia de interação entre os átomos espalhados, em relação a energia do canal fechado, pode ser ajustada por parâmetros externos tais como campo magnéticos ou através de métodos de controle óptico [42].

A figura 2.2 ilustra as posições relativas entre as curvas dos canais aberto e fechado.

Figura 2.2: Canal aberto (curva inferior) e canal fechado (curva superior) relacionados à ressonância de Feshbach. No primeiro exemplo, a esquerda, a energia do estado ligado do canal fechado é inferior a energia do canal aberto, o que corresponde a uma interação atrativa entre os átomos. No segundo exemplo, a direita, a interação é repulsiva, uma vez que a energia do canal fechado é maior que a energia do canal aberto. A posição relativa entre as curvas é ajustada experimentalmente através de campos magnéticos ou por técnicas de controle óptico.

Nas proximidades da ressonância de Feshbach a expressão para o comprimento de espalhamento das ondas-s é dada por [74]

$$a(B) = \tilde{a} \left(1 - \frac{\Delta}{B - B_0} \right), \quad (2.74)$$

onde $\tilde{a}$ corresponde ao comprimento de espalhamento em uma situação distante da condição de ressonância, Δ é denominado de *largura de ressonância* e B_0 é o campo magnético característico da condição de ressonância.

Como se pode notar pela expressão (2.74), se $\frac{\Delta}{B - B_0} < 1$ o comprimento de espalhamento é positivo, o que caracteriza um potencial repulsivo entre os átomos. No caso $\frac{\Delta}{B - B_0} > 1$ a interação entre os átomos é atrativa. Quanto mais próximo a energia do canal fechado se encontra da energia do canal aberto maior é o efeito do espalhamento [42].

A figura 2.3 corresponde a determinação experimental da ressonância de Feshbach para o ^{23}Na [75].

Figura 2.3: Observação da ressonância de Feshbach em um condensado de ^{23}Na . (a) Número de átomos no condensado em função do campo magnético. (b) Comprimento de espalhamento normalizado em função do campo magnético. Os pontos representam os dados experimentais e as linhas sólidas o ajuste pela equação (2.74). Esta figura foi extraída da referência [75].

Recentemente (em 2015) foi desenvolvida uma técnica na qual se é capaz de realizar a modulação espacial do comprimento de espalhamento em condensados de Bose-Einstein. Deste modo, torna-se possível produzir condensados nos quais o comprimento de espalhamento entre os átomos não é constante, mas varie ao longo da nuvem atômica [76].

Tal técnica poderá ser de fundamental importância na realização experimental de vórtices estáveis em condensados atrativos, confirmando os resultados teóricos deste trabalho. Tais resultados são discutidos no Capítulo 4 desta dissertação.

A figura 2.4 contém alguns resultados experimentais obtidos em [76] acerca da modulação espacial do comprimento de espalhamento em um condensado.

Figura 2.4: Dinâmica de um condensado com interação espacialmente modulada. Em (a) o comprimento de espalhamento é repulsivo em todo o condensado, sendo menor no centro do mesmo. Em (b) e (c) a modulação espacial das interações é tal que o comprimento de espalhamento é repulsivo ou atrativo em diferentes regiões do mesmo condensado. Esta figura foi extraída da referência [76].

Capítulo 3

Métodos numéricos

No presente capítulo são discutidos os métodos numéricos empregados nas soluções da equação de Gross-Pitaevskii e das equações de Bogoliubov-de Gennes. Primeiramente é discutido o método de *Split-Step*, o qual permite resolver separadamente as partes cinética e do potencial da equação de Gross-Pitaevskii. Em seguida, a técnica de evolução no tempo imaginário e o algoritmo de relaxação utilizados são descritos. Os métodos de Crank-Nicolson e D'yakonov, utilizados na relaxação e na evolução temporal das soluções são discutidos na terceira seção. Finalmente, são apresentados os métodos utilizados para a solução das equações de Bogoliubov-de Gennes.

3.1 *Split-Step*

Como deduzido no capítulo anterior, a equação de Gross-Pitaevskii é dada por

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi(\mathbf{r},t) + V(\mathbf{r})\Psi(\mathbf{r},t) + g|\Psi(\mathbf{r},t)|^2\Psi(\mathbf{r},t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\mathbf{r},t). \quad (3.1)$$

Reescrevendo como

$$(\mathbf{T} + \mathbf{V})\Psi(\mathbf{r},t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\mathbf{r},t), \quad (3.2)$$

onde

$$\mathbf{T} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2, \quad \mathbf{V} = V(\mathbf{r}) + g|\Psi(\mathbf{r},t)|^2, \quad (3.3)$$

tem-se que as soluções são da forma

$$\Psi(\mathbf{r},t) = e^{-i(\mathbf{T}+\mathbf{V})\delta t/\hbar}\Psi(\mathbf{r},t_0), \quad (3.4)$$

onde $\delta t = t - t_0$.

Sendo $\mathbf{T}$ e $\mathbf{V}$ operadores, é necessário encontrar uma forma de escrever a exponencial acima como produtos de exponenciais, uma vez que a expressão

$$e^{\mathbf{A}}e^{\mathbf{B}} = e^{\mathbf{A}+\mathbf{B}}, \quad (3.5)$$

é válida apenas para casos particulares, como será visto a seguir.

A rigor o produto de exponenciais de operadores é dado por ,

$$e^{\mathbf{A}}e^{\mathbf{B}} = e^{\mathbf{A}\bullet\mathbf{B}}, \quad (3.6)$$

onde

$$\begin{aligned} \mathbf{A} \bullet \mathbf{B} := & \mathbf{A} + \mathbf{B} + \sum_{\substack{k,l \geq 0 \\ k+l \geq 0}} \sum_{\substack{a_1, b_1 \geq 0 \\ a_1+b_1 > 0}} \cdots \sum_{\substack{a_k, b_k \geq 0 \\ a_k+b_k > 0}} \frac{(-1)^k}{l!(k+1)(b_1 + \cdots + b_k)} \left(\prod_{i=1}^k \frac{1}{a_i! b_i!} \right) \\ & \times \underbrace{[\mathbf{A}, [\mathbf{A}, \cdots [\mathbf{A}, \underbrace{[\mathbf{B}, [\mathbf{B}, \cdots [\mathbf{B}, \cdots [\mathbf{A}, [\mathbf{A}, \cdots \mathbf{A}, \underbrace{[\mathbf{B}, [\mathbf{B}, \cdots \mathbf{B}]] \cdots]]}_{b_k}}] \cdots]]]_{a_1}}_{a_k} \underbrace{[\mathbf{B}, [\mathbf{B}, \cdots [\mathbf{B}, \cdots [\mathbf{A}, [\mathbf{A}, \cdots \mathbf{A}, \underbrace{[\mathbf{B}, [\mathbf{B}, \cdots \mathbf{B}]] \cdots]]}_{b_k}}] \cdots]]]_{a_1}}_{b_1} \cdots \end{aligned} \quad (3.7)$$

Os primeiros termos de (3.7) são dados por

$$\mathbf{A} \bullet \mathbf{B} = \mathbf{A} + \mathbf{B} + \frac{1}{2}[\mathbf{A}, \mathbf{B}] + \frac{1}{12}([\mathbf{A}, [\mathbf{A}, \mathbf{B}]] + [\mathbf{B}, [\mathbf{B}, \mathbf{A}]] + \cdots). \quad (3.8)$$

A expressão (3.6) é conhecida como *fórmula de Baker-Campbell-Hausdorff* [67]. Nota-se, portanto que a expressão (3.5) é válida apenas quando $[\mathbf{A}, \mathbf{B}] = 0$.

Embora esta expressão seja a forma exata de escrever o produto de exponenciais de operadores a mesma é de difícil implementação em métodos numéricos, o que leva a utilização de expressões aproximadas. Porém, tal fórmula é útil no estudo de erros oriundos de métodos de aproximação.

Com o objetivo de encontrar um método aproximado simples e que forneça um erro pequeno, dois casos são comparados. Primeiramente, a exponencial da soma dos operadores $\mathbf{A}$ e $\mathbf{B}$ pode ser escrita como uma série de Taylor na forma

$$e^{\lambda(\mathbf{A}+\mathbf{B})} = \mathbf{1} + \lambda(\mathbf{A} + \mathbf{B}) + \frac{\lambda^2}{2!}(\mathbf{A} + \mathbf{B})^2 + \frac{\lambda^3}{3!}(\mathbf{A} + \mathbf{B})^3 + \cdots, \quad (3.9)$$

sendo λ uma constante multiplicativa.

No caso do produto de duas exponencias

$$e^{\lambda\mathbf{A}}e^{\lambda\mathbf{B}} = \left[\mathbf{1} + \lambda\mathbf{A} + \frac{\lambda^2}{2!}\mathbf{A}^2 + \frac{\lambda^3}{3!}\mathbf{A}^3 + \cdots \right] \left[\mathbf{1} + \lambda\mathbf{B} + \frac{\lambda^2}{2!}\mathbf{B}^2 + \frac{\lambda^3}{3!}\mathbf{B}^3 + \cdots \right]. \quad (3.10)$$

Subtraindo (3.9) de (3.10) nota-se que

$$e^{\lambda(\mathbf{A}+\mathbf{B})} - e^{\lambda\mathbf{A}}e^{\lambda\mathbf{B}} = \mathcal{O}(\lambda^2), \quad (3.11)$$

isto é, o erro em se aproximar (3.10) de (3.9) é da ordem de λ^2 . Portanto, quanto menor o valor de λ , melhor é a aproximação.

Supondo agora uma decomposição na forma

$$\begin{aligned} e^{\lambda\mathbf{B}/2}e^{\lambda\mathbf{A}}e^{\lambda\mathbf{B}/2} = & \left[\mathbf{1} + \lambda\frac{\mathbf{B}}{2} + \frac{\lambda^2}{2!}\left(\frac{\mathbf{B}}{2}\right)^2 + \frac{\lambda^3}{3!}\left(\frac{\mathbf{B}}{2}\right)^3 + \cdots \right] \left[\mathbf{1} + \lambda\mathbf{A} + \frac{\lambda^2}{2!}\mathbf{A}^2 + \frac{\lambda^3}{3!}\mathbf{A}^3 + \cdots \right] \\ & \left[\mathbf{1} + \lambda\frac{\mathbf{B}}{2} + \frac{\lambda^2}{2!}\left(\frac{\mathbf{B}}{2}\right)^2 + \frac{\lambda^3}{3!}\left(\frac{\mathbf{B}}{2}\right)^3 + \cdots \right], \end{aligned} \quad (3.12)$$

e subtraindo a mesma de (3.9), obtém-se [34, 77]

$$e^{\lambda(\mathbf{A}+\mathbf{B})} - e^{\lambda\mathbf{B}/2}e^{\lambda\mathbf{A}}e^{\lambda\mathbf{B}/2} = \mathcal{O}(\lambda^3). \quad (3.13)$$

Logo a aproximação (3.12) é mais acurada que aquela dada por (3.10), uma vez que seu erro é da ordem de λ^3 .

Portanto, considerando

$$e^{-i(\mathbf{T}+\mathbf{V})\delta t/\hbar} \approx e^{-i\mathbf{V}\delta t/2\hbar} e^{-i\mathbf{T}\delta t/\hbar} e^{-i\mathbf{V}\delta t/2\hbar}, \quad (3.14)$$

então, por (3.4)

$$\Psi(\mathbf{r}, t) \approx e^{-i\mathbf{V}\delta t/2\hbar} e^{-i\mathbf{T}\delta t/\hbar} e^{-i\mathbf{V}\delta t/2\hbar} \Psi(\mathbf{r}, t_0). \quad (3.15)$$

O *Split-Step* consiste em calcular a função de onda dada por (3.15) a partir do seguinte algoritmo:

1. Calcula-se

$$\phi_1(\mathbf{r}) = e^{-i\mathbf{V}\delta t/2\hbar} \Psi(\mathbf{r}, t_0), \quad (3.16)$$

sendo $\Psi(\mathbf{r}, t_0)$ a condição inicial, obtida pelo método de relaxação descrito a seguir.

2. Utilizando o resultado anterior

$$\phi_2(\mathbf{r}) = e^{-i\mathbf{T}\delta t/\hbar} \phi_1(\mathbf{r}). \quad (3.17)$$

3. Finalmente, a função de onda para um tempo t_1 é obtida por

$$\Psi(\mathbf{r}, t_1) = e^{-i\mathbf{V}\delta t/2\hbar} \phi_2(\mathbf{r}). \quad (3.18)$$

No cálculo de $\Psi(\mathbf{r}, t_2)$ utiliza-se $\Psi(\mathbf{r}, t_1)$ como condição inicial, e assim por diante.

Para a equação de Gross-Pitaevskii, o operador $\mathbf{V}$ é, simplesmente, uma função de $\mathbf{r}$ e o cálculo da exponencial desse operador é trivial. Entretanto o operador $\mathbf{T}$ é uma derivada de segunda ordem em relação a $\mathbf{r}$, de modo que o passo 2 do algoritmo requer alguma técnica para o cálculo da exponencial. Neste trabalho este problema foi resolvido através de dois métodos, sendo o primeiro o *Método de Crank-Nicolson*, para cálculos em bidimensionais em coordenadas polares, e pelo *Método de D'yakonov* [78], para cálculos tridimensionais em coordenadas cilíndricas, e cartesianos em duas e três dimensões.

3.2 Algoritmo de relaxação

A solução da equação de Gross-Pitaevskii adimensional pode ser encontrada a partir da evolução no tempo imaginário, onde se considera $\tau = it$, de modo que [80]

$$-\frac{\partial \tilde{\Psi}}{\partial \tau} = \left[-\nabla^2 + V(x) + \eta |\tilde{\Psi}|^2 - \mu \right] \tilde{\Psi}, \quad (3.19)$$

onde μ é o autovalor da equação de Gross-Pitaevskii e

$$|\Psi|^2 \equiv \eta |\tilde{\Psi}|^2, \quad (3.20)$$

sendo $\tilde{\Psi}$ normalizado a unidade.

