

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE FÍSICA

Formação de sólitons em condensados de Bose-Einstein e em meios ópticos

Eduardo Georges Khamis

Orientador: Prof. Dr. Arnaldo Gammal

Tese apresentada ao Instituto de Física
para a obtenção do título de
Doutor em Ciências

Banca examinadora:

Prof. Dr. Arnaldo Gammal (IFUSP)

Prof. Dr. Antonio Fernando Ribeiro de Toledo Piza (IFUSP)

Prof. Dr. Emerson Jose Veloso de Passos (IFUSP)

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

Prof. Dr. Valery Shchesnovich (UFABC)

São Paulo

2010

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

Khamis, Eduardo Georges

Formação de sólitons em condensados de Bose-Einstein e em meios ópticos. São Paulo, 2010.

Tese (Doutorado) – 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. Sólitons; 3. Equação não- linear de Schrödinger; 4. Ondas de choque; 5. Condensado dipolar.

USP/IF/SBI-065/2010

à

Paula Martins de Souza.

Agradecimentos

Agradeço ao Prof. Dr. Arnaldo Gammal pela oportunidade de realizar este trabalho, pela orientação, confiança, amizade e por me manter sempre motivado mesmo nas etapas mais difíceis.

Ao Prof. Dr. Anatoly Kamchatnov e Prof. Dr. Gennady A. El pela intensa colaboração e oportunidade de participar do projeto sobre a formação de sólitons em meios fotorrefrativos.

Ao Prof. Dr. Klaus Ziegler e Dr. Oleksandr Fialko pelas discussões interessantes.

À minha família: meu pai Id Georges Khamis; minha mãe Ivone Anita Khamis; meus irmãos Paulo Cesar Khamis, Davi Georges Khamis, Daniel Kalil Khamis e Silvia Maria Khamis; meu avô Georges Khamis; meus tios Paulo Mori, Mário Mori, Pedro Mori, Cesar Khamis, Lily Margarida Roth e Araci Judith; por todo amor, carinho e apoio que sempre me deram.

À Paula Martins de Souza por me proporcionar tanta alegria, pelo seu amor, carinho, amizade e compreensão.

Aos colegas ou ex-colegas do instituto de Física: Adriana, Diogo, George, Hedhio, Karine, Leandro, Marcos, Marcelo, Marijana, Mikiya, Raul, Sarah e Vicente pelas amizades.

Ao meu amigo Annibale por seu excessivo bom humor, alegria contagiante e eterno positivismo.

À todos os funcionários e estagiários da biblioteca do Instituto de Física. Em especial, ao Josué, Lea, Lygia, Virgínia e Zeca pelas amizades e prestação de serviços impecável.

*Aos Srs. **Marcelino Alves** e **Rubens D. Forcemo** por poder contar sempre com eles para qualquer coisa na Oficina Mecânica do Departamento de Física Geral.*

*Ao analista de sistema do Departamento de Física Geral **Valdir** pela amizade e constante ajuda.*

*À todos os vigias do Instituto de Física que sempre me deram a devida assistência. Em especial, aos atuais vigias da ALA I: **João, Saulo, Silvio e Wilson**, e o chefe da vigilância **Florisvaldo**.*

*À secretária do Departamento de Física Experimental **Edi** pela amizade, motivação e constante ajuda em toda a burocracia, e ao secretário **Paulo**.*

*Aos meus amigos funcionários do IFUSP: **Edmilson, Ednéia e Edneusa**.*

*Às meninas da cantina: **Silvia** e **Simone** pela amizade e por contagiarem alegria todos os dias.*

*Finalmente, agradeço ao **CNPq** e à **FAPESP** pelo importante apoio financeiro.*

Resumo

Diferentes tipos de sólitons têm sido observados em meios ópticos não-lineares, e seus comportamentos individuais descritos pela equação não-linear de Schrödinger e pela equação não-linear de Schrödinger generalizada, em diferentes dimensões e geometrias. Entretanto, há situações onde muitos sólitons são gerados formando uma densa rede de sólitons. Nestes casos, é impossível desprezar as interações entre os sólitons e temos que considerar a evolução da estrutura como um todo. A teoria das ondas de choque dispersivas em meios fotorrefrativos e a teoria da difração não-linear de intensos feixes de luz propagando-se em meios fotorrefrativos com um fio refletor incorporado a esse meio foi desenvolvida, e verificamos que está em excelente acordo com nossas simulações numéricas. No caso da formação de sólitons em condensados, fizemos cálculos numéricos realísticos dentro da aproximação de campo médio usando a equação de Gross-Pitaevskii, incluindo também um potencial de confinamento, um potencial móvel e um potencial dipolar. A maioria dos resultados puderam ser comparados com experimentos recentes.

Palavras-chave: condensação de Bose-Einstein; condensados dipolares; sólitons; meios fotorrefrativos; ondas de choque; força de arrasto.

Abstract

Different kinds of solitons have already been observed in various nonlinear optical media, and their behavior has been explained in the frameworks of such mathematical models as the nonlinear Schrödinger and generalized nonlinear Schrödinger equations for different dimensions and geometries. However, there are situations when many solitons are generated so that they can comprise a dense soliton train. In such situations, it is impossible to neglect interactions between solitons and one has to consider the evolution of the structure as a whole rather than to trace the evolution of each soliton separately. The theory of optical shock waves in photorefractive media and the theory of nonlinear diffraction of light beams propagating in photorefractive media with embedded reflecting wire was developed and agrees very well with our numerical simulations. In the condensate soliton formation case, we did numerical calculations in the mean field approach using the Gross-Pitaevskii equation, adding a trap potential and a moving potential and a potential of the dipole-dipole interaction. The main results were also checked by recent experiments.

Key-words: Bose-Einstein condensation; dipolar condensates; solitons; photorefractive media; shock waves; drag force.

Sumário

1	Introdução	1
2	Feixes luminosos em cristais fotorrefrativos	7
2.1	Dedução da GNLS a partir das equações de Maxwell	10
2.2	Dedução das equações principais	22
2.3	Ondas de choque dispersivas	25
2.3.1	Teoria analítica de choques dispersivos unidimensionais gerados no decaimento de uma distribuição inicial na forma de degrau	25
2.4	Fio imerso no meio fotorrefrativo	32
2.4.1	Teoria da difração não-linear em cristais fotorrefrativos	36
3	Condensados de Bose-Einstein	40
3.1	Equação de Gross-Pitaevskii independente do tempo	42
3.2	Equação GP dependente do tempo	45
3.3	Semelhança entre GNLS e GP	49
3.4	Condensados dipolares	50
3.5	Condensados confinados na presença de um obstáculo móvel	50
3.6	Equações de conservação e teorema virial	51
3.7	Força de arrasto	52
4	Métodos numéricos	54
4.1	<i>Split-step FFT</i>	55
4.2	Estado fundamental: métodos da evolução no tempo imaginário e dos gradientes conjugados	60

4.2.1	Propagação no tempo imaginário	61
4.2.2	Gradientes conjugados	62
5	Resultados numéricos	63
5.1	Em meios ópticos	63
5.1.1	Caso unidimensional com um “degrau” em fundo uniforme	63
5.1.2	Caso unidimensional com um “buraco” em fundo uniforme	66
5.1.3	Caso bidimensional com um “obstáculo” em fundo uniforme	68
5.1.4	Difração não-linear	71
5.2	Em condensados de Bose-Einstein	76
5.3	Em condensados dipolares	81
6	Conclusão	85
6.1	Perspectivas e planos futuros	87

Lista de Figuras

1.1	Exemplos de intensidade e fase em função da coordenada x normalizada para os sólitons claro (a), escuro (b) e cinza (c) (adaptado de Tomlinson et al. [1]).	4
1.2	Ondas de choque formando-se no ar.	5
2.1	Representação gráfica do campo elétrico E em $z = 0$, onde $A(\mathbf{r}_\perp, z, t)$ é uma função que varia lentamente.	14
2.2	Decaimento de uma descontinuidade inicial da intensidade da luz em um feixe propagando-se através de um cristal fotorrefrativo. (a) Aproximação sem dispersão com uma região sem significado físico de múltiplos valores de intensidade. (b) Representação gráfica da formação de um choque dispersivo devido ao balanço entre os efeitos dispersivo e não-linear . Os valores de x_1^- e x_1^+ são os mesmos para (a) e (b) enquanto que os valores de x_2^- e x_2^+ são diferentes.	30
2.3	Representação gráfica da formação do padrão de difração não-linear na propagação de um feixe de luz através de um meio fotorrefrativo com um fio refletor inserido neste meio.	35
2.4	Coordenadas definindo um “raio vetor” \mathbf{r} e um vetor de onda \mathbf{k} normal à frente de onda mostrada esquematicamente por uma linha curvelínea. Esta linha de fase constante $\Phi = kr \cos \mu$ pode ser encontrada na forma paramétrica.	38

- 5.1 Evolução de um pulso inicial na forma de degrau, Eq. (5.1), com $\rho_0 = 5$ e $\rho = 1$, para o caso de $\gamma = 0.1$. A estrutura geral confirma a formação de uma onda de rarefação, um choque dispersivo, e um estado intermediário constante no meio. A intensidade $\rho^- = 2.466$, calculada de acordo com a equação (2.82), coincide com o resultado numérico para a intensidade do estado intermediário. As coordenadas das bordas da onda de rarefação em $t = 32$, calculadas analiticamente, são iguais a $x_1^- = -47.7$, $x_1^+ = -9.02$ para a onda de rarefação, e $x_2^- = 42.57$, $x_2^+ = 99.52$. Podemos ver que concordam muito bem com os resultados numéricos. Ondas de pequena amplitude em torno de $x = -50$ correspondem à “resolução” linear dispersiva da descontinuidade fraca ocorrendo na borda direita da onda de rarefação. 64
- 5.2 Dependência dos valores intermediários (linhas sólidas) da intensidade (a) e do vetor de onda transversal (b) sobre o parâmetro de saturação γ para valores fixos dos parâmetros iniciais de descontinuidade: $\rho_0 = 5$, $u_0 = 0$ para $x < 0$ e $\rho^+ = 1$, $u^+ = 0$ para $x > 0$ em $z = 0$. Os valores calculados numericamente são representados por pontos. 65
- 5.3 Choque dispersivo evoluído a partir de um pulso na forma de degrau, com ρ^- e u^- relacionados pela condição de salto da “onda simples”, para valores grandes de $\rho^- = 10$, muito maior que $\rho^- = 4$. A ocorrência de um ponto de vácuo entre $x = 100$ e $x = 150$ é encontrada. Um novo estado intermediário constante é formado na região detrás do choque dispersivo, mostrando que a condição de salto da onda simples (2.83) não previne mais a formação da segunda onda para valores grandes de ρ^- 66
- 5.4 Perfil de intensidade em $z = 100$ evoluído de um pulso inicial, Eq. (5.4) (linha pontilhada), com perfil inicial de $u(x)$ calculado de acordo com (5.5), com $\gamma = 0.2$. Após a quebra da onda e formação de um choque dispersivo, o pulso evolui para um certo número de sólitons escuros. A propagação de alguns sólitons para a esquerda é causada pela formação de um ponto de vácuo em um estágio intermediário da evolução. 67

5.5	(a) Perfil de densidade do padrão de intensidade evoluído a partir de uma distribuição inicial na forma de faixa, Eq. (5.6), com $\gamma = 0.1$ e $z = 10$, (b) Corte do perfil em $y = 0$	69
5.6	(a) Perfil de densidade do padrão de intensidade evoluído a partir de uma distribuição inicial circular, com $\gamma = 0.1$ e $z = 10$, (b) Corte do perfil em $y = 0$	70
5.7	(a) Interação entre dois choques dispersivos circulares, com $\gamma = 0.1$ e $z = 15$, (b) Corte do perfil em $y = 0$. É marcante que o choque dispersivo não-linear de ondas é bastante robusto e não produz ondas intensas na região de sobreposição, ao menos para $\gamma = 0.1$	71
5.8	Padrão de difração no plano de saída no comprimento $z = 60$ do meio fotorrefrativo. O padrão foi obtido pela simulação numérica da Eq. (2.55) com $V(\mathbf{r}_\perp)$ correspondendo a um fio refletor ideal com raio unitário, para $\gamma = 0.2$ e $U = 2$. O resultado dessa simulação numérica é apresentado em unidades adimensionais definidas em (2.54).	72
5.9	Distribuição de fase do padrão de difração no plano de saída do meio fotorrefrativo. O padrão corresponde a $\gamma = 0.2$, $U = 2$ e $z = 60$. Os sólitons oblíquos decaem nos seus pontos finais em vórtices; mas, próximo ao obstáculo, são descritos por um “fluxo potencial” com um salto de fase entre eles.	73
5.10	Padrão de onda calculado numericamente, que corresponde à difração de um feixe de luz sobre o obstáculo incorporado a um meio fotorrefrativo. O cálculo foi feito com $\gamma = 0.2$ e $U = 2$ até $z = 120$, com $V(\mathbf{r}_\perp)$ correspondendo a um fio refletor ideal com raio unitário. A linha tracejada corresponde à teoria analítica linear, Eq. (2.100), para a linha de fase constante; ela foi deslocada para a esquerda em duas unidades de comprimento a partir do centro do obstáculo por causa do seu tamanho finito nas simulações numéricas e melhor ajuste com esse cálculo.	74

5.11	Perfil de intensidade em frente ao obstáculo para $x < 0$, $y = 0$, e com a escolha dos parâmetros $\gamma = 0.2$, $U = 2$ e $V_0 = 2.6$. A linha sólida corresponde à Eq. (2.99), e a linha tracejada à solução numérica das Eqs. (2.56) e (2.57).	74
5.12	Painel superior: Perfis das distribuições de intensidade para $x = 100$ (linha tracejada), $x = 400$ (linha contínua) e $y > 0$ obtidas a partir da solução numérica da Eq. (2.56) com o termo não-linear dado pela Eq. (2.57), para $U = 5$, $\gamma = 0.2$ e $z = 120$. Esses perfis são comparados com os perfis dos sólitons obtidos pelas soluções da Eq. (2.98), com a inclinação $a = 10.58$, mostrados como funções de y nos mesmos valores de x ($x = 100$ corresponde às “cruzes” e $x = 400$ aos “círculos”). Painel inferior: Perfis da variação da fase ao longo dos mesmos “cortes” da função de onda do condensado calculada numericamente. Os saltos de fase correspondem ao comportamento bem conhecido da fase através dos sólitons escuros.	75
5.13	Padrão de difração no plano de saída no comprimento $z = 120$ e número de Mach $M = 0.9$. Os padrões são obtidos pela solução numérica da Eq. (2.55) com $V(\mathbf{r}_\perp)$ correspondendo a um fio refletor ideal com raio unitário e $\gamma = 0.2$	75
5.14	Evolução temporal do condensado bidimensional com interação de contato. Nessa evolução, um feixe de <i>laser</i> passa com velocidade subsônica constante (maior que a velocidade crítica v_c) por um condensado de ^{85}Rb confinado, em forma de “pizza”, a partir do estado inicial fundamental. De acordo com os perfis de densidade e de fase, observamos a formação de vórtices. Em estágios posteriores à passagem do obstáculo, eventualmente dois vórtices podem se aniquilar e formar um sóliton.	78

5.15	<p> Checagem dos resultados numéricos pelo teorema virial e cálculo da força de arrasto da evolução do condensado com um potencial móvel mostrada na Fig. (5.14). A força de arrasto “oscila” com a formação de pares de vórtices. Um par de vórtices (nesse caso, um vórtice e um antivórtice) é gerado quando a velocidade do condensado nos arredores do obstáculo excede a velocidade crítica. Essa força pode se tornar negativa dependendo do tamanho do obstáculo em relação às dimensões do condensado. </p>	79
5.16	<p> Evolução temporal do condensado tridimensional com interação de contato. As figuras são projeções da densidade/fase do condensado no plano xy, com $z = 0$. Nessa evolução, um feixe de <i>laser</i> passa com velocidade supersônica constante por um condensado de ^{85}Rb confinado, em forma de “pizza”, a partir do estado inicial fundamental. De acordo com os perfis de densidade e de fase, observamos a formação de sólitons oblíquos escuros e seus decaimentos em vórtices. Em estágios posteriores à passagem do obstáculo, eventualmente dois vórtices podem se aniquilar e formar um sóliton. </p>	79
5.17	<p> Evolução temporal do condensado tridimensional com interação de contato. Nessa evolução, um feixe de <i>laser</i> passa com velocidade subsônica constante (maior que a velocidade crítica v_c) por um condensado de ^{85}Rb confinado, em forma de “pizza”, a partir do estado inicial fundamental. De acordo com os padrões de fase e velocidades na isodensidade, observamos a formação de vórtices. Em estágios posteriores à passagem do obstáculo, eventualmente dois vórtices podem se aniquilar e formar um sóliton. </p>	80
5.18	<p> Estados fundamentais de condensados puramente dipolares de ^{52}Cr, com a adição do potencial $U'(\mathbf{r})$. </p>	82
5.19	<p> Evolução temporal do condensado tridimensional puramente dipolar. A figura é uma projeção da densidade do condensado no plano xy, com $z = 0$. Inicialmente, um condensado de ^{52}Cr está no estado fundamental sob a ação de um potencial hamônico que o deixa em forma de “pizza”. Com a retirada da armadilha, o condensado se expande e passa por um obstáculo impenetrável. Na evolução, observamos a formação de sólitons oblíquos escuros. </p>	83

5.20	Evolução temporal do condensado tridimensional puramente dipolar. Nessa evolução, um feixe de <i>laser</i> passa com velocidade supersônica constante por um condensado de ^{52}Cr confinado, em forma de “pizza”, a partir do estado inicial fundamental. Observamos a formação de novas estruturas, provalmente geradas por colapsos locais.	84
------	---	----

Lista de Tabelas

3.1	Analogia entre meios ópticos e condensados de Bose-Einstein.	49
-----	--	----

Lista de Símbolos e Abreviaturas

CBE \longleftrightarrow Condensação de Bose-Einstein

CUDA \longleftrightarrow *Compute Unified Device Architecture*

CW \longleftrightarrow *Continuous-wave*

\mathcal{F} \longleftrightarrow Transformada de Fourier

\mathcal{F}^{-1} \longleftrightarrow Transformada inversa de Fourier

\mathcal{F}_{3D} \longleftrightarrow Transformada de Fourier tridimensional

\mathcal{F}_{3D}^{-1} \longleftrightarrow Transformada inversa de Fourier tridimensional

FFT \longleftrightarrow *Fast Fourier Transform*

GNLS \longleftrightarrow equação generalizada não-linear de Schrödinger

GP \longleftrightarrow equação de Gross-Pitaevskii

IST \longleftrightarrow *Inverse Scattering Transform*

NLS \longleftrightarrow equação não-linear de Schrödinger

SBN \longleftrightarrow *Strontium Barium Niobate*

Capítulo 1

Introdução

*“Sempre muito, muito atento
sempre atento a muito pouco
devagar, vai indo lento.
Desatento se foi longe
de tão rápido por léguas
de si mesmo, um se esconde.*

*Devagar se vai a fundo:
pouco espaço, muito mundo.”*

Paula Martins de Souza

Recentemente, recebemos a visita, em São Paulo, de dois colaboradores russos: Anatoly Kamchatnov e Gennady A. El. Atualmente, Anatoly trabalha na Academia Russa de Ciências, em Troitsky, região de Moscow, na Rússia. Gennady trabalha na Universidade de Loughborough, que fica na cidade que leva o mesmo nome, no Reino Unido. Ambos têm uma extensa contribuição em pesquisa na área da teoria da modulação de Whitham, ondas de choque dispersivas, propagação de ondas lineares em condensados de Bose-Einstein e meios ópticos, e outras. Eles fizeram boa parte do trabalho analítico do projeto sobre ondas de choque e formação de sólitons em cristais fotorrefrativos. Nesse

projeto, Arnaldo Gammal, que é meu orientador, e eu, fomos responsáveis por todo o cálculo numérico apresentado, pela verificação numérica da teoria apresentada, e também pela checagem de parte do cálculo analítico. Publicamos os resultados em [2] e [3]. O estudo sobre a formação de sólitons em condensados foi feito inteiramente por meu orientador e por mim.

Em 1834, o engenheiro escocês John Scott Russell observou uma onda solitária em um canal, e se dedicou a reproduzi-la em laboratório. Na sua descrição [4]:

“I was observing the motion of a boat which was rapidly drawn along a narrow channel by a pair of horses, when the boat suddenly stopped - not so the mass of water in the channel which it had put in motion; it accumulated round the prow of the vessel in a state of violent agitation, then suddenly leaving it behind, rolled forward with great velocity, assuming the form of a large solitary elevation, a rounded, smooth and well-defined heap of water, which continued its course along the channel apparently without change of form or diminution of speed. I followed it on horseback, and overtook it still rolling on at a rate of some eight or nine miles an hour, preserving its original figure some thirty feet long and a foot to a foot and a half in height. Its height gradually diminished, and after a chase of one or two miles I lost it in the windings of the channel. Such, in the month of August 1834, was my first chance interview with that singular and beautiful phenomenon which I have called the Wave of Translation.”,

no excerto citado acima, percebemos a fascinação de Russell diante do fenômeno observado e sua tentativa de definir o sóliton.

Antes de definirmos o sóliton, relembremos alguns conceitos. Se substituirmos o modo de Fourier, $u(x, t) = \exp(ikx - i\omega t)$, na equação linear da onda, obteremos que $w = \pm ck$. Então, todas as ondas que se movem numa dada direção têm a mesma velocidade $\pm c$, e por isso não se dispersam, ou seja, a equação descreve pulsos que mantêm a forma. Esses pulsos são chamados de ondas viajantes.

Se a velocidade de cada modo de Fourier de uma onda puder se propagar com uma velocidade diferente, haverá dispersão. E, se a velocidade de fase, w/k , depende de k de uma forma complicada, as ondas são chamadas de dispersivas. A dispersão tende a espalhar a onda, é um fenômeno linear e independe da amplitude da onda.

Equações não-lineares, como a equação não-linear da onda, descrevem a deformação de pulsos, e tudo depende da amplitude, ou seja, a não-linearidade causa efeitos de amplitude, onde diferentes amplitudes geram dinâmicas diferentes.

Na água, uma quebra da onda não-linear acontece quando a velocidade da onda é maior quanto maior for sua amplitude. As partes “altas” devem ser mais rápidas que as “baixas”, e com isso a onda se deforma. Depois de um tempo, as partes altas ultrapassam as partes baixas e a onda se quebra.

Há situações em que a dispersão e não-linearidade se anulam e dão origem a ondas que mantêm a forma, são as ondas solitárias. Porém, nem todas as equações não-lineares e dispersivas descrevem essa situação.

Voltemos, então, à definição de um sóliton. Quando há formação de ondas solitárias, e estas não se destroem quando interagem com outras ondas, temos o sóliton. Dessa forma, definimos o sóliton como um pulso localizado que viaja inalterado e não se destrói quando interage com outras ondas. Os sólitons são robustos.

Geralmente, quando há formação de sólitons, teremos soluções solitônicas puras para um certa condição inicial. Caso haja mudança nessa condição, teremos sólitons e um trem de ondas dispersivo. Porém, nesse caso, os sólitons dominam em tempos longos, ou seja, os “detalhes” das condições iniciais somem. Então, a função inicial determinará apenas o conteúdo solitônico da solução, determinando quantos são e com quais amplitudes.

Rigorosamente, se uma equação não-linear for integrável através do método IST (*Inverse Scattering Transform*), haverá sólitons. Porém, nem sempre uma equação não-linear integrável apresentará sólitons ou ondas solitárias.

De acordo com a Figura (1.1), os sólitons podem ser classificados em claros (ou brilhantes), escuros e cinzas. Um sóliton claro é uma onda localizada, um “ponto” brilhante, com uma fase constante através do pulso todo; o escuro é uma onda extensa com um “ponto” escuro no centro e um salto de π na fase; e, o cinza tem a forma parecida com a de um sóliton escuro, mas não possui intensidade zero no centro, e a diferença de fase no centro ocorre de modo mais gradual.

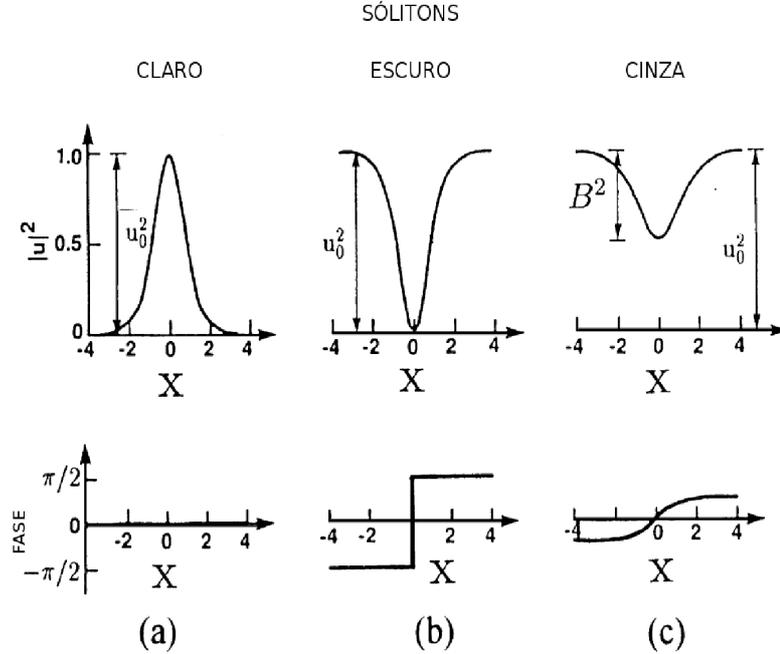


Figura 1.1: Exemplos de intensidade e fase em função da coordenada x normalizada para os sólitons claro (a), escuro (b) e cinza (c) (adaptado de Tomlinson et al. [1]).

Os sólitons aparecem também em condensados de Bose-Einstein e em meios ópticos. Sua formação nesses meios será o objetivo principal desta tese. Para isso, utilizaremos métodos numéricos para solucionarmos a equação de Gross-Pitaevskii (GP), no caso dos condensados, e a equação generalizada não-linear de Schrödinger (GNLS), no caso dos meios ópticos.

Estudaremos também a formação das ondas de choque. Um exemplo simples para a compreensão do que é uma onda de choque é o vôo supersônico de um avião. De acordo com a figura (1.2), notamos que quando a velocidade v do avião for maior que a velocidade v_s do som, haverá uma onda de choque.