O algoritmo de relaxação utilizado neste trabalho é baseado naquele encontrado na referência [81]. Os passos necessários para sua implementação são dados por

$$\begin{cases} \psi_{n+1/3} \approx \psi_n - \frac{\Delta\tau}{2} [V + \eta_n |\psi_n|^2 - \mu] \psi_n \\ \psi_{n+2/3} \approx \mathcal{O}\psi_{n+1/3} \\ \psi_{n+1} \approx \psi_{n+1/3} - \frac{\Delta\tau}{2} [V + \eta_n |\psi_n|^2 - \mu] \psi_n \\ \eta_{n+1} \approx \eta_n [\int |\psi_{n+1}|^2 d\vec{x}]^{-1} \\ \psi_{n+1} \approx \psi_{n+1} [\int |\psi_{n+1}|^2 d\vec{x}]^{-1/2}, \end{cases}$$

onde n é o passo no tempo, $\Delta\tau$ a largura do passo e $\mathcal{O}$ é o algoritmo do cálculo de ∇^2 , sendo neste trabalho o método de Crank-Nicolson ou D'yakonov.

3.3 Métodos de Crank-Nicolson e D'yakonov

A equação de Gross-Pitaevskii na ausência dos potenciais externo e de interação é escrita, simplesmente, como

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}, \quad (3.21)$$

ou, após reorganizar os termos de maneira conveniente,

$$\frac{i\hbar}{2m} \nabla^2 \Psi = \frac{\partial \Psi}{\partial t}. \quad (3.22)$$

Introduzindo $\sigma \equiv i\hbar/2m$ resulta que

$$\sigma \nabla^2 \Psi = \frac{\partial \Psi}{\partial t}, \quad (3.23)$$

sendo esta amplamente conhecida como *equação do calor* ou *equação de difusão*.

Tal equação, assim como as equações de Schrödinger linear ou não-linear (Gross-Pitaevskii) residem na classe das equações diferenciais parciais parabólicas. Para a equação (3.23), ou seja, na ausência de potenciais, existem diversos métodos numéricos que podem empregados para a sua solução. Tais métodos consistem na discretização dos operadores diferenciais, sendo que a diferença entre seus esquemas de discretização diz respeito ao erro cometido na aproximação e a estabilidade numérica do método.

Este último aspecto refere-se à escolha adequada dos passos de integração nas coordenadas espacial e temporal, além da constante σ , para assegurar a convergência das soluções para um valor finito. Isto significa que uma escolha não apropriada de tais constantes levam a soluções que divergem a cada passo no método.

Ainda no âmbito da equação (3.23), a escolha adequada das constantes é inferida através da análise de estabilidade de *von Neumann* cuja dedução, bem como discussão, pode ser encontrada nas referências [78, 79].

Através de tal critério de estabilidade é possível demonstrar que certos esquemas de discretização para a equação (3.23) são *incondicionalmente estáveis*, isto é, sua estabilidade é sempre garantida e independente da escolha dos passos de integração nas coordenadas espacial e temporal, bem como de outras constantes. Embora a implementação de métodos incondicionalmente estáveis seja mais trabalhosa do que os demais métodos, sua utilização é desejável devido sua garantia de estabilidade. Neste trabalho são empregados os métodos implícitos de *Crank-Nicolson* e de *D'yakonov*, descritos a seguir.

Considerando, por simplicidade, a equação (3.23) em uma dimensão

$$\sigma \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} = \frac{\partial u(x, t)}{\partial t}, \quad (3.24)$$

pelo esquema de Crank-Nicolson, sua forma discretizada é

$$\frac{U_j^{n+1} - U_j^n}{h_t} = \frac{1}{2} \sigma \left[\delta_j^2 \left(U_j^{n+1} + U_j^n \right) \right], \quad (3.25)$$

com

$$\delta_j^2 U_j = \frac{U_{j+1} - 2U_j + U_{j-1}}{h_j^2}, \quad (3.26)$$

onde h_j e h_t são, respectivamente, a largura do passo de integração no espaço e no tempo.

Definindo $d = \sigma h_t / h_j^2$ e reorganizando os termos, tem-se que

$$U_j^{n+1} - \frac{d}{2} \left(U_{j+1}^{n+1} - 2U_j^{n+1} + U_{j-1}^{n+1} \right) = U_j^n + \frac{d}{2} \left(U_{j+1}^n - 2U_j^n + U_{j-1}^n \right), \quad (3.27)$$

ou em sua forma matricial

$$\begin{aligned} & \begin{bmatrix} 1+d & -d/2 & 0 & \cdot & \cdot & 0 \\ -d/2 & 1+d & -d/2 & 0 & \cdot & 0 \\ 0 & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & 0 & -d/2 & 1+d & -d/2 \\ 0 & \cdot & \cdot & 0 & -d/2 & 1+d \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U_1^{n+1} \\ U_2^{n+1} \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ U_{j-1}^{n+1} \end{bmatrix} = \\ & = \begin{bmatrix} 1-d & d/2 & 0 & \cdot & \cdot & 0 \\ d/2 & 1-d & d/2 & 0 & \cdot & 0 \\ 0 & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & 0 & d/2 & 1-d & d/2 \\ 0 & \cdot & \cdot & 0 & d/2 & 1-d \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U_1^n \\ U_2^n \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ U_{j-1}^n \end{bmatrix}, \end{aligned}$$

onde j e n correspondem, respectivamente, aos passos na direção x e no tempo t .

Sendo a equação matricial do método de Crank-Nicolson constituída de matrizes tri-diagonais, ou seja, as quais seus únicos elementos não nulos estão presentes na diagonal principal e na primeira diagonal acima e abaixo desta, então pode-se usar o método da decomposição LU para resolver este sistema de equações [78].

Dada uma matriz A este método consiste em encontrar duas matrizes denominadas inferior (L), onde os elementos da diagonal principal são iguais a 1 e somente os elementos da primeira diagonal abaixo desta são não nulos, e superior (U), onde os elementos da diagonal principal e da primeira acima desta são não nulos. Essas matrizes são tais que o produto LU resulta em A .

Neste problema a matriz A corresponde a matriz quadrada do lado esquerdo. Por simplicidade a matriz coluna do lado esquerdo (contendo os elementos $n+1$) será denominada x e o produto matricial do lado direito será denominado B .

Com isso a equação matricial do método de Crank-Nicolson é representada como

$$Ax = B \quad (3.28)$$

Na decomposição LU primeiramente é resolvida a equação

$$Lz = B, \quad (3.29)$$

onde z é uma matriz coluna cuja as entradas são incógnitas, encontradas na solução deste sistema. Feito isso resolve-se a equação

$$Ux = z, \quad (3.30)$$

determinando assim os valores da matriz coluna x .

Entretanto, neste trabalho, foram estudados sistemas em duas e três dimensões em coordenadas polares e cilíndricas (assumindo simetria na coordenada angular θ). No caso bidimensional a equação de difusão é

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \sigma \left(\frac{\partial^2 u}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial u}{\partial r} \right) \quad (3.31)$$

e, pelo método de Crank-Nicolson, sua discretização é dada por

$$\begin{aligned} \frac{U_j^{n+1} - U_j^n}{h_t} = \frac{1}{2} \sigma \left[\frac{U_{j+1}^{n+1} - 2U_j^{n+1} + U_{j-1}^{n+1}}{h_j^2} + \frac{1}{jh_j} \frac{U_{j+1}^{n+1} - U_{j-1}^{n+1}}{2h_j} \right. \\ \left. + \frac{U_{j+1}^n - 2U_j^n + U_{j-1}^n}{h_j^2} + \frac{1}{jh_j} \frac{U_{j+1}^n - U_{j-1}^n}{2h_j} \right]. \end{aligned} \quad (3.32)$$

Definindo $d = \sigma h_t / h_j^2$, então

$$\begin{aligned} U_j^{n+1} - \frac{d}{2} \left[\left(U_{j+1}^{n+1} - 2U_j^{n+1} + U_{j-1}^{n+1} \right) + \left(\frac{U_{j+1}^{n+1} - U_{j-1}^{n+1}}{2j} \right) \right] \\ = U_j^n + \frac{d}{2} \left[\left(U_{j+1}^n - 2U_j^n + U_{j-1}^n \right) + \left(\frac{U_{j+1}^n - U_{j-1}^n}{2j} \right) \right]. \end{aligned} \quad (3.33)$$

Obtém-se finalmente que o esquema de Crank-Nicolson para equação de difusão em duas dimensões em coordenadas polares é

$$\left(1 - \frac{d}{2} \delta_j^2 \right) U_j^{n+1} = \left(1 + \frac{d}{2} \delta_j^2 \right) U_j^n, \quad (3.34)$$

onde

$$\delta_j^2 U_j = (U_{j+1} - 2U_j + U_{j-1}) + \left(\frac{U_{j+1} - U_{j-1}}{2j} \right). \quad (3.35)$$

sendo esse o esquema de Crank-Nicolson em coordenadas polares utilizado nesse trabalho.

No caso tridimensional, onde a equação de difusão em coordenadas cilíndricas é dada por

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \sigma \left(\frac{\partial^2 u}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial u}{\partial r} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right), \quad (3.36)$$

sua discretização, pelo método de Crank-Nicolson, é

$$\begin{aligned} \frac{U_{j,k}^{n+1} - U_{j,k}^n}{h_t} = \frac{1}{2}\sigma \left[\frac{U_{j+1,k}^{n+1} - 2U_{j,k}^{n+1} + U_{j-1,k}^{n+1}}{h_j^2} + \frac{1}{jh_j} \frac{U_{j+1,k}^{n+1} - U_{j-1,k}^{n+1}}{2h_j} + \frac{U_{j+1,k}^n - 2U_{j,k}^n + U_{j-1,k}^n}{h_j^2} \right. \\ \left. + \frac{1}{jh_j} \frac{U_{j+1,k}^n - U_{j-1,k}^n}{2h_j} + \frac{U_{j,k+1}^{n+1} - 2U_{j,k}^{n+1} + U_{j,k-1}^{n+1}}{h_k^2} + \frac{U_{j,k+1}^n - 2U_{j,k}^n + U_{j,k-1}^n}{h_k^2} \right]. \quad (3.37) \end{aligned}$$

Definindo $d = \sigma h_t / (h_j h_k)^2$,

$$\begin{aligned} U_{j,k}^{n+1} - \frac{d}{2} \left[h_k^2 (U_{j+1,k}^{n+1} - 2U_{j,k}^{n+1} + U_{j-1,k}^{n+1}) + h_j h_k^2 \left(\frac{U_{j+1,k}^{n+1} - U_{j-1,k}^{n+1}}{2jh_j} \right) + h_j^2 (U_{j,k+1}^{n+1} - 2U_{j,k}^{n+1} + U_{j,k-1}^{n+1}) \right] \\ = U_{j,k}^n + \frac{d}{2} \left[h_k^2 (U_{j+1,k}^n - 2U_{j,k}^n + U_{j-1,k}^n) + h_j h_k^2 \left(\frac{U_{j+1,k}^n - U_{j-1,k}^n}{2jh_j} \right) + h_j^2 (U_{j,k+1}^n - 2U_{j,k}^n + U_{j,k-1}^n) \right], \quad (3.38) \end{aligned}$$

o esquema de Crank-Nicolson em coordenadas cilíndricas é dado por

$$\left(1 - \frac{d}{2}\delta_j^2\right) \left(1 - \frac{d}{2}\delta_k^2\right) U_{j,k}^{n+1} = \left(1 + \frac{d}{2}\delta_j^2\right) \left(1 + \frac{d}{2}\delta_k^2\right) U_{j,k}^n. \quad (3.39)$$

onde

$$\delta_j^2 U_{j,k} = h_k^2 (U_{j+1,k} - 2U_{j,k} + U_{j-1,k}) + h_j h_k^2 \left(\frac{U_{j+1,k} - U_{j-1,k}}{2jh_j} \right), \quad (3.40)$$

e

$$\delta_k^2 U_{j,k} = h_r^2 (U_{j,k+1} - 2U_{j,k} + U_{j,k-1}). \quad (3.41)$$

O esquema de D'yakonov [82] é obtido através do esquema de Crank-Nicolson e é dado por

$$\begin{aligned} \left(1 - \frac{d}{2}\delta_j^2\right) U_{j,k}^{n+1/2} &= \left(1 + \frac{d}{2}\delta_j^2\right) \left(1 + \frac{d}{2}\delta_k^2\right) U_{j,k}^n, \\ \left(1 - \frac{d}{2}\delta_k^2\right) U_{j,k}^{n+1} &= U_{j,k}^{n+1/2}. \end{aligned} \quad (3.42)$$

Vale ressaltar que ambos os métodos são classificados como incondicionalmente estáveis e seu erro é proporcional a $\mathcal{O}(h_t^2 + h_j^2)$. Entretanto tal classificação refere-se à equações lineares não sendo, portanto, válida no contexto de equações não-lineares.

Embora o método de Crank-Nicolson seja amplamente utilizado, optou-se nesse trabalho pelo uso do método de D'yakonov uma vez que em problemas anteriores abordados pelo grupo o mesmo se mostrou mais estável na evolução de vórtices em sistemas bidimensionais.

3.4 Discretização das equações Bogoliubov de-Gennes

Como visto no Capítulo 2, a estabilidade de condensados para pequenas excitações (lineares) é descrita a partir da análise dos autovalores das equações de Bogoliubov-de Gennes que, para as situações de interesse neste trabalho, são dadas por (2.64) e (2.67).

Com o objetivo de encontrar seus autovalores e autovetores tais equações são, primeiramente, escritas em uma forma discreta. Desse modo, a discretização das equações (2.64) resulta em

$$\begin{cases} -\frac{1}{2} \left(\frac{u_{j+1} - 2u_j + u_{j-1}}{h_j^2} \right) - \frac{1}{2jh_j} \left(\frac{u_{j+1} - u_{j-1}}{2h_j} \right) + \left[\frac{1}{2} \frac{(S+L)^2}{(jh_j)^2} - \mu - 2R_j^2 + \frac{(jh_j)^2}{2} \right] u_j \\ \quad - R_j^2 v_j = \omega_L u_j \\ \frac{1}{2} \left(\frac{v_{j+1} - 2v_j + v_{j-1}}{h_j^2} \right) + \frac{1}{2jh_j} \left(\frac{v_{j+1} - v_{j-1}}{2h_j} \right) + \left[-\frac{1}{2} \frac{(S-L)^2}{(jh_j)^2} + \mu + 2R_j^2 - \frac{(jh_j)^2}{2} \right] v_j \\ \quad + R_j^2 u_j = \omega_L v_j \end{cases} \quad (3.43)$$

Reagrupando os termos com mesmo índice j obtém-se

$$\begin{cases} \left[\frac{1}{2} \frac{(S+L)^2}{(jh_j)^2} - \mu - 2R_j^2 + \frac{(jh_j)^2}{2} + \frac{1}{h_j^2} \right] u_j + \left(-\frac{1}{2h_j^2} - \frac{1}{4jh_j^2} \right) u_{j+1} + \left(-\frac{1}{2h_j^2} + \frac{1}{4jh_j^2} \right) u_{j-1} \\ \quad - R_j^2 v_j = \omega_L u_j \\ \left[-\frac{1}{2} \frac{(S-L)^2}{(jh_j)^2} + \mu + 2R_j^2 - \frac{(jh_j)^2}{2} - \frac{1}{h_j^2} \right] v_j - \left(-\frac{1}{2h_j^2} - \frac{1}{4jh_j^2} \right) v_{j+1} - \left(-\frac{1}{2h_j^2} + \frac{1}{4jh_j^2} \right) v_{j-1} \\ \quad + R_j^2 u_j = \omega_L v_j \end{cases} \quad (3.44)$$

Definindo

$$A_j = \left(-\frac{1}{2h_j^2} + \frac{1}{4jh_j^2} \right), \quad C_j = \left(-\frac{1}{2h_j^2} + \frac{1}{4jh_j^2} \right),$$

$$B_j^+ = \left[\frac{1}{2} \frac{(S+L)^2}{(jh_j)^2} - \mu - 2R_j^2 + \frac{(jh_j)^2}{2} + \frac{1}{h_j^2} \right], \quad B_j^- = \left[-\frac{1}{2} \frac{(S-L)^2}{(jh_j)^2} + \mu + 2R_j^2 - \frac{(jh_j)^2}{2} - \frac{1}{h_j^2} \right].$$

o sistema de equações pode ser escrito, assumindo como exemplo apenas nove pontos na coordenada j , em uma forma matricial como

$$\begin{bmatrix}
 B_1^+ & C_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & | & gR_1^2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 A_2 & B_2^+ & C_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & | & 0 & gR_2^2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & A_3 & B_3^+ & C_3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & | & 0 & 0 & gR_3^2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & A_4 & B_4^+ & C_4 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & | & 0 & 0 & 0 & gR_4^2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & A_5 & B_5^+ & C_5 & 0 & 0 & 0 & 0 & | & 0 & 0 & 0 & 0 & gR_5^2 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & A_6 & B_6^+ & C_6 & 0 & 0 & 0 & | & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & gR_6^2 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & A_7 & B_7^+ & C_7 & 0 & 0 & | & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & gR_7^2 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & A_8 & B_8^+ & C_8 & 0 & | & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & gR_8^2 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & A_9 & B_9^+ & 0 & | & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & gR_9^2 \\
 -gR_1^2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & | & B_1^- & -C_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & -gR_2^2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & | & -A_2 & B_2^- & -C_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & -gR_3^2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & | & 0 & -A_3 & B_3^- & -C_3 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & -gR_4^2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & | & 0 & 0 & -A_4 & B_4^- & -C_4 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & -gR_5^2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & | & 0 & 0 & 0 & -A_5 & B_5^- & -C_5 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -gR_6^2 & 0 & 0 & 0 & 0 & | & 0 & 0 & 0 & 0 & -A_6 & B_6^- & -C_6 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -gR_7^2 & 0 & 0 & 0 & | & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -A_7 & B_7^- & -C_7 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -gR_8^2 & 0 & 0 & | & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -A_8 & B_8^- & -C_8 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -gR_9^2 & 0 & | & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -A_9 & B_9^-
 \end{bmatrix}
 \begin{bmatrix}
 u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \\ u_5 \\ u_6 \\ u_7 \\ u_8 \\ u_9 \\ - \\ v_1 \\ v_2 \\ v_3 \\ v_4 \\ v_5 \\ v_6 \\ v_7 \\ v_8 \\ v_9
 \end{bmatrix}
 = \omega_L
 \begin{bmatrix}
 u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \\ u_5 \\ u_6 \\ u_7 \\ u_8 \\ u_9 \\ - \\ v_1 \\ v_2 \\ v_3 \\ v_4 \\ v_5 \\ v_6 \\ v_7 \\ v_8 \\ v_9
 \end{bmatrix}.$$

Para sistemas tridimensionais, as equações de Bogoliubov-de Gennes dadas por (2.67) são discretizadas na forma

$$\left\{ \begin{array}{l}
 -\frac{1}{2} \left(\frac{u_{j+1,k} - 2u_{j,k} + u_{j-1,k}}{h_j^2} \right) - \frac{1}{2jh_j} \left(\frac{u_{j+1,k} - u_{j-1,k}}{2h_j} \right) - \frac{1}{2} \left(\frac{u_{j,k+1} - 2u_{j,k} + u_{j,k-1}}{h_k^2} \right) \\
 \quad + \left[\frac{1}{2} \frac{(S+L)^2}{(jh_j)^2} - \mu - 2R_{j,k}^2 + \frac{(jh_j)^2}{2} \right] u_{j,k} + \frac{(\Omega kh_k)^2}{2} u_{j,k} - R_{j,k}^2 v_{j,k} = \omega_L u_{j,k} \\
 \\
 \frac{1}{2} \left(\frac{v_{j+1,k} - 2v_{j,k} + v_{j-1,k}}{h_j^2} \right) + \frac{1}{2jh_j} \left(\frac{v_{j+1,k} - v_{j-1,k}}{2h_j} \right) + \frac{1}{2} \left(\frac{v_{j,k+1} - 2v_{j,k} + v_{j,k-1}}{h_k^2} \right) \\
 \quad + \left[-\frac{1}{2} \frac{(S-L)^2}{(jh_j)^2} + \mu + 2R_{j,k}^2 - \frac{(jh_j)^2}{2} \right] v_{j,k} - \frac{(\Omega kh_k)^2}{2} v_{j,k} + R_{j,k}^2 u_{j,k} = \omega_L v_{j,k}.
 \end{array} \right. \quad (3.45)$$

Reagrupando os termos com mesmo índice j e k obtém-se

$$\left\{ \begin{array}{l}
 \left[\frac{1}{2} \frac{(S+L)^2}{(jh_j)^2} - \mu - 2R_{j,k}^2 + \frac{(jh_j)^2}{2} + \frac{(\Omega kh_k)^2}{2} + \frac{1}{h_j^2} + \frac{1}{h_k^2} \right] u_{j,k} + \left(-\frac{1}{2h_j^2} - \frac{1}{4jh_j^2} \right) u_{j+1,k} \\
 \quad + \left(-\frac{1}{2h_j^2} + \frac{1}{4jh_j^2} \right) u_{j-1,k} - \frac{1}{2h_k^2} u_{j,k+1} - \frac{1}{2h_k^2} u_{j,k-1} - R_{j,k}^2 v_{j,k} = \omega_L u_{j,k} \\
 \\
 \left[-\frac{1}{2} \frac{(S-L)^2}{(jh_j)^2} + \mu + 2R_{j,k}^2 - \frac{(jh_j)^2}{2} - \frac{(\Omega kh_k)^2}{2} - \frac{1}{h_j^2} - \frac{1}{h_k^2} \right] v_{j,k} - \left(-\frac{1}{2h_j^2} - \frac{1}{4jh_j^2} \right) v_{j+1,k} \\
 \quad - \left(-\frac{1}{2h_j^2} + \frac{1}{4jh_j^2} \right) v_{j-1,k} + \frac{1}{2h_k^2} v_{j,k+1} + \frac{1}{2h_k^2} v_{j,k-1} + R_{j,k}^2 u_{j,k} = \omega_L v_{j,k}.
 \end{array} \right. \quad (3.46)$$

Definindo

$$\begin{aligned}
 A_{jk} &= \left(-\frac{1}{2h_j^2} + \frac{1}{4jh_j^2} \right), & C_{jk} &= \left(-\frac{1}{2h_j^2} + \frac{1}{4jh_j^2} \right), & D_{jk} &= \frac{1}{2h_k^2}, \\
 B_{jk}^+ &= \left[\frac{1}{2} \frac{(S+L)^2}{(jh_j)^2} - \mu - 2R_{j,k}^2 + \frac{(jh_j)^2}{2} + \frac{(\Omega kh_k)^2}{2} + \frac{1}{h_j^2} + \frac{1}{h_k^2} \right], \\
 B_{jk}^- &= \left[-\frac{1}{2} \frac{(S-L)^2}{(jh_j)^2} + \mu + 2R_{j,k}^2 - \frac{(jh_j)^2}{2} - \frac{(\Omega kh_k)^2}{2} - \frac{1}{h_j^2} - \frac{1}{h_k^2} \right]. \tag{3.47}
 \end{aligned}$$

o sistema de equações pode ser escrito, assumindo como exemplo apenas três pontos nas coordenadas j e k , em uma forma matricial como

$$\begin{bmatrix}
 B_{11}^+ & C_{11} & 0 & -D & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & | & gR_{11}^2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 A_{21} & B_{21}^+ & C_{21} & 0 & -D & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & | & 0 & gR_{21}^2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & A_{31} & B_{31}^+ & 0 & 0 & -D & 0 & 0 & 0 & 0 & | & 0 & 0 & gR_{31}^2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 -D & 0 & 0 & B_{12}^+ & C_{12} & 0 & -D & 0 & 0 & 0 & | & 0 & 0 & 0 & gR_{12}^2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & -D & 0 & A_{22} & B_{22}^+ & C_{22} & 0 & -D & 0 & 0 & | & 0 & 0 & 0 & 0 & gR_{22}^2 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & -D & 0 & A_{32} & B_{32}^+ & 0 & 0 & -D & 0 & | & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & gR_{32}^2 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & -D & 0 & 0 & B_{13}^+ & C_{13} & 0 & 0 & | & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & gR_{13}^2 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & -D & 0 & A_{23} & B_{23}^+ & C_{23} & 0 & | & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & gR_{23}^2 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -D & 0 & A_{33} & B_{33}^+ & 0 & | & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & gR_{33}^2 \\
 - & - & - & - & - & - & - & - & - & - & | & - & - & - & - & - & - & - & - \\
 -gR_{11}^2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & | & B_{11}^- & -C_{11} & 0 & D & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & -gR_{21}^2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & | & -A_{21} & B_{21}^- & -C_{21} & 0 & D & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & -gR_{31}^2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & | & 0 & -A_{31} & B_{31}^- & 0 & 0 & D & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & -gR_{12}^2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & | & D & 0 & 0 & B_{12}^- & -C_{12} & 0 & D & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & -gR_{22}^2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & | & 0 & D & 0 & -A_{22} & B_{22}^- & -C_{22} & 0 & D \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -gR_{32}^2 & 0 & 0 & 0 & 0 & | & 0 & 0 & D & 0 & -A_{32} & B_{32}^- & 0 & D \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -gR_{13}^2 & 0 & 0 & 0 & | & 0 & 0 & 0 & D & 0 & 0 & B_{13}^- & -C_{13} \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -gR_{23}^2 & 0 & 0 & | & 0 & 0 & 0 & 0 & D & 0 & -A_{23} & B_{23}^- \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -gR_{33}^2 & 0 & | & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & D & 0 & -A_{33}
 \end{bmatrix}
 \begin{bmatrix}
 u_{11} \\
 u_{21} \\
 u_{31} \\
 u_{12} \\
 u_{22} \\
 u_{32} \\
 u_{13} \\
 u_{23} \\
 u_{33} \\
 - \\
 v_{11} \\
 v_{21} \\
 v_{31} \\
 v_{12} \\
 v_{22} \\
 v_{32} \\
 v_{13} \\
 v_{23} \\
 v_{33}
 \end{bmatrix}
 = \omega_L
 \begin{bmatrix}
 u_{11} \\
 u_{21} \\
 u_{31} \\
 u_{12} \\
 u_{22} \\
 u_{32} \\
 u_{13} \\
 u_{23} \\
 u_{33} \\
 - \\
 v_{11} \\
 v_{21} \\
 v_{31} \\
 v_{12} \\
 v_{22} \\
 v_{32} \\
 v_{13} \\
 v_{23} \\
 v_{33}
 \end{bmatrix}.$$

Os autovalores dessa matriz são encontrados a partir da utilização de pacotes para a solução de problemas gerais em álgebra linear, tais como o *LAPACK* [83] e o *ARPACK* [84].

Capítulo 4

Resultados

No presente capítulo são apresentados os resultados deste trabalho, obtidos através de simulações computacionais de equações presentes no capítulo 2 a partir das técnicas discutidas no capítulo 3.