Verificaremos numericamente a teoria das ondas de choque dispersivas geradas na propagação de feixes de luz em meios fotorrefrativos. A teoria analítica unidimensional baseada na modulação de Whitham foi desenvolvida para o caso mais simples de uma descontinuidade inicial na forma de degrau em um feixe com geometria unidimensional na forma de faixa. Essa aproximação será confirmada por simulações numéricas, que serão estendidas também para feixes com simetria cilíndrica. A teoria explica experimentos

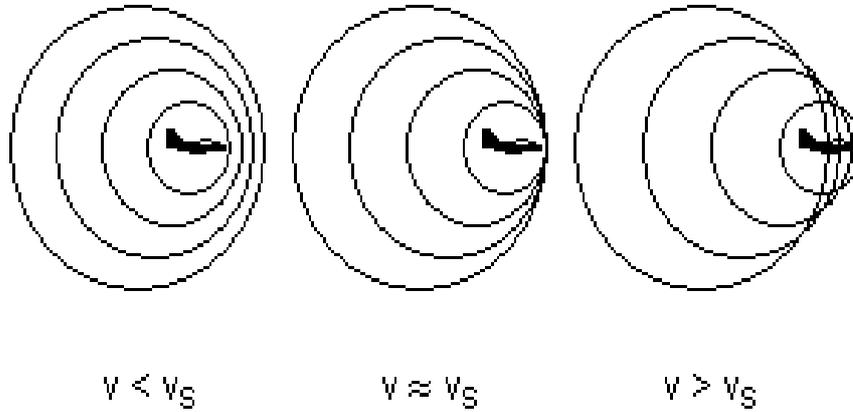


Figura 1.2: Ondas de choque formando-se no ar.

recentes nos quais as ondas de choque dispersivas foram observadas.

Também verificaremos numericamente a teoria da difração não-linear de feixes intensos de luz que se propagam em meios fotorrefrativos. A difração ocorre por causa de um fio refletor incorporado nesse meio não-linear, sendo que o fio deve formar um pequeno ângulo em relação à direção de propagação do feixe. Mostraremos que esse processo é análogo à geração de ondas pelo fluxo de um superfluido que passa por um obstáculo. A “equação de estado” desse superfluido foi determinada pelas propriedades não-lineares do meio. Com base na analogia com a hidrodinâmica, a noção de “número de Mach” será introduzida onde a componente transversa do vetor de onda atua como velocidade do fluido. Verificaremos que o cone de Mach separa duas regiões do padrão de difração: dentro do cone de Mach sólitons oblíquos escuros serão gerados e fora do cone de Mach localizaremos a região das “ondas de navio ópticas” (padrão de onda formado por um pacote bidimensional de ondas lineares). Verificaremos numericamente a teoria analítica desenvolvida para a descrição dessas “ondas ópticas de navio”. Sólitons escuros bidimensionais serão encontrados como soluções da equação que descreve a propagação do feixe.

Estenderemos o cálculo numérico para os condensados ao estudarmos a solução da equação de Gross-Pitaevskii dependente do tempo em três dimensões, com diferentes tipos de potenciais: um potencial harmônico responsável pelo confinamento do condensado; um potencial móvel, ou seja, um feixe de laser que passa pelo condensado a uma velocidade

constante; e um potencial de interação dipolo-dipolo, quando estudarmos condensados dipolares. Calcularemos também a força de arrasto que o obstáculo móvel exerce sobre esses condensados confinados.

O conteúdo dos capítulos é esboçado a seguir. No **capítulo (2)**, estudaremos a propagação de feixes luminosos em cristais fotorrefrativos. Serão esclarecidas as aproximações utilizadas para a derivação da equação generalizada não-linear de Schrödinger a partir das equações de Maxwell. A teoria das ondas de choque dispersivas em meios fotorrefrativos será parcialmente desenvolvida, e a difração não-linear de feixes de luz que se propagam com um fio refletor imerso nesse meio será apresentada. No **capítulo (3)**, derivaremos a equação de Gross-Pitaevskii independente e dependente do tempo, bem como discutiremos sua semelhança com a equação generalizada não-linear de Schrödinger. Apresentaremos os condensados dipolares, os diversos potenciais, as leis de conservação e a força de arrasto. No **capítulo (4)**, apresentaremos uma síntese dos métodos numéricos empregados. No **capítulo (5)**, os resultados principais serão analisados. Dentre eles estão as ondas de choque, as “ondas de navio”, os sólitons, os vórtices e a força de arrasto. No **capítulo (6)**, apresentaremos a nossa conclusão, bem como fundamentaremos a sua possível continuação.

Capítulo 2

Feixes luminosos em cristais fotorrefrativos

Atualmente, o estudo de sólitons formados em meios ópticos é uma área de intensa pesquisa, para a qual é importante tanto cientificamente quanto para potenciais aplicações [5, 6]. Diferentes tipos de sólitons já foram observados em vários meios ópticos não-lineares e seus comportamentos têm sido explicados por modelos que utilizam a equação não-linear de Schrödinger (NLS) e a equação não-linear generalizada de Schrödinger (GNLS) que serve às diferentes dimensões e geometrias, de modo que podemos considerar as propriedades de sólitons individuais como já sendo do conhecimento de nossa comunidade científica. Porém, há situações nas quais muitos sólitons são gerados, formando uma densa rede de sólitons. Nestes casos é impossível desprezar as interações entre os sólitons, sendo necessário considerar a evolução da estrutura como um todo ao invés de traçar a evolução de cada sóliton separadamente. Geralmente, essas estruturas aparecem como resultado da quebra da onda de um grande pulso inicial ou de uma grande perturbação junto a um fundo constante. Por isso, tais estruturas podem ser consideradas como partes dispersivas das correspondentes ondas de choque que são bem conhecidas na física dos fluidos viscosos compressíveis [7]. Em um fluido viscoso, o choque pode ser representado como uma estreita região em que processos de forte dissipação ocorrem. Em óptica, ao contrário, efeitos de dissipação podem ser desprezados se comparados com os efeitos de dispersão, de modo que a descontinuidade do choque se resolve dentro de uma região em

expansão cheia de oscilações não-lineares. Tais ondas de choque dispersivas são conhecidas como *tidal bores* quando ocorrem nos rios [8] e têm sido observadas também em outros sistemas físicos, incluindo o plasma [9] e os condensados de Bose-Einstein [10].

Dependendo das propriedades de dispersão e de não-linearidade do meio no qual a onda se propaga, os choques dispersivos podem conter sólitons brilhantes ou escuros. Por exemplo, *tidal bores* consistem de sólitons brilhantes governados pela equação de Korteweg-de Vries para ondas superficiais de água enquanto que choques em condensados de Bose-Einstein com interação interatômica repulsiva são governados pela equação defocalizadora de Gross-Pitaevskii e consiste em uma sequência de sólitons escuros.

É importante notar que os choques dispersivos não devem ser confundidos com uma sequência de sólitons gerados em meios modulacionalmente instáveis descritos, por exemplo, por uma equação focalizadora não-linear de Schrödinger [11]. Tal meio não pode existir em um estado uniforme, e qualquer perturbação decai para sólitons brilhantes ou até conduz para um colapso no caso tridimensional. Esta situação na óptica de cristais fotorrefrativos foi discutida teoricamente em [12]. Neste trabalho iremos considerar apenas a situação modulacionalmente estável.

A geração de estruturas com muitos sólitons foi observada na propagação de feixes de luz em meios ópticos não-lineares [13, 14, 15]. Nesses experimentos, a inicial não-uniformidade dos feixes de luz necessários para a formação de sólitons foi criada por uma grande perturbação na distribuição de intensidade ou distribuição de fase. Em ambos os casos, uma perturbação inicial evolui para uma sequência de sólitons. A teoria de uma similar evolução para o caso de condensados de Bose-Einstein descrita pela equação de Gross-Pitaevskii unidimensional foi desenvolvida na Ref.[16]. Experimentos em óptica para a produção de tais ondas de choque dispersivas foram recentemente apresentadas em [15, 17]. Motivados por esses experimentos, nós iremos considerar aqui a teoria de ondas de choque dispersivas em meios fotorrefrativos.

Considerando o fato de que o número de sólitons que interagem em choques dispersivos é geralmente muito maior do que um, e de que esses sólitons são espacialmente ordenados na amplitude, tal choque dispersivo pode ser representado por uma onda periódica mo-

dulada com parâmetros que mudam um pouco em um período transversal ou longitudinal da amplitude do pacote de onda eletromagnética. Uma lenta mudança dos parâmetros da amplitude do pacote é governada até altas ordens pelas equações modulacionais de Whitham obtidas por leis de conservação proporcionais sobre a família de soluções periódicas não-lineares ou pela aplicação do princípio variacional médio [7, 18, 19].

Para a equação NLS unidimensional, as equações de Whitham foram derivadas em [20, 21] (veja também [19]) e a teoria matemática das ondas de choque dispersivas para o caso de defocalização foi desenvolvida em [22, 23, 24, 25, 26, 27, 28]. Ela foi aplicada para a propagação de sinais em fibras ópticas em [29] e em condensados de Bose-Einstein em [30, 10]. Deveria ter sido mencionado que para o caso da equação NLS unidimensional, a presença de uma estrutura integrável tem consequências importantes para o sistema de modulação (Whitham), ou seja, o último pode ser representado em uma forma diagonal (Riemann), na qual simplifica-se drasticamente as análises adicionais. O método para obter as equações de Whitham nesta forma é baseada na *Inverse Scattering Transform* (IST) aplicada à equação NLS [20, 21]. Porém, no caso da equação generalizada não-linear de Schrödinger, o método IST não pode mais ser usado, e a estrutura diagonal do sistema (Whitham) não está disponível. Apesar disso, foi mostrado em [31, 32, 33] que neste caso as características principais da onda de choque dispersiva ainda podem ser encontradas usando algumas propriedades gerais das equações de Whitham as quais permanecem presentes até no caso não-integrável. Aqui nós devemos usar o último método para derivação dos parâmetros das ondas de choque dispersivas unidimensionais geradas em cristais fotorrefrativos e devemos confirmar nossos resultados analíticos através de simulações numéricas, as quais também fornecem uma informação mais detalhada nos casos em que a aproximação analítica não está ainda bem desenvolvida (digamos, em 2D).

2.1 Dedução da GNLS a partir das equações de Maxwell

A equação generalizada não-linear de Schrödinger (GNLS) tem um papel fundamental em óptica não-linear. Em razão de sua importância, vamos derivá-la a partir das equações de Maxwell na forma diferencial que descrevem a propagação de ondas eletromagnéticas em um meio. Inicialmente derivaremos a equação da onda e sairemos do domínio temporal para o domínio da frequência, separando o campo elétrico em um envelope e uma onda plana que se propaga numa certa direção e frequência, de modo que assumiremos que este envelope é uma função que varia lentamente. Em seguida, separamos as respostas linear e não-linear do meio material de modo a relacionar sua interação com o campo eletromagnético. Para isso, devemos incluir a não-linearidade através da expansão em série de Taylor da constante de propagação até segunda ordem nos termos lineares e implicitamente até segunda ordem no termo não-linear acrescentado. Ao voltarmos para o domínio temporal, obteremos a GNLS e a simplificaremos mudando o sistema de referência para um sistema que se move na velocidade do pulso.

Esse método de derivação pode ser encontrado em Boyd [34], onde se assume que a não-linearidade também pode ser incluída na polarização criando assim um método que depende de como a polarização é modelada ou, de forma mais rigorosa, derivada através do tratamento quântico da susceptibilidade não-linear. De forma mais concisa, McLeod *et al.* [35] incluem a não-linearidade através da constante dielétrica. Métodos alternativos dessa derivação podem ser encontrados em [36, 37, 38, 19].

Como estamos interessados em estudar feixes estacionários em cristais fotorrefrativos, podemos incluir a não-linearidade através de um modelo descrito por Kukhtarev [39], no qual ela é dada por um índice de refração que depende da intensidade do feixe de modo a gerar uma não-linearidade saturável. Em sua forma mais simples, essa não-linearidade pode ser descrita como do tipo Kerr.

Vamos começar assumindo que o meio é dielétrico (isolante), ou seja, sem cargas livres, não-magnético e isotrópico. Nestas condições as equações de Maxwell são

$$\nabla \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}, \quad (2.1)$$

$$\nabla \times \vec{H} = \frac{\partial \vec{D}}{\partial t}, \quad (2.2)$$

$$\nabla \cdot \vec{D} = 0, \quad (2.3)$$

$$\nabla \cdot \vec{B} = 0, \quad (2.4)$$

na qual os vetores \vec{E} , \vec{H} , \vec{D} e \vec{B} são, respectivamente, o campo elétrico e magnético, a densidade de fluxo elétrico e magnético. Esses vetores possuem dependência temporal, t , e nas três coordenadas espaciais, $\mathbf{r}_\perp = (x, y)$ e z . Porém, por enquanto as dependências são omitidas para simplificar a notação. As densidades de fluxo \vec{D} e \vec{B} são geradas em resposta aos campos \vec{E} e \vec{H} , que se propagam no meio, e relacionam-se através das relações constitutivas

$$\vec{D} = \varepsilon_0 \vec{E} + \vec{P}, \quad (2.5)$$

$$\vec{B} = \mu_0 \vec{H}, \quad (2.6)$$

nas quais \vec{P} é a polarização induzida do material; ε_0 e μ_0 são a permissividade e a permeabilidade do vácuo, respectivamente, e estas são relacionadas pela velocidade da luz no vácuo $1/c^2 = \varepsilon_0 \mu_0$.

Derivamos agora a equação da onda pelo método tradicional tomando o rotacional da Eq.(2.1), fazendo o uso da Eq.(2.2) e da relação (2.6)

$$\nabla \times \nabla \times \vec{E} = -\mu_0 \frac{\partial^2 \vec{D}}{\partial t^2}. \quad (2.7)$$

Para simplificar esta equação, vamos utilizar a identidade vetorial

$$\nabla \times \nabla \times \vec{E} = \nabla (\nabla \cdot \vec{E}) - \nabla^2 \vec{E} = -\nabla^2 \vec{E}, \quad (2.8)$$

na qual assumimos que $\nabla \cdot \vec{D} = 0$, ou seja, o meio não contém cargas livres, então $\nabla \cdot \vec{E} = 0$ [40]. Podemos agora reescrever a equação (2.7) usando a identidade (2.8)

$$\nabla^2 E = \mu_0 \frac{\partial^2 D}{\partial t^2}. \quad (2.9)$$

Esta é a equação não-linear da onda escalar no domínio temporal. Por definição, se o meio é isotrópico, a relação entre os vetores \vec{P} e \vec{E} é independente do vetor \vec{E} , então o meio exibe o mesmo comportamento em todas as direções, e os vetores \vec{E} e \vec{P} devem ser paralelos [41]. Assumimos que a polarização não muda durante a propagação. Então, a equação da onda (2.7) pode ser utilizada para um campo elétrico \vec{E} em qualquer direção. Desta forma, escalares podem substituir os vetores. Ao invés de considerarmos a polarização explicitamente, vamos escrever a equação constitutiva para D , Eq.(2.5), como

$$D = \varepsilon_0 \varepsilon E, \quad (2.10)$$

na qual $\varepsilon = \varepsilon(\omega, |E|^2)$ é a constante dielétrica efetiva, adimensional, que descreve as contribuições linear e não-linear para a resposta do meio aos campos. A dependência da constante dielétrica efetiva sobre a intensidade do campo elétrico $|E|^2$ será omitida enquanto a não-linearidade não for explicitada. Substituindo a relação (2.10) na Eq. (2.9), obtemos

$$\nabla^2 E = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 (\varepsilon E)}{\partial t^2}. \quad (2.11)$$

Vamos expressar os campos em termos de suas transformadas de Fourier. Por conveniência, adotaremos as seguintes definições

$$E(\mathbf{r}_\perp, z, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathcal{E}(\mathbf{r}_\perp, z, \omega) e^{-i\omega t} d\omega, \quad (2.12a)$$

$$D(\mathbf{r}_\perp, z, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathcal{D}(\mathbf{r}_\perp, z, \omega) e^{-i\omega t} d\omega, \quad (2.12b)$$

em que são relacionados no domínio da frequência pela seguinte equação

$$\mathcal{D}(\mathbf{r}_\perp, z, \omega) = \varepsilon_0 \varepsilon(\omega) \mathcal{E}(\mathbf{r}_\perp, z, \omega). \quad (2.13)$$

Introduzindo a transformada (2.12a) na equação (2.11), obtemos a equação da onda no domínio da frequência

$$\nabla^2 \mathcal{E}(\mathbf{r}_\perp, z, \omega) + k^2 \mathcal{E}(\mathbf{r}_\perp, z, \omega) = 0, \quad (2.14)$$

onde k é uma função de ω , de modo que

$$k^2(\omega) = \varepsilon(\omega) \frac{\omega^2}{c^2}. \quad (2.15)$$

Pretendemos derivar a equação generalizada não-linear de Schrödinger, que pode ser considerada a equação da onda para uma função $A(\mathbf{r}_\perp, z, t)$ que varia lentamente. Para isso, é útil isolarmos as modulações relativamente lentas de E , Fig. (2.1), se comparadas ao comprimento de onda ou ao período, das rápidas oscilações delimitadas pelo pacote de onda na frequência ω_0 , separando o campo em um envelope e uma onda plana que se propaga na direção z

$$E(\mathbf{r}_\perp, z, t) = A(\mathbf{r}_\perp, z, t) e^{i(k_0 z - \omega_0 t)} + c.c., \quad (2.16)$$

na qual ω_0 é a frequência central no espectro do pulso, $k_0 = \sqrt{\varepsilon(\omega_0)} \omega_0 / c$ é a parte linear do vetor de onda nessa frequência, e *c.c.* significa o complexo conjugado do termo à esquerda. A constante k_0 também pode ser escrita como $k_0 = n_0 \omega_0 / c = 2\pi n_0 / \lambda$, onde n_0 é o índice de refração linear, λ é o comprimento de onda da luz, e $A(\mathbf{r}_\perp, z, t)$ é a amplitude da onda.

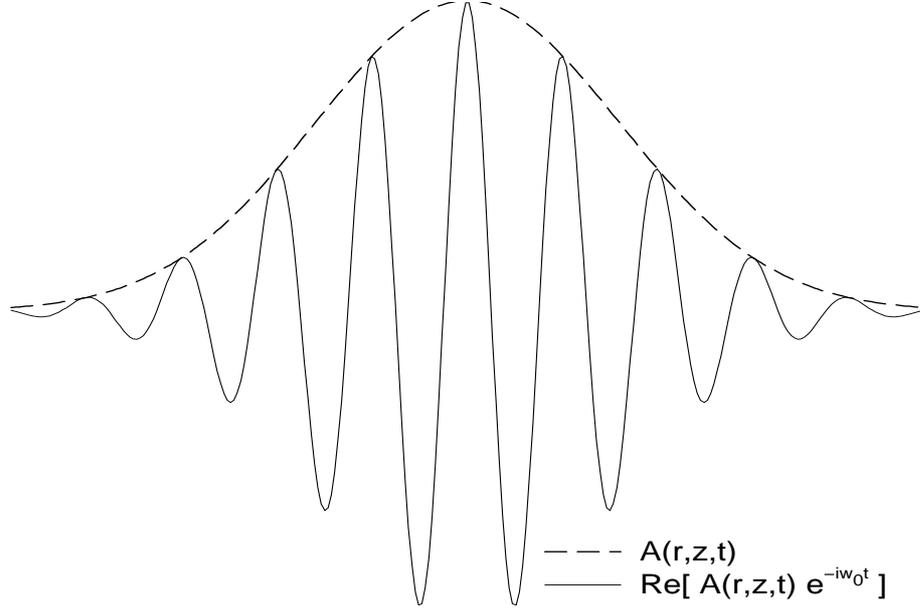


Figura 2.1: Representação gráfica do campo elétrico E em $z = 0$, onde $A(\mathbf{r}_\perp, z, t)$ é uma função que varia lentamente.

Representamos essa amplitude em termos de seu conteúdo espectral como

$$A(\mathbf{r}_\perp, z, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathcal{A}(\mathbf{r}_\perp, z, \omega) e^{-i\omega t} d\omega, \quad (2.17)$$

e a transformada de Fourier de $A(\mathbf{r}_\perp, z, t)$ é dada por

$$\mathcal{A}(\mathbf{r}_\perp, z, \omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} A(\mathbf{r}_\perp, z, t) e^{-i\omega t} dt. \quad (2.18)$$

Obtemos a relação entre $\mathcal{E}(\mathbf{r}_\perp, z, \omega)$ e $\mathcal{A}(\mathbf{r}_\perp, z, \omega)$ (função que varia lentamente no domínio da frequência) tomando a transformada de Fourier da Eq.(2.16)

$$\begin{aligned} \mathcal{E}(\mathbf{r}_\perp, z, \omega) &= \int_{-\infty}^{+\infty} (A(\mathbf{r}_\perp, z, t) e^{i(k_0 z - \omega_0 t)} + A^*(\mathbf{r}_\perp, z, t) e^{-i(k_0 z - \omega_0 t)}) e^{i\omega t} dt \\ &= e^{ik_0 z} \int_{-\infty}^{+\infty} A(\mathbf{r}_\perp, z, t) e^{it(\omega - \omega_0)} dt + e^{-ik_0 z} \int_{-\infty}^{+\infty} A^*(\mathbf{r}_\perp, z, t) e^{it(\omega + \omega_0)} dt \\ &= \mathcal{A}(\mathbf{r}_\perp, z, \omega - \omega_0) e^{ik_0 z} + \mathcal{A}^*(\mathbf{r}_\perp, z, \omega + \omega_0) e^{-ik_0 z} \\ &\simeq \mathcal{A}(\mathbf{r}_\perp, z, \omega - \omega_0) e^{ik_0 z}. \end{aligned} \quad (2.19)$$

Essa forma aproximada é obtida notando-se que $A(\mathbf{r}_\perp, z, t)$ que varia lentamente no tempo

não pode possuir componentes de Fourier de alta frequência. Agora, escreveremos a equação da onda (2.14) em termos da transformada de Fourier de $A(\mathbf{r}_\perp, z, t)$

$$\nabla^2 (\mathcal{A} e^{ik_0 z}) + k^2 (\mathcal{A} e^{ik_0 z}) = 0. \quad (2.20)$$

O primeiro termo do lado esquerdo desta equação é calculado aplicando a regra da cadeia quando derivamos em z

$$\nabla^2 (\mathcal{A} e^{ik_0 z}) = \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) (\mathcal{A} e^{ik_0 z}) = e^{ik_0 z} \nabla_\perp^2 \mathcal{A} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} (\mathcal{A} e^{ik_0 z}), \quad (2.21)$$

na qual $\nabla_\perp^2 = \partial^2/\partial x^2 + \partial^2/\partial y^2$ é o Laplaciano transversal; e

$$\frac{\partial^2}{\partial z^2} (\mathcal{A} e^{ik_0 z}) = \frac{\partial}{\partial z} \left(e^{ik_0 z} \frac{\partial \mathcal{A}}{\partial z} + ik_0 e^{ik_0 z} \mathcal{A} \right) = e^{ik_0 z} \left(\frac{\partial^2 \mathcal{A}}{\partial z^2} + 2ik_0 \frac{\partial \mathcal{A}}{\partial z} - k_0^2 \mathcal{A} \right). \quad (2.22)$$

Substituindo as equações (2.21) e (2.22) em (2.20) obtemos

$$\nabla_\perp^2 \mathcal{A} + \frac{\partial^2 \mathcal{A}}{\partial z^2} + 2ik_0 \frac{\partial \mathcal{A}}{\partial z} + (k^2 - k_0^2) \mathcal{A} = 0. \quad (2.23)$$

Para simplificarmos esta equação, é usual assumirmos a aproximação da variação lenta do envelope, às vezes chamada de aproximação paraxial

$$\left| \frac{\partial^2 \mathcal{A}}{\partial z^2} \right| \ll 2k_0 \left| \frac{\partial \mathcal{A}}{\partial z} \right|. \quad (2.24)$$

Com ela podemos desprezar o termo contendo $\partial^2 \mathcal{A}/\partial z^2$. Esta aproximação significa que o envelope não muda muito rapidamente em z , de modo que a derivada deste envelope é suave numa escala se comparada ao comprimento de onda. Porém, esta aproximação falha para não-linearidades muito grandes ou pulsos muito curtos. Então, obtemos

$$\nabla_\perp^2 \mathcal{A} + 2ik_0 \frac{\partial \mathcal{A}}{\partial z} + (k^2 - k_0^2) \mathcal{A} = 0. \quad (2.25)$$

Na prática, k e k_0 são muito próximos. Para uma boa aproximação, podemos substituir

$$k^2 - k_0^2 \cong 2k_0(k - k_0) \quad (2.26)$$

de modo a obtermos

$$\nabla_{\perp}^2 \mathcal{A} + 2ik_0 \frac{\partial \mathcal{A}}{\partial z} + 2k_0(k - k_0) \mathcal{A} = 0. \quad (2.27)$$

Relembrando que a constante de propagação k depende tanto da frequência quanto da intensidade da onda óptica (através da dependência de ε na intensidade $|E|^2$), é adequado descrevermos essa dependência aproximando $k(\omega)$ como uma série de potências na diferença de frequências $\omega - \omega_0$ como

$$k = k_0 + \delta k_{NL} + (\omega - \omega_0)k_1 + \frac{1}{2}(\omega - \omega_0)^2 k_2, \quad \text{válido se } \delta k_{NL} \ll k_0, \quad (2.28)$$

onde a introduzimos, nessa expressão, a contribuição não-linear δk_{NL} da constante de propagação que será dada *a posteriori*; e

$$k_1 = \left. \frac{\partial k}{\partial \omega} \right|_{\omega_0} = \left(\frac{n_0}{c} + \frac{\omega_0}{c} \frac{\partial n_0}{\partial \omega} \right) = \frac{1}{n_0 c} \left(\varepsilon_L + \frac{\omega_0}{c} \frac{\partial \varepsilon_L}{\partial \omega} \right) \equiv \frac{1}{v_g(\omega_0)}, \quad (2.29)$$

na qual v_g é a velocidade de grupo do pulso no meio material e k_1 é definida como o inverso dessa velocidade; e

$$k_2 = \left. \frac{\partial^2 k}{\partial \omega^2} \right|_{\omega_0} = \left(-\frac{1}{v_g^2} \frac{\partial v_g}{\partial \omega} \right)_{\omega_0} = -\frac{1}{\omega_0 n_0 c} \left(\varepsilon_L + 2\omega_0 \frac{\partial \varepsilon_L}{\partial \omega} + \frac{\omega_0^2}{2} \frac{\partial^2 \varepsilon_L}{\partial \omega^2} \right), \quad (2.30)$$

na qual k_2 é a medida da dispersão da velocidade de grupo. Formas alternativas de expansão podem ser feitas utilizando-se a constante dielétrica efetiva ε com o termo linear expandido até segunda ordem na frequência, e com o termo não-linear expandido implicitamente até segunda ordem no campo elétrico

$$\varepsilon = \varepsilon_L(\omega) + \delta \varepsilon_{NL}(E) = \varepsilon_L + (\omega - \omega_0) \left. \frac{\partial \varepsilon_L}{\partial \omega} \right|_{\omega_0} + \frac{1}{2}(\omega - \omega_0)^2 \left. \frac{\partial^2 \varepsilon_L}{\partial \omega^2} \right|_{\omega_0} + \delta \varepsilon_{NL}(|E|^2), \quad (2.31)$$

ou o índice de refração $n = \sqrt{\varepsilon}$ expandido até primeira ordem como

$$n = n_0 + \frac{1}{2n_0}(\omega - \omega_0) \left. \frac{\partial \varepsilon_L}{\partial \omega} \right|_{\omega_0} + \frac{1}{4n_0}(\omega - \omega_0)^2 \left. \frac{\partial^2 \varepsilon_L}{\partial \omega^2} \right|_{\omega_0} + \delta n(|E|^2), \quad (2.32)$$

onde o índice de refração linear $n_0 = \sqrt{\varepsilon_L}$. Termos dispersivos de mais alta ordem podem ser incluídos se adicionarmos os termos lineares seguintes nas expansões de Taylor. Vamos substituir a expansão (2.28) na Eq.(2.27) e então, após dividirmos a equação por $2k_0$, obtemos

$$i \frac{\partial \mathcal{A}}{\partial z} + \frac{1}{2k_0} \nabla_{\perp}^2 \mathcal{A} + \left[\delta k_{NL} + k_1 (\omega - \omega_0) + \frac{1}{2} k_2 (\omega - \omega_0)^2 \right] \mathcal{A} = 0. \quad (2.33)$$