Inicialmente, na seção 4.1, são reproduzidos os resultados da referência [62], onde são estudadas as soluções da equação de Gross-Pitaevskii em duas dimensões, com potencial de interação entre os átomos atrativo e constante, para valores de vorticidade $S = 0, 1$ e 2 . São discutidos os resultados do potencial químico e da energia do vórtice em função do número de átomos no condensado. Em seguida apresentam-se as curvas da parte imaginária dos autovalores das equações de Bogoliubov-de Gennes em função do potencial químico, com as quais se determina a região de estabilidade do sistema. A evolução temporal do sistema para diferentes valores do potencial químico também é discutida.

Na seção 4.2 é feita uma análise semelhante à aquela feita na seção anterior. Entretanto, o potencial de interação entre os átomos utilizado nesta seção é atrativo, porém espacialmente modulado. Como será discutido, tal alteração no sistema é capaz de estabilizar vórtices multicarregados, isto é, vórtices com $S > 1$.

Por fim, na seção 4.3, são exibidos os resultados reproduzidos da referência [65], onde são estudados vórtices em três dimensões, novamente com potencial de interação entre os átomos atrativo e constante, para valores de vorticidade $S = 0, 1$ e 2 e para diferentes valores de frequência de confinamento na direção perpendicular.

4.1 Vórtices em condensados atrativos bidimensionais - g constante

Nessa seção são estudados condensados atrativos em confinamento harmônico, no qual o potencial de interação entre os átomos g é constante em todo o espaço. Considera-se que o condensado é mais confinado em uma das dimensões em relação às outras duas, de tal modo que seja válido tratar o problema como um gás bidimensional, descrito pela equação (2.57).

4.1.1 Potencial químico e energia

Os primeiros resultados dessa seção dizem respeito ao cálculo do potencial químico μ e da energia E em função do número de átomos no condensado. Mantendo-se $g = -1$ na equação (2.57) foram obtidos, para valores de vorticidade $S = 0, 1$ e 2 , os resultados mostrados na figura 4.1.

Figura 4.1: Potencial químico μ e energia E em função do número de átomos no condensado para valores de vorticidade $S = 0, 1$ e 2 . Resultados obtidos a partir das equações (2.57) e (2.58). As linhas sólidas denotam a região de estabilidade das soluções da equação (2.57), enquanto as linhas tracejadas denotam a região de instabilidade do condensado.

Nota-se nos gráficos que as soluções com $S = 0$ são estáveis em todo o intervalo. As soluções com valor de vorticidade $S = 1$ são estáveis para valores de μ entre $\mu = 2$ e $\mu = \mu_{cr} = 1.27$, ou ainda, em termos do número de átomos N , entre $N = 0$ e $N = N_{cr} = 7.75$. Conforme ilustrado na figura, soluções com valor de vorticidade $S = 2$ não apresentam estabilidade para valor algum de N .

Pode-se ainda observar que, à medida que o valor de μ decresce, o valor do número de átomos N aumenta, tendendo assintoticamente a um certo valor. Uma análise semi-analítica, descrita no Apêndice B, permite estimar o valor do limite assintótico. A comparação entre o resultado apresentado na figura 4.1 e o limite assintótico encontra-se na figura 4.2.

Figura 4.2: Comparação das curvas de $\mu \times N$ obtidas através da solução da equação (2.57) (linhas sólidas) e do limite assintótico descrito no Apêndice B (linhas tracejadas) para valores de vorticidade $S = 0, 1$ e 2 .

Para comparação com os resultados numéricos obtidos pela equação (2.57) foram também realizados cálculos variacionais. Para isso foi utilizado um *ansatz* gaussiano como função de onda, contendo um parâmetro variacional ρ . Tal parâmetro é encontrado a partir da substituição do *ansatz* na expressão (2.58) para a energia do sistema e sucessiva minimização da mesma. No caso de vórtices em duas dimensões para g constante o problema pode ser resolvido analiticamente e é descrito em detalhes no Apêndice C. A comparação entre os resultados numéricos e provenientes da análise variacional são exibidos na figura 4.3.

Figura 4.3: Comparação das curvas de $\mu \times N$ obtidas através da solução da equação (2.57) (linhas sólidas) e por cálculos variacionais descritos no Apêndice C (linhas tracejadas) para valores de vorticidade $S = 0, 1$ e 2 .

Embora os cálculos variacionais aqui utilizados sejam de simples realização, através dos mesmos não é possível inferir a respeito da dinâmica do sistema, sendo assim necessário determinar numericamente as soluções da equação de Gross-Pitaevskii. Portanto, para este trabalho, a análise variacional é utilizada apenas como um método quantitativo para verificar a validade das soluções numéricas.

4.1.2 Estabilidade

Com o objetivo de determinar a região de estabilidade do sistema foram calculadas as frequências características dos modos normais de pequenas oscilações do sistema através das equações de Bogoliubov-de Gennes (2.64). Como já mencionado, se as frequências características do sistema possuem componente imaginária, então ocorrem instabilidades dinâmicas no sistema.

A figura 4.4 corresponde a parte imaginária positiva das frequências características das equações de Bogoliubov-de Gennes em função do potencial químico μ para condensados com $S = 1$ e $S = 2$ para diferentes modos de excitação L .

Nota-se na figura 4.4 que, para $S = 1$, ao diminuir o valor de μ o primeiro modo a exibir frequências características com parte imaginária corresponde a $L = 2$ sendo este, portanto, o modo dominante na instabilidade no intervalo de μ estudado. Isto permite concluir que a solução para $S = 1$ é estável até certo valor μ_{cr} , a partir do qual surge a instabilidade.

Figura 4.4: Parte imaginária positiva dos modos normais ω_L das equações de Bogoliubov-de Gennes em função do potencial químico μ para condensados com $S = 1$ e $S = 2$. O índice L denota o modo de excitação.

Nesta figura encontra-se que $\mu_{cr} = 1.27$. Conclui-se também que a solução para $S = 2$ é instável para todo valor de μ , uma vez que o modo $L = 2$ sempre apresenta frequências características com parte imaginária. Vale ressaltar que na região de μ apresentada nas figuras foram investigados os modos entre $L = 1$ e $L = 12$. Logo, os outros modos não exibidos não possuem frequências características com parte imaginária.

4.1.3 Evolução temporal dos vórtices

Com o objetivo de verificar a consistência dos resultados provenientes da análise pelas equações de Bogoliubov-de Gennes foram feitas simulações nas quais realiza-se a evolução temporal dos vórtices.

Em uma primeira etapa foi simulado um vórtice com $S = 1$ para valor de potencial químico $\mu = 1.4$ ($N = 6.63$) que, de acordo com a figura 4.4 corresponde a uma região de estabilidade do vórtice. Nas simulações, uma perturbação aleatória da ordem de 5% do valor da amplitude inicial é adicionada ao vórtice no instante $t = 0$. A evolução temporal deste vórtice é ilustrada na figura 4.5.

Pela figura 4.5 nota-se que a perturbação rapidamente desaparece do vórtice, o que indica sua estabilidade para o valor de μ em questão.

A seguir foi estudado um vórtice, novamente com $S = 1$, para o valor de potencial químico $\mu = 1.2$ ($N = 8.46$) o que, de acordo com a figura 4.4, corresponde a um regime instável.

Observa-se para este caso, de acordo com a evolução temporal presente na figura 4.6, que o vórtice se divide em duas componentes e, após um certo tempo, se reconecta. Ao que foi observado, tal processo de quebra e sucessiva reconexão ocorre indefinidamente. Tal fenômeno é conhecido na literatura como *modo de respirar* (*breathing mode*, no inglês) [62].

Um último caso a ser discutido refere-se a região onde não mais se observa o modo de respirar. Para este caso o vórtice se quebra em duas partes, entretanto a reconexão entre as mesmas não ocorre.

Figura 4.5: Evolução temporal da densidade (figuras superiores) e da fase (figuras inferiores) para um vórtice com $S = 1$ e $\mu = 1.4$ ($N = 6.63$). Uma perturbação adicionada em $t = 0$ é rapidamente suprimida no regime estável.

Figura 4.6: Evolução temporal da densidade para um vórtice com $S = 1$ e $\mu = 1.2$ ($N = 8.46$), onde se observa a quebra e sucessiva reconexão do vórtice.

4.2 Vórtices em condensados atrativos bidimensionais - g espacialmente modulado

Os resultados da seção anterior referem-se a vórtices em um condensado atrativo no qual o potencial de interação entre os átomos é constante em todo o condensado. Nessa seção é estudado um modelo no qual tal potencial de interação é espacialmente modulado na forma

$$g(r) = g_0 \exp(-b^2 r^2/2). \quad (4.1)$$

Como será discutido, com o tipo de interação em questão é possível estabilizar vórtices com valores de vorticidade de até $S = 6$, pelo menos. Tais resultados nunca foram observados experimentalmente ou previstos teoricamente, de modo que os mesmos foram recentemente publicados no periódico *Physical Review A* [64].

4.2.1 Potencial químico e energia

Do mesmo modo que na seção anterior, na presente seção é estudado um condensado sujeito a um confinamento harmônico bidimensional. Entretanto o potencial de interação entre os átomos aqui considerado é modulado espacialmente, de maneira que o seu valor varia ao longo do condensado. No potencial em questão, dado por (4.1), considera-se que $g_0 = -1$. Os resultados apresentados nas figuras 4.7 dizem respeito ao cálculo do potencial químico μ e da energia E em função do número de átomos de condensados com valores de vorticidade de $S = 1$ a $S = 6$.

Figura 4.7: Potencial químico μ e energia E em função do número de átomos no condensado para diferentes vorticidades S , com $b = 1.5$. As linhas sólidas e tracejadas indicam, respectivamente, as regiões estáveis e instáveis das soluções da equação (2.57).

Nota-se na figura 4.7 a existência de regiões de estabilidade para os vórtices com valor de vorticidade de até $S = 6$. Observou-se na primeira seção desse capítulo, na qual foram reproduzidos os resultados da referência [62], que vórtices em condensados atrativos com $S = 2$ são instáveis para todos os valores do potencial químico μ . Portanto os resultados aqui apresentados demonstram que potenciais interatômicos espacialmente modulados são capazes estabilizar vórtices multicarregados, sendo tal estabilização nunca antes observada em experimentos ou predita teoricamente.

Os resultados da figura 4.7 foram obtidos escolhendo-se $b = 1.5$ em (4.1). Nas tabelas 4.1 e 4.2 são apresentadas as regiões de estabilidade em termos de μ e N , respectivamente, para alguns valores de b . Observa-se na tabela 4.1 que, para $b = 1.5$ e $b = 2.0$, há a estabilidade das soluções do tipo vórtice para todos os valores de vorticidade entre $S = 1$ e $S = 6$. Os intervalos de estabilidade das soluções em termos de μ são maiores para $b = 1.5$, embora nota-se pela tabela 2 que para $b = 2.0$ o condensado pode conter um número maior de átomos em relação aos outros valores de b .

Tabela 4.1: Intervalos de $(\mu_{\min}; \mu_{\max})$ nos quais vórtices são estáveis, para diferentes valores de S e b . Para $S = 1, 3, 4$, somente $\mu_{\min}$ é dado, pois $\mu_{\max} = 1 + S$ nesses casos.

	S=1	S=2	S=3	S=4	S=5	S=6
b=0.75	1.21	2.16 - 2.27	Instável	Instável	Instável	Instável
b=1.0	1.29	2.30 - 3	Instável	4.82	5.51 - 5.84	6.51 - 6.60
b=1.5	1.51	2.58 - 3	3.64	4.69	5.73 - 6	6.76 - 7
b=2.0	1.66	2.73 - 3	3.79	4.83	5.85 - 6	6.84 - 6.96

Tabela 4.2: Intervalos de $(N_{\min}; N_{\max})$ nos quais vórtices são estáveis, para diferentes valores de S e b . Para $S = 1, 3, 4$, somente $N_{\max}$ é dado, pois $N_{\min} = 0$ nesses casos.

	S=1	S=2	S=3	S=4	S=5	S=6
b=0.75	11.0	18 - 20.3	Instável	Instável	Instável	Instável
b=1.0	12.2	0 - 25	Instável	27.4	42.5 - 103	150 - 172
b=1.5	15.1	0 - 41	101	237	0 - 550	0 - 1274
b=2.0	20.7	0 - 83	299	1066	0 - 3829	2160 - 13418

Na figura 4.8 estão presentes os perfis de densidade de probabilidade para vórtices com $S = 3$, $\mu = 1$ e diferentes valores de b . A medida que o valor de b aumenta, nota-se na figura que a amplitude da densidade de probabilidade torna-se maior e sua largura diminui.

Figura 4.8: Perfis de densidade para diferentes valores de b com $S = 3$ e $\mu = 1$.

Figura 4.9: Densidade de probabilidade (figura superior) para $\mu = 1$ e potencial de interação $g(r)$ (figura inferior) para $S = 3$ e $b = 1.5$.

4.2.2 Estabilidade

Assim como na seção anterior, foram calculados os modos normais de pequenas oscilações do sistema através das equações de Bogoliubov-de Gennes (2.64) para se determinar sua região de estabilidade.

A figura 4.10 corresponde a parte imaginária positiva das frequências características das equações de Bogoliubov-de Gennes em função do potencial químico μ para condensados com valores de vorticidade de $S = 1$ a $S = 6$ para diferentes modos de excitação L .

Figura 4.10: Parte imaginária positiva dos modos normais ω_L das equações de Bogoliubov-de Gennes em função do potencial químico μ para condensados com $S = 1$ a $S = 6$. O índice L denota o modo de excitação.

Como sumarizado pela tabela 4.1 nota-se, pelas figuras 4.10, que para todos os valores de S existe uma região de valores de μ entre $\mu_{max} = S + 1$ e um certo valor μ_{min} onde nenhum dos modos exibe frequências com parte imaginária, o que indica estabilidade das soluções para os vórtices nesses intervalos de μ .