Para voltarmos ao domínio do tempo devemos multiplicar a equação (2.33) acima por $e^{-i(\omega - \omega_0)t}$ e integrar sobre todos os valores de $\omega - \omega_0$. As integrais resultantes são calculadas a seguir

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{A}(\mathbf{r}_{\perp}, z, \omega - \omega_0) e^{-i(\omega - \omega_0)t} \frac{d(\omega - \omega_0)}{2\pi} = A(\mathbf{r}_{\perp}, z, t), \quad (2.34a)$$

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{\infty} (\omega - \omega_0) \mathcal{A}(\mathbf{r}_{\perp}, z, \omega - \omega_0) e^{-i(\omega - \omega_0)t} \frac{d(\omega - \omega_0)}{2\pi} \\ &= \frac{1}{(-i)} \frac{\partial}{\partial t} \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{A}(\mathbf{r}_{\perp}, z, \omega - \omega_0) e^{-i(\omega - \omega_0)t} \frac{d(\omega - \omega_0)}{2\pi} = i \frac{\partial}{\partial t} A(\mathbf{r}_{\perp}, z, t), \end{aligned} \quad (2.34b)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} (\omega - \omega_0)^2 \mathcal{A}(\mathbf{r}_{\perp}, z, \omega - \omega_0) e^{-i(\omega - \omega_0)t} \frac{d(\omega - \omega_0)}{2\pi} = -\frac{\partial^2}{\partial t^2} A(\mathbf{r}_{\perp}, z, t). \quad (2.34c)$$

Então, a equação (2.33) torna-se

$$i \frac{\partial A}{\partial z} + \frac{1}{2k_0} \nabla_{\perp}^2 A + i k_1 \frac{\partial A}{\partial t} - \frac{k_2}{2} \frac{\partial^2 A}{\partial t^2} = -\delta k_{NL} A. \quad (2.35)$$

Essa equação pode ser simplificada fazendo-se uma transformação de coordenadas para um sistema de referência que se move na velocidade do pulso

$$\tau = t - \frac{z}{v_g} = t - k_1 z, \quad (2.36)$$

e descrevemos o pulso óptico pela função $A_s(\mathbf{r}_\perp, z, t)$, a qual é relacionada com a função $A(\mathbf{r}_\perp, z, t)$ por

$$A_s(\mathbf{r}_\perp, z, \tau) = A(\mathbf{r}_\perp, z, t). \quad (2.37)$$

Em seguida, utilizamos a regra da cadeia da diferenciação para mostrar que

$$\frac{\partial A}{\partial z} = \frac{\partial A_s}{\partial z} + \frac{\partial A_s}{\partial \tau} \frac{\partial \tau}{\partial z} = \frac{\partial A_s}{\partial z} - k_1 \frac{\partial A_s}{\partial \tau}, \quad (2.38a)$$

$$\frac{\partial A}{\partial t} = \frac{\partial A_s}{\partial z} \frac{\partial z}{\partial t} + \frac{\partial A_s}{\partial \tau} \frac{\partial \tau}{\partial t} = \frac{\partial A_s}{\partial \tau}, \quad (2.38b)$$

e analogamente que $\partial^2 A / \partial t^2 = \partial^2 A_s / \partial \tau^2$. Estas expressões são agora introduzidas na Eq.(2.35) e, cancelando os termos opostos $ik_1 \partial A_s / \partial \tau$, obtemos

$$i \frac{\partial A_s}{\partial z} + \frac{1}{2k_0} \nabla_\perp^2 A_s - \frac{k_2}{2} \frac{\partial^2 A_s}{\partial \tau^2} = -\delta k_{NL} A_s. \quad (2.39)$$

Como

$$\delta k_{NL} = \frac{\omega_0}{c} \delta n(|E|^2) = \frac{k_0}{n_0} \delta n(|E|^2) \quad \text{e} \quad |E|^2 = |A|^2 = |A_s|^2, \quad (2.40)$$

obtemos

$$i \frac{\partial A_s}{\partial z} + \frac{1}{2k_0} \nabla_\perp^2 A_s - \frac{k_2}{2} \frac{\partial^2 A_s}{\partial \tau^2} = -\frac{k_0}{n_0} \delta n(|A_s|^2) A_s. \quad (2.41)$$

Essa equação pode ser considerada como uma generalização da equação não-linear de Schrödinger e possui uma história extremamente rica em óptica não-linear. Geralmente ela não é integrável e em muitos casos só pode ser resolvida numericamente. Reescrevendo essa equação na forma

$$\frac{\partial A_s(\mathbf{r}_\perp, \tau)}{\partial z} = \left[\frac{i}{2k_0} \nabla_\perp^2 - \frac{i}{2} k_2 \frac{\partial^2}{\partial \tau^2} + i \frac{k_0}{n_0} \delta n(|A_s|^2) \right] A_s \quad (2.42)$$

somos levados à interpretação de que a amplitude A_s do campo varia com a distância de propagação z (lado esquerdo da equação) por causa de três efeitos físicos (os três termos do lado direito da equação). O termo envolvendo o Laplaciano transversal descreve o espalhamento do feixe devido à difração, o termo envolvendo a derivada temporal segunda descreve o espalhamento do pulso no tempo devido à dispersão da velocidade de grupo, e o terceiro termo descreve a aquisição não-linear de fase e é livre de dispersão visto que

não possui dependência em ω . A não-linearidade pode neutralizar os efeitos de espalhamento dispersivo e difrativo e, dependendo de como os termos se balançam, poderá haver formação de sólitons espaciais ou temporais.

No modelo mais simples de não-linearidade, a propagação de um pulso óptico ou de uma onda óptica contínua em um meio cuja não-linearidade é do tipo Kerr (ou de terceiro grau), provoca instantaneamente uma mudança no índice de refração não-linear de modo que

$$\delta n(|E|^2) = n_2 |E|^2, \quad (2.43)$$

onde n_2 é o coeficiente do efeito Kerr óptico de um meio material. Se $n_2 > 0$, a não-linearidade provoca a autofocalização do feixe; se $n_2 < 0$, ocorre uma autodefocalização. Este modelo descreve muito bem a propagação de feixes em fibras ópticas.

Segundo Kivshar e Luther-Davies [42], todos os tipos de não-linearidades que não são do tipo Kerr discutidos em relação à existência de sólitons em óptica não-linear, podem ser divididos, de maneira geral, em três classes principais: (i) não-linearidades concorrentes, ou seja, não-linearidades de terceiro grau focalizadora (defocalizadora) e de quinto grau defocalizadora (focalizadora), ou ainda sua generalização em série de potências; (ii) não-linearidades saturáveis; e, (iii) não-linearidades na forma de degrau.

Geralmente, o índice de refração não-linear de meios ópticos satura quando um feixe de luz muito intenso é aplicado e nesses casos o modelo de não-linearidade do tipo Kerr passa a falhar. Em alguns materiais, esta variação do índice de refração não-linear pode ser modelada por uma não-linearidade concorrente de terceiro e quinto graus,

$$\delta n(|E|^2) = n_2 |E|^2 + n_3 |E|^4. \quad (2.44)$$

Esse modelo descreve a competição entre autofocalização ($n_2 > 0$), para baixas intensidades, e autodefocalização ($n_3 < 0$), para intensidades mais altas. Modelos similares são geralmente aplicados na descrição da estabilização do colapso de onda na equação NLS (2+1)-dimensional. Em casos mais gerais, os modelos de não-linearidades concorrentes podem ser descritos por uma dependência da intensidade do feixe numa série de

potências,

$$\delta n(|E|^2) = n_p |E|^p + n_{2p} |E|^{2p}, \quad (2.45)$$

onde p é uma constante positiva e geralmente $n_p n_{2p} < 0$.

Modelos com não-linearidades saturáveis são muito aplicados em óptica não-linear. Em potências mais altas, a saturação da não-linearidade tem sido medida em muitos materiais e conseqüentemente a máxima mudança do índice de refração tem sido tabelada. Não vamos nos estender sobre os mecanismos físicos que estão por trás da saturação, mas apenas notar que ela existe em muitos meios não-lineares, geralmente sendo descrita por modelos fenomenológicos introduzidos há mais de trinta anos. Algumas vezes, esses modelos encontram uma justificativa rigorosa como no caso de sólitons fotovoltaicos [43, 44].

De um ponto de vista mais geral, a não-linearidade saturável deve ser caracterizada por três parâmetros independentes: a intensidade de saturação, $|E|_{sat}^2$, a máxima mudança no índice de refração, n_∞ , e o coeficiente n_2 do efeito Kerr óptico, o qual aparece para pequenas intensidades de luz. Em particular, o modelo fenomenológico

$$\delta n(|E|^2) = n_\infty \left[1 - \frac{1}{(1 + |E|^2/|E|_{sat}^2)^p} \right] \quad (2.46)$$

satisfaz esses critérios, onde o coeficiente Kerr aparece como $n_2 = n_\infty p / |E|_{sat}^2$.

Existem sólitons que geralmente requerem um tipo especial de índice de refração não-linear o qual é descrito por uma não-linearidade do tipo Kerr, para feixes de luz pouco intensos, e para feixes mais intensos também é descrito por uma não-linearidade do tipo Kerr, porém, com um diferente coeficiente n_2 . Essa não-linearidade na forma de degrau, tendo como limiar uma intensidade crítica, pode ser escrita como

$$\delta n(|E|^2) = \begin{cases} n_2^{(1)} |E|^2 & \text{se } |E|^2 < |E|_{cr}^2, \\ n_2^{(2)} |E|^2 & \text{se } |E|^2 > |E|_{cr}^2. \end{cases} \quad (2.47)$$

Aliás, sólitons formados com este tipo especial de índice de refração possuem propriedades atrativas úteis para possíveis aplicações tecnológicas como, por exemplo, o desenvolvi-

mento de portas lógicas e de dispositivos de chaveamento.

Como estamos interessados na propagação de ondas contínuas (*CW*) em meios fotorrefrativos, estudaremos feixes estacionários. No caso da luz *CW*, a amplitude A_s é independente de τ [37] e, conseqüentemente, o termo que envolve a derivada segunda no tempo $\partial^2 A_s / \partial \tau^2 = 0$. Com isso, podemos simplificar a equação (2.41) escrevendo

$$A_s(\mathbf{r}_\perp, z, \tau) = \psi(\mathbf{r}_\perp, z) \quad \text{e} \quad |E|^2 = |\psi|^2, \quad (2.48)$$

e assim obtemos a GNLS em sua forma mais conhecida

$$i \frac{\partial \psi}{\partial z} + \frac{1}{2k_0} \nabla_\perp^2 \psi + \frac{k_0}{n_0} \delta n(|\psi|^2) \psi = 0. \quad (2.49)$$

Assumiremos como modelo de não-linearidade a saturável (2.46) com $p = 1$, a qual descreve muito bem os recentes experimentos feitos com cristais fotorrefrativos, em especial, o cristal SBN:75 (*Strontium Barium Niobate*). Com isso, temos que

$$\delta n(|\psi|^2) = \delta n = n_\infty \frac{\rho}{\rho + \rho_{sat}}, \quad (2.50)$$

onde $\rho = |\psi|^2$ é a intensidade e $\rho_{sat} = |\psi|_{sat}^2$ é o parâmetro de saturação.

A partir do modelo de Kukhtarev com uma dimensão transversa, pode-se mostrar que em um meio fotorrefrativo com um campo elétrico externo orientado ao longo do eixo x e um feixe óptico propagando-se ao longo do eixo z , a mudança do índice de refração é

$$n_\infty = -\frac{1}{2} n_0^3 r_{33} E_p, \quad (2.51)$$

onde r_{33} é o índice eletro-óptico e $E_p = V/L$ é o campo elétrico aplicado, sendo V a voltagem externa e L o comprimento do cristal. Assumiremos que esta relação também é válida para o caso de existirem duas dimensões transversas [45].

2.2 Dedução das equações principais

Sólitons em meios ópticos fotorrefrativos foram observados pela primeira vez no experimento descrito em Duree *et al.* [46], e nos experimentos descritos em Couton *et al.* [15] e Wan *et al.* [17] a formação de ondas de choque dispersivas foram observadas na evolução espacial de feixes de luz propagando-se através de cristais fotorrefrativos autodefocalizadores. Conforme a dedução da seção anterior, a propagação desses feixes estacionários é descrita pela equação

$$i\frac{\partial\psi}{\partial z} + \frac{1}{2k_0}\nabla_{\perp}^2\psi + \frac{k_0}{n_0}\delta n(|\psi|^2)\psi + V(\mathbf{r}_{\perp})\psi = 0, \quad (2.52)$$

onde ψ é o envelope da onda eletromagnética com número de onda $k_0 = 2\pi n_0/\lambda$, z é a coordenada ao longo do feixe, x, y são coordenadas transversas, $\mathbf{r}_{\perp} = (x, y)$, $\nabla_{\perp}^2 = \partial^2/\partial x^2 + \partial^2/\partial y^2$ é o Laplaciano transversal, n_0 é o índice de refração linear, o termo $V(\mathbf{r}_{\perp})$ adicionado representa um “potencial” de um obstáculo (por exemplo, de um fio refletor) no qual ocorre difração, e em um meio fotorrefrativo nós temos

$$\delta n = -\frac{1}{2}n_0^3 r_{33} E_p \frac{\rho}{\rho + \rho_{sat}}, \quad (2.53)$$

onde E_p é o campo elétrico aplicado, r_{33} é o índice eletro-óptico, $\rho = |\psi|^2$, e ρ_{sat} é o parâmetro de saturação.

Por conveniência matemática, introduzimos as variáveis adimensionais

$$\tilde{z} = \frac{1}{2}kn_0^2 r_{33} E_p \left(\frac{\rho_c}{\rho_d}\right) z, \quad \tilde{x} = kn_0 \sqrt{\frac{1}{2}r_{33} E_p \left(\frac{\rho_c}{\rho_d}\right)} x, \quad \tilde{y} = kn_0 \sqrt{\frac{1}{2}r_{33} E_p \left(\frac{\rho_c}{\rho_d}\right)} y,$$

$$\tilde{\psi} = \sqrt{\rho_c}\psi, \quad (2.54)$$

onde ρ_c é um valor característico da intensidade óptica (sua concreta definição depende do problema em consideração; por exemplo, pode ser a intensidade de fundo), de modo

que a Eq. (2.52) toma a forma da equação GNLS

$$i\frac{\partial\psi}{\partial z} + \frac{1}{2}\nabla_{\perp}^2\psi - \frac{|\psi|^2}{1 + \gamma|\psi|^2}\psi + V(\mathbf{r}_{\perp})\psi = 0, \quad (2.55)$$

onde $\gamma = \rho_c/\rho_{sat}$, $V(\mathbf{r}_{\perp})$ é representado em unidades adimensionais, e os tils são omitidos por conveniência da notação. Na verdade, nossa abordagem pode ser aplicada a outras formas do termo não-linear desde que corresponda a feixes de luz autodefocalizadores. Portanto, vamos usar também a forma geral da equação,

$$i\frac{\partial\psi}{\partial z} + \frac{1}{2}\nabla_{\perp}^2\psi - f(|\psi|^2)\psi + V(\mathbf{r}_{\perp})\psi = 0, \quad (2.56)$$

onde $f(|\psi|^2) > 0$. Em particular, para o meio fotorrefrativo,

$$f(\rho) = \frac{\rho}{1 + \gamma\rho}. \quad (2.57)$$

Se o efeito de saturação é desprezível ($\gamma|\psi|^2 \ll 1$), então a equação (2.55) reduz-se à equação padrão NLS de terceiro grau

$$i\frac{\partial\psi}{\partial z} + \frac{1}{2}\nabla_{\perp}^2\psi - |\psi|^2\psi + V(\mathbf{r}_{\perp})\psi = 0. \quad (2.58)$$

Se a fase de ψ for uma função de um único valor, então é conveniente representarmos as equações NLS apresentadas acima, na forma hidrodinâmica. Para isso, aplicamos a transformação de Madelung, ou seja, assumimos que $\nabla \times \mathbf{u} = 0$ e fazemos a substituição

$$\psi(\mathbf{r}_{\perp}, z) = \sqrt{\rho} \exp[i\phi(\mathbf{r}_{\perp}, z)], \quad (2.59)$$

onde a fase

$$\phi(\mathbf{r}_{\perp}, z) = \int^{\mathbf{r}_{\perp}} \mathbf{u}(\mathbf{r}'_{\perp}, z) \cdot d\mathbf{r}'_{\perp}, \quad (2.60)$$

de modo a obtermos o sistema

$$\begin{cases} i\frac{\partial\psi}{\partial z} + \frac{1}{2}\nabla_{\perp}^2\psi - f(\rho)\psi + V(\mathbf{r}_{\perp})\psi = 0 & \text{(GNLS),} \\ -i\frac{\partial\psi^*}{\partial z} + \frac{1}{2}\nabla_{\perp}^2\psi^* - f(\rho)\psi^* + V(\mathbf{r}_{\perp})\psi^* = 0 & \text{(c.c.).} \end{cases} \quad (2.61)$$

Se multiplicarmos a primeira equação por ψ^* e a segunda por ψ , obtemos

$$\begin{cases} i\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial z} + \frac{1}{2}\psi^*\nabla_{\perp}^2\psi - \psi^*f(\rho)\psi + \psi^*V(\mathbf{r}_{\perp})\psi = 0, \\ -i\psi\frac{\partial\psi^*}{\partial z} + \frac{1}{2}\psi\nabla_{\perp}^2\psi^* - \psi f(\rho)\psi^* + \psi V(\mathbf{r}_{\perp})\psi^* = 0, \end{cases} \quad (2.62)$$

de modo que se subtraímos e somamos estas equações, obtemos respectivamente,

$$\begin{cases} \rho_z + \nabla_{\perp} \cdot (\rho\mathbf{u}) = 0, \\ \mathbf{u}_z + (\mathbf{u} \cdot \nabla_{\perp})\mathbf{u} + \nabla_{\perp}f(\rho) - \nabla V(\mathbf{r}_{\perp}) - \nabla_{\perp} \left[\frac{\nabla_{\perp}^2\rho}{4\rho} - \frac{(\nabla_{\perp}\rho)^2}{8\rho^2} \right] = 0. \end{cases} \quad (2.63)$$

A intensidade de luz, ρ , na interpretação hidrodinâmica representa a densidade de um “fluido” e a Eq. (2.57) pode ser vista como uma “equação de estado” para esse fluido. A função $\mathbf{u}(\mathbf{r}_{\perp}, z) = \nabla_{\perp}\phi(\mathbf{r}_{\perp}, z)$ é um valor local da componente transversa do vetor de onda na direção do feixe de luz; na representação hidrodinâmica ela tem o significado de “velocidade do fluxo”. A variável z desempenha o papel de tempo, então é natural descrevermos as deformações do feixe de luz em termos evolucionários. Obviamente, se a distribuição inicial não depender de uma das coordenadas transversas (digamos, y), então os operadores diferenciais vetoriais transversos reduzem-se às usuais derivadas ($\nabla_{\perp} \rightarrow \partial/\partial x$, $\nabla_{\perp}^2 \rightarrow \partial^2/\partial x^2$) e as Eqs. (2.63) tornam-se uma representação hidrodinâmica equivalente da Eq. (2.58) unidimensional.

Conforme o sistema (2.63), com $V(\mathbf{r}_{\perp}) = 0$, a evolução de uma distribuição inicial especificada em $z = 0$ tipicamente conduz à quebra de onda e formação de ondas de choque dispersivas. Podemos distinguir os seguintes casos típicos: (i) caso unidimensional com geração de choques dispersivos na evolução de uma *strip hump* brilhante sobre uma

distribuição uniforme de intensidade (de fundo), (ii) caso unidimensional com geração de seqüências de sólitons a partir de um *strip hole* na intensidade da luz, e (iii) caso bidimensional com geração de choques dispersivos na evolução de um *hump* brilhante cilindricamente simétrico sobre uma distribuição uniforme de intensidade.

Na geometria unidimensional tais *humps* podem ser modelados qualitativamente por pulsos na forma de degrau, e esses modelos são convenientes para fazermos considerações analíticas. Como foi mostrado em [10] para o caso da equação NLS, com $\gamma = 0$, esse modelo concorda muito bem com as simulações numéricas de dinâmicas bidimensionais. Então, utilizaremos esses modelos idealizados.

2.3 Ondas de choque dispersivas

Nesta seção, o método das características, a teoria da onda simples e a teoria das modulações de Whitham ([47, 7, 19, 48]) são aplicadas para obtermos uma solução analítica.

2.3.1 Teoria analítica de choques dispersivos unidimensionais gerados no decaimento de uma distribuição inicial na forma de degrau

Começemos com o tratamento analítico de choques descritos pela equação unidimensional

$$i\psi_z + \frac{1}{2}\psi_{xx} - f(|\psi|^2)\psi = 0, \quad (2.64)$$

ou, na forma hidrodinâmica, pelo sistema

$$\begin{aligned} \rho_z + (\rho u)_x &= 0, \\ u_z + uu_x + \frac{df}{d\rho}\rho_x + \left(\frac{(\rho_x)^2}{8\rho^2} - \frac{\rho_{xx}}{4\rho} \right)_x &= 0, \end{aligned} \quad (2.65)$$

onde a função não-linear $f(\rho)$ é dada pela Eq. (2.57). Sistemas do tipo (2.65) são frequentemente referidos como sistemas hidrodinâmicos dispersivos.

Vamos considerar distribuições iniciais de intensidade e vetores de onda transversos na forma

$$\rho(x, 0) = \begin{cases} \rho_0 & \text{para } x < 0, \\ 1 & \text{para } x \geq 0; \end{cases} \quad u(x, 0) = 0, \quad (2.66)$$

isto é, assumimos que a velocidade inicial $u(x, 0)$ é igual a zero em todo o espaço o que significa que o feixe inicial entra no meio fotorrefrativo em $z = 0$ sem nenhuma focalização. Assumiremos também que $\rho_0 > 1$.

No estágio inicial da evolução, ondas lineares são geradas, as quais se propagam conforme a lei de dispersão obtida por meio da linearização das Eqs. (2.65) em torno do estado uniforme $\rho = \rho_0$, $u = u_0$ (mantivemos aqui o valor de u_0 diferente de zero por conveniência futura); isto é, $\rho = \rho_0 + \rho_1 \exp[i(kx - \omega z)]$, $u = u_0 + u_1 \exp[i(kx - \omega z)]$, onde $\rho_1, u_1 \ll 1$. Então, obtemos a relação de dispersão [2]

$$\omega = \omega_0(\rho_0, u_0, k) = ku_0 \pm k \sqrt{\frac{\rho_0}{(1 + \gamma\rho_0)^2} + \frac{k^2}{4}}. \quad (2.67)$$

Observe que $\omega''(k) > 0$, o que implica no aparecimento de sólitons *escuros* nas soluções não-lineares completas. Mas antes de considerarmos tais soluções, vamos examinar um estágio da evolução não-linear na aproximação de não haver dispersão onde podemos desprezar os termos de mais alta ordem no sistema (2.65).

Aproximação sem dispersão

Na aproximação de não haver dispersão, o sistema (2.65) reduz-se às equações que descrevem a dinâmica de fluidos compressíveis

$$\begin{aligned} \rho_z + (\rho u)_x &= 0, \\ u_z + uu_x + f'(\rho)\rho_x &= 0. \end{aligned} \quad (2.68)$$

Por causa da natureza bidirecional desse sistema, geralmente um degrau inicial (2.66) determina-se na combinação de duas ondas que se propagam em direções opostas. Uma destas ondas representa uma onda de rarefação com claro significado físico, mas a outra conduz à dependência de múltiplos valores de intensidade $\rho(x, z)$ e número de onda

transverso (velocidade associada do fluxo) $u(x, z)$ sobre a coordenada x . Apesar disso, esta solução geral formal nos traz alguma luz sobre a estrutura da atual solução física e alguns destes elementos serão utilizados depois, portanto, vamos considerá-las aqui. Para este fim, apresentamos o sistema (2.68) diagonalizado [7, 19] pela introdução de novas variáveis, invariantes de Riemann

$$r_{\pm} = u \pm \frac{2}{\sqrt{\gamma}} \arctan \sqrt{\gamma\rho}, \quad (2.69)$$

de modo a tomar a forma

$$\frac{\partial r_{\pm}}{\partial z} + V_{\pm} \frac{\partial r_{\pm}}{\partial x} = 0, \quad (2.70)$$

onde as velocidades características V_{\pm} são expressas em termos das variáveis hidrodinâmicas ρ e u pela relação

$$V_{\pm} = u \pm \frac{\sqrt{\rho}}{1 + \gamma\rho}. \quad (2.71)$$

Quando $\gamma \rightarrow 0$ temos $r_{\pm} = u \pm 2\sqrt{\rho}$, $V_{\pm} = u \pm \sqrt{\rho}$, ou seja, as usuais expressões para o limite da equação NLS defocalizadora sem dispersão (o sistema de ondas de superfície na água [22]).