4.2.3 Evolução temporal dos vórtices

Para corroborar os resultados de estabilidade obtidos através da análise das frequências características das equações de Bogoliubov-de Gennes, foram realizadas simulações da evolução temporal dos vórtices, nas quais é inserida, no instante $t = 0$, uma perturbação aleatória com amplitude relativa de 5% da função de onda com o objetivo de verificar a estabilidade de tais vórtices.

A figura 4.11 diz respeito a evolução temporal de um vórtice com $S = 3$ e $\mu = 3.8$ ($N = 69.18$) o que, segundo a figura 4.10, corresponde a uma situação na qual o vórtice é estável. De fato, o que se observa é que a perturbação aleatória rapidamente se dissipa para essa situação, o que indica a estabilidade do vórtice.

Figura 4.11: Evolução da densidade (figuras superiores) e fase (figuras inferiores) para um vórtice com $S = 3$ e $\mu = 3.8$ ($N = 69.18$). Uma perturbação aleatória rapidamente se dissipa nesse regime estável. Nos perfis de densidade as cores mais claras correspondem as regiões onde a densidade de probabilidade da função de onda do condensado é maior enquanto que, nos perfis de fase a mesma varia de $-\pi$ a π das regiões mais escuras para as mais claras, respectivamente.

Portanto, escolhendo com base nas curvas para $S = 3$ da figura 4.10 diferentes valores de μ pode-se selecionar alguns nos quais certos modos são dominantes. Por exemplo, para $\mu = 3.3$ ($N = 128.51$) o modo dominante é $L = 1$. Nota-se na figura 4.12 que, após algum tempo o condensado colapsa para uma certa região no espaço. Para $\mu = 2.7$ ($N = 127.55$) a figura 4.13 mostra que o condensado se divide em três partes. Para esse valor de μ o modo dominante é $L = 2$, embora $L = 3$ também seja significativo nesse caso.

Na figura 4.14, onde $\mu = 2$ ($N = 113.1$) e $L = 3$ é dominante, a quebra do condensado também ocorre em três partes. Finalmente, for $\mu = 0$ ($N = 90.8$), o condensado se fragmenta em quatro peças (figura 4.15), confirmando o fato de que o modo $L = 4$ é dominante.

Figura 4.12: Evolução temporal da densidade para $S = 3$ e $\mu = 3.3$ ($N = 128.51$).

Figura 4.13: Evolução temporal da densidade para $S = 3$ e $\mu = 2.7$ ($N = 127.55$).

Figura 4.14: Evolução temporal da densidade para $S = 3$ e $\mu = 2$ ($N = 113.1$).

Figura 4.15: Evolução temporal da densidade para $S = 3$ e $\mu = 0$ ($N = 90.8$).

4.3 Vórtices em condensados atrativos tridimensionais - g constante

Nesta etapa do trabalho são estudadas as soluções tridimensionais do tipo vórtice para a equação de Gross-Pitaevskii em coordenadas cilíndricas, descrita por (2.60). Novamente considera-se o potencial de interação entre os átomos constante. Tais condensados são estudados valores de vorticidade de $S = 0, 1$ e 2 e para valores de frequência de confinamento na direção perpendicular de $\Omega = 0.1, 1$ e 10 . O caso $\Omega = 0.1$ corresponde a um condensado fracamente confinado na direção z e, portanto, alongado. Para $\Omega = 10$ o condensado é achatado. Os resultados aqui apresentados foram reproduzidos da referência [65].

4.3.1 Potencial químico e energia

As figuras a seguir correspondem as curvas de potencial químico μ e energia E em função do número de átomos N para valores de frequência $\Omega = 0.1, 1$ e 10 , e vorticidade $S = 0, 1$ e 2 . Em contraste com o resultado bidimensional, nota-se na figura (4.16) que as soluções com $S = 0$ são instáveis para condensados tridimensionais em um certo intervalo de potencial químico. Entretanto, assim como no caso bidimensional, as soluções para $S = 1$ também possuem um intervalo de estabilidade, enquanto as soluções para $S = 2$ são instáveis para qualquer valor de μ .

Figura 4.16: Potencial químico μ e energia E em função do número de átomos para um condensado condensado com $S = 0$ e valores de frequência de confinamento na direção perpendicular $\Omega = 0.1, 1$ e 10 . Resultados obtidos a partir das equações (2.60) e (2.61). As linhas sólidas denotam a região de estabilidade das soluções da equação (2.60), enquanto as linhas tracejadas denotam a região de instabilidade das soluções.

Figura 4.17: Potencial químico μ e energia E em função do número de átomos para um condensado condensado com $S = 1$ e valores de frequência de confinamento na direção perpendicular $\Omega = 0.1, 1$ e 10 . Resultados obtidos a partir das equações (2.60) e (2.61). As linhas sólidas denotam a região de estabilidade das soluções da equação (2.60), enquanto as linhas tracejadas denotam a região de instabilidade das soluções.

Figura 4.18: Potencial químico μ e energia E em função do número de átomos para um condensado condensado com $S = 2$ e valores de frequência de confinamento na direção perpendicular $\Omega = 0.1, 1$ e 10 . Resultados obtidos a partir das equações (2.60) e (2.61). As linhas sólidas denotam a região de estabilidade das soluções da equação (2.60), enquanto as linhas tracejadas denotam a região de instabilidade das soluções. Para tal vorticidade nota-se que o condensado é instável para qualquer valor de N .

Tal como feito na Seção 4.1, apresentam-se nas figuras 4.19 e 4.20, respetivamente, as análises assintótica e variacional da equação de Gross-Pitaevskii em comparação com os resultados de potencial químico μ em função do número de átomos N .

Figura 4.19: Comparação das curvas de $\mu \times N$ dadas através da solução da equação (2.60) e do limite assintótico descrito no Apêndice B para valores de frequência de confinamento na direção perpendicular $\Omega = 0.1, 1$ e 10 e de vorticidade $S = 0, 1$ e 2 .

Vale ressaltar que, como observado na Seção 4.1, o número de átomos tende a um valor constante no limite de $\mu \rightarrow -\infty$ para um condensado bidimensional. Entretanto quando se considera um condensado em três dimensões nota-se que o número de átomos tende a zero para o mesmo limite, como pode ser observado no Apêndice B.

Figura 4.20: Comparação das curvas de $\mu \times N$ dadas através da solução da equação (2.60) (linhas sólidas) e de cálculos variacionais (linhas tracejadas) descritos no Apêndice C para valores de frequência de confinamento na direção perpendicular $\Omega = 0.1, 1$ e 10 e de vorticidade $S = 0, 1$ e 2 .

4.3.2 Estabilidade

Os estudos de estabilidade a seguir foram realizados para valores de frequência de confinamento Ω na direção z iguais a 0.1, 1 e 10.

A análise da estabilidade para soluções com valores de vorticidade $S = 1$ e $S = 2$ foi realizada através das soluções das equações de Bogoliubov-de Gennes. Para as soluções com $S = 0$ tal estudo está em andamento. Porém, como discutido na referência [65], a análise dos autovalores da equação de Bogoliubov-de Gennes para as soluções $S = 0$ satisfaz o critério de estabilidade de Vakhitov-Kolokolov, o qual estabelece que as soluções da equação de Schrödinger não-linear são estáveis se [85, 86]

$$\frac{d\mu}{dN} < 0. \quad (4.2)$$

Embora o critério de Vakhitov-Kolokolov seja obedecido para as soluções com $S = 0$ aqui estudadas, o mesmo é uma condição necessária, porém não suficiente para a estabilidade de soluções. Existem alguns exemplos na literatura onde o critério não é violado [87, 88], de modo que pode-se afirmar que são necessárias readequações ao critério com o objetivo de estender seu domínio de validade.

As figuras a seguir exibem as frequências características dos modos L das equações de Bogoliubov-de Gennes do condensado em função do potencial químico μ para $S = 1$ e $S = 2$, com $\Omega = 0.1, 1$ e 10.

Figura 4.21: Parte imaginária das frequências características dos modos L das equações de Bogoliubov-de Gennes para diferentes frequências Ω para $S = 1$.

Figura 4.22: Parte imaginária das frequências características dos modos L das equações de Bogoliubov-de Gennes para diferentes frequências Ω para $S = 2$.

Nota-se que para $S = 1$ o condensado é estável para uma dada região de μ , sendo $1.76 \leq \mu \leq 2.05$ para $\Omega = 0.1$, $1.86 \leq \mu \leq 2.5$ para $\Omega = 1$ e $6.28 \leq \mu \leq 7$ para $\Omega = 10$. No caso $S = 2$ o condensado é instável em todo intervalo de μ para todos os valores de Ω .

Capítulo 5

Conclusões e perspectivas

Neste trabalho foi estudada a estabilidade de vórtices em condensados de Bose-Einstein com interação atrativa entre os átomos. Para isso foram realizadas simulações computacionais da equação de Gross-Pitaevskii e das equações de Bogoliubov-de Gennes para condensados bidimensionais e tridimensionais em confinamento harmônico.

Primeiramente foram reproduzidos os resultados da referência [62] para vórtices em condensados bidimensionais nos quais o potencial de interação entre os átomos é atrativo e constante ao longo do condensado. Verificou-se, através da solução das equações de Bogoliubov-de Gennes, que a solução para $S = 0$ da equação de Gross-Pitaevskii é sempre estável, enquanto que as soluções do tipo vórtice são estáveis para o valor de vorticidade $S = 1$. Entretanto, tal estabilidade do vórtice é observada até um certo número crítico de átomos havendo, a partir daí, a instabilidade do vórtice. No início do regime instável o vórtice apresenta o chamado *modo de respiro*, caracterizado pela sua divisão em duas partes e sucessiva reconexão, fenômeno este que acontece periodicamente. Com o acréscimo do número de átomos no sistema o vórtice se divide em duas componentes que não se recombinam. Foi também verificado que vórtices com $S > 1$ são instáveis para qualquer número de átomos.

Em uma segunda etapa do trabalho foram estudados vórtices em condensados bidimensionais, sendo proposto um modelo o qual o potencial interatômico varia espacialmente. Verificou-se que o mesmo é capaz de estabilizar vórtices multicarregados com carga de, no mínimo $S = 6$. Os resultados foram obtidos pela análise dos autovalores da matriz de Bogoliubov-de Gennes e corroborados com resultados de evolução temporal dos vórtices. Tais resultados nunca foram observados experimentalmente e nunca haviam sido previstos teoricamente. Espera-se que com as atuais técnicas de modulação óptica das interações atômicas em gases ultrafrios os resultados deste trabalho possam ser verificados.

Finalmente, resultados de vórtices em condensados tridimensionais foram reproduzidos da referência [65], onde se considera que o potencial interatômico é também atrativo e constante ao longo do condensado. Nesse caso, foram estudados condensados com diferentes frequências de confinamento na direção perpendicular. Observa-se que as soluções com $S = 0$ são instáveis, obedecendo o critério de estabilidade de Vakhitov-Kolokolov. Assim como na primeira seção, foi demonstrado a partir análise dos autovalores da equações de Bogoliubov-de Gennes que as soluções do tipo vórtice da equação de Gross-Pitaevskii são estáveis para o valor de vorticidade $S = 1$, para um certo número de átomos. Verificou-se também que as soluções com $S = 2$ são sempre instáveis. Os resultados obtidos ilustram a forte dependência do número de átomos com a frequência de confinamento da armadilha atômica. Para pequenos valores de frequência de confinamento na direção perpendicular

observa-se que o sistema admite maior número de átomos sem instabilizar. A análise da evolução temporal das soluções da equação de Gross-Pitaevskii para condensados tridimensionais está em andamento.

5.1 Perspectivas

O trabalho realizado neste mestrado terá continuidade no estudo de diversos aspectos de vórtices em condensados:

- Primeiramente deseja-se estudar a evolução temporal dos modos de instabilidade para se determinar os modos de instabilidade predominantes em um condensado em função do tempo.
- Outro tema de interesse a ser explorado é a dependência da frequência do modo de respiro de um condensado com o número de átomos no mesmo.
- Analogamente aos resultados publicados, espera-se utilizar o modelo de interação atômica espacialmente modulada em condensados tridimensionais com o objetivo de estabilizar vórtices multicarregados.
- Após um estágio realizado na Newcastle University, Inglaterra, surge a oportunidade de estudar a estabilidade de vórtices e o colapso de condensados atrativos em função da temperatura utilizando o formalismo da equação de Gross-Pitaevskii estocástica.

Apêndice A

Reescalonamento da equação de Gross-Pitaevskii e ordens de grandeza

A.1 Reescalonamento

A equação de Gross-Pitaevskii independente do tempo para um confinamento harmônico em duas dimensões é dada por

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + \frac{m\omega_r^2}{2}(x^2 + y^2)\psi + gN_{at}|\psi|^2\psi = \mu\psi, \quad (\text{A.1})$$

onde N_{at} é o número de átomos no condensado. Vale ressaltar que a função de onda é convenientemente normalizada à unidade.