No caso das condições iniciais da distribuição na forma de degrau as variáveis r_{\pm} devem depender somente da variável auto-similar $\zeta = x/z$, então a Eq. (2.70) reduz-se à $(V_{\pm} - \zeta)(dr_{\pm}/d\zeta) = 0$ e chegamos nas conhecidas soluções de onda simples

$$u + \frac{\sqrt{\rho}}{1 + \gamma\rho} = \frac{x}{z}, \quad u - \frac{2}{\sqrt{\gamma}} \arctan \sqrt{\gamma\rho} = r_{-}^0 = \text{const}, \quad (2.72)$$

ou

$$u - \frac{\sqrt{\rho}}{1 + \gamma\rho} = \frac{x}{z}, \quad u + \frac{2}{\sqrt{\gamma}} \arctan \sqrt{\gamma\rho} = r_{+}^0 = \text{const}. \quad (2.73)$$

Aqui, as constantes são escolhidas a partir das condições de continuidade nos pontos em que as ondas simples entram nas regiões de intensidades constantes. Desde que a onda de rarefação, que se propaga para a esquerda descrita por (2.73), coincida com o fluxo externo

$\rho = \rho_0$, $u = 0$ [veja a Fig. 2.2(a)] temos $r_+^0 = \frac{2}{\sqrt{\gamma}} \arctan \sqrt{\gamma \rho_0}$ e, correspondentemente,

$$u = \frac{2}{\sqrt{\gamma}} (\arctan \sqrt{\gamma \rho_0} - \arctan \sqrt{\gamma \rho}). \quad (2.74)$$

Agora, substituindo essa equação na primeira das Eqs. (2.73) temos

$$\frac{\sqrt{\rho}}{1 + \gamma \rho} + \frac{2}{\sqrt{\gamma}} (\arctan \sqrt{\gamma \rho} - \arctan \sqrt{\gamma \rho_0}) = -\frac{x}{z}, \quad (2.75)$$

o que determina implicitamente a intensidade ρ como uma função de x/z na onda de rarefação. Para $x < x_1^-$ temos $\rho = \rho_0 = \text{const}$, então $x = x_1^-$ é o ponto de descontinuidade fraca que deve propagar-se com a velocidade do som [49] que em nosso caso é

$$c_s(\rho) = \frac{\sqrt{\rho}}{1 + \gamma \rho}. \quad (2.76)$$

De fato, substituindo $\rho = \rho_0$ na Eq. (2.75) temos

$$\frac{x_1^-}{z} = -c_s(\rho_0). \quad (2.77)$$

Na realidade, as velocidades de propagação das descontinuidades fracas no sistema fotorrefrativo concordam com as velocidades de grupo determinadas pelo limite de longo comprimento de onda $k \rightarrow 0$ na relação de dispersão linear (2.67).

Em seguida, para $x > x_2^-$ temos $\rho = 1$, $u = 0$ [veja a Fig. (2.2a)] e isso não está de acordo com a relação (2.74) na solução da onda de rarefação que se propaga para a esquerda. Por isso, temos que introduzir alguma distribuição intermediária

$$\rho(x/z) = \rho^- = \text{const}, \quad u(x/z) = u^- = \text{const} \quad (2.78)$$

a qual coincida com a onda de rarefação em algum $x = x_1^+$. Agora, para conectar a distribuição intermediária (2.78) com $\rho = 1$, e $u = 0$, temos que usar a solução de onda simples que se propaga para a direita (2.72), onde a constante $r_+^0 = \frac{2}{\sqrt{\gamma}} \arctan \sqrt{\gamma}$.

Conseqüentemente, temos

$$u = \frac{2}{\sqrt{\gamma}} (\arctan \sqrt{\gamma\rho} - \arctan \sqrt{\gamma}) \quad (2.79)$$

e

$$\frac{\sqrt{\rho}}{1 + \gamma\rho} + \frac{2}{\sqrt{\gamma}} (\arctan \sqrt{\gamma} - \arctan \sqrt{\gamma\rho}) = \frac{x}{z}. \quad (2.80)$$

As equações (2.74) e (2.79) em $\rho = \rho^-$ devem dar $u = u^-$. Por isso, fornecem a equação

$$\arctan \sqrt{\gamma\rho^-} = \frac{1}{2} (\arctan \sqrt{\gamma\rho_0} + \arctan \sqrt{\gamma}) \quad (2.81)$$

a qual determina o parâmetro ρ^-

$$\rho^- = \left[\frac{\sqrt{1 + \gamma\rho_0} - 1 + \sqrt{\rho_0}(\sqrt{1 + \gamma} - 1)}{\gamma\sqrt{\rho_0} - (\sqrt{1 + \gamma\rho_0} - 1)(\sqrt{1 + \gamma} - 1)} \right]^2. \quad (2.82)$$

Quando ρ^- é conhecido, o parâmetro u^- é encontrado pela Eq. (2.79),

$$u^- = \frac{2}{\sqrt{\gamma}} (\arctan \sqrt{\gamma\rho^-} - \arctan \sqrt{\gamma}). \quad (2.83)$$

Os pontos finais “internos” x_1^+ e x_2^- são encontrados substituindo os valores intermediários ρ^- e u^- nas soluções (2.72) e (2.73),

$$\frac{x_1^+}{z} = u^- - \frac{\sqrt{\rho^-}}{1 + \gamma\rho^-}, \quad \frac{x_2^-}{z} = u^- + \frac{\sqrt{\rho^-}}{1 + \gamma\rho^-}. \quad (2.84)$$

Esses pontos correspondem às descontinuidades fracas que se propagam com velocidades do som $c_s(\rho^-)$ em direções opostas no sistema de referência associado com o fluxo uniforme u^- . A estrutura inteira da distribuição de intensidade é mostrada na Fig. (2.2a). Ela possui a região $x_2^- < x < x_1^+$ com três valores de intensidade, correspondendo à solução formal (2.72), a qual obviamente não possui significado físico e seu surgimento serve como um indicativo de que uma onda oscilatória dispersiva de choque é gerada na região de transição de $\rho = \rho^-$, $u = u^-$ a $\rho^+ = 1$, $u^+ = 0$. A estrutura física que surge é mostrada esquematicamente na Fig. (2.2b). É importante notar que os contornos x_2^\pm da região de

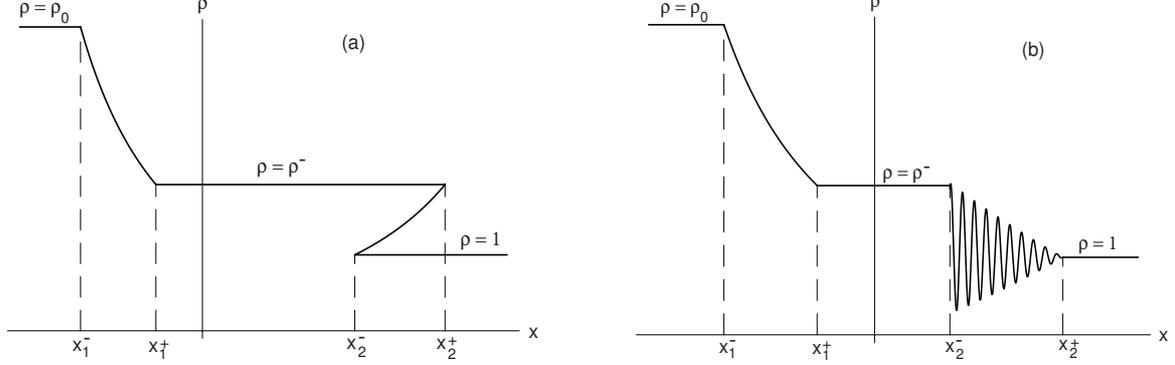


Figura 2.2: Decaimento de uma descontinuidade inicial da intensidade da luz em um feixe propagando-se através de um cristal fotorrefrativo. (a) Aproximação sem dispersão com uma região sem significado físico de múltiplos valores de intensidade. (b) Representação gráfica da formação de um choque dispersivo devido ao balanço entre os efeitos dispersivo e não-linear. Os valores de x_1^- e x_1^+ são os mesmos para (a) e (b) enquanto que os valores de x_2^- e x_2^+ são diferentes.

oscilação não coincidem de forma alguma com aqueles da solução formal sem dispersão de três valores. Porém, é notável que apesar da mudança radical qualitativa e quantitativa do fluxo, por si só os valores de ρ^- e u^- ainda podem ser determinados pelas prévias equações (2.82) e (2.83). Isso é uma consequência da condição de que o choque dispersivo forma um salto que requer que os valores da invariante de Riemann $r_- = u - (2/\sqrt{\gamma}) \arctan \sqrt{\gamma\rho}$ nos pontos finais da onda de choque dispersiva sejam iguais um ao outro

$$r_-|_{x_2^-} = r_-|_{x_2^+}, \quad (2.85)$$

o que implica imediatamente a Eq. (2.83). Visto que a onda de rarefação, mesmo na presença de dispersão, é ainda descrita com boa precisão pela aproximação de não haver dispersão, deduzimos que a Eq. (2.82) obtida na representação hidrodinâmica sem dispersão também é válida. Devemos enfatizar que, apesar de todas as relações obtidas, rigorosamente falando, somente se mantém assintoticamente para “tempos” z suficientemente grandes, como poderemos ver através das soluções numéricas diretas da equação NLS, elas se mantêm com boa precisão até para valores mais moderados de z . A condição de salto dispersivo do tipo (2.85) foi proposta pela primeira vez em [50], em que se baseou no raciocínio físico intuitivo e nos resultados de simulações numéricas do fluxo sem colisão de plasmas. Uma derivação matemática consistente dessa condição, junto com algumas

importantes restrições para a sua aplicabilidade, foi fornecida na teoria de Whitham em [31, 33].

Como foi mencionado, os pontos extremos da região oscilatória do choque dispersivo na Fig. (2.2b) não coincidem com os pontos finais da região de três valores na Fig. (2.2a). De fato, essa região oscilatória surge devido ao balanço entre os efeitos de dispersão e não-linearidade e tem uma estrutura similar àquelas observadas no caso integrável intensamente estudado da equação NLS defocalizadora [22, 23, 24, 25, 26, 27, 28, 29, 30]. A saber, próxima ao extremo x_2^+ a onda se transforma em um pacote de onda linear cuja amplitude vai desaparecendo, e no extremo x_2^- ela se converte em um sóliton escuro. Consequentemente, o ponto final da região oscilatória x_2^+ deve mover-se com a velocidade de grupo das ondas lineares, $c_g = \partial\omega_0/\partial k$, calculada para algum valor de $k = k^+$ diferente de zero em contraste com a aproximação de não haver dispersão correspondendo à $k \rightarrow 0$ (além da diminuição da amplitude das oscilações $a \rightarrow 0$). O ponto extremo x_2^- se move com a velocidade do sóliton correspondente o que também não tem nada em comum com o limite de não haver dispersão (note que no limite do sóliton $k \rightarrow 0$ mas a amplitude $a = a^-$ permanece finita). Então, nossa tarefa é determinar quantitativamente as características principais da região oscilatória do choque dispersivo através de cálculo numérico, e comparar esses resultados com a teoria desenvolvida em [2].

Podemos observar que a estrutura oscilatória da onda de choque dispersiva é caracterizada por duas diferentes escalas espaciais: dentro do choque a intensidade oscila rapidamente mas os parâmetros dessas oscilações mudam pouco em um comprimento de onda na direção x e em um período através do feixe na direção z . Isso sugere que o choque dispersivo oscilatório pode ser representado com uma onda periódica não-linear lentamente modulada e, consequentemente, que podemos aplicar a teoria das modulações de Whitham [7] para essa descrição. Na aproximação de Whitham, calcula-se a média da equação original contendo as derivadas de x de mais alta ordem sobre a família de soluções periódicas não-lineares de ondas viajantes. Como resultado, obtemos um sistema de equações diferenciais parciais não-lineares de primeira-ordem na forma hidrodinâmica (ou seja, linear com respeito às derivadas primeiras) que descrevem a evolução das lentas modulações. A modulação do sistema não contém nenhum parâmetro na dimensão de

comprimento, então ela permite a introdução dos extremos $x_{\pm}^{\pm}(z)$ da onda de choque dispersiva em um modo matematicamente consistente, como características nas quais ocorre o acordo entre as soluções “interna” (modulação) e “externa” (dinâmicas de fluido sem dispersão). É claro que, rigorosamente falando, a descrição da média somente é válida quando a razão do típico comprimento de onda em relação à largura da região oscilatória é pequena. Para o nosso caso, o decaimento de uma descontinuidade inicial corresponde a um comportamento assintótico de “longa duração”, $z \gg 1$. Porém, como veremos a partir da comparação de simulações numéricas diretas, os resultados na aproximação das modulações são válidos mesmo para valores mais moderados de z .

A aproximação da modulação para a descrição de ondas de choque dispersivas foi realizada pela primeira vez por Gurevich and Pitaevskii [51] no estudo da equação de Korteweg–de Vries (KdV). Para colocarmos esta aproximação em prática no estudo das deformações dos feixes de luz em meios fotorrefrativos, temos que estudar numericamente as soluções das Eqs. (2.65).

2.4 Fio imerso no meio fotorrefrativo

Uma analogia entre a propagação de feixes de luz em meios não-lineares e o fluxo de um superfluido é bem conhecida e bastante sugestiva. Formalmente, ela é baseada na semelhança matemática entre as equações que descrevem a evolução dos campos eletromagnéticos de feixes de luz na aproximação paraxial, e as equações de Gross-Pitaevskii que descrevem a dinâmica de condensados de Bose-Einstein de gases diluídos. Consequentemente, estruturas não-lineares como sólitons brilhantes ou escuros e vórtices têm sido minuciosamente estudadas em óptica e em dinâmica de superfluidos [5, 52]. Essas estruturas surgem como resultado do balanço entre as propriedades não-linear e dispersiva do meio em consideração. Um exemplo a mais dessa estrutura é proporcionado pelos choques dispersivos que substituem a noção de choques dissipativos na dinâmica de fluidos compressíveis no caso da dissipação poder ser desprezada quando comparada aos efeitos da dispersão. Como resultado, uma fina camada com forte dissipação em seu interior desdobra-se numa região de rápidas oscilações, a qual pode ser representada como uma

onda modulada periódica não-linear (uma “rede de sólitons”). A noção de choques dispersivos apareceu primeiro no estudo de ondas de água (teoria de *undular bores* em rios) [8] e plasma (ondas de choque não-colisionais) [53], então a generalização desse fenômeno foi realizada (baseada na teoria de Whitham [54] de modulações de ondas não-lineares) e métodos matemáticos para sua descrição foram desenvolvidos [55, 51, 56, 57, 58, 59, 31].

A realização de condensados de Bose-Einstein de gases frios diluídos [60, 61, 62] e o estudo de sua dinâmica têm, naturalmente, levado a estudos teóricos e experimentais de choques dispersivos nesse novo meio [63, 64, 65]. Estudos correspondentes de choques dispersivos em óptica, sugeridos pela analogia mencionada anteriormente entre feixes ópticos e dinâmica de superfluidos, foram realizados experimentalmente em [17, 66, 67, 68], e a teoria dos choques dispersivos obtidos opticamente foram desenvolvidos em [2].

Na dinâmica de fluidos dissipativos com dispersão desprezível, os choques também podem ser gerados pelo fluxo supersônico de um fluido que passa sobre um obstáculo. Esses choques tem a forma de um salto estacionário dos parâmetros do fluido através de certas linhas inclinadas em relação à direção do fluxo. Para choques de pequena intensidade, essas linhas repousam ao longo dos conhecidos “cones de Mach” [49]. Na dinâmica de fluidos dispersivos, esses choques oblíquos desdobram-se em *fans* de sólitons espaciais, que se espalham após o obstáculo na direção de propagação [69]. A teoria de tais choques dispersivos oblíquos foi desenvolvida em [70, 71] para o caso de meios fracamente dispersivos quando o fluxo que passa por um pequeno corpo é assintoticamente descrito pela equação de Korteweg-de Vries ao longo das linhas de Mach.

A dinâmica de um condensado de Bose-Einstein é descrita pela equação de Gross-Pitaevskii, e a teoria foi estendida para esse caso em [72, 73]. Se o obstáculo é suficientemente pequeno, então o choque consiste de um único sóliton escuro oblíquo. A teoria de sólitons escuros oblíquos foi desenvolvida em [74, 75]. É importante notar que estes sólitons oblíquos localizam-se dentro do cone de Mach com o número de Mach definido pela razão entre a velocidade do fluxo e a velocidade do som calculada em um comprimento de onda infinito. As conhecidas “ondas de navio”, localizadas fora do cone de Mach, surgem como pacotes de onda estacionários dispersivos das excitações de Bogoliubov. Aparentemente,

elas foram observadas no experimento [76] e sua teoria foi desenvolvida em [77, 78]. A analogia entre feixes ópticos e a dinâmica de superfluidos sugere que efeitos similares devem existir no contexto óptico onde elas tomam a forma de padrões da difração de ondas em feixes de luz que se propagam através de um meio não-linear. Embora estas estruturas tenham sido observadas em alguns experimentos [79], elas ainda não foram estudadas sistematicamente.

Consideraremos uma simples e típica situação de difração não-linear da luz, a qual pode ser considerada como uma analogia da geração de choques dispersivos espaciais e “ondas de navio” no fluxo de um condensado de Bose-Einstein que passa por um obstáculo. Para sermos mais precisos, consideraremos um feixe de luz propagando-se em um meio material refrativo não-linear autodefocalizador com um fio fino (uma “agulha”) inserido nele; veja a Fig. (2.3). A direção do feixe de luz é inclinada em relação ao fio, isto é, existe um “fluxo” de luz que “passa por um obstáculo”. Como resultado, no plano de saída do meio, um padrão de difração é formado, o qual consiste em sólitons oblíquos escuros, em vórtices, e em “ondas de navio”. Nós daremos um tratamento numérico desse fenômeno, comparando os resultados com as previsões teóricas [3], de modo a obtermos as principais características do padrão de difração.

Consideraremos a propagação de um feixe de luz com intensidade uniforme inclinado em relação a um fio, isto é, em $z = 0$ ele tem uma forma inicial

$$\psi(\mathbf{r}_\perp, 0) = \exp(iUx), \quad (2.86)$$

ou seja, supomos que a intensidade de fundo é igual a um; U representa a componente x do vetor de onda devido à inclinação do feixe de luz. O problema é descrevermos o padrão de onda no valor de saída z .

Para gerarmos uma figura de todo o padrão de difração, resolveremos numericamente a Eq. (2.55) para a função de onda de valor inicial ψ dado pela Eq. (2.86) com $U = 2$ na condição de contorno de que ψ tende a zero na superfície $r = 1$ do obstáculo localizado em $x = 0, y = 0$. Como poderemos ver, o padrão de difração consiste em duas partes diferentes separadas pelo cone de Mach (ou Cherenkov), o qual é definido como sendo

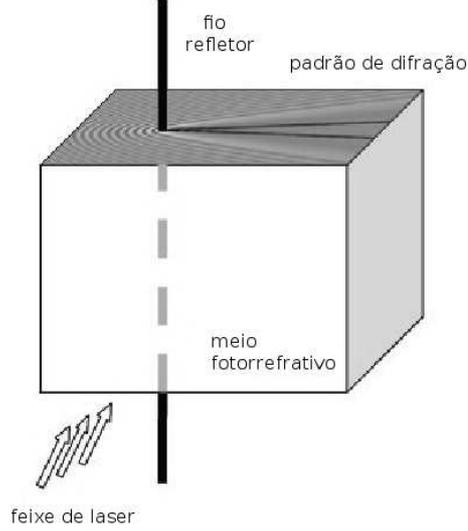


Figura 2.3: Representação gráfica da formação do padrão de difração não-linear na propagação de um feixe de luz através de um meio fotorrefrativo com um fio refletor inserido neste meio.

linhas desenhadas no ângulo θ com respeito à direção do fluxo (eixo x) com

$$\sin \theta = \frac{1}{M}, \quad M = \frac{U}{c_s} \quad (2.87)$$

onde a velocidade do som corresponde ao limite de não haver dispersão das Eqs. (2.63), ou seja, $(\nabla p/\rho \equiv \nabla f(\rho))$

$$c_s = \sqrt{\left. \frac{dp}{d\rho} \right|_{\rho_0}} = \sqrt{f'(\rho_0)\rho_0} \quad (2.88)$$

a qual no caso fotorrefrativo com $\rho_0 = 1$ fornece

$$c_s = \frac{1}{1 + \gamma} \quad \text{and} \quad M = U(1 + \gamma). \quad (2.89)$$

Do lado de fora do cone de Mach, há um padrão de onda estacionário criado pela interferência de ondas lineares (longe o suficiente do obstáculo). Dentro do cone de Mach, existem dois sólitons oblíquos situados simetricamente em relação à direção do “fluxo”. Esses sólitons oblíquos decaem nos pontos extremos em vórtices. Mas, próximo ao obstáculo, eles são descritos por um fluxo potencial com um salto de fase entre esses sólitons,

como será demonstrado no capítulo (5).

Nossa tarefa, agora, será desenvolver numericamente o padrão de difração dessas duas regiões e compará-los com as previsões teóricas.

2.4.1 Teoria da difração não-linear em cristais fotorrefrativos

Se o tamanho do obstáculo for muito menor do que o comprimento de onda do padrão de difração, então podemos considerá-lo como puntual e, com isso, podemos escrever o potencial do obstáculo na forma

$$V(\mathbf{r}_\perp) = V_0\delta(\mathbf{r}_\perp). \quad (2.90)$$

Suficientemente distante do obstáculo, a amplitude do padrão de onda é pequena se for comparada com a intensidade de fundo do feixe de luz, a vorticidade é nula, e o “fluxo” da luz pode ser considerado como um fluido “potencial”. Dessa forma, podemos usar a representação hidrodinâmica das equações de evolução do feixe de luz. Aqui, o potencial do obstáculo pode ser desprezado (no caso de um fio refletor, ele desaparece do lado de fora da superfície do fio, ou seja, o obstáculo é representado por uma infinita barreira cilíndrica), e para um valor de z suficientemente grande, o sóliton se aproxima do seu estado estacionário. O perfil de intensidade ρ e as “velocidades” u e v podem ser encontradas analiticamente como uma solução das equações estacionárias

$$(\rho u)_x + (\rho v)_y = 0, \quad (2.91)$$

e

$$\begin{aligned} uu_x + vv_y + \left(\frac{\rho}{1 + \gamma\rho} \right)_x + \left(\frac{\rho_x^2 + \rho_y^2}{8\rho^2} - \frac{\rho_{xx} + \rho_{yy}}{4\rho} \right)_x &= 0, \\ uv_x + vv_y + \left(\frac{\rho}{1 + \gamma\rho} \right)_y + \left(\frac{\rho_x^2 + \rho_y^2}{8\rho^2} - \frac{\rho_{xx} + \rho_{yy}}{4\rho} \right)_y &= 0, \end{aligned} \quad (2.92)$$

com condições de contorno (nesta seção, assumiremos $\rho_0 = 1$)

$$\rho = 1, \quad u = U, \quad v = 0 \quad \text{em} \quad |x| \rightarrow \infty. \quad (2.93)$$

Para simplificarmos os cálculos, é conveniente notarmos que uma das Eqs. (2.92) pode ser modificada se utilizarmos a condição de vorticidade nula

$$u_y - v_x = 0, \quad (2.94)$$

a qual é realizada para o fluxo potencial na solução solitônica.

Procuramos pela solução na forma

$$\rho = \rho(\theta), \quad u = u(\theta), \quad v = v(\theta), \quad \text{onde} \quad \theta = x - ay. \quad (2.95)$$

O parâmetro a determina uma inclinação do sóliton oblíquo no plano x, y . Então, as Eqs. (2.91) e (2.94) com as condições (2.93), fornecem as expressões para as componentes da “velocidade do fluxo” em termos da intensidade da luz

$$u = \frac{U(1 + a^2\rho)}{(1 + a^2)\rho}, \quad v = -\frac{aU(1 - \rho)}{(1 + a^2)\rho}. \quad (2.96)$$

Ao substituírmos essas expressões em qualquer uma das Eqs. (2.92), e ao integrarmos a equação resultante, obtemos

$$\frac{1}{8}(1 + a^2)^2(\rho'^2 - 2\rho\rho'') + (1 + a^2)\frac{\rho^3}{1 + \gamma\rho} - \left(\frac{U^2}{2} + \frac{1 + a^2}{1 + \gamma}\right)\rho^2 + \frac{U^2}{2} = 0, \quad (2.97)$$

onde uma constante de integração é escolhida em acordo com as condições (2.93). Essa equação pode ser integrada mais uma vez, e assim, obtemos

$$\begin{aligned} \frac{(1 + a^2)^2}{8} \left(\frac{d\rho}{d\theta}\right)^2 = & -\frac{(1 + a^2)\rho}{\gamma^2} \ln(1 + \gamma\rho) + \left(\frac{1 + a^2}{(1 + \gamma)\gamma} - \frac{U^2}{2}\right)\rho^2 + \\ & \left(U^2 + \frac{1 + a^2}{\gamma^2} \ln(1 + \gamma) - \frac{1 + a^2}{\gamma(1 + \gamma)}\right)\rho - \frac{U^2}{2}, \end{aligned} \quad (2.98)$$

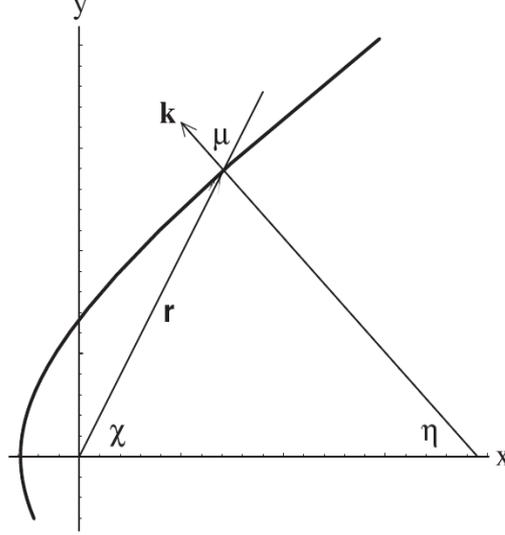


Figura 2.4: Coordenadas definindo um “raio vetor” \mathbf{r} e um vetor de onda \mathbf{k} normal à frente de onda mostrada esquematicamente por uma linha curvelínea. Esta linha de fase constante $\Phi = kr \cos \mu$ pode ser encontrada na forma paramétrica.

onde as condições (2.93) também são levadas em conta. Para um dado número de Mach $M = (1 + \gamma)U$, a solução solitônica depende apenas do parâmetro a . Essa equação pode ser facilmente resolvida numericamente de modo a encontrarmos sólitons oblíquos escuros dentro do cone de Mach.