Introduzindo as transformações

$$l_r = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_r}}, \quad x = l_r\tilde{x}, \quad y = l_r\tilde{y}, \quad \psi = \frac{1}{l_r}\tilde{\psi}, \quad \nabla^2 = \frac{1}{l_r^2}\tilde{\nabla}^2, \quad (\text{A.2})$$

e inserindo em (A.1) resulta que

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{l_r^2}\tilde{\nabla}^2\tilde{\psi} + l_r^2\frac{m\omega_r^2}{2}(\tilde{x}^2 + \tilde{y}^2)\tilde{\psi} + \frac{gN_{at}}{l_r^2}|\tilde{\psi}|^2\tilde{\psi} = \mu\tilde{\psi}, \quad (\text{A.3})$$

$$-\frac{\hbar\omega_r}{2}\tilde{\nabla}^2\tilde{\psi} + \frac{\hbar\omega_r}{2}(\tilde{x}^2 + \tilde{y}^2)\tilde{\psi} + \frac{gN_{at}}{l_r^2}|\tilde{\psi}|^2\tilde{\psi} = \mu\tilde{\psi}, \quad (\text{A.4})$$

$$-\frac{1}{2}\tilde{\nabla}^2\tilde{\psi} + \frac{1}{2}(\tilde{x}^2 + \tilde{y}^2)\tilde{\psi} + \frac{gN_{at}}{\hbar\omega_r l_r^2}|\tilde{\psi}|^2\tilde{\psi} = \frac{\mu}{\hbar\omega_r}\tilde{\psi}. \quad (\text{A.5})$$

Definindo

$$\tilde{g}N = \frac{gN_{at}}{\hbar\omega_r l_r^2}, \quad \tilde{\mu} = \frac{\mu}{\hbar\omega_r}, \quad (\text{A.6})$$

então

$$-\frac{1}{2}\tilde{\nabla}^2\tilde{\psi} + \frac{1}{2}(\tilde{x}^2 + \tilde{y}^2)\tilde{\psi} + \tilde{g}N|\tilde{\psi}|^2\tilde{\psi} = \tilde{\mu}\tilde{\psi}, \quad (\text{A.7})$$

sendo essa a equação de Gross-Pitaevskii reescalada utilizada neste trabalho.

Em três dimensões a equação de Gross-Pitaevskii independente do tempo é dada por

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + \left[\frac{m\omega_r^2}{2}(x^2 + y^2) + \frac{m\omega_z^2}{2}z^2\right]\psi + gN_{at}|\psi|^2\psi = \mu\psi. \quad (\text{A.8})$$

Analogamente ao caso bidimensional obtém-se que a forma adimensional da equação de Gross-Pitaevskii em três dimensões é dada por

$$-\frac{1}{2}\tilde{\nabla}^2\tilde{\psi} + \frac{1}{2}[(\tilde{x}^2 + \tilde{y}^2) + \Omega^2\tilde{z}^2]\tilde{\psi} + \tilde{g}N|\tilde{\psi}|^2\tilde{\psi} = \tilde{\mu}\tilde{\psi}, \quad (\text{A.9})$$

onde, nesse caso, $z = l_r\tilde{z}$, $\Omega = \omega_z/\omega_r$, $\psi = \tilde{\psi}/l_r^{3/2}$ e

$$\tilde{g}N = \frac{gN_{at}}{\hbar\omega_rl_r^3}. \quad (\text{A.10})$$

A.2 Ordens de grandeza

Em todo o raciocínio apresentado a seguir considera-se um condensado de átomos de ^7Li . Essa espécie é geralmente utilizada na realização de condensados atrativos [46, 89, 90] por ser possível, através da técnica de ressonância de Feshbach, a obtenção de valores negativos para o comprimento de espalhamento.

Uma vez que as equações (A.1) e (A.8) foram reescaladas em termos do chamado *comprimento característico do oscilador harmônico*, l_r , é conveniente calcular o valor de tal grandeza.

Sendo que a massa do átomo de ^7Li é, aproximadamente, $m_{Li} = 1.15 \times 10^{-26}$ Kg [91], usando $\hbar = 1.054 \times 10^{-34}$ J·s e considerando $\omega_r = 10$ Hz obtém-se que

$$l_r \simeq 30.2\mu\text{m}. \quad (\text{A.11})$$

Isso significa que em todas as figuras onde existe a dependência com a coordenada espacial a escala das mesmas é l_r . Tomando com exemplo a figura 4.11, onde o diâmetro da nuvem é de, aproximadamente, 7 em unidade adimensionais, obtém-se que, em unidades físicas dadas por l_r , tal diâmetro é de $211.4\mu\text{m}$.

Outra grandeza de fundamental importância neste trabalho é o número de átomos do condensado que, em (A.6), é dado por

$$N_{at} = \hbar\omega_rl_r^2\frac{\tilde{g}}{g}N. \quad (\text{A.12})$$

Em duas dimensões a constante de acoplamento g é dada por [26]

$$g = \sqrt{8\pi}\frac{\hbar^2}{m}\left(\frac{a}{l_z}\right), \quad (\text{A.13})$$

APÊNDICE A. REESCALONAMENTO DA EQUAÇÃO DE GROSS-PITAEVSKII E ORDENS DE GRANDEZA

onde $l_z = \sqrt{\hbar/m\omega_z}$ e ω_z é a frequência da armadilha na direção perpendicular. No caso bidimensional $\omega_z \gg \omega_r$ e, portanto, no cálculo a seguir considera-se que $\omega_z = 1000$ Hz. Com isso

$$l_z \simeq 3.02\mu\text{m}. \quad (\text{A.14})$$

Em experimentos onde se observam sólitons claros em condensados de ^7Li , o valor do comprimento de espalhamento é da ordem de $a = -10^{-9}$ m [46, 90] a $a = -10^{-10}$ m [89]. Utilizando o valor de l_r já calculado e, sendo que nos cálculos deste trabalho considera-se $\tilde{g} = -1$, então o número de átomos no condensado é de cerca de

$$N_{at} = 602N \quad \text{a} \quad N_{at} = 6020N, \quad (\text{A.15})$$

onde N é o número de átomos reescalado presente nos gráficos do capítulo 4.

Como visto no capítulo 2, a constante de acoplamento g para um condensado tridimensional é dada por

$$g = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m}. \quad (\text{A.16})$$

Utilizando os mesmos valores de comprimento de espalhamento do caso bidimensional obtém-se por (A.10) que o número de átomos no condensado tridimensional é

$$N_{at} = 2400N \quad \text{a} \quad N_{at} = 24000N. \quad (\text{A.17})$$

Apêndice B

Limite assintótico da equação de Gross-Pitaevskii

Na figura a seguir estão presentes dois resultados do perfil (secção) da parte real da função de onda da equação de Gross-Pitaevskii bidimensional (A.7) em $y = 0$, para $S = 1$, $\mu_1 = 2$ e $\mu_2 = -20$. Está presente na mesma figura o perfil do potencial harmônico V_{tr} em $y = 0$.

Figura B.1: Perfil da parte real da função de onda da equação (A.7) em $y = 0$ com $S=1$, $\mu_1 = 2$ e $\mu_2 = -20$. A curva V_{tr} representa o potencial harmônico da armadilha.

Como se pode notar pela figura B.1, a função de onda para $\mu_2 = -20$ limita-se a uma região do espaço muito menor em relação a função de onda para $\mu_1 = 2$. Isso ocorre porque quanto menor o valor de μ , maior o valor do termo não-linear da equação de Gross-Pitaevskii e, portanto, maior a intensidade do potencial atrativo do condensado.

Observa-se no ponto $x = 0$, onde a função de onda está centrada, que o valor do potencial da armadilha V_{tr} é muito pequeno, de modo que, para $\mu \rightarrow -\infty$, o mesmo pode ser desprezado. Com isso a equação de Gross-Pitaevskii (A.7) (Normalizada a N e com $g = -1$) é escrita como

$$\nabla^2 \psi + 2|\psi|^2 \psi = -2\mu \psi. \quad (\text{B.1})$$

Seja $\phi = \sqrt{2}\psi$ e $\nu^2 = -2\mu$. Logo

$$\nabla^2 \phi + |\phi|^2 \phi = \nu \phi. \quad (\text{B.2})$$

Reescalando a equação (B.2) na forma $\phi' = \phi/\nu$ e $r' = \nu r$, obtém-se que,

$$\nabla^2 \phi' + |\phi'|^2 \phi' = \phi'. \quad (\text{B.3})$$

Em um condensado bidimensional em coordenadas polares, a norma da função de onda pode ser expressa através das transformações utilizadas para reescalar a equação de Gross-Pitaevskii como

$$\begin{aligned} N &= \int_0^\infty |\psi|^2 r dr = \frac{1}{2} \int_0^\infty |\phi|^2 r dr \\ &= \frac{1}{2} \int_0^\infty |\phi'|^2 r' dr'. \end{aligned}$$

Definindo

$$N_0 = \int_0^\infty |\phi'|^2 r' dr', \quad (\text{B.4})$$

onde ϕ' é a solução da equação (B.3), obtém-se que o número de átomos em um condensado bidimensional atrativo em coordenadas polares na ausência de potencial externo é dado

$$N = \frac{N_0}{2}. \quad (\text{B.5})$$

Analogamente, em um condensado tridimensional, com $z' = \nu z$

$$N = \int_{-\infty}^\infty \int_0^\infty |\psi|^2 r dr = \frac{1}{2\nu} \int_{-\infty}^\infty \int_0^\infty |\phi'|^2 r' dr' dz', \quad (\text{B.6})$$

de onde se tem que

$$N = \frac{N_0}{2\sqrt{-2\mu}}. \quad (\text{B.7})$$

com

$$N_0 = \int_{-\infty}^\infty \int_0^\infty |\phi'|^2 r' dr' dz'. \quad (\text{B.8})$$

Nota-se por (B.5) e (B.7) que uma vez resolvida a equação (B.3) e encontrado o valor de N_0 (ver tabela B.1) obtém-se o valor de N para qualquer μ nos casos bidimensional e tridimensional [92].

Tabela B.1: Valores de N_0 obtidos a partir da solução da equação (B.3) para condensados em duas e três dimensões com $S = 0, 1$ e 2 .

	S=0	S=1	S=2
N_0^{2d}	11.70	48.30	89.72
N_0^{3d}	18.66	80.14	151.10

Apêndice C

Método variacional

Neste apêndice é descrito o método variacional utilizado neste trabalho para a solução do tipo vórtice da equação de Gross-Pitaevskii em um condensado atrativo. Primeiramente, na Seção C.1, é apresentado o cálculo analítico para vórtices bidimensionais em um condensado atrativo em coordenadas polares. Em seguida, na Seção 6.2, é descrito o cálculo para vórtices tridimensionais em um condensado atrativo em coordenadas cilíndricas, o qual resulta em um sistema de equações não-lineares resolvido utilizando os métodos numéricos descritos na Seção C.3.

C.1 Cálculos variacionais para vórtices bidimensionais

Como visto no capítulo 2, a energia para um vórtice em um condensado de Bose-Einstein atrativo bidimensional é dada por

$$E = 2\pi \int_0^\infty \left[\left(\frac{\partial R}{\partial r} \right)^2 + \left(\frac{S}{r} \right)^2 R^2 - 2\mu R^2 + r^2 R^2 + gR^4 \right] r dr. \quad (\text{C.1})$$

O método variacional consiste em sugerir como solução para o problema uma função de onda dependente de parâmetros a serem determinados, os quais são conhecidos como *parâmetros variacionais*. Tal “solução tentativa”, também conhecida como *ansatz*¹, é inserida na expressão para a energia do sistema. Esta expressão, agora dependente dos parâmetros variacionais, é minimizada em função dos mesmos, o que resulta em um sistema de equações de onde são obtidos os valores para os parâmetros variacionais. Finalmente, substituindo os valores obtidos para tais parâmetros na função de onda utilizada com *ansatz*, obtém-se a solução aproximada para o problema.

Neste trabalho foi utilizado um *ansatz* gaussiano na forma

$$R(r) = A r^S e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{r}{\rho} \right)^2}, \quad (\text{C.2})$$

onde S é o valor da vorticidade, A a amplitude da função de onda (relacionada, a seguir, com um parâmetro variacional) e ρ um parâmetro variacional.

¹ *Ansatz*: Palavra alemã cuja tradução para o português é *Aproximação*. Entretanto, na Física a palavra possui também o significado de *solução tentativa*.

A norma para a função de onda é dada por,

$$\int_0^{2\pi} \int_0^\infty |R(r, z)|^2 r dr d\theta = N \quad (\text{C.3})$$

a qual, substituindo o *ansatz* é escrita como

$$N = \pi S! \rho^{2S-2} M, \quad (\text{C.4})$$

onde $M = A^2 \rho^4$ é um parâmetro variacional.

Substituindo o *ansatz* na expressão para a energia do condensado obtém-se (tomando $g = -1$) uma expressão dependente dos parâmetros variacionais M e ρ na forma

$$4E = 2\pi M \left[4S^2(S-1)! \rho^{2S-4} - 4S! \rho^{2S-2} \left(\frac{S}{\rho^2} + \mu \right) + 2(S+1)! \rho^{2S} \left(1 + \frac{1}{\rho^4} \right) - \frac{(2S)! M \rho^{4S-6}}{2^{2S}} \right]. \quad (\text{C.5})$$

Para se determinar o valor dos parâmetros variacionais é necessário minimizar a expressão para a energia, o que é feito calculando

$$\frac{\partial E}{\partial \rho} = 0 \quad \text{e} \quad \frac{\partial E}{\partial M} = 0. \quad (\text{C.6})$$

Para um condensado atrativo com $S = 0$, a expressão para a energia é

$$4E = 2\pi M \left[-\frac{4\mu}{\rho^2} + 2 \left(1 + \frac{1}{\rho^4} \right) - \frac{M}{\rho^6} \right]. \quad (\text{C.7})$$

Minimizando (C.7) a partir de (C.6) obtém-se um sistema de equações em função dos parâmetros variacionais na forma

$$\begin{cases} \frac{4\rho^2}{3}(1 - \mu\rho^2) = M \\ \rho^6 + \rho^2 - 2\mu\rho^4 = M, \end{cases} \quad (\text{C.8})$$

o qual pode ser resolvido analiticamente, de modo que sua solução é

$$\rho^2 = \frac{\mu \pm \sqrt{\mu^2 + 3}}{3}. \quad (\text{C.9})$$

Utilizando a expressão (C.4) e a solução do sistema de equações tem-se que o número de átomos em função do potencial químico μ é

$$N = \frac{4\pi}{3} \left[1 - \mu \left(\frac{\mu + \sqrt{\mu^2 + 3}}{3} \right) \right]. \quad (\text{C.10})$$

A expressão para a energia de um vórtice bidimensional com $S = 1$ em termo dos parâmetros variacionais M e μ é dada por

$$4E = 2\pi M \left[-4\mu + 4\rho^2 + \frac{4}{\rho^4} - \frac{M}{2\rho^2} \right], \quad (\text{C.11})$$

a qual, minimizando a partir de (C.6), resulta em

$$\begin{cases} 8(1 - \rho^4) = M \\ 4(\rho^4 - \mu\rho^2 + 1) = M, \end{cases} \quad (\text{C.12})$$

de onde se obtém que

$$\rho^2 = \frac{\mu \pm \sqrt{\mu^2 + 12}}{6}. \quad (\text{C.13})$$

Logo

$$N = 8\pi \left[1 - \left(\frac{\mu + \sqrt{\mu^2 + 12}}{6} \right)^2 \right]. \quad (\text{C.14})$$

Do mesmo modo, para um vórtice bidimensional com $S = 2$,

$$E = 2\pi M \left[-2\mu\rho^2 + 3\rho^4 + 3 - \frac{3}{8}M\rho^2 \right]. \quad (\text{C.15})$$

A partir da minimização da expressão anterior obtém-se

$$\begin{cases} \frac{16}{3}(3\rho^2 - \mu) = M \\ \frac{4}{3} \left(3\rho^2 - 2\mu + \frac{3}{\rho^2} \right) = M. \end{cases} \quad (\text{C.16})$$

Com isso

$$\rho^2 = \frac{\mu \pm \sqrt{\mu^2 + 27}}{9}, \quad (\text{C.17})$$

e

$$N = \frac{32\pi}{27} \left[\mu + \sqrt{\mu^2 + 27} \right] \left[\left(\frac{\mu + \sqrt{\mu^2 + 27}}{3} \right) - \mu \right]. \quad (\text{C.18})$$

C.2 Cálculos variacionais para vórtices tridimensionais

Na presente seção são apresentados os cálculos variacionais para soluções do tipo vórtice da equação de Gross-Pitaevskii para condensados atrativos tridimensionais em coordenadas cilíndricas. Neste caso, a energia do sistema é dada por

$$E = 2\pi \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} \left[\left(\frac{\partial R}{\partial r} \right)^2 + \left(\frac{\partial R}{\partial z} \right)^2 + \left(\frac{S}{r} \right)^2 R^2 - 2\mu R^2 + (r^2 + \Omega^2 z^2) R^2 + gR^4 \right] r dr dz. \quad (\text{C.19})$$

Analogamente à seção anterior, é sugerido um *ansatz* gaussiano para vórtices na forma

$$R(r, z) = A r^S e^{-\left[\frac{1}{2} \left(\frac{r}{\rho} \right)^2 + \frac{1}{2} \left(\frac{z}{h} \right)^2 \right]}, \quad (\text{C.20})$$

onde, em comparação com o caso bidimensional, há a presença de um mais um parâmetro variacional, denominado h .

A norma N do *ansatz* é dada por

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{2\pi} \int_0^{\infty} |R(r, z)|^2 r dr d\theta dz = N. \quad (\text{C.21})$$

Sendo $M \equiv A^2 h \rho^4$, então

$$N = \frac{\pi^{3/2}}{2} S! M \rho^{2S-2}. \quad (\text{C.22})$$

Substituindo o *ansatz* (C.20) na expressão da energia (C.19) obtém-se, após algumas passagens algébricas (tomando $g = -1$), que [65]

$$\begin{aligned} \frac{8}{\sqrt{\pi}} E = 2\pi M \left[4S^2(S-1)! \rho^{2S-4} - 4S! \rho^{2S-4} \left(\frac{S}{\rho^2} + \mu \right) + \right. \\ \left. + 2(S+1)! \rho^{2S} \left(1 + \frac{1}{\rho^4} \right) + \left(\Omega^2 h^2 + \frac{1}{h^2} \right) S! \rho^{2S-2} - \frac{(2S)! M \rho^{4S-6}}{2^{2S} h \sqrt{2}} \right]. \end{aligned} \quad (\text{C.23})$$

Neste caso, para se determinar os parâmetros variacionais M , ρ e h a energia deve ser minimizada calculando

$$\frac{\partial E}{\partial \rho} = 0, \quad \frac{\partial E}{\partial M} = 0 \quad \text{e} \quad \frac{\partial E}{\partial h} = 0. \quad (\text{C.24})$$

A seguir são apresentadas, respectivamente, as expressões para a energia e os sistemas de equações obtidas através da minimização da energia para condensados com $S = 0$, $S = 1$ e $S = 2$.

- Para $S = 0$

$$\frac{8}{\sqrt{\pi}} E = 2\pi M \left[-\frac{4\mu}{\rho^2} + 2 + \frac{2}{\rho^4} + \frac{\Omega^2 h^2}{\rho^2} + \frac{1}{\rho^2 h^2} - \frac{M}{h \rho^6 \sqrt{2}} \right] \quad (\text{C.25})$$

$$\begin{cases} \frac{h\sqrt{2}}{2} \left[-4\mu\rho^4 + 2\rho^6 + 2\rho^2 + \Omega^2 h^2 \rho^4 + \frac{\rho^4}{h^2} \right] = M \\ \frac{h\rho^2\sqrt{2}}{3} \left[4 - 4\mu\rho^2 + \Omega^2 h^2 \rho^2 + \frac{\rho^2}{h^2} \right] = M \\ 2\sqrt{2}\rho^4 \left[\frac{1}{h} - \Omega^2 h^3 \right] = M. \end{cases} \quad (\text{C.26})$$

- Para $S = 1$

$$\frac{8}{\sqrt{\pi}} E = 2\pi M \left[-4\mu + 4\rho^2 + \frac{4}{\rho^2} + \Omega^2 h^2 + \frac{1}{h^2} - \frac{M}{h \rho^2 2\sqrt{2}} \right] \quad (\text{C.27})$$

$$\begin{cases} h\sqrt{2} \left[-4\mu\rho^2 + 4\rho^4 + 4 + \Omega^2 h^2 \rho^2 + \frac{\rho^2}{h^2} \right] = M \\ 4\rho^2\sqrt{2} \left[\frac{1}{h} - \Omega^2 h^3 \right] = M \\ 8h\sqrt{2} (1 - \rho^4) = M. \end{cases} \quad (\text{C.28})$$

- Para $S = 2$

$$\frac{8}{\sqrt{\pi}}E = 2\pi M \left[-8\mu\rho^2 + 12\rho^4 + 12 + 2\rho^2\Omega^2h^2 + \frac{2\rho^2}{h^2} - \frac{12M\rho^2}{8h\sqrt{2}} \right] \quad (\text{C.29})$$

$$\begin{cases} \frac{h2\sqrt{2}}{3} \left[-4\mu + 6\rho^2 + \frac{6}{\rho^2} + \Omega^2h^2 + \frac{1}{h^2} \right] = M \\ \frac{h4\sqrt{2}}{3} \left[-4\mu + 12\rho^2 + \Omega^2h^2 + \frac{1}{h^2} \right] = M \\ \frac{8\sqrt{2}}{3} \left[\frac{1}{h} - \Omega^2h^3 \right] = M. \end{cases} \quad (\text{C.30})$$

Embora na seção anterior os parâmetros variacionais tenham sido obtidos analiticamente, nesta seção optou-se em utilizar para tal tarefa o método numérico descrito na próxima seção, uma vez que os sistemas de equações resultantes da minimização da expressão da energia são de maior complexidade e, portanto, mais difíceis de serem resolvidos por métodos puramente analíticos.

C.3 Método numérico para solução de sistemas de equações não-lineares

Seja $F(\vec{x}) = \{f_1(\vec{x}), f_2(\vec{x}), \dots, f_n(\vec{x})\} = 0$ o sistemas de n equações

$$\begin{cases} f_1(\vec{x}) = 0 \\ \vdots \\ f_n(\vec{x}) = 0, \end{cases} \quad (\text{C.31})$$

com variáveis $\vec{x} = \{x_1, x_2, \dots, x_n\}$.

Expandindo $F(\vec{x})$ em série de Taylor em torno de $\vec{x}_0$ obtém-se

$$F(\vec{x}) = F(\vec{x}_0) + J(\vec{x}_0)(\vec{x} - \vec{x}_0) + \dots, \quad (\text{C.32})$$

onde $J(\vec{x}_0)$ é a matriz jacobiana do sistema, dada por

$$J = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \frac{\partial f_1}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n} \\ \frac{\partial f_2}{\partial x_1} & \frac{\partial f_2}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_2}{\partial x_n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_n}{\partial x_1} & \frac{\partial f_n}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_n}{\partial x_n} \end{bmatrix}.$$

Utilizando apenas os termos de primeira ordem de (C.31)

$$F(\vec{x}_1) = F(\vec{x}_0) + J(\vec{x}_0)(\vec{x}_1 - \vec{x}_0). \quad (\text{C.33})$$

Sendo $F(\vec{x}_1) = 0$ então

$$J_0 = \Delta x_0 = -F(\vec{x}_0), \quad (\text{C.34})$$

onde $J_0 \equiv J(\vec{x}_0)$ e $\Delta x_0 \equiv (\vec{x}_1 - \vec{x}_0)$.

Para $x_{k+1}^{\vec{}}$

$$J_k \Delta x_k = -F(\vec{x}_k), \quad (\text{C.35})$$

onde $x_{k+1}^{\vec{}} = \vec{x}_k + \Delta x_k$.

Um sistema de apenas duas equações pode ser escrito como

$$\begin{bmatrix} J_{11} & J_{12} \\ J_{21} & J_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1^{k+1} \\ x_2^{k+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f_1^k \\ f_2^k \end{bmatrix},$$

onde $J_{mn} = \frac{\partial f_m}{\partial x_n}$ e $f_m^k = f_m(x_1^k, x_2^k)$.

Do sistema de equações acima resulta que

$$x_1^{k+1} = -\frac{1}{J_{11}} \left[f_1^k + J_{12} x_2^k \right] \quad \text{e} \quad x_2^{k+1} = \frac{J_{21} f_1^k - J_{11} f_2^k}{\det J}. \quad (\text{C.36})$$

Logo, dado um valor inicial x_1^0 e x_2^0 , a solução para um sistema de duas equações não-lineares pode ser encontrada resolvendo iterativamente as equações (C.36) [93].

Referências Bibliográficas

- [1] S. N. Bose, Plancks Gesetz und Lichtquantenhypothese, Zeitschrift für Physik **26**, 178-181 (1924).
- [2] A. Einstein, Quantentheorie des einatomigen idealen Gases (Zweite Abhandlung), Sitzungsberichte der Preussischen Akademie der Wissenschaften **1**, 3-14 (1925); Teoria quântica do gás ideal monoatômico (Segundo Tratado), RBEF **27**, 113-120 (2005).
- [3] A. Griffin, A Brief History of Our Understanding of BEC: From Bose to Beliaev, arXiv:cond-mat/9901123 (1999).
- [4] H. K. Onnes, The Liquefaction of Helium, Communications from the Physical Laboratory at the University of Leiden **108**, 3 (1908).
- [5] H. K. Onnes, The Disappearance of the Resistivity of Mercury, Communications from the Physical Laboratory at the University of Leiden **122b** (1911).
- [6] P. F. Dahl, *Superconductivity*, American Institute of Physics, New York, 1992.
- [7] J. M. F. Bassalo, F. Caruso, *Feynman*, Livraria da Física, São Paulo, 2013; J. M. F. Bassalo, F. Caruso, *Landau*, Livraria da Física, São Paulo, 2013.
- [8] P. Ehrenfest, Koninklijke Akademie van Wetenschappen te Amsterdam **36**, 147 (1933).
- [9] L. D. Landau, The Theory of Phase Transitions, Nature **138**, 840 (1936).
- [10] L. D. Landau, JETP **7**, 19 (1937).
- [11] L. D. Landau, Zur Theorie der Phasenumwandlungen, Physikalische zeitschrift der Sowjetunion **11**, 26 (1937).
- [12] P. Kapitza, Viscosity of Liquid Helium below the λ -Point, Nature **141**, 74 (1938).
- [13] J. F. Allen and A. D. Misener, Flow of Liquid Helium II, Nature **141**, 75 (1938).
- [14] F. London, The λ -Phenomenon of Liquid Helium and the Bose-Einstein Degeneracy, Nature **141** 643 (1938).
- [15] F. London, On the Bose-Einstein Condensation, Phys. Rev. **54**, 947 (1938).
- [16] F. London, The State of Liquid Helium Near Absolute Zero, J. Phys. Chem. **43**, 49 (1938).
- [17] L. Tisza, Transport Phenomena in Helium II, Nature **141**, 913 (1938).
- [18] L. Tisza, Journal de Physique et le Radium **1** 164, 350 (1940).