Em [3], o padrão de difração externo ao cone de Mach foi determinado analiticamente, e “ondas de navio” foram localizadas. O perfil de intensidade próximo ao obstáculo, para $x < 0$ e $y = 0$, é escrito na forma

$$\delta\rho = 2V_0\rho_0\sqrt{\frac{(M^2 - 1)^{1/2}}{\pi(2M^2 + 1)|x|}} \cos\left(\frac{-2\sqrt{M^2 - 1}x}{1 + \gamma} - \frac{\pi}{4}\right), \quad (2.99)$$

e as linhas de fase constante $\Phi = kr \cos \mu$, mostradas esquematicamente na Figura (2.4), foram encontradas na forma paramétrica. Introduzindo coordenadas polares, as componentes dos vetores \mathbf{r} (“raio vetor”) e \mathbf{k} (vetor de onda normal à frente de onda), são da

forma

$$\begin{aligned}
 x &= r \cos \chi = \frac{4(1 + \gamma)\Phi}{(2\sqrt{M^2 \cos^2 \eta - 1})^3} \cos \eta(1 - M^2 \cos 2\eta), \\
 y &= r \sin \chi = \frac{4(1 + \gamma)\Phi}{(2\sqrt{M^2 \cos^2 \eta - 1})^3} \sin \eta(2M^2 \cos^2 \eta - 1), \\
 k_x &= -k \cos \eta, \\
 k_y &= k \sin \eta,
 \end{aligned} \tag{2.100}$$

onde

$$-\arccos \frac{1}{M} \leq \eta \leq \arccos \frac{1}{M}, \tag{2.101}$$

e

$$\Phi = -2c_s x_0 \sqrt{M^2 - 1}, \tag{2.102}$$

ou seja, para um valor fixo de x_0 (valor de x quando $y = 0$), ao variarmos η na sua região de validade, obtemos a linha (x, y) de fase constante.

Capítulo 3

Condensados de Bose-Einstein

A condensação de Bose-Einstein (CBE) acontece quando um sistema de bósons é suficientemente resfriado e ocorre uma ocupação macroscópica de um mesmo estado de uma partícula. Um critério geral para a ocorrência da CBE, proposto por Penrose e Onsager [80], diz que se um dos autovalores da matriz densidade de um corpo é da ordem do número N de partículas do sistema, há condensação. Nesse caso, o correspondente autovetor é o estado de ocupação macroscópica. Se mais do que um autovalor é da ordem de N , o condensado é fragmentado; por outro lado, se nenhum autovalor da matriz densidade de um corpo é dessa ordem, não há condensação.

Evidências típicas de tal fenômeno são a superfluidez e a formação de vórtices. Experimentos com o ^4He líquido nos anos 30 demonstraram superfluidez e vórtices [81]. Recentemente, experimentos no ^4He líquido têm buscado determinar a distribuição dos momentos na fase HeII com espalhamento de nêutrons [82]. Mas esses resultados ainda não são conclusivos de que esteja ocorrendo CBE no HeII. Teorias para gases diluídos homogêneos foram desenvolvidas no passado com intuito de descrever a superfluidez no ^4He líquido (fase HeII).

A partir de 1995, vem sendo realizada experimentalmente a condensação Bose-Einstein em armadilhas atômicas, usando gases diluídos de ^{87}Rb [60], ^{23}Na [61], ^7Li [83, 62], ^1H [84]; e mais recentemente com ^{85}Rb [85, 86, 87] e ^4He metaestável [88, 89]. Esses experimentos permitiram uma verificação direta da condensação pela observação de um pico na distribuição espacial não-homogênea em armadilhas atômicas [90]. Além disso, incor-

porando momento angular ao condensado, verificou-se a formação de vórtices, fenômeno intimamente ligado à superfluidez [91]. Essas e outras observações tem mostrado bom acordo com a descrição pela Eq. de Gross-Pitaevskii em temperatura nula ($T = 0$) na aproximação de campo médio na forma

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V_{ext} + g|\psi|^2 \right] \psi \quad (3.1)$$

onde $\Psi \equiv \Psi(\mathbf{r}, t)$, m é a massa do átomo, V_{ext} é um potencial externo de armadilha e o termo de interação de dois corpos foi aproximado por uma interação de contato, $g = 4\pi\hbar^2 a/m$, e a é o comprimento de espalhamento átomo-átomo.

Para $a > 0$ (interação efetivamente repulsiva), as soluções para o estado fundamental são sempre estáveis. Com $a < 0$ (interação efetivamente atrativa), as soluções serão (meta-) estáveis até atingirem um número crítico máximo, a partir do qual não há mais estabilidade [92, 93].

Um novo interessante aspecto da dinâmica com interações atrativas foi a realização experimental de sólitons brilhantes que se propagam no meio condensado [94, 95]. Sólitons são tipicamente objetos em que há equilíbrio entre dispersão e não linearidade [96], e que não se deformam. Eles podem ser encontrados praticamente em todos os ramos da física, como propagação de ondas na água, ondas luminosas em fibras óticas, ondas em plasma e outros.

A formação dos sólitons brilhantes foi tecnicamente realizada com átomos de ${}^7\text{Li}$, iniciando-se com um condensado que possui $a > 0$. Em seguida, por meio de ressonância Feschbach, o comprimento de espalhamento foi tornado negativo, gerando um trem de sólitons. Esse processo ocorre muito rapidamente. Estudos analíticos e numéricos mostraram que, em estágios iniciais, o sóliton é formado devido a uma instabilidade modulacional [97, 98, 99].

O estudo da formação dos sólitons será feito através de simulações numéricas da equação de Gross-Pitaevskii, na qual o potencial externo reunirá as contribuições de um potencial harmônico de confinamento e do potencial de um obstáculo móvel. A equação de

Gross-Pitaevskii será derivada a seguir com base em Cohen-Tannoudji e Robilliard [100] e nas notas de aula [101, 102].

3.1 Equação de Gross-Pitaevskii independente do tempo

Se considerarmos quanticamente uma única partícula no espaço tridimensional como uma combinação linear de dois estados $\phi_1(\mathbf{r})$ e $\phi_2(\mathbf{r})$, ou seja, $\phi(\mathbf{r}) = c_1\phi_1(\mathbf{r}) + c_2\phi_2(\mathbf{r})$, então a probabilidade $|\phi(\mathbf{r})|^2$ de encontrá-la em \mathbf{r} contém os termos cruzados $c_1c_2^*\phi_1(\mathbf{r})\phi_2^*(\mathbf{r}) + c.c.$ os quais causam efeitos de interferência. Para um sistema com N partículas, esta situação é mais complicada visto que, geralmente, a função de onda $\phi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_2)$ definida no espaço tridimensional desse sistema não é fatorizável. Porém, considerando o caso particular dos condensados de Bose-Einstein, a descrição pode ser simplificada pela introdução da “onda de matéria macroscópica” no espaço tridimensional, com a qual a questão da fase relativa e da interferência entre dois condensados pode ser investigada. Na usual aproximação de quebra de simetria, a onda de matéria “macroscópica” é simplesmente o valor médio $\phi(\mathbf{r}) = \langle \hat{\phi}(\mathbf{r}) \rangle$ do operador de campo quântico.

Para um sistema de átomos bosônicos, todos os observáveis possuem um número igual de operadores de criação e aniquilação, o que significa que eles não mudam o número total N de bosons. De forma diferente dos fótons, átomos bosônicos não podem ser criados ou destruídos em um processo de interação.

Para derivarmos a equação de Gross-Pitaevskii (GP), vamos considerar que N bosons idênticos estão confinados por uma armadilha descrita pelo potencial externo V_{ext} . Para temperaturas próximas ao zero absoluto, dependendo desse potencial externo, eles se condensam no estado fundamental do Hamiltoniano

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \left[\frac{\hat{\mathbf{p}}_i^2}{2m} + V_{ext}(\hat{\mathbf{r}}_i) \right] + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i}^N U(|\hat{\mathbf{r}}_i - \hat{\mathbf{r}}_j|) \quad (3.2)$$

onde o termo cinético é $\mathbf{p} = -i\hbar\nabla$, $U(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|)$ é o potencial de interação de contato

entre pares de bosons onde \mathbf{r}_i e \mathbf{r}_j são as posições de cada par de partículas, e, como não devemos contar duas vezes a interação entre cada par, explicamos a razão do fator $1/2$. Em temperaturas muito baixas, isto é, quando o comprimento de onda de de Broglie torna-se muito maior que o alcance do potencial de interação, somente o espalhamento da onda s entre pares de bosons permanece significativo, e podemos aproximar o potencial de interação por

$$U(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|) = g \delta(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \quad \text{com} \quad g = \frac{4\pi\hbar^2}{m} a, \quad (3.3)$$

onde a é o comprimento de espalhamento.

Para encontrarmos uma função de onda aproximada para o condensado na presença de interações entre as partículas, utilizamos o produto de Hartree como um *ansatz* para a função de onda e variacionalmente otimizamos a função de onda $\phi(\mathbf{r})$ para uma única partícula. Trata-se da conhecida aproximação do campo médio e é análoga à aproximação de Hartree-Fock para fermions.

A função de onda para um sistema de N partículas que estão em um mesmo estado quântico é dada pelo produto da função de onda de cada partícula neste estado, ou seja, assumimos o *ansatz*

$$|\Psi\rangle = |\phi(1)\rangle \cdots |\phi(i)\rangle \cdots |\phi(N)\rangle, \quad (3.4)$$

então, para o caso de N partículas idênticas (um condensado de N bosons que interagem fracamente entre si), ela é aproximadamente o produto de Hartree

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) = \prod_{i=1}^N \phi(\mathbf{r}_i), \quad (3.5)$$

onde a função de onda, $\phi(\mathbf{r})$, para uma única partícula é normalizada,

$$\langle \phi | \phi \rangle = \int |\phi(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r} = 1. \quad (3.6)$$

Na verdade, as interações provocam correlações e, mesmo em $T = 0$, podem haver configurações onde átomos ocupam estados excitados, mas para gases diluídos a aproximação assumida é suficiente para uma boa descrição do condensado.

Geralmente, o estado fundamental de \hat{H} não pode ser determinado com exatidão. Porém, na ausência de interações, todos os bosons estão no estado fundamental do Hamiltoniano de uma única partícula $\hat{h} = \hat{p}^2/2m + V_{ext}(\hat{\mathbf{r}})$. Na presença de interações fracas, ainda podemos aproximar o estado fundamental de \hat{H} pelo produto (3.5) onde todos os bosons estão no mesmo estado $|\phi\rangle$.

A seguir, vamos derivar a GP com base no método variacional. Ao contrário do caso de não interação, $|\phi\rangle$ não é mais o estado fundamental de \hat{h} , e o estado que melhor se aproxima do estado fundamental de \hat{H} é obtido através do $|\phi\rangle$ que minimiza o funcional

$$E[\phi] = \frac{\langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle}, \quad (3.7)$$

onde a cada ϕ , o funcional assume um valor.

Vamos calcular primeiro $\langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle$, o que resulta em

$$\begin{aligned} \langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle = & N \int d^3\mathbf{r} \phi^*(\mathbf{r}) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{ext} \right] \phi(\mathbf{r}) \\ & + \frac{N(N-1)}{2} \iint d^3\mathbf{r} d^3\mathbf{r}' \phi^*(\mathbf{r}) \phi^*(\mathbf{r}') U(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \phi(\mathbf{r}') \phi(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (3.8)$$

Agora, procuramos pelo mínimo de $\langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle$ com a restrição $\langle \Psi | \Psi \rangle$. Como ϕ *a priori* é um número complexo, podemos considerar as variações $\delta\phi$ e $\delta\phi^*$ de ϕ e ϕ^* , respectivamente, como independentes. Utilizando o método dos multiplicadores de Lagrange, o estado fundamental aproximado $|\Psi\rangle$ deve satisfazer

$$\delta \left[\langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle \right] - \lambda \delta \langle \Psi | \Psi \rangle = 0, \quad (3.9)$$

onde λ é o multiplicador de Lagrange associado com a restrição $\langle \Psi | \Psi \rangle = 1$.

Inserindo a expressão (3.8) na equação (3.9) e cancelando os coeficientes de $\delta\phi^*$, encontramos

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{ext}(\mathbf{r}) \right] \phi(\mathbf{r}) + (N-1) \left[\int d^3\mathbf{r}' U(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) |\phi(\mathbf{r}')|^2 \right] \phi(\mathbf{r}) = \lambda \phi(\mathbf{r}). \quad (3.10)$$

Essa é a equação de Gross-Pitaevskii independente do tempo, a qual descreve a evolução de cada boson em um potencial externo V_{ext} e em um potencial de campo médio produzido pelos outros $N - 1$ bosons.

Para encontrarmos a interpretação física do parâmetro λ , o qual foi formalmente introduzido como o multiplicador de Lagrange, multiplicamos a equação (3.10) por ϕ^* e integramos sobre \mathbf{r} . Feito isso, obtemos

$$\begin{aligned} \lambda &= \int d^3\mathbf{r} \phi^*(\mathbf{r}) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{ext}(\mathbf{r}) \right] \phi(\mathbf{r}) \\ &\quad + \underbrace{(N-1)}_{\simeq N} \iint d^3\mathbf{r} d^3\mathbf{r}' \phi^*(\mathbf{r}) \phi^*(\mathbf{r}') U(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \phi(\mathbf{r}') \phi(\mathbf{r}), \\ \lambda &\simeq \frac{\partial}{\partial N} \langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle = \frac{d}{dN} \langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle - \underbrace{\frac{\langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle}{\delta \phi}}_{=0} \frac{\partial \phi}{\partial N}. \end{aligned} \quad (3.11)$$

Então, $\lambda = \frac{d}{dN} \langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle$, representa o potencial químico, o qual daqui por diante será denotado por μ .

Podemos simplificar a equação (3.10) se substituirmos o potencial de interação (3.3) descrito anteriormente. Também podemos supor que $N \gg 1$, o que nos permite fazer a substituição de $N - 1$ por N . Com isso, obtemos a equação GP na forma

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{ext}(\mathbf{r}) \right] \phi(\mathbf{r}) + N g |\phi(\mathbf{r}')|^2 \phi(\mathbf{r}) = \mu \phi(\mathbf{r}). \quad (3.12)$$

Geralmente o fator N é removido se mudarmos a normalização de ϕ usando $\psi(\mathbf{r}) = \sqrt{N} \phi(\mathbf{r})$.

3.2 Equação GP dependente do tempo

Derivamos, na seção anterior, a equação GP estacionária, a qual fornece a função de onda do estado fundamental e a energia. Agora, investigaremos a dinâmica de condensados sob a ação de potenciais externos e, para esse fim, derivaremos a equação GP dependente do tempo com base na minimização da ação. Podemos escrever o funcional da ação, $S[\Psi]$,

da função de onda de N bosons como

$$S[\Psi] = \int dt \int d\mathbf{r}_1 \cdots d\mathbf{r}_N \Psi^* \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \hat{H} \right) \Psi. \quad (3.13)$$

Para uma única partícula, podemos escrever a ação como

$$S[\phi] = \int_{t_1}^{t_2} dt \int d\mathbf{r} \mathcal{L}(\phi, \phi^*, \dot{\phi}, \dot{\phi}^*, \nabla\phi, \nabla\phi^*), \quad (3.14)$$

onde $\dot{\phi} = \partial\phi/\partial t$. Assumindo que ϕ desaparece nos limites espaciais de integração e que as variações satisfazem $\delta\phi(t_1, r) = \delta\phi(t_2, r)$ para todos os pontos \mathbf{r} , deriva-se as equações de Lagrange para o Lagrangiano,

$$-\frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\phi}^*} + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi^*} - \nabla \cdot \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \nabla \phi^*} \right) = 0, \quad (3.15)$$

onde o último termo do lado esquerdo da equação é $\sum_{j=x,y,z} \partial_j \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_j \phi^*)} \right)$. Para uma única partícula sob a ação de um potencial externo,

$$\mathcal{L} = i\frac{\hbar}{2} (\phi^* \dot{\phi} - \dot{\phi}^* \phi) - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla \phi^* \nabla \phi - \phi^* V_{ext}(\mathbf{r}, t) \phi. \quad (3.16)$$

Com este Lagrangiano, podemos calcular os termos

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\phi}^*} = -i\frac{\hbar}{2} \phi, \quad (3.17a)$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi^*} = i\frac{\hbar}{2} \dot{\phi} - V_{ext} \phi, \quad (3.17b)$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \nabla \phi^*} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla \phi. \quad (3.17c)$$

Substituindo os termos (3.17) na equação de Lagrange (3.15), obtemos a equação de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \phi = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \phi + V_{ext} \phi. \quad (3.18)$$

No caso de muitas partículas, a ação e o Lagrangiano podem ser generalizados para N

partículas que dependem de $\nabla_{\mathbf{r}_i}\phi$, onde \mathbf{r}_i é a posição da i -ésima partícula e a integração dentro da ação que é calculada sobre todas as posições das partículas $\int d\mathbf{r}_1 \cdots d\mathbf{r}_N$. Então, para N partículas, a equação de Lagrange é

$$-\frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\phi}^*} + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi^*} - \sum_{i=1}^N \nabla_{\mathbf{r}_i} \cdot \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \nabla_{\mathbf{r}_i} \phi^*} \right) = 0, \quad (3.19)$$

com a função de onda de muitos corpos $\phi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, t)$. E, para N partículas sob a ação de um potencial externo,

$$\mathcal{L} = i\frac{\hbar}{2} (\dot{\phi}^* \phi - \dot{\phi} \phi^*) - \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^N \nabla_{\mathbf{r}_i} \phi^* \nabla_{\mathbf{r}_i} \phi - \sum_{i=1}^N \phi^* V_{ext}(\mathbf{r}_i, t) \phi - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i}^N \phi^* U(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \phi. \quad (3.20)$$

Aplicando o Lagrangiano (3.20) em (3.19), obtemos a equação de Schrödinger para muitos corpos, a qual esperávamos

$$i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^N \nabla_{\mathbf{r}_i}^2 \phi + \sum_{i=1}^N V_{ext}(\mathbf{r}_i, t) \phi + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i}^N U(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \phi. \quad (3.21)$$

Para derivarmos a equação GP dependente do tempo, devemos tomar o mesmo *ansatz* que escolhemos no caso independente do tempo, ou seja,

$$\phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N, t) = \varphi(\mathbf{r}_1, t) \varphi(\mathbf{r}_2, t) \cdots \varphi(\mathbf{r}_N, t) \quad (3.22)$$

de modo que

$$\dot{\phi}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N, t) = \sum_{i=1}^N \varphi(\mathbf{r}_1, t) \cdots \frac{\partial \varphi(\mathbf{r}_i, t)}{\partial t} \cdots \varphi(\mathbf{r}_N, t). \quad (3.23)$$

Queremos uma equação somente sobre $\varphi(\mathbf{r}, t)$. Para obtê-la, multiplicamos os termos do lado esquerdo e direito da equação por $\int \prod_{j=1}^N d\mathbf{r}_j \phi^*(\mathbf{r}_j, t)$ e usamos a restrição de que $\int d\mathbf{r}_j |\varphi(\mathbf{r}_j, t)|^2 = 1$. Com esse procedimento e com a aproximação do potencial de

interação na forma (3.3), obtemos a ação total

$$S[\phi] = N \int_{t_1}^{t_2} dt \int d\mathbf{r} \left[i\frac{\hbar}{2} \left(\phi^* \frac{\partial \phi}{\partial t} - \frac{\partial \phi^*}{\partial t} \phi \right) - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla \phi^*(\mathbf{r}, t) \nabla \phi(\mathbf{r}, t) - V_{ext}(\mathbf{r}, t) |\phi(\mathbf{r}, t)|^2 - \frac{1}{2} (N-1) g |\phi(\mathbf{r}, t)|^4 \right] \quad (3.24)$$

A ação de um sistema de muitos corpos com N partículas reduziu a N vezes a ação de um sistema com apenas uma partícula, ou seja, trata-se da teoria do campo médio. Usando a ação (3.24) e as equações de Lagrange (3.20), e novamente considerando que $N \gg 1$, obtemos a equação de Gross-Pitaevskii dependente do tempo,

$$i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \phi(\mathbf{r}, t) + V_{ext}(\mathbf{r}, t) \phi(\mathbf{r}, t) + N g |\phi(\mathbf{r}, t)|^2 \phi(\mathbf{r}, t). \quad (3.25)$$

Com a substituição

$$\phi(\mathbf{r}, t) = \phi(\mathbf{r}) \exp\left(-\frac{i\mu t}{\hbar}\right), \quad (3.26)$$

obtemos novamente a equação GP estacionária. Vamos, porém, reescrever a equação (3.25), fazendo a substituição $\psi(\mathbf{r}, t) = \sqrt{N} \phi(\mathbf{r}, t)$. Com ela obtemos

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{ext} + g |\psi|^2 \right] \psi. \quad (3.27)$$

Sem o potencial externo, podemos facilmente adimensionalizar a equação (3.27) com a seguinte mudança de variáveis

$$x = x' l_0, \quad y = y' l_0, \quad z = z' l_0, \quad \psi = \sqrt{g} \psi' l_0^{3/2} \quad \text{com} \quad l_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m}}, \quad (3.28)$$

assim a GP adimensional, omitindo os primos, toma a nova forma

$$i \frac{\partial \psi}{\partial t} + \frac{1}{2} \nabla^2 \psi - |\psi|^2 \psi = 0. \quad (3.29)$$

3.3 Semelhança entre GNLS e GP

Antes de analisarmos a semelhança entre as equações GNLS (2.55) e GP (3.27), consideremos o caso de não haver um potencial externo. Assim, a GNLS adimensional pode ser escrita na forma

$$i\frac{\partial\psi}{\partial z} + \frac{1}{2}\nabla_{\perp}^2\psi - \frac{|\psi|^2}{1 + \gamma|\psi|^2}\psi = 0. \quad (3.30)$$

Vamos escrever a equação GP (3.29) em duas dimensões,

$$i\frac{\partial\psi}{\partial t} + \frac{1}{2}\nabla_{\perp}^2\psi - |\psi|^2\psi = 0. \quad (3.31)$$

Dessa forma, fica evidente que se $\gamma \rightarrow 0$ na equação (3.30), ela se torna a equação NLS e fica igual à equação GP (3.31). Então, podemos fazer uma analogia entre um sistema óptico não-linear e um sistema com átomos frios de acordo com a tabela (3.1).

Sistema óptico não-linear	Sistema de átomos frios
Equação não-linear de Schrödinger	Equação de Gross-Pitaevskii
$ \psi ^2 =$ intensidade da luz	$ \psi ^2 =$ densidade de probabilidade
propagação no espaço	evolução no tempo
difração	espalhamento da energia cinética
termo de interação não-linear autodefocalizador do tipo Kerr	termo de interação não-linear efetivamente repulsiva do campo médio

Tabela 3.1: Analogia entre meios ópticos e condensados de Bose-Einstein.

Enquanto que no sistema óptico podemos interpretar $|\psi|^2$ como a intensidade da luz, no sistema de átomos frios esse termo é a densidade de probabilidade. É importante notarmos que no sistema óptico temos o caso estacionário com a propagação na coordenada espacial z , enquanto que no sistema de átomos, temos a evolução temporal no espaço bidimensional.

3.4 Condensados dipolares

Recentemente, também foi realizada a condensação de Bose-Einstein do ^{52}Cr [103], que foi alvo de intensa pesquisa, já que as interações dipolares geram mudanças significativas tanto na forma do condensado como nas suas propriedades físicas. A função de onda das partículas desse condensado também é descrita pela equação de Gross-Pitaevskii, porém, com a adição de um termo de interação dipolar

$$i\hbar\frac{\partial\psi(\mathbf{r},t)}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V_{ext}(\mathbf{r}) + g|\psi(\mathbf{r},t)|^2 + \int d\mathbf{r}'V_{dd}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')|\psi(\mathbf{r}',t)|^2 \right] \psi(\mathbf{r},t) \quad (3.32)$$

onde o potencial V_{dd} de interação dipolar tem a forma

$$V_{dd}(\mathbf{r}) = d^2\frac{1-3\cos^2\theta}{r^3}, \quad (3.33)$$

na qual, d é o momento de dipolo, \mathbf{r} é a distância entre os dipolos e θ é o ângulo entre o vetor \mathbf{r} e o eixo do dipolo, o qual escolhemos alinhado ao longo do eixo z da armadilha.

3.5 Condensados confinados na presença de um obstáculo móvel

O potencial externo $V_{ext} = V_{trap} + V_{obs}$ reúne as contribuições do potencial do obstáculo, V_{obs} , e do potencial harmônico

$$V_{trap}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2}m(\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2), \quad (3.34)$$

onde m é a massa do átomo e ω_x , ω_y e ω_z são as frequências de confinamento. Esse potencial harmônico modela a armadilha magnética que confina o condensado.

O obstáculo é modelado com a adição nas equações (3.27) e (3.32) do potencial do obstáculo,

$$V_{obs}(x,y) = \pm A \exp\left[-\frac{(x-vt)^2 + y^2}{2\rho_0^2}\right], \quad (3.35)$$

que experimentalmente corresponde à aplicação de um feixe de *laser* que atravessa o condensado com uma velocidade v constante ao longo da coordenada x , onde A é a amplitude da Gaussiana e ρ_0 é sua largura. Quando $A > 0$, ou seja, o obstáculo é repulsivo, esse feixe afasta os átomos para criar uma condição de movimento semelhante a de um objeto macroscópico massivo. Quando $A < 0$, o obstáculo é atrativo, porém, esse não será estudado nesta tese.

Estamos interessados no caso de condensados estáveis puramente dipolares, ou seja, condensados em que podemos desprezar o termo de interação de contato pois o comprimento de espalhamento é reduzido a zero. Pfau *et al.* [104] constataram que, para isso acontecer, devemos ter uma armadilha na forma de “pizza” onde $\omega_x = \omega_y$ e $\omega_z/\omega_y > 5.2$.

3.6 Equações de conservação e teorema virial

A equação que corresponde à conservação da massa é a seguinte

$$\partial_t \rho + \partial_i J_i = 0, \quad (3.36)$$

onde

$$\rho = m\Psi^*\Psi \quad \text{e} \quad J_i = \frac{\hbar}{2i}(\Psi^*\partial_i\Psi - \Psi\partial_i\Psi^*), \quad (3.37)$$

são a densidade de massa e a corrente. A velocidade é definida como

$$v_i = \frac{J_i}{\rho} = \frac{\hbar}{m}\partial_i\phi, \quad (3.38)$$

onde ϕ é a fase do campo Ψ .

O funcional de energia, considerando o termo de interação dipolar, tem a seguinte forma:

$$\begin{aligned}
E[\Psi] &= E_{kin} + E_{trap} + E_{int} + E_{dip} + E_{obs} \\
&= \int \frac{\hbar^2}{2m} |\nabla\Psi|^2 d\mathbf{r} + \int V_{trap} |\Psi|^2 d\mathbf{r} + \int \frac{g}{2} |\Psi|^4 d\mathbf{r} \\
&\quad + \frac{1}{2} \int V_{dip} |\Psi|^4 d\mathbf{r} + \int V_{obs} |\Psi|^2 d\mathbf{r}.
\end{aligned} \tag{3.39}$$

Note que as integrais acima são respectivas a cada tipo de energia. O potencial químico μ é calculado da mesma forma que a energia, porém, com um fator 2 no termo E_{int} .

O teorema virial tridimensional independente do tempo para condensados confinados com interação de contato e interação de dipolo-dipolo foi deduzido em [105]. Podemos mostrar que esse teorema dependente do tempo, na presença de um obstáculo móvel, é escrito como:

$$\frac{\partial \langle \mathbf{r} \cdot \mathbf{p} \rangle}{\partial t} = 2E_{kin} - 2E_{trap} + 3E_{int} + 3E_{dip} - E'_{obs}, \tag{3.40}$$

onde o operador $\mathbf{p} = -i\hbar\nabla$, $\mathbf{r} = (x, y, z)$, e

$$E'_{obs} = \int \Psi^* (\mathbf{r} \cdot \nabla V_{obs}) \Psi d\mathbf{r}. \tag{3.41}$$

3.7 Força de arrasto

Considerando o condensado em repouso e um obstáculo que passa por ele com velocidade v , uma força de arrasto leva à transferência de energia para o condensado. A taxa dessa transferência de energia é dada por

$$\frac{dE}{dt} = \mathbf{F}_{arrasto} \cdot \mathbf{v}. \tag{3.42}$$

A força de arrasto F_x na direção da coordenada x , instantânea por unidade de com-

primento, pode ser calculada de três formas diferentes:

$$\begin{aligned} F_x(t) &= + \int_{\Omega} d\Omega \rho \frac{\partial (V_{trap}/m)}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial t} \left[\int_{\Omega} d\Omega J_x(t) \right] \\ &= - \int_{\Omega} d\Omega \rho \frac{\partial (V_{obs}/m)}{\partial x} \\ &= \frac{1}{v} \frac{dE}{dt}, \end{aligned} \tag{3.43}$$

onde Ω define uma região do fluido que cerca o obstáculo.

Capítulo 4

Métodos numéricos

A maioria das equações diferenciais presentes nesta tese estão na forma da equação NLS, a qual pode ser resolvida numericamente através de uma série de métodos diferentes. Dependendo do sistema físico envolvido e das condições iniciais do problema, opta-se por um ou por outro método. De qualquer forma, ao estudarmos a dinâmica do sistema, utilizaremos apenas métodos em que haja conservação da norma, ou seja, nas quais o número de partículas do sistema seja conservado.

Muitas vezes, quando lidamos com apenas uma dimensão, o fator tempo de execução não costuma servir de base para a escolha do método ou ser um fator restritivo. Porém, ao estudarmos a evolução de um sistema em duas ou mais dimensões, o tempo de execução pode limitar bastante as possibilidades de sucesso em um cálculo.

Os métodos que costumam ser mais rápidos, geralmente envolvem o uso da transformada rápida de Fourier, a FFT (*fast Fourier transform*) [106], em uma, duas ou três dimensões, ou às vezes, a transformada de Hankel [107], que reduz duas dimensões a uma dimensão quando há simetria cilíndrica.

Estudos com métodos de diferenças finitas (Crank-Nicolson) já vêm largamente sendo empregados pelo nosso grupo. Entretanto, para a geração de sólitons em uma dimensão, métodos espectrais se mostraram mais confiáveis devido aos altos valores das derivadas, fato percebido ao longo da investigação em [30]. O método de Crank-Nicolson será utilizado apenas em alguns cálculos bidimensionais e para a comparação de resultados. Uma

descrição detalhada do método pode ser encontrada em Barros [108].

Resolveremos a equação de Gross-Pitaevskii dependente do tempo em três dimensões, e sem simetrias, pois no sistema haverá a presença de um obstáculo que passará por um condensado de Bose-Einstein confinado. Esse tipo de cálculo pode levar semanas de processamento nos computadores atuais. Por esse motivo, escolhemos um método espectral que utiliza FFT para obtermos resultados confiáveis mais rapidamente. Esse método chama-se *split-step FFT*, e, em meios ópticos, também é chamado de método da propagação do feixe (*beam propagation method*), o qual será descrito a seguir.

Para estudarmos a evolução temporal de um condensado, partimos do seu estado fundamental. E para calcularmos esse estado, utilizaremos o método da evolução no tempo imaginário ou o método dos gradientes conjugados, os quais também serão descritos a seguir.

A evolução no tempo imaginário será feita com métodos espectrais, e como o estado fundamental no problema tridimensional possui simetria cilíndrica, temos então apenas as coordenadas radial, ρ , e axial, z . O termo de dispersão correspondente à coordenada axial será resolvido com FFT. O termo radial será executado com a transformada de Hankel e os termos harmônicos e não-lineares serão adicionados com *split-step*. Os resultados serão comparados com aqueles obtidos apenas com FFTs.

4.1 *Split-step FFT*

Em uma dimensão, a equação de Schrödinger é

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} + V(x)\psi(x, t) \\ &= (\mathbf{T} + \mathbf{V})\psi(x, t), \end{aligned} \tag{4.1}$$

na qual m é a massa da partícula, \mathbf{T} é o termo de energia cinética e \mathbf{V} é o potencial. Em mecânica quântica, \mathbf{T} e \mathbf{V} são operadores.

Essa definição é válida para operadores em geral, inclusive os nossos operadores \mathbf{T} e \mathbf{V} . Com ela, uma solução formal da equação (4.1) é escrita como

$$\psi(x, t) = e^{-i(\mathbf{T}+\mathbf{V})(t-t_0)/\hbar} \psi(x, t_0). \quad (4.2)$$

Por conveniência, definimos $\delta_t = t - t_0$, de modo que a evolução temporal da função de onda é dada por

$$\psi(x, t) = e^{-i(\mathbf{T}+\mathbf{V})\delta_t/\hbar} \psi(x, t_0). \quad (4.3)$$

Portanto, podemos obter a função de onda $\psi(x, t)$ em qualquer tempo t a partir de um valor conhecido de $\psi(x, t_0)$ em um t_0 inicial.

Dada a definição da exponencial de um operador

$$e^{\mathbf{A}} = \mathbf{1} + \mathbf{A} + \frac{1}{2!}\mathbf{A}\mathbf{A} + \frac{1}{3!}\mathbf{A}\mathbf{A}\mathbf{A} \cdots, \quad (4.4)$$

podemos mostrar que o produto de duas exponenciais

$$e^{\mathbf{A}}e^{\mathbf{B}} = e^{\mathbf{C}}, \quad (4.5)$$

é válido se, e somente se, o operador

$$\mathbf{C} = \mathbf{A} + \mathbf{B} + \frac{1}{2}[\mathbf{A}, \mathbf{B}] + \frac{1}{12}([\mathbf{A}, [\mathbf{A}, \mathbf{B}]] + [[\mathbf{A}, \mathbf{B}], \mathbf{B}]) + \cdots, \quad (4.6)$$

no qual, o comutador dos operadores \mathbf{A} e \mathbf{B} é definido como

$$[\mathbf{A}, \mathbf{B}] = \mathbf{A}\mathbf{B} - \mathbf{B}\mathbf{A}. \quad (4.7)$$

Essa afirmação é conhecida como o teorema de Baker-Campbell-Hausdorff, e é muito útil quando os operadores \mathbf{A} e \mathbf{B} comutam pois obteríamos exatamente $e^{\mathbf{A}}e^{\mathbf{B}} = e^{\mathbf{A}+\mathbf{B}}$. Porém, trataremos de situações em que \mathbf{A} e \mathbf{B} não comutam; e, para isso, subtraímos a

exponencial

$$e^{\lambda(\mathbf{A}+\mathbf{B})} = \mathbf{1} + \lambda(\mathbf{A} + \mathbf{B}) + \frac{\lambda^2}{2!}(\mathbf{A} + \mathbf{B})^2 + \frac{\lambda^3}{3!}(\mathbf{A} + \mathbf{B})^3 + \dots \quad (4.8)$$

pelo produto das exponenciais

$$e^{\lambda\mathbf{A}/2}e^{\lambda\mathbf{B}}e^{\lambda\mathbf{A}/2} = \left[\mathbf{1} + \lambda \left(\frac{\mathbf{A}}{2} \right) + \frac{\lambda^2}{2!} \left(\frac{\mathbf{A}}{2} \right)^2 + \dots \right] \left[\mathbf{1} + \lambda(\mathbf{B}) + \frac{\lambda^2}{2!}(\mathbf{B})^2 + \dots \right] \left[\mathbf{1} + \lambda \left(\frac{\mathbf{A}}{2} \right) + \frac{\lambda^2}{2!} \left(\frac{\mathbf{A}}{2} \right)^2 + \dots \right], \quad (4.9)$$

nas quais λ é um parâmetro, de modo a obtermos

$$e^{\lambda(\mathbf{A}+\mathbf{B})} = e^{\lambda\mathbf{A}/2}e^{\lambda\mathbf{B}}e^{\lambda\mathbf{A}/2} + \mathcal{O}(\lambda^3). \quad (4.10)$$

Utilizando essa relação, podemos escrever

$$e^{-i(\mathbf{T}+\mathbf{V})\delta_t/\hbar} \approx e^{-i\mathbf{V}\delta_t/2\hbar}e^{-i\mathbf{T}\delta_t/\hbar}e^{-i\mathbf{V}\delta_t/2\hbar}, \quad (4.11)$$

a qual produz um erro da ordem de δ_t^3 . E, utilizando a aproximação (4.11) na equação (4.3), obtemos

$$\psi(x, t) \approx e^{-i\mathbf{V}\delta_t/2\hbar}e^{-i\mathbf{T}\delta_t/\hbar}e^{-i\mathbf{V}\delta_t/2\hbar} \psi(x, t_0). \quad (4.12)$$

Definimos, agora, uma quantidade intermediária, $\phi(x)$, como

$$\phi(x) = e^{-i\mathbf{V}\delta_t/2\hbar} \psi(x, t_0), \quad (4.13)$$

na qual, por enquanto vamos supor que $\mathbf{V} = V(x)$ e, em seguida, determinamos o resultado da exponencial da energia cinética operando em ϕ ,

$$e^{-i\mathbf{T}\delta_t/\hbar} \phi(x). \quad (4.14)$$

No espaço das coordenadas, este é um termo perturbador. Ele contém o operador $\partial^2/\partial x^2$, exponenciado. Mas, no espaço das transformadas, poderemos calcular a derivada mais

facilmente. Para isso, precisamos de $\Phi(k)$, a transformada de Fourier de $\phi(x)$, a qual é convenientemente definida como

$$\Phi(k) = \mathcal{F}[\phi(x)] = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \phi(x) e^{-ikx} dx, \quad (4.15)$$

e a transformada inversa

$$\phi(x) = \mathcal{F}^{-1}[\Phi(k)] = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \Phi(k) e^{+ikx} dk, \quad (4.16)$$

então,

$$\begin{aligned} e^{-i\mathbf{T}\delta_t/\hbar} \phi(x) &= e^{-i\mathbf{T}\delta_t/\hbar} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \Phi(k) e^{+ikx} dk \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \Phi(k) \left(1 + \frac{-i\mathbf{T}\delta_t}{\hbar} + \frac{(-i)^2 \mathbf{T}\mathbf{T}\delta_t^2}{2!\hbar^2} + \dots \right) e^{+ikx} dk \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \Phi(k) \left[1 + \frac{-i\hbar^2 k^2 \delta_t}{2m\hbar} + \frac{1}{2!} \left(\frac{-i\hbar^2 k^2 \delta_t}{2m\hbar} \right)^2 + \dots \right] e^{+ikx} dk, \end{aligned} \quad (4.17)$$

e ao introduzirmos o termo de energia cinética na forma

$$T(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \quad (4.18)$$

obtemos

$$\begin{aligned} e^{-i\mathbf{T}\delta_t/\hbar} \phi(x) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \Phi(k) \left[1 + \frac{-iT(k)\delta_t}{\hbar} + \frac{1}{2!} \left(\frac{-iT(k)\delta_t}{\hbar} \right)^2 + \dots \right] e^{+ikx} dk \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-iT(k)\delta_t/\hbar} \Phi(k) e^{+ikx} dk \\ &= \mathcal{F} [e^{-iT(k)\delta_t/\hbar} \Phi(k)]. \end{aligned} \quad (4.19)$$

Reorganizando os termos, obtemos a função de onda, $\psi(x, t)$, na forma [106]

$$\psi(x, t) \approx e^{-iV(x)\delta_t/2\hbar} \mathcal{F} \{ e^{-iT(k)\delta_t/\hbar} \mathcal{F}^{-1} [e^{-iV(x)\delta_t/2\hbar} \psi(x, t_0)] \} + \mathcal{O}(\delta_t^3). \quad (4.20)$$

Na prática, o método transforma a exponencial do operador cinético em uma simples multiplicação escalar por $\exp(-iT(k)\delta_t/\hbar)$, e pode ser usado na seguinte forma em três

dimensões,

$$\psi(\mathbf{r}, t) \approx e^{-iV(\mathbf{r})\delta_t/2\hbar} \mathcal{F}_{3D} \{e^{-iT(\mathbf{k})\delta_t/\hbar} \mathcal{F}_{3D}^{-1} [e^{-iV(\mathbf{r})\delta_t/2\hbar} \psi(\mathbf{r}, t_0)]\} + \mathcal{O}(\delta_t^3), \quad (4.21)$$

na qual, os símbolos \mathcal{F}_{3D} e \mathcal{F}_{3D}^{-1} representam as transformadas de Fourier direta e inversa, respectivamente, nas três coordenadas. A evolução converge para um valor de δ_t suficientemente pequeno.

Na discretização do problema, é de grande ajuda a relação entre δ_x e δ_k ,

$$\delta_k = \frac{2\pi}{N\delta_x}, \quad (4.22)$$

na qual, N é o número de pontos da grade, e δ_x e δ_k são os espaçamentos constantes entre os pontos nos contínuos x e k .

No caso da equação não-linear de Schrödinger, podemos resolvê-la numericamente se utilizarmos $\mathbf{V} = |\psi(x, t_0)|^2$ e, analogamente, podemos resolver várias outras equações diferenciais parciais. Por exemplo, para resolvermos a Gross-Pitaevskii com o termo de interação dipolar, interação de dois corpos e um potencial externo, utilizaremos

$$\mathbf{V} = V_{ext}(\mathbf{r}) + g|\psi(\mathbf{r}, t_0)|^2 + \int d\mathbf{r}' V_{dd}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') |\psi(\mathbf{r}', t_0)|^2, \quad (4.23)$$

na qual, o potencial externo, V_{ext} , é um potencial harmônico que confina o condensado, e o cálculo do termo de interação dipolar pode ser simplificado usando o teorema da convolução.

Para o cálculo do termo de interação dipolar, seguindo [109], vamos considerar que em um dado tempo t , a densidade por partícula em \mathbf{r} é

$$n(\mathbf{r}) = |\psi(\mathbf{r})|^2, \quad (4.24)$$

e o potencial dipolar (3.33), adimensional, é

$$V_{dd}(\mathbf{r}) = \frac{3z^2/r^2 - 1}{r^3}. \quad (4.25)$$

Vamos considerar que $\tilde{n}(\mathbf{k})$ e $\tilde{V}_{dd}(\mathbf{k})$ são, respectivamente, suas transformadas de Fourier

$$\tilde{n}(\mathbf{k}) = \int d\mathbf{r} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} n(\mathbf{r}), \quad (4.26)$$

e [109]

$$\tilde{V}_{dd}(\mathbf{k}) = \frac{4\pi}{3}(3k_z^2/k^2 - 1) = \frac{4\pi}{3}(3\cos^2\alpha - 1), \quad (4.27)$$

na qual, α é o ângulo entre \mathbf{k} e a coordenada z . Note que essa última expressão foi calculada analiticamente e, para isso, foi feita uma expansão de $\exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})$ em séries de harmônicos esféricos e funções de Bessel. Nessa expansão, apenas o termo Y_{20} contribui. Com essas expressões, e utilizando o teorema da convolução, obtemos

$$\int d\mathbf{r}' V_{dd}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') |\psi(\mathbf{r}')|^2 = \int d\mathbf{r}' V_{dd}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') n(\mathbf{r}') = \mathcal{F}_{3D}^{-1} [\tilde{V}_{dd}(\mathbf{k}) \tilde{n}(\mathbf{k})]. \quad (4.28)$$

Como vantagens desse cálculo, temos um termo calculado analiticamente e o uso da FFT, a qual é mais rápida que uma multiplicação matricial em três dimensões.

4.2 Estado fundamental: métodos da evolução no tempo imaginário e dos gradientes conjugados

Analicamente, o estado fundamental de um condensado de Bose-Einstein pode ser obtido na aproximação de Thomas-Fermi, a qual descarta por completo o termo cinético. Embora produza um resultado razoável, ao compararmos a dinâmica de um condensado partindo dessa aproximação com a que parte de um estado fundamental calculado de forma mais precisa, obtemos na maioria das vezes, resultados muito diferentes, principalmente quando o tempo de evolução temporal é longo. Para evitarmos esse tipo de problema, utilizaremos dois métodos diferentes, preferencialmente o método dos gradientes conjugados, por ser extremamente mais rápido que o método da evolução no tempo imaginário, e por ser, em geral, mais preciso.

4.2.1 Propagação no tempo imaginário

De acordo com Susuki [110], dado um sistema governado por uma equação de Schrödinger dependente do tempo

$$i\frac{\partial\psi}{\partial t} = H\psi, \quad (4.29)$$

na qual $\hbar = 1$, a função ψ pode ser expandida em termos dos autoestados na forma

$$\psi = \sum_{i=0}^{\infty} a_i \phi_i, \quad (4.30)$$

sendo ϕ_0 o estado fundamental. Quando o tempo t é substituído por um tempo imaginário α , na forma $t \rightarrow -i\alpha$, temos

$$\frac{\partial\psi(\alpha)}{\partial\alpha} = -H\psi(\alpha), \quad (4.31)$$

cujas solução formal é

$$\psi(\alpha) = e^{-H\alpha}\psi(0), \quad (4.32)$$

desde que a Hamiltoniana seja independente do tempo.

A evolução no tempo imaginário permite calcular o estado fundamental notando-se que

$$\lim_{\alpha \rightarrow \infty} \frac{\psi(\alpha)}{\langle \psi(\alpha) | \psi(\alpha) \rangle^{1/2}} = \frac{a_0}{|a_0|} \phi_0, \quad (4.33)$$

ou seja, é possível chegar ao estado fundamental fazendo uma evolução no tempo imaginário com $\alpha \rightarrow \infty$. Isso pode ser provado se assumirmos que, ao escrevermos $\psi(0)$ em termos da equação (4.30), teremos $a_0 \neq 0$, ou seja, haverá uma componente não nula do estado fundamental na função de onda inicial. Assumindo esta condição, escreveremos a energia média na forma

$$\begin{aligned} E(\alpha) &\equiv \frac{\langle \psi(\alpha) | H | \psi(\alpha) \rangle}{\langle \psi(\alpha) | \psi(\alpha) \rangle} \\ &= \frac{E_0 + \sum_{i=1}^{\infty} E_i e^{-2\alpha(E_i - E_0)} |a_i/a_0|^2}{1 + \sum_{i=1}^{\infty} e^{-2\alpha(E_i - E_0)} |a_i/a_0|^2} \\ &= E_0 + \frac{\sum_{i=1}^{\infty} (E_i - E_0) e^{-2\alpha(E_i - E_0)} |a_i/a_0|^2}{1 + \sum_{i=1}^{\infty} e^{-2\alpha(E_i - E_0)} |a_i/a_0|^2} \geq E_0, \end{aligned} \quad (4.34)$$

de modo que $E(\alpha)$ tende a E_0 quando $\alpha \rightarrow \infty$.

4.2.2 Gradientes conjugados

Uma forma de utilização do método dos gradientes conjugados para a obtenção do estado fundamental é a minimização do funcional da energia, por exemplo, o funcional da energia (3.7), através de sucessivas minimizações de linhas ao longo de direções otimamente escolhidas [111]. Uma descrição detalhada dos gradientes conjugados pode ser encontrada em [112].

Inúmeras variações do método foram desenvolvidas, porém, utilizaremos a desenvolvida por Yang [113], a qual utiliza também o método de Newton. O método de Yang provavelmente se tornará padrão para a obtenção do estado fundamental, visto que é muito rápido se comparado aos demais; é muito robusto, é confiável; e, produz resultados muito precisos. No trabalho de Yang, encontramos tanto o algoritmo quanto o código computacional que resolve a equação NLS bidimensional com potenciais periódicos. Com isso, modificamos o código de modo a obtermos o estado fundamental de condensados.

Capítulo 5

Resultados numéricos

Apresentaremos, neste capítulo, a discussão dos principais resultados obtidos no estudo da formação de sólitons em meios ópticos e em condensados.

5.1 Em meios ópticos

Os principais resultados obtidos em meios ópticos são a formação de sólitons, vórtices, o surgimento de ondas de choque e “ondas de navio”.

5.1.1 Caso unidimensional com um “degrau” em fundo uniforme

Podemos começar pelo tratamento das ondas de choques descritas pela equação GNLS, em uma dimensão, com distribuição inicial de intensidade e vetor de onda transversal na forma

$$\rho(x, 0) = \begin{cases} \rho_0 > 1 & \text{para } x < 0, \\ 1 & \text{para } x \geq 0; \end{cases} \quad u(x, 0) = 0. \quad (5.1)$$

Na Figura (5.1), mostramos o decaimento da descontinuidade inicial da intensidade da luz num feixe propagando-se através de um cristal fotorrefrativo, com a formação de um choque dispersivo causado pelo balanço entre os efeitos dispersivos e não-lineares.

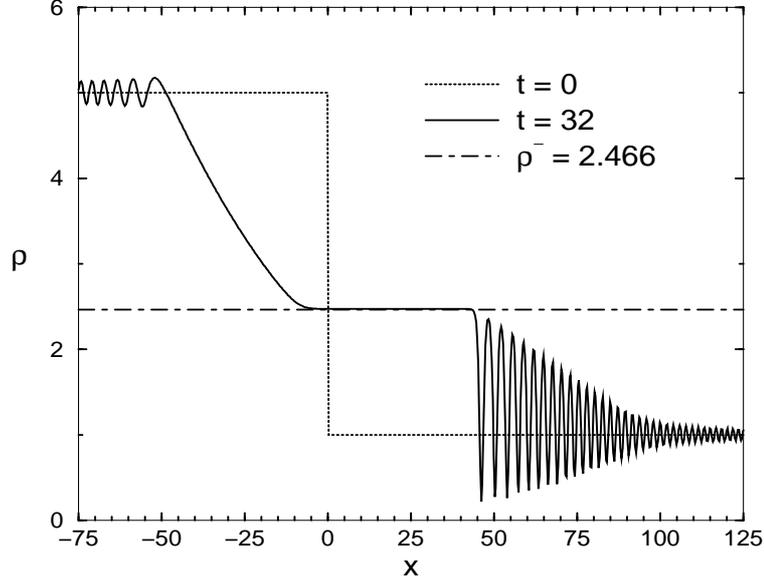


Figura 5.1: Evolução de um pulso inicial na forma de degrau, Eq. (5.1), com $\rho_0 = 5$ e $\rho = 1$, para o caso de $\gamma = 0.1$. A estrutura geral confirma a formação de uma onda de rarefação, um choque dispersivo, e um estado intermediário constante no meio. A intensidade $\rho^- = 2.466$, calculada de acordo com a equação (2.82), coincide com o resultado numérico para a intensidade do estado intermediário. As coordenadas das bordas da onda de rarefação em $t = 32$, calculadas analiticamente, são iguais a $x_1^- = -47.7$, $x_1^+ = -9.02$ para a onda de rarefação, e $x_2^- = 42.57$, $x_2^+ = 99.52$. Podemos ver que concordam muito bem com os resultados numéricos. Ondas de pequena amplitude em torno de $x = -50$ correspondem à “resolução” linear dispersiva da descontinuidade fraca ocorrendo na borda direita da onda de rarefação.

Na Figura (5.2), construímos a dependência de ρ^- e u^- sobre o parâmetro de saturação γ e obtivemos um ótimo acordo numérico com as equações (2.82) e (2.83), baseadas na condição de salto da “onda simples”, a qual é aplicável para valores não muito grandes de ρ^- ($\lesssim 4$), de modo que a formação de um ponto de vácuo não ocorra.

Como ρ^- aumenta com o crescimento de ρ_0 , tornando-se maior que a intensidade crítica $\rho_{cr}^- \simeq 4$, a Eq. (2.83) não fornece mais os valores de u^- compatíveis com o valor determinado de ρ^- , de modo que é gerado apenas um único choque dispersivo que se propaga para a direita; isso é ilustrado pela Figura (5.3), onde uma nova região “intermediária” de fluxo constante parece estar se formando, a qual se iguala com o choque dispersivo propagando-se para a direita. Enquanto isso, outro choque dispersivo está aparentemente se formando para a esquerda deste novo constante estado, que se igualará com ρ_0 .

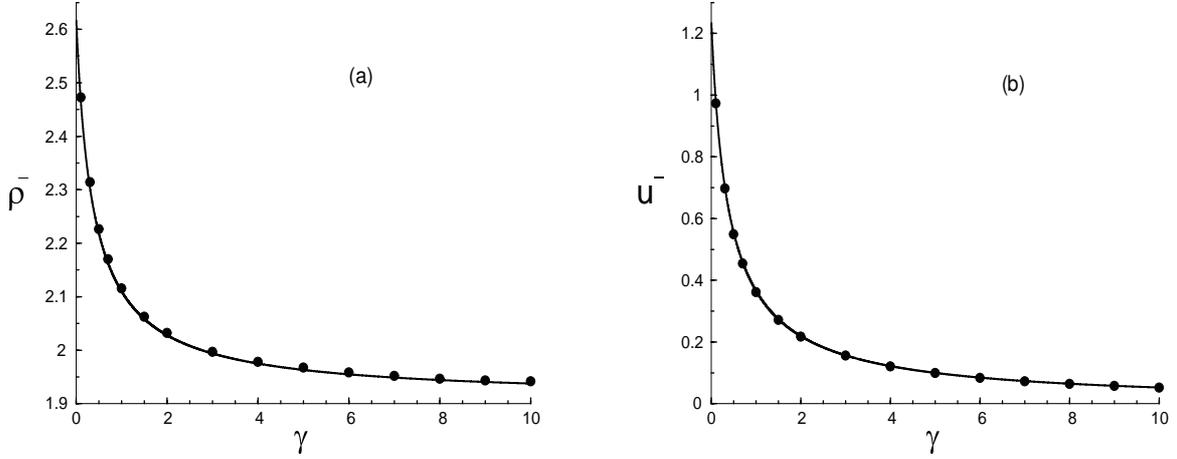


Figura 5.2: Dependência dos valores intermediários (linhas sólidas) da intensidade (a) e do vetor de onda transversal (b) sobre o parâmetro de saturação γ para valores fixos dos parâmetros iniciais de descontinuidade: $\rho_0 = 5$, $u_0 = 0$ para $x < 0$ e $\rho^+ = 1$, $u^+ = 0$ para $x > 0$ em $z = 0$. Os valores calculados numericamente são representados por pontos.