- [19] L. D. Landau, The Theory of Superfluidity of Helium II, J. Phys. U.S.S.R. **5**, 71 (1941).
- [20] L. D. Landau, On the Theory of Superfluidity of Helium II, J. Phys. U.S.S.R. **11**, 91 (1947).
- [21] I. M. Khalatnikov, *An Introductction to the Theory of Superfluidity*, Westview Press, 1965.
- [22] L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Fluid Mechanics*, Butterworth-Heinemann, Oxford, 2000.
- [23] P. Kapitza, J. Phys. U.S.S.R. **4**, 181 (1941).
- [24] L. Onsager, Nuovo Cimento **6**, 249 (1949).
- [25] N. N. Bogoliubov, J. Phys. U.S.S.R. **11**, 23 (1947).
- [26] L. P. Pitaevskii and S. Stringari, *Bose-Einstein Condensation*, Oxford University Press, 2003.
- [27] J. Bardeen, L. N. Cooper, and J. R. Schrieffer, Theory of Superconductivity, Phys. Rev. **108**, 1175 (1957).
- [28] L. M. Brown, *Selected Papers of Richard Feynman*, World Scientific, Singapore, 2003.
- [29] M. Tinkham, *Introduction to Superconductivity*, 2nd edition, Dover, New Work, 2004.
- [30] O. Penrose and L. Onsager, Bose-Einstein Condensation and Liquid Helium, Phys. Rev. **104**, 576 (1956).
- [31] K. Huang, *Statistical Mechanics*, 2nd edition, John Wiley & Sons, 1987.
- [32] E. P. Gross, Structure of a Quantized Vortex in Boson Systems, Nuovo Cimento **20**, 454 (1961).
- [33] L. P. Pitaevskii, Vortex Lines in an Imperfect Bose Gas, JETP **13**, 451 (1961).
- [34] E. G. Khamis, A. Gammal (Orientador), *Formação de sólitons em condensados de Bose-Einstein e em meios ópticos*, Tese de doutorado - Instituto de Física da Universidade de São Paulo, São Paulo, Brasil, 2010.
- [35] S. V. Andreev, V. I. Balykin, V. S. Letokhov, and V. G. Minogin, Radiative Slowing and Reduction of the Energy Spread of a Beam of Sodium Atoms to 1.5 K in an Oppositely Directed Laser Beam, JETP Lett. **34**, 442 (1981).
- [36] J. V. Prodan, W. D. Phillips, and H. Metcalf, Laser Production of a Very Slow Monoenergetic Atomic Beam, Phys. Rev. Lett. **49**, 1149 (1982).
- [37] V. I. Balykin, V. S. Letokhov, and A. I. Sidorov, Radiative Collimation of an Atomic Beam by Two-Dimensional Cooling by Laser Beam, JETP Lett. **40**, 1026 (1984).
- [38] S. Chu, L. Hollberg, J. E. Bjorkholm, A. Cable, and A. Ashkin, Three-dimensional Viscous Confinement and Cooling of Atoms by Resonance Radiation Pressure, Phys. Rev. Lett. **55**, 48 (1985).

- [39] P. D. Lett, R. N. Watts, C. I. Westbrook, W. D. Phillips, P. L. Gould, and H. J. Metcalf, Observation of Atoms Laser Cooled below the Doppler Limit, *Phys. Rev. Lett.* **61**, 169 (1988).
- [40] A. Aspect, E. Arimondo, R. Kaiser, N. Vansteenkiste, and C. Cohen-Tannoudji, Laser Cooling below the One-Photon Recoil Energy by Velocity-Selective Coherent Population Trapping, *Phys. Rev. Lett.* **61**, 826 (1988).
- [41] M. Kasevich, and S. Chu, Laser Cooling below a Photon Recoil with Three-Level Atoms, *Phys. Rev. Lett.* **69**, 1741 (1992).
- [42] C. J. Pethick and H. Smith, *Bose-Einstein Condensation in Dilute Gases*, 2nd edition, Cambridge University Press, Cambridge, 2008.
- [43] W. Ketterle, D. S. Durfee, and D. M. Stamper-Kurn, Making, probing and understanding Bose-Einstein condensates, arXiv:cond-mat/9904034v2 (1999).
- [44] M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthews, C. H. Weiman and E. A. Cornell, Observation of Bose-Einstein Condensation in a Dilute Atomic Vapor, *Science* **269**, 198 (1995).
- [45] K. B. Davis, M. O. Mewes, M. R. Andrews, N. J. van Druten, D. S. Durfee, D. M. Kurn, and W. Ketterle, Bose-Einstein Condensation in a Gas of Sodium Atoms, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 3969 (1995).
- [46] C. C. Bradley, C. A. Sackett, J. J. Tollet, and R. G. Hulet, Evidence of Bose-Einstein Condensation in an Atomic Gas with Attractive Interactions, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 1687 (1995); *ibid.* **78**, 985 (1997).
- [47] D. G. Fried, T. C. Killian, L. Willmann, D. Landhuis, S. C. Moss, D. Kleppner, and T. J. Greytak, Bose-Einstein Condensation of Atomic Hydrogen, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 3811 (1998).
- [48] N. R. Claussen, S. L. Cornish, J. L. Roberts, E. A. Donley, E. A. Cornell, and C. E. Wieman, Stable ^{85}Rb Bose-Einstein Condensates with Widely Tunable Interactions, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 1795 (2000); Controlled Collapse of a Bose-Einstein Condensate, *ibid.* **86**, 4211 (2001); E. A. Donley *et al.*, Dynamics of collapsing and exploding Bose-Einstein condensates, *Nature (London)* **412**, 295 (2001).
- [49] A. Robert, O. Sirjean, A. Browaeys, J. Poupard, S. Nowak, D. Boiron, C. I. Westbrook, and A. Aspect, A Bose-Einstein Condensate of Metastable Atoms, *Science* **292**, 461 (2001); F. Pereira Dos Santos, J. Léonard, Junmin Wang, C. J. Barrelet, F. Perales, E. Rasel, C. S. Unnikrishnan, M. Leduc, C. Cohen-Tannoudji, Bose-Einstein Condensation of Metastable Helium, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 3459 (2001).
- [50] M. R. Matthews, B. P. Anderson, P. C. Haljan, D. S. Hall, C. E. Wieman, and E. A. Cornell, Vortices in a Bose-Einstein Condensate, *Phys. Rev. Lett.* **83**, 2498 (1999).
- [51] K. W. Madison, F. Chevy, W. Wohlleben, and J. Dalibard, Vortex Formation in a Stirred Bose-Einstein Condensate, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 806 (2000).
- [52] K. W. Madison, F. Chevy, W. Wohlleben, and J. Dalibard, Vortices in a stirred Bose-Einstein condensate, *J. Mod. Opt.* **47**, 2715 (2000).

- [53] E. J. Yarmchuk, M. J. V. Gordon, and R. E. Packard, Observation of Stationary Vortex Arrays in Rotating Superfluid Helium, *Phys. Rev. Lett.* **43**, 214 (1979).
- [54] J. R. Abo-Shaeer, C. Raman, J. M. Vogels, W. Ketterle, Observation of Vortex Lattices in Bose-Einstein Condensates, *Science* **292**, 476 (2001).
- [55] A.A. Abrikosov, On the Magnetic Properties of Superconductors of the Second Group, *JETP* **5**, 1174 (1957).
- [56] I. Coddington, P. Engels, V. Schweikhard, and E. A. Cornell, Observation of Tkachenko Oscillations in Rapidly Rotating Bose-Einstein Condensates, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 100402 (2003).
- [57] V.K. Tkachenko, On Vortex Lattices, *JETP* **22**, 1282 (1966).
- [58] V.K. Tkachenko, Stability of Vortex Lattices, *JETP* **23**, 1049 (1966).
- [59] A. L. Fetter, Rotating Trapped Bose-Einstein Condensates, *Rev. Mod. Phys.* **81**, 647 (2009)
- [60] E. A. L. Henn, J. A. Seman, G. Roati, K. M. F. Magalhães, and V. S. Bagnato, Emergence of Turbulence in an Oscillating Bose-Einstein Condensate, *Phys. Rev. Lett.* **103**, 045301 (2009).
- [61] H. Saito, and M. Ueda, Split Instability of a Vortex in an Attractive Bose-Einstein Condensate, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 190402 (2002).
- [62] D. Mihalache, D. Mazilu, B. A. Malomed, and F. Lederer, Vortex Stability in Nearly-Two-Dimensional Bose-Einstein Condensates with Attraction, *Phys. Rev. A* **73**, 043615 (2006).
- [63] M. Brtko, A. Gammal, and B. Malomed, Hidden Vorticity in Binary Bose-Einstein Condensates, *Phys. Rev. A* **82**, 053610 (2010).
- [64] J. B. Sudharsan, R. Radha, H. Fabrelli, A. Gammal, and B. A. Malomed, Stable Multiple Vortices in Collisionally Inhomogeneous Attractive Bose-Einstein Condensates, *Phys. Rev A* **92**, 053601 (2015).
- [65] B. A. Malomed, F. Lederer, D. Mazilu, and D. Mihalache, On Stability of Vortices in Three-Dimensional Self-Attractive Bose-Einstein Condensates, *Phys. Lett. A* **361**, 336 (2007).
- [66] P. G. Drazin and R. S. Johnson, *Solitons: An introduction*, Cambridge University Press, 1989; S. Novikov, V. E. Zakharov, L. P. Pitaevskii, and S. V. Manakov, *Theory of Solitons: The Inverse Scattering Method*, Springer, 1984.
- [67] J. C. A. Barata, Curso de Física-Matemática, consultado em 09/01/2016, http://denebola.if.usp.br/~jbarata/Notas_de_aula/capitulos.html.
- [68] J. S. Russell, Report on waves, Fourteenth Meeting of the British Association for the Advancement of Science, p. 311 a 390, (1844).
- [69] A. J. Chorin, and J. E. Marsden, *A Mathematical Introduction to Fluid Mechanics*, Springer-Verlag, New Work, NY, USA, 3rd edition, 1993.

- [70] H. L. F. da Luz, L. Tomio (Orientador), *Dinâmica e estabilidade de condensados de Bose-Einstein em redes ópticas lineares e não-lineares*, Tese de doutorado - Instituto de Física da Universidade de São Paulo, São Paulo, Brasil, 2013.
- [71] B. A. Lippman, and J. Schwinger, Variational Principles for Scattering Processes. I, Phys. Rev. **79**, 469 (1950).
- [72] A. F. R. de Toledo Piza, *Mecânica Quântica*, edusp, São Paulo, Brasil, 2^a edição, 2009.
- [73] R. Kishor Kumar, P. Muruganandam (Orientador), *Study on the Properties of Dipolar Bose-Einstein Condensates from Mean-Field Description*, Doctor of Philosophy Thesis - School of Physics, Bharathidasan University, Tiruchirapalli, India, 2013.
- [74] A. J. Moerdijk, B. J. Verhaar, and A. Axelsson, Resonances in Ultracold Collisions of ^6Li , ^7Li and ^{23}Na , Phys. Rev. A **51**, 4852 (1995).
- [75] S. Inouye, M. R. Andrews, J. Stenger, H.-J. Miesner, D. M. Stamper-Kurn, and W. Ketterle, Observation of Feshbach Resonances in a Bose-Einstein Condensate, Nature **392**, 151 (1998).
- [76] L. W. Clark., L.-C. Ha, C.-Y. Xu, and C. Chin, Quantum Dynamics with Spatiotemporal Control of Interactions in a Stable Bose-Einstein Condensate, Phys. Rev. Lett. **115**, 155301 (2015).
- [77] P. L. DeVries, *A First Course in Computational Physics*, John Wiley & Sons, Inc, New York, NY, USA, 1st edition, 1993.
- [78] D. Quinney, *Introduction to the Numerical Solution of Differential Equations*, John Wiley & Sons, Inc, 1987.
- [79] R. D. Richtmyer and K. W. Morton, *Difference Methods for Initial Value Problem*, John Wiley & Sons, Inc, 1967.
- [80] C. Huepe, S. Métens, G. Dewel, P. Borckmans, and M. E. Brachet, Decay Rates in Attractive Bose-Einstein Condensates, Phys. Rev. Lett. **82**, 1616 (1999).
- [81] M. Brtko, A. Gammal, and L. Tomio, Relaxation Algorithm to Hyperbolic States in Gross Pitaevskii Equation, Phys. Lett. A **359**, 339 (2006).
- [82] Ye. G. D'yakonov, Zh. Vych. Mat. **2**, 549 (1962). [USSR Comput. Math. Phys. **2**, 581 (1963)]
- [83] <http://http://www.netlib.org/lapack/> (acessado em 09/01/2016).
- [84] <http://http://www.caam.rice.edu/software/ARPACK/> (acessado em 09/01/2016).
- [85] N. G. Vakhitov and A. A. Kolokolov, Stationary Solutions of the Wave Equation in a Medium With Nonlinear Saturation, Izv. Vyssh. Uchebn. Zaved. Radiofiz. **16**, 1020 (1973) [Radiophys. Quantum Electron. **16**, 783 (1975)].
- [86] F. Kh. Abdullaev, A. Gammal, L. Tomio and T. Frederico, Stability of Trapped Bose-Einstein Condensates, Phys. Rev. A **63**, 043604 (2001).

- [87] A. Espinosa-Céron, J. Fujioka, B. A. Malomed and R. F. Rodríguez, Soliton Dynamics in the Complex Modified KdV Equation with a Periodic Potential, *Physica D* **236**, 141 (2007).
- [88] B. V. Gisin, R. Driben, and B. A. Malomed, Bistable Guided Solitons in the Cubic-Quintic medium, *J. Opt. B: Quantum Semiclass. Opt.* **6**, S259 (2004).
- [89] L. Khaykovich, F. Schreck, G. Ferrari, T. Bourdel, J. Cubizolles, L. D. Carr, Y. Castin, and C. Salomon, Formation of a Matter-Wave Bright Soliton, *Science* **296**, 1290 (2002).
- [90] K. E. Strecker, G. B. Partridge, A. G. Truscott, and F. G. Hulet, Formation and Propagation of Matter-Wave Soliton Trains, *Nature (London)* **417**, 150 (2002).
- [91] <http://www.ciaaw.org/atomic-weights.htm> (consultado em 6/01/2016).
- [92] E. A. Kuznetsov, J. J. Rasmussen, K. Rypdal, and S. K. Turitsyn, Sharper Criteria for the Wave Collapse, *Physica D* **87**, 273 (1995).
- [93] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, and B. P. Flannery, *Numerical Recipes in C: The Art of Scientific Computing*, 2nd edition, Cambridge University Press, 1992.