Surpreendentemente, nesse caso da formação da onda de choque dispersiva a partir de um pulso com grande amplitude, encontrou-se em [2] que a transição entre o novo estado intermediário constante e $\rho = 1$, agora satisfazem uma condição clássica de salto do choque, a qual segue de um equilíbrio da “massa” e do “momento” através do choque, da mesma forma que ocorre nos choques dissipativos clássicos. Usando as equações (2.68) sem dispersão representadas numa forma conservativa encontrou-se em [2] que as condições formais de salto do choque produzem a dependência

$$u^- = \frac{\sqrt{2}(\rho^- - 1)}{\sqrt{(\rho^- + 1)(1 + \gamma\rho)(1 + \gamma)}}. \quad (5.2)$$

Checamos que a dependência (5.2) é de fato muito bem satisfeita para $\rho^- > 4$. O mecanismo físico que sustenta o aparecimento das condições de choque clássicas em um sistema sem dissipação tal como o (2.65) não é bem claro no momento. Notamos que um efeito similar do aparecimento da condição clássica de salto do choque através de um choque dispersivo em expansão foi observado recentemente em [114] para ondas superficiais de água com grande amplitude (*undular bores*), modeladas pelo sistema Green-Naghdi, que também não é integrável pelo método *IST*. Ao mesmo tempo, sabe-se que para choques dispersivos descritos pela equação NLS integrável, a condição de salto da onda simples é satisfeita exatamente para todos os valores do salto inicial da intensidade. Isso segue

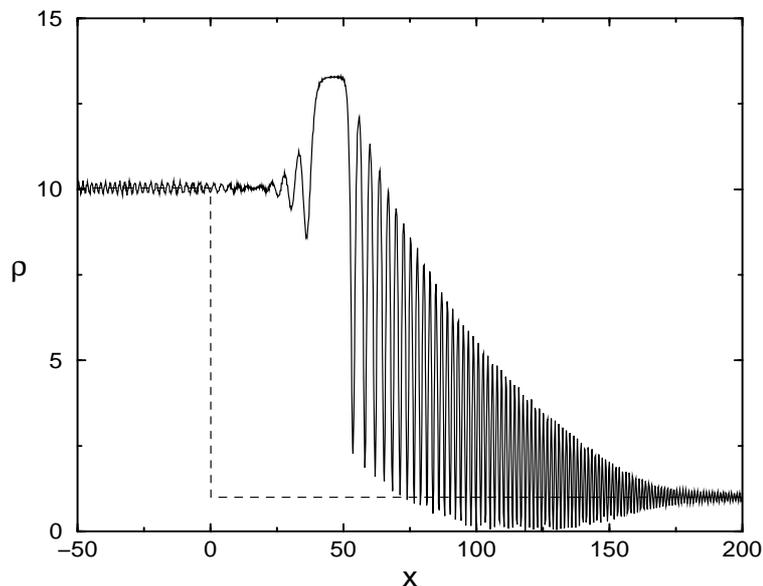


Figura 5.3: Choque dispersivo evoluído a partir de um pulso na forma de degrau, com ρ^- e u^- relacionados pela condição de salto da “onda simples”, para valores grandes de $\rho^- = 10$, muito maior que $\rho^- = 4$. A ocorrência de um ponto de vácuo entre $x = 100$ e $x = 150$ é encontrada. Um novo estado intermediário constante é formado na região detrás do choque dispersivo, mostrando que a condição de salto da onda simples (2.83) não previne mais a formação da segunda onda para valores grandes de ρ^- .

da solução de modulação completa ([23, 29, 10]), e também é confirmada por nossas simulações numéricas. Então, é possível que o fenômeno descrito pelo aparecimento de condições de choque clássicas constitui uma manifestação específica da não-integrabilidade em sistemas dispersivos sem dissipação, o que ainda está para ser explorado.

A seguir, estudaremos a formação de sólitons escuros gerados por uma perturbação na forma de um “buraco”.

5.1.2 Caso unidimensional com um “buraco” em fundo uniforme

Consideremos uma evolução assintótica do decaimento em larga escala

$$\rho(x, 0) = \rho_0(x) \leq 1, \quad u(x, 0) = u_0(x); \quad \rho_0(x) \rightarrow 1, \quad u_0(x) \rightarrow 0 \quad \text{para } |x| \rightarrow \infty, \quad (5.3)$$

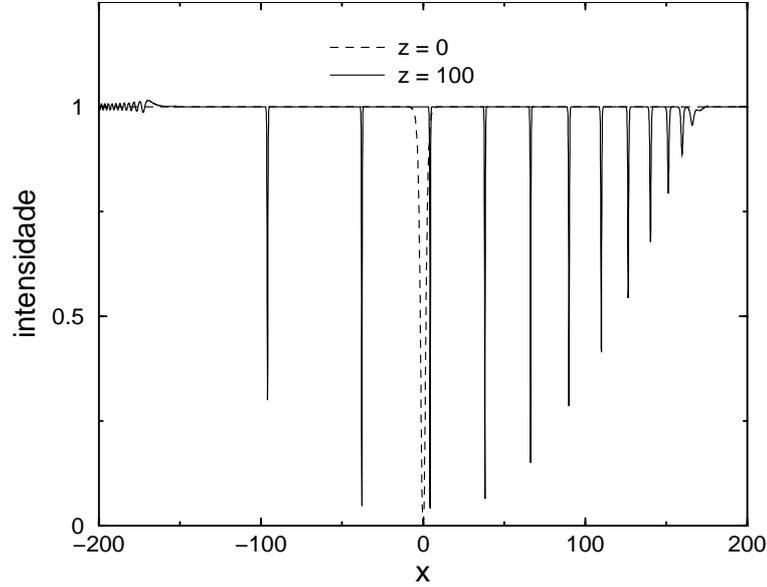


Figura 5.4: Perfil de intensidade em $z = 100$ evoluído de um pulso inicial, Eq. (5.4) (linha pontilhada), com perfil inicial de $u(x)$ calculado de acordo com (5.5), com $\gamma = 0.2$. Após a quebra da onda e formação de um choque dispersivo, o pulso evolui para um certo número de sólitons escuros. A propagação de alguns sólitons para a esquerda é causada pela formação de um ponto de vácuo em um estágio intermediário da evolução.

de uma distribuição inicial

$$\rho_0(x) = \left(1 - \frac{0.9}{\cosh(0.2x)}\right)^2, \quad (5.4)$$

e a distribuição inicial do número de onda transversal calculada de acordo com a equação

$$u_0(x) = \frac{2}{\sqrt{\gamma}}(\arctan \sqrt{\gamma \rho_0(x)} - \arctan \sqrt{\gamma}), \quad (5.5)$$

ou seja, consideramos a formação de uma onda de choque dispersiva que se propaga para a direita, a partir do perfil (5.3), satisfazendo uma restrição adicional da onda simples (2.83).

A evolução desse pulso de acordo com a equação (2.55), com $\gamma = 0.2$, é ilustrada pela Figura (5.4) onde o perfil de intensidade é mostrado em $z = 100$. Como vemos, após uma quebra na onda e a formação de um choque dispersivo, este pulso eventualmente evolui para um certo número de sólitons escuros. O aparecimento de sólitons que se propagam para o lado esquerdo não contradiz a restrição unidirecional garantida pelas condições

iniciais da onda simples (5.4) e (5.5). Ele ocorre devido à relativamente alta amplitude da perturbação inicial (5.4), a qual provoca o aparecimento de um ponto de vácuo em um estágio intermediário da onda de choque dispersiva, e assim os sólitons se formam.

As simulações numéricas da equação GNLS mostraram o decaimento de (5.3) em dois grupos de sólitons escuros propagando-se em direções opostas, o que é consistente com a natureza dessa equação na descrição de tal propagação. Para $\gamma = 0$, a dinâmica é descrita pela equação NLS integrável, e os parâmetros do sóliton são encontrados a partir da regra generalizada de Bohr-Sommerfeld [27]. No presente caso da equação GNLS (2.65) não-integrável, esses parâmetros podem ser obtidos através de uma extensão do método de modulação, o qual é utilizado na obtenção dos parâmetros da onda de choque dispersiva para casos quando a distribuição inicial corresponde à solução da onda simples das equações sem dispersão; isto é, uma das invariantes de Riemann (2.69) é supostamente constante.

Essa extensão foi desenvolvida em [115], no contexto das ondas não-lineares superficiais de água, e foi utilizada em [2] na derivação da fórmula para o número total de sólitons que resultam de uma perturbação inicial (5.3). Nessa derivação, foi assumido que a perturbação inicial inteira eventualmente se transforma em sólitons (fato conhecido no caso da equação NLS integrável, e agora também confirmado pelas simulações numéricas da equação GNLS). Em seguida, foi aplicada a teoria geral da modulação na descrição da formação de uma onda de choque dispersiva em um estágio intermediário, e então, foi encontrado um eventual estágio de trem de sólitons quando $z \rightarrow \infty$.

5.1.3 Caso bidimensional com um “obstáculo” em fundo uniforme

Nas Refs. [10, 17], a teoria de choques dispersivos que evoluem a partir de um pulso inicial na forma de degrau, de acordo com a equação NLS (2.58) ($\gamma = 0$), foi usada para a explicação qualitativa de choques dispersivos com outras geometrias em situações físicas concretas (veja também [30] onde a teoria NLS da quebra da onda também foi usada para

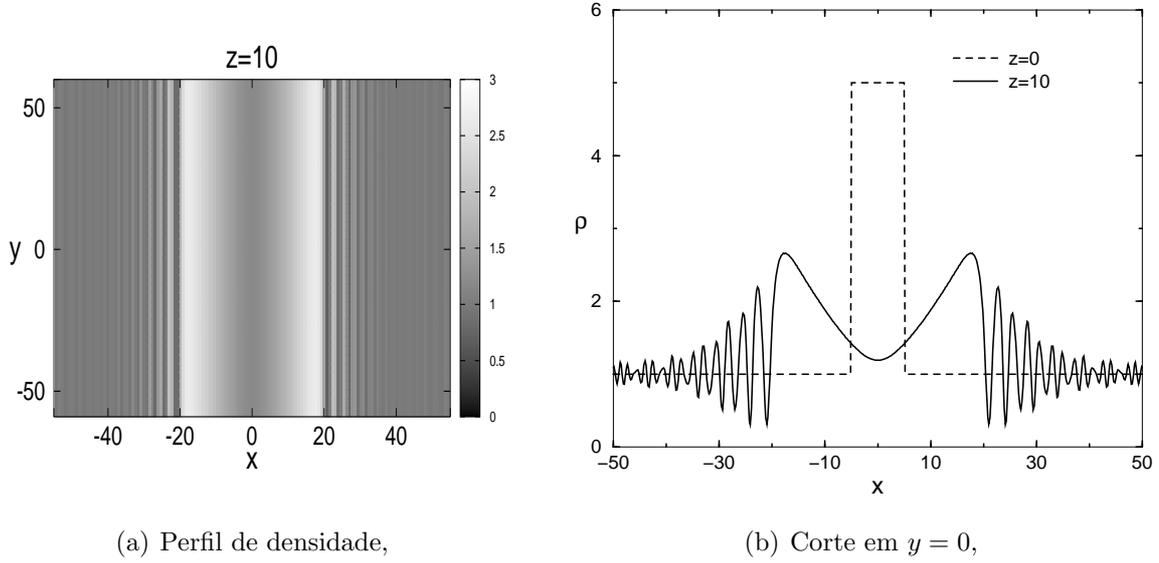


Figura 5.5: (a) Perfil de densidade do padrão de intensidade evoluído a partir de uma distribuição inicial na forma de faixa, Eq. (5.6), com $\gamma = 0.1$ e $z = 10$, (b) Corte do perfil em $y = 0$.

a descrição de choques dispersivos em condensados de Bose-Einstein). De forma semelhante, a teoria desenvolvida em [2] de choques dispersivos em meios fotorrefrativos pode ser usada para a descrição de experimentos na geração de choques obtidos opticamente. Tais experimentos foram descritos em [15, 17] e aqui apresentamos alguns resultados baseados nas soluções numéricas da equação para meios fotorrefrativos (2.55) com condições iniciais semelhantes as distribuições iniciais de luz dos trabalhos experimentais mencionados (resultados semelhantes de simulações numéricas foram apresentados em [17]).

Em [17] a distribuição das intensidades de saída são apresentadas para distribuições iniciais na forma de faixa, de um círculo, e dois círculos separados. Fizemos simulações numéricas com condições iniciais semelhantes. Na Figura (5.5) apresentamos um gráfico de densidade do padrão de intensidade evoluído de acordo com a equação (2.55), com $\gamma = 0.1$, a partir de uma distribuição na forma de faixa dada pela fórmula

$$\rho(x) = \begin{cases} 1 + 5(1 - x^2/25)^{0.2} & \text{para } |x| < 5, \\ 1 & \text{para } |x| > 5, \end{cases} \quad (5.6)$$

que aproxima com boa precisão os valores constantes de intensidade dentro e fora da

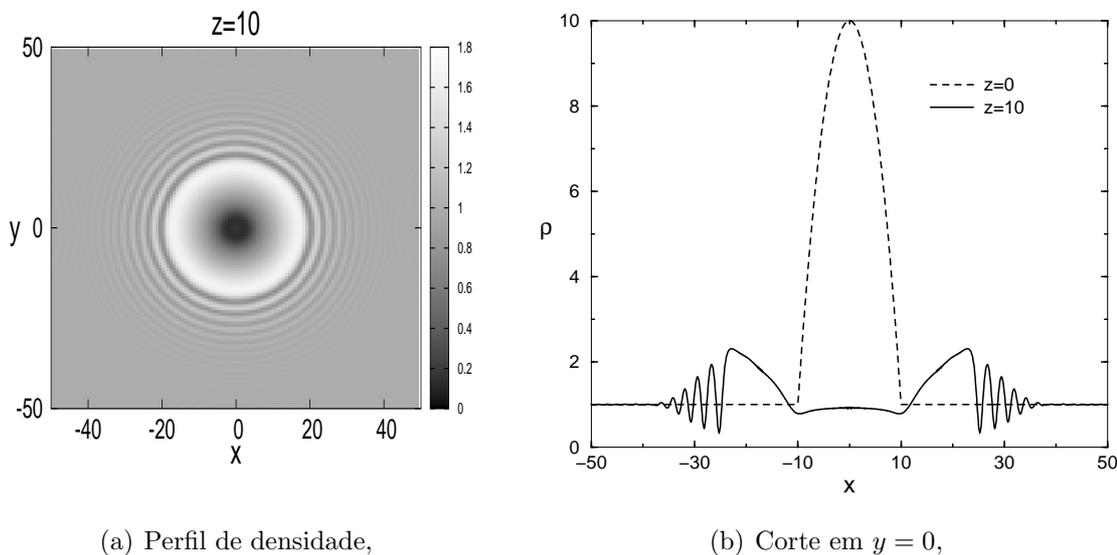
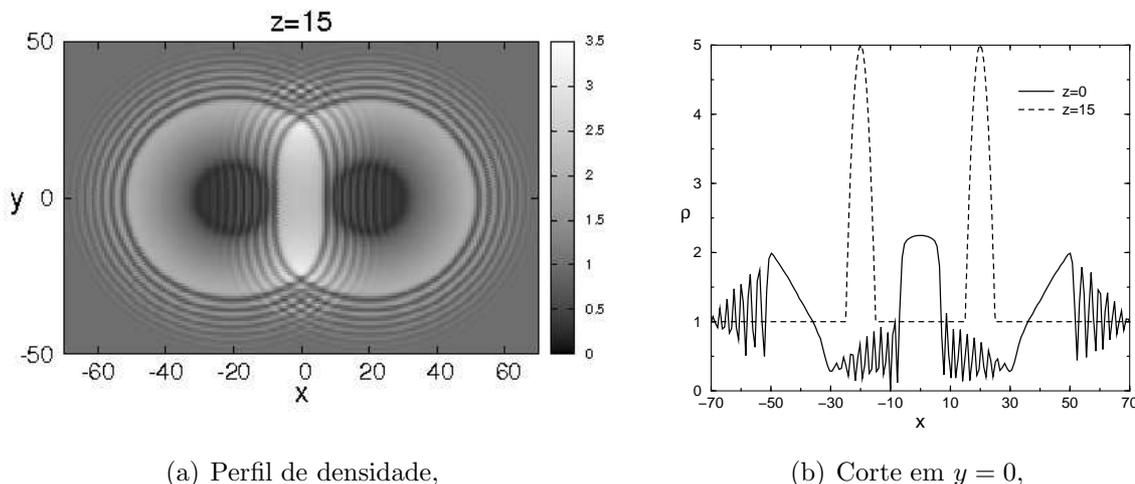


Figura 5.6: (a) Perfil de densidade do padrão de intensidade evoluído a partir de uma distribuição inicial circular, com $\gamma = 0.1$ e $z = 10$, (b) Corte do perfil em $y = 0$.

faixa. Um gráfico similar de densidade para uma distribuição inicial circular é mostrada na Figura (5.6). Como vemos, em ambos os casos o *hump* inicial quebra com a formação de choques dispersivos: na geometria em forma de faixa temos dois choques propagando-se em direções opostas e na geometria circular temos um choque dispersivo na forma de anel expandindo-se na direção radial.

Na Figura (5.7), uma interação entre duas ondas de choque circulares é mostrada. É notável que, mesmo no caso não-integrável da propagação em um meio fotorrefrativo bidimensional, o choque dispersivo não-linear de ondas é bastante robusto e não produz ondas intensas na região de sobreposição, ao menos para $\gamma = 0.1$. Na região de intensidade não-uniforme, sólitons circulares refratam mas não decaem em outras ondas. Esse é um tipo de cenário que é esperado em um sistema com $\gamma = 0$ descrito pela equação NLS integrável onde a interação de dois choques dispersivos geram a formação da região de uma onda modulada com duas fases descrita pelo sistema correspondente [28]. Enquanto não estiver disponível a descrição analítica das ondas não-lineares com muitas fases na equação fotorrefrativa (2.65), podemos considerar que a semelhança qualitativa entre o comportamento da solução para a equação não-integrável que descreve meios fotorrefrativos e para a equa-



(a) Perfil de densidade,

(b) Corte em $y = 0$,

Figura 5.7: (a) Interação entre dois choques dispersivos circulares, com $\gamma = 0.1$ e $z = 15$, (b) Corte do perfil em $y = 0$. É marcante que o choque dispersivo não-linear de ondas é bastante robusto e não produz ondas intensas na região de sobreposição, ao menos para $\gamma = 0.1$.

ção NLS com valores moderados da amplitude inicial, é uma confirmação de que o *ansatz* da onda modulada viajante é robusto na descrição das ondas de choque dispersivas em sistemas não-integráveis, pelo menos para algum intervalo razoável de amplitudes iniciais.

5.1.4 Difração não-linear

A forma geral do padrão de difração obtido através da propagação de um feixe intenso de luz que passa sobre um fio refletor resume-se a padrões que contém sólitons, vórtices e ondas de navio, como na Figura (5.8). Como vemos, o padrão de difração consiste em duas partes diferentes separadas pelo cone de Mach. Na região externa ao cone de Mach, há um padrão de onda estacionário criado pela interferência de ondas lineares que estão suficientemente longes do obstáculo, são geradas as conhecidas “ondas de navio”. Dentro do cone de Mach, há dois sólitons oblíquos escuros localizados simetricamente em relação à direção do fluxo (eixo x). Esses sólitons oblíquos decaem, nos seus pontos finais, em vórtices. Mas, próximo ao obstáculo, eles são descritos por um fluxo potencial com um salto de fase entre esses sólitons, como é demonstrado na Figura (5.9). Com o aumento do raio do obstáculo notamos a formação de outros pares de sólitons dentro do cone de

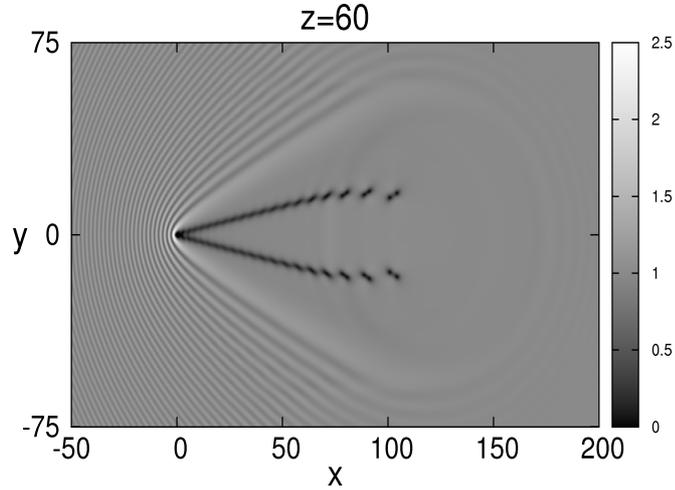


Figura 5.8: Padrão de difração no plano de saída no comprimento $z = 60$ do meio fotorefrativo. O padrão foi obtido pela simulação numérica da Eq. (2.55) com $V(\mathbf{r}_\perp)$ correspondendo a um fio refletor ideal com raio unitário, para $\gamma = 0.2$ e $U = 2$. O resultado dessa simulação numérica é apresentado em unidades adimensionais definidas em (2.54).

Mach, porém, nos limitaremos à formação de apenas um par de sólitons.

Conforme a teoria desenvolvida em [3], as previsões analíticas são comparadas com o padrão de onda calculado numericamente na Figura (5.10), e encontramos um excelente acordo. Na região em frente ao obstáculo, onde $y = 0$ e $x < 0$, as perturbações na intensidade da luz tomam a forma mais simples. Em [3], esse perfil de intensidade é calculado analiticamente pela Eq. (2.99). Como vemos na Figura (5.11), ao compararmos esse cálculo com a simulação numérica, obtemos uma precisão suficiente para quase toda a região, exceto nas proximidades do obstáculo.

O perfil de intensidade da luz através dos sólitons oblíquos pode ser obtido pela integração numérica da Eq. (2.98), e para isso, utilizamos o método de euler. Na Figura (5.12), comparamos o perfil teórico com o perfil do padrão de difração obtido diretamente pela simulação numérica das Eqs. (2.56) e (2.57) originais. Um bom acordo entre esses dois perfis, bem como o comportamento característico da fase da função de onda mostrados no painel inferior da Fig. (5.12), confirmam que o padrão na Fig. (5.8) dentro do cone de Mach de fato consiste em sólitons oblíquos escuros gerados pela difração não-linear do

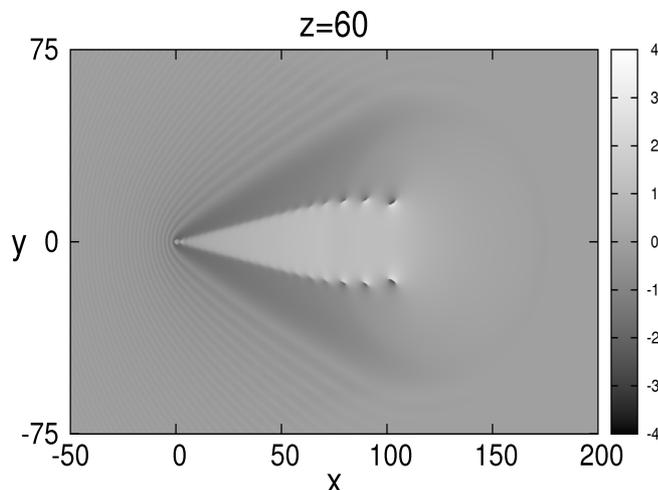


Figura 5.9: Distribuição de fase do padrão de difração no plano de saída do meio fotorrefrativo. O padrão corresponde a $\gamma = 0.2$, $U = 2$ e $z = 60$. Os sólitons oblíquos decaem nos seus pontos finais em vórtices; mas, próximo ao obstáculo, são descritos por um “fluxo potencial” com um salto de fase entre eles.

feixe de luz sobre o obstáculo.

Esses perfis de sólitons investigados acima são alcançados assintoticamente quando $z \rightarrow \infty$. Porém, os padrões calculados para valores finitos de z , como o mostrado na Fig. (5.8), indicam que algumas oscilações da intensidade acontecem ao longo dos sólitons oblíquos. A amplitude dessas oscilações aumentam com a distância ao obstáculo, o que causa a formação de vórtices nos pontos finais dos sólitons. De fato, é bem conhecido que a instabilidade de sólitons escuros bidimensionais em relação à perturbações transversas resulta nesse estágio não-linear com formação de vórtices [5]. Na realidade, apenas essa instabilidade previne a formação de sólitons escuros no caso da velocidade subsônica do fluxo. Essa situação é ilustrada Figura (5.13), na qual o padrão de onda no plano de saída é calculado numericamente para o número de Mach $M = 0.9$. Como podemos ver, apenas vórtices são gerados porque os sólitons escuros são absolutamente instáveis e não podem ser criados como estruturas estacionárias do padrão de difração.

A seguir, estudaremos a formação de sólitons e vórtices em condensados de Bose-Einstein.

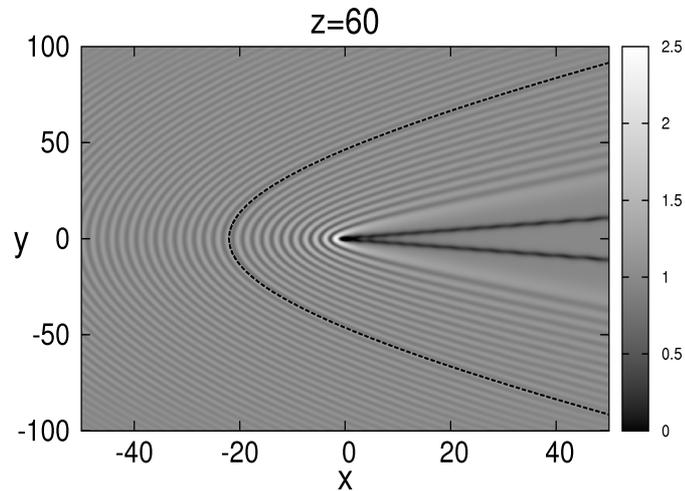


Figura 5.10: Padrão de onda calculado numericamente, que corresponde à difração de um feixe de luz sobre o obstáculo incorporado a um meio fotorrefrativo. O cálculo foi feito com $\gamma = 0.2$ e $U = 2$ até $z = 120$, com $V(\mathbf{r}_\perp)$ correspondendo a um fio refletor ideal com raio unitário. A linha tracejada corresponde à teoria analítica linear, Eq. (2.100), para a linha de fase constante; ela foi deslocada para a esquerda em duas unidades de comprimento a partir do centro do obstáculo por causa do seu tamanho finito nas simulações numéricas e melhor ajuste com esse cálculo.

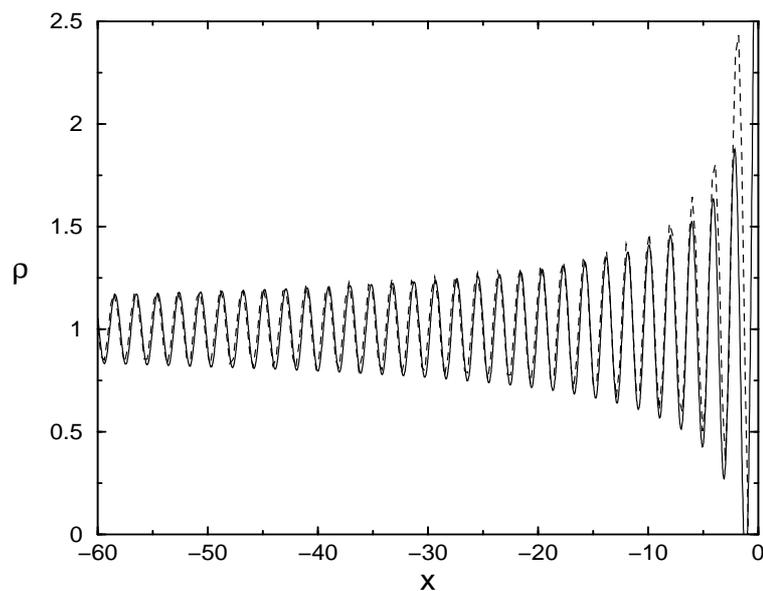


Figura 5.11: Perfil de intensidade em frente ao obstáculo para $x < 0$, $y = 0$, e com a escolha dos parâmetros $\gamma = 0.2$, $U = 2$ e $V_0 = 2.6$. A linha sólida corresponde à Eq. (2.99), e a linha tracejada à solução numérica das Eqs. (2.56) e (2.57).

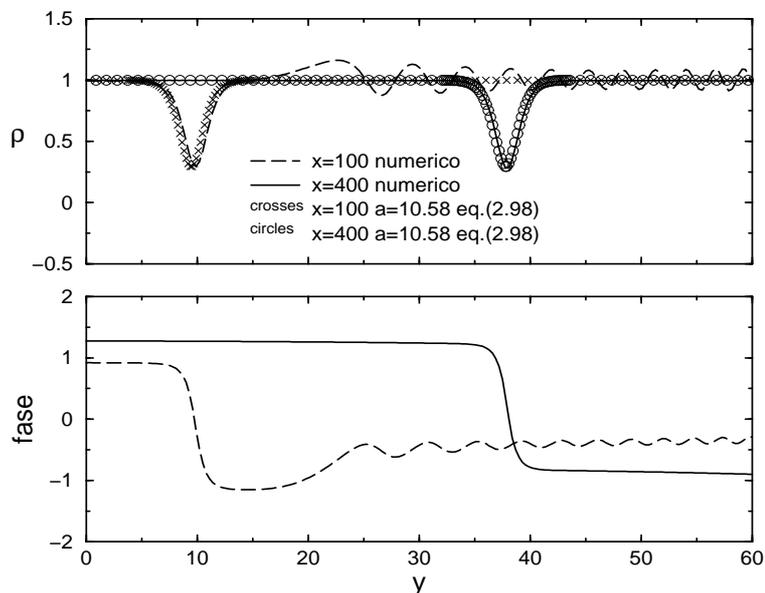


Figura 5.12: Paine superior: Perfis das distribuições de intensidade para $x = 100$ (linha tracejada), $x = 400$ (linha contínua) e $y > 0$ obtidas a partir da solução numérica da Eq. (2.56) com o termo não-linear dado pela Eq. (2.57), para $U = 5$, $\gamma = 0.2$ e $z = 120$. Esses perfis são comparados com os perfis dos sólitons obtidos pelas soluções da Eq. (2.98), com a inclinação $a = 10.58$, mostrados como funções de y nos mesmos valores de x ($x = 100$ corresponde às “cruzes” e $x = 400$ aos “círculos”). Paine inferior: Perfis da variação da fase ao longo dos mesmos “cortes” da função de onda do condensado calculada numericamente. Os saltos de fase correspondem ao comportamento bem conhecido da fase através dos sólitons escuros.

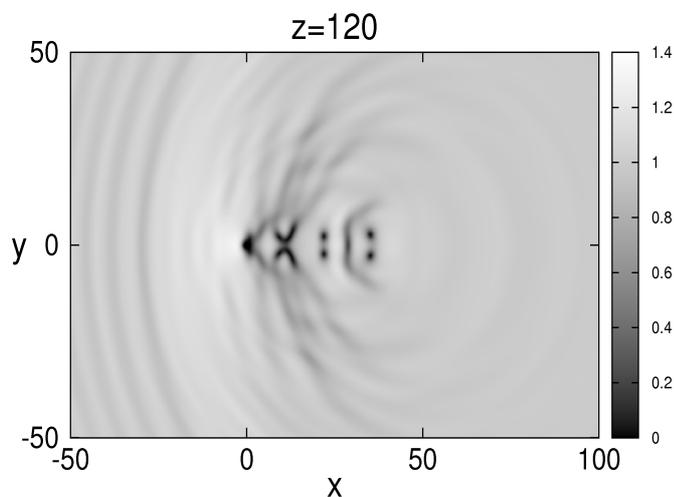


Figura 5.13: Padrão de difração no plano de saída no comprimento $z = 120$ e número de Mach $M = 0.9$. Os padrões são obtidos pela solução numérica da Eq. (2.55) com $V(\mathbf{r}_\perp)$ correspondendo a um fio refletor ideal com raio unitário e $\gamma = 0.2$.

5.2 Em condensados de Bose-Einstein

Um critério para a superfluidez foi proposto por Landau [116], e diz que se a velocidade do fluxo de um fluido for menor que um valor crítico $v_c = \min\{E(q)/q\}$, onde $E(q)$ é a energia de uma excitação elementar com momento q , não ocorre dissipação.

Experimentos feitos com Hélio II líquido para testar essa idéia, mostraram que existe uma velocidade crítica, porém, muito abaixo da esperada. Feynman, então, sugeriu que vórtices quantizados sejam os responsáveis por essa diminuição [117]. Experimentos em condensados de Bose-Einstein mostraram que a velocidade crítica é menor que a esperada por Landau [118, 119], e que isso está relacionado com a formação de vórtices [120].

Em fluidos quânticos, espera-se que exista uma velocidade crítica v_c para o início de uma força de arrasto, ou seja, o fluido passaria a oferecer resistência ao movimento de um objeto sobre ele. Em um estudo numérico anterior, Winiecki et al. [121] mostraram que, quando a velocidade v do fluxo contínuo de um condensado sobre um obstáculo fixo for $v > v_c$, a força de arrasto aumenta quadraticamente com v .

Antes de tudo, percebemos que para termos um sistema de átomos frios com o mesmo padrão obtido na seção anterior, como na Fig. (5.8), tivemos que observar a expansão de um condensado, após a retirada da armadilha magnética, sobre um obstáculo fixo e impenetrável (na região do obstáculo a função de onda se anula). Um padrão semelhante acontece apenas em tempos longos de evolução, o que torna o condensado muito diluído de modo a tornar essa comparação inviável.

Com isso, fizemos uma grande mudança na forma da abordagem do problema. Inicialmente, mantínhamos um obstáculo fixo e expandíamos o condensado sobre ele. Daqui em diante faremos o inverso, manteremos o condensado confinado e passaremos o obstáculo (feixe de *laser*) por ele com uma velocidade constante.

São duas grandes vantagens nesta mudança, uma física e outra computacional. Fisicamente, manteríamos a característica do condensado de possuir apenas a interação de contato, ou de ser puramente dipolar em certas frequências de confinamento. Não teríamos esta garantia se “desligássemos” a armadilha radialmente e deixássemos o condensado

expandir-se sobre o obstáculo. Computacionalmente, a vantagem seria a maior liberdade de escolha no tamanho da grade na qual o condensado é discretizado. Isso faz uma enorme diferença no tempo gasto do cálculo numérico.

Como não temos resultados analíticos para comparar com nossos resultados numéricos no caso de condensados confinados, desenvolvemos uma metodologia para a checagem dos resultados que se baseia na verificação do teorema virial, cálculos de energia e leis de conservação, convergência da solução, cálculo de velocidades e fase da função de onda, e cálculo da força de arrasto que o condensado exerce no obstáculo na sua passagem.

Um resultado será confiável se, por exemplo, quando um vórtice é criado, a força de arrasto “oscila” e os vetores de velocidade “giram” em torno dos vórtices assim como a fase dá um salto de $2\pi n$ no seu valor, com $n \geq 0$ inteiro. Outra verificação importante se dá quando o valor de entrada do potencial químico “bate” com o obtido após a determinação do estado fundamental. Além disso, verificamos se há contato do condensado com as “bordas” da grade, etc.

Feita a mudança, primeiramente checamos os resultados em condensados armadilhados onde há apenas o termo de interação de dois corpos. Começamos pelo condensado bidimensional, com interação de contato, preso a uma armadilha e atravessado por um obstáculo em baixa velocidade. O primeiro passo nesta simulação foi a obtenção do estado fundamental do condensado. Aliás, daqui para frente este será um procedimento padrão em todas as simulações. Encontramos o estado fundamental e, ao acionarmos o obstáculo móvel na simulação, obtivemos formação de vórtices [veja a Fig. (5.14)].

Checamos os resultados em todos os passos da evolução numérica e tivemos excelente acordo numérico. Além da conservação da massa estar em perfeito acordo, o teorema virial, Eq. (3.40), também foi satisfeito [veja a Fig. (5.15a)]. De forma coerente, a força de arrasto calculada de três formas diferentes também forneceu um excelente resultado [veja a Fig. (5.15b)].

Aumentamos a velocidade do obstáculo, no caso bidimensional, e obtivemos a formação de sólitons oblíquos escuros, além dos vórtices. Uma animação foi feita em cada caso e podem ser encontradas nos sítios [122] e [123].

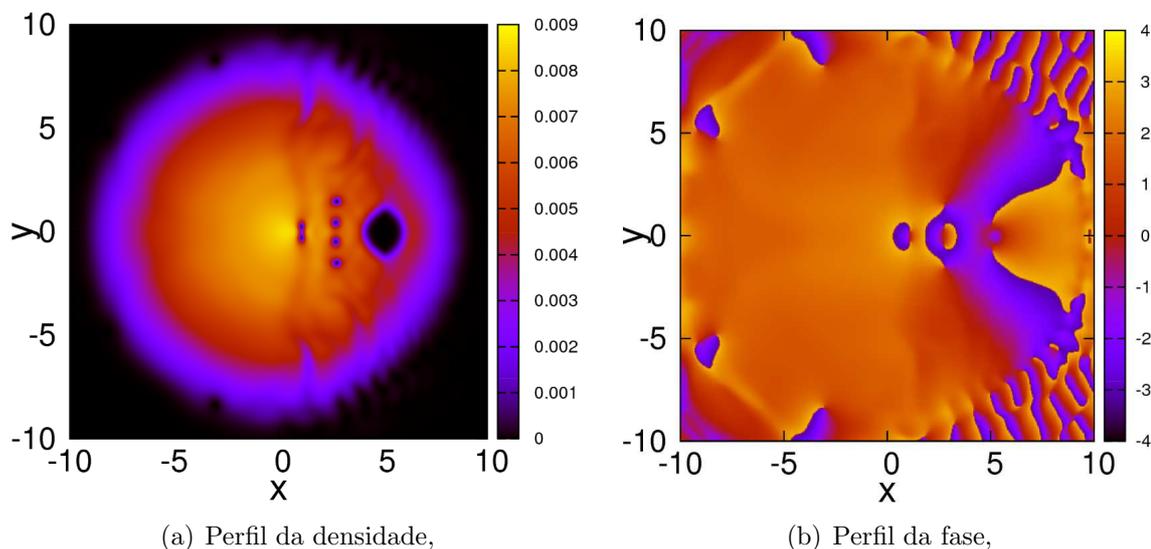
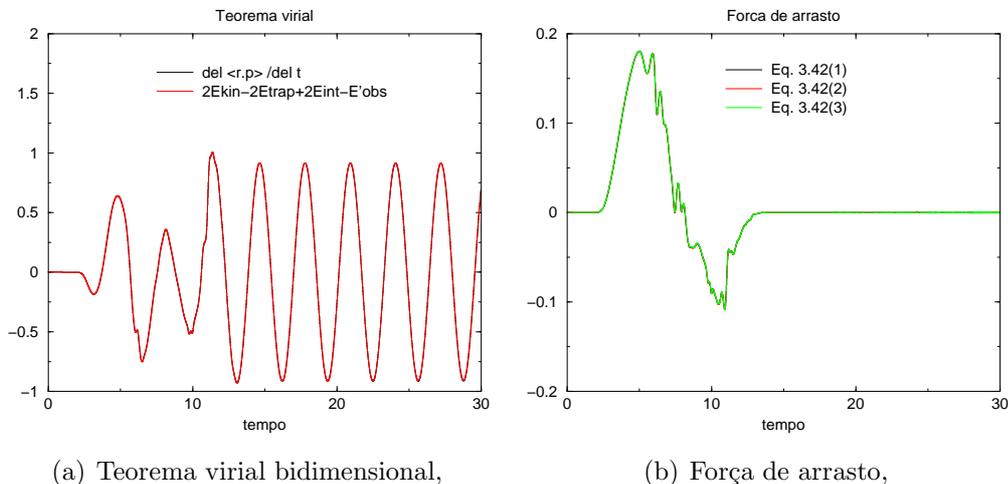


Figura 5.14: Evolução temporal do condensado bidimensional com interação de contato. Nessa evolução, um feixe de *laser* passa com velocidade subsônica constante (maior que a velocidade crítica v_c) por um condensado de ^{85}Rb confinado, em forma de “pizza”, a partir do estado inicial fundamental. De acordo com os perfis de densidade e de fase, observamos a formação de vórtices. Em estágios posteriores à passagem do obstáculo, eventualmente dois vórtices podem se aniquilar e formar um sóliton.

Estudamos o que acontece quando um feixe de *laser* passa sobre um condensado com apenas interação de contato, no caso tridimensional. Podemos ver na Fig. (5.16) que os sólitons oblíquos escuros aparecem, como os obtidos no estudo anterior [3]. Porém, nesse estudo não havia armadilha. Para obtermos resultados semelhantes aos observados em duas dimensões, a armadilha teve que ser configurada de modo a deixar o condensado em forma de “pizza”.

Na Fig. (5.17), fizemos o mesmo estudo em três dimensões com o obstáculo passando com uma velocidade subsônica, e também obtivemos uma ótima verificação dos resultados numéricos. Note que pudemos observar, ao redor dos vórtices, padrões típicos de fase e velocidade.

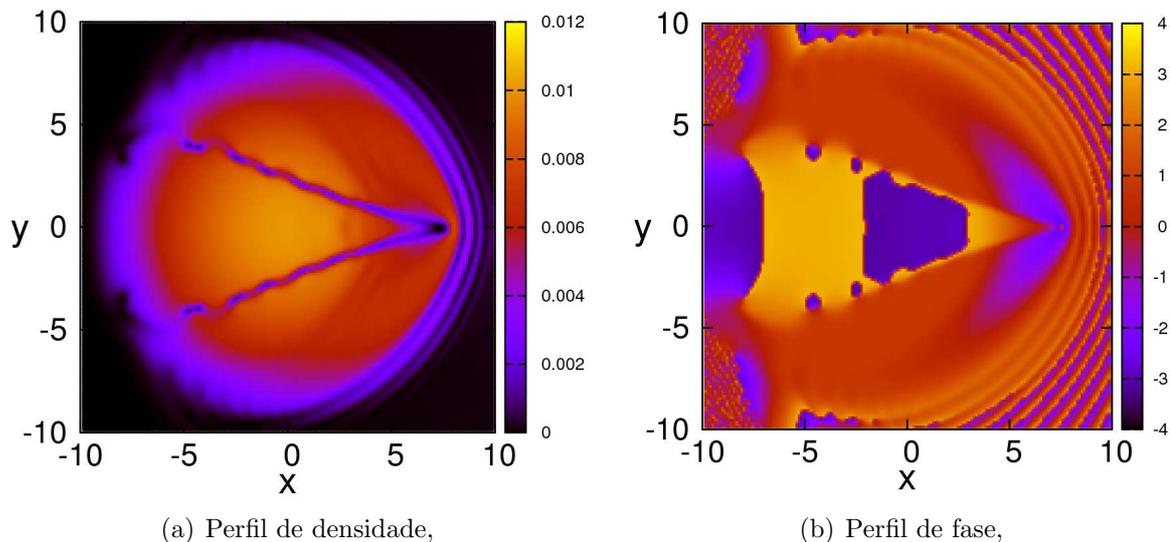
Um efeito notável na dinâmica dos vórtices acontece quando dois deles se aniquilam formando um sóliton! Esse resultado numérico ainda não foi observado experimentalmente.



(a) Teorema virial bidimensional,

(b) Força de arrasto,

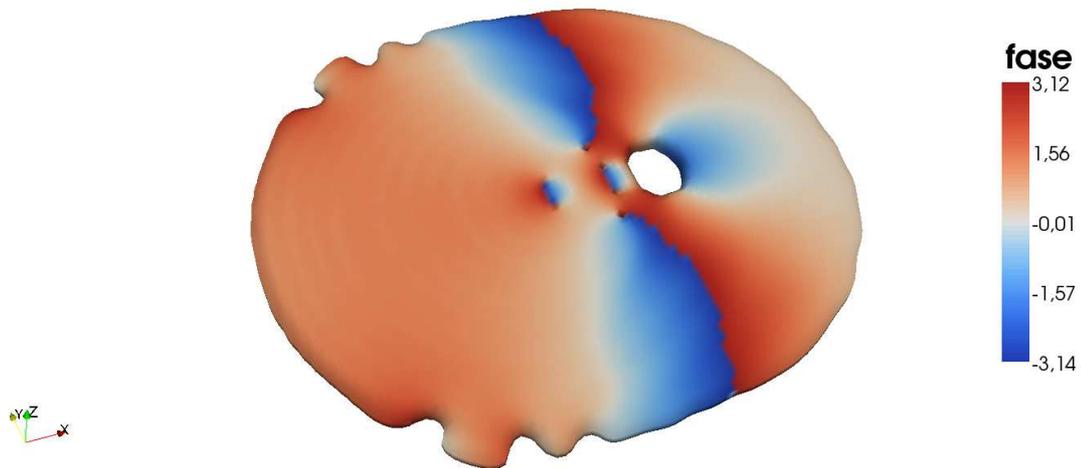
Figura 5.15: Checagem dos resultados numéricos pelo teorema virial e cálculo da força de arrasto da evolução do condensado com um potencial móvel mostrada na Fig. (5.14). A força de arrasto “oscila” com a formação de pares de vórtices. Um par de vórtices (nesse caso, um vórtice e um antivórtice) é gerado quando a velocidade do condensado nos arredores do obstáculo excede a velocidade crítica. Essa força pode se tornar negativa dependendo do tamanho do obstáculo em relação às dimensões do condensado.



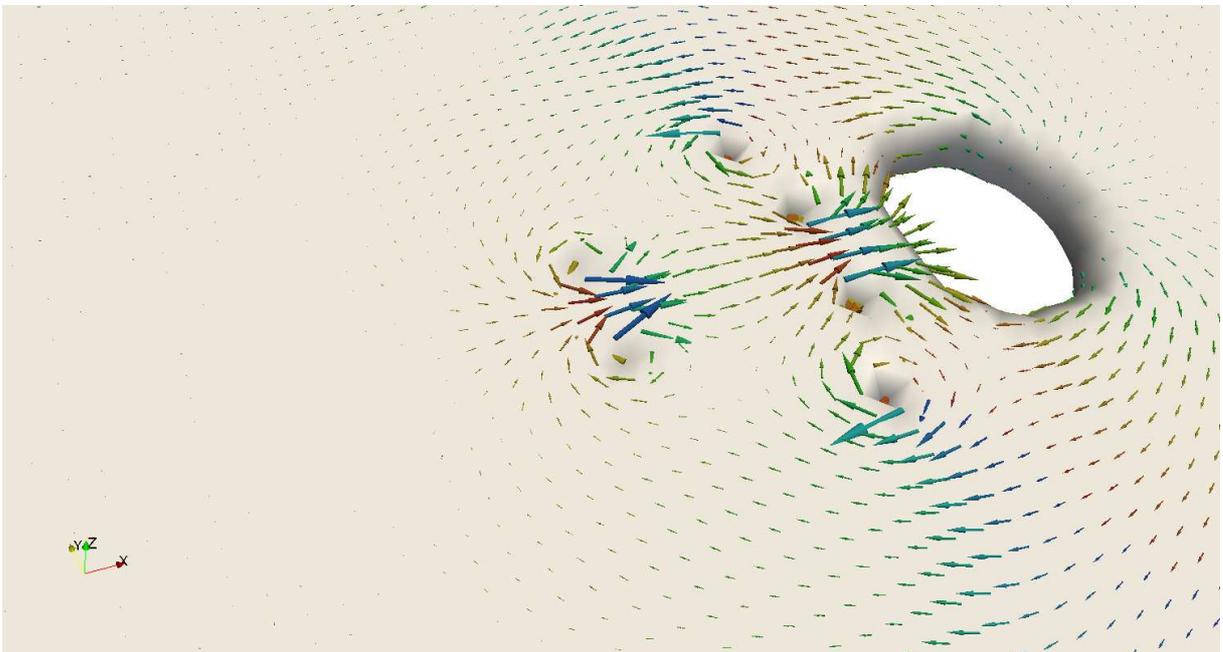
(a) Perfil de densidade,

(b) Perfil de fase,

Figura 5.16: Evolução temporal do condensado tridimensional com interação de contato. As figuras são projeções da densidade/fase do condensado no plano xy , com $z = 0$. Nessa evolução, um feixe de *laser* passa com velocidade supersônica constante por um condensado de ^{85}Rb confinado, em forma de “pizza”, a partir do estado inicial fundamental. De acordo com os perfis de densidade e de fase, observamos a formação de sólitons oblíquos escuros e seus decaimentos em vórtices. Em estágios posteriores à passagem do obstáculo, eventualmente dois vórtices podem se aniquilar e formar um sóliton.



(a) Padrão de fase na isodensidade,



(b) Padrão das velocidades (vetores) na isodensidade,

Figura 5.17: Evolução temporal do condensado tridimensional com interação de contato. Nessa evolução, um feixe de *laser* passa com velocidade subsônica constante (maior que a velocidade crítica v_c) por um condensado de ^{85}Rb confinado, em forma de “pizza”, a partir do estado inicial fundamental. De acordo com os padrões de fase e velocidades na isodensidade, observamos a formação de vórtices. Em estágios posteriores à passagem do obstáculo, eventualmente dois vórtices podem se aniquilar e formar um sólon.

5.3 Em condensados dipolares

Podemos simplificar o cálculo numérico se introduzirmos um parâmetro adimensional $D = md^2/\hbar^2 a_{ho}$, onde $a_{ho} = \sqrt{\hbar/m\omega_x}$ é o comprimento transversal do oscilador harmônico. A energia do dipolo E_D é calculada com

$$E_D = \frac{1}{2} \int \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' V_{dd}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') |\Psi(\mathbf{r}')|^2 |\Psi(\mathbf{r})|^2. \quad (5.7)$$

O estado fundamental é calculado evoluindo a equação não-linear (2.80) através do tempo imaginário com frequências da armadilha escolhidas de modo a deixar o condensado puramente dipolar, e com isso, o termo de interação de contato pode ser desprezado (o comprimento de espalhamento se reduz a zero).

O primeiro teste feito na tentativa de obtermos a evolução temporal do condensado dipolar foi a checagem da energia do dipolo para sabermos se o teorema da convolução foi aplicado corretamente. Segundo [111] o resultado teve bom acordo numérico.

Em seguida, conseguimos comparar o estado fundamental calculado numericamente com o da literatura. Para isso, adicionamos na equação (3.32) mais um potencial

$$U'(\mathbf{r}) = A \exp\left(-\frac{\rho^2}{2\rho_0^2}\right), \quad (5.8)$$

que experimentalmente corresponde a aplicação de um feixe de *laser* ao longo do eixo da armadilha, onde A é a amplitude da Gaussiana e ρ_0 é sua largura. Podemos notar na figura (5.18) que obtivemos os mesmos resultados utilizando métodos numéricos diferentes. Neste estudo, utilizamos $A = \hbar\omega_x$ e $\rho_0 = 0.2a_{ho}$, frequências 100 Hz nas direções x e y , e 1700 Hz na direção z [124], em um condensado com aproximadamente 104000 átomos, $D = 100.0$, $D = 181.2$ e obtivemos condensados estáveis puramente dipolares em excelente concordância com os resultados publicados em [124].

Testes exaustivos ao variarmos as frequências da armadilha e D também mostraram excelente acordo com os resultados publicados em [125]. Passamos a estudar a dinâmica desses condensados, e obtivemos o resultado mostrado na figura (5.19), onde vemos a

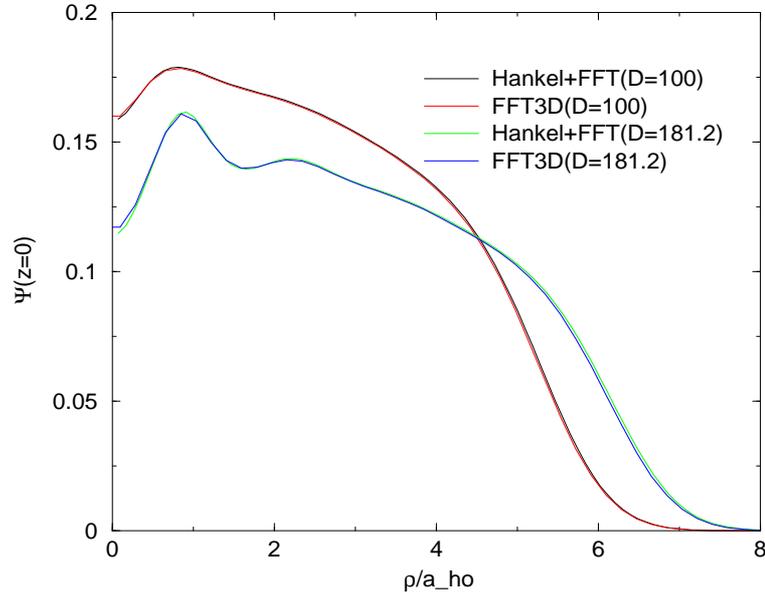


Figura 5.18: Estados fundamentais de condensados puramente dipolares de ^{52}Cr , com a adição do potencial $U'(\mathbf{r})$.

evolução temporal do condensado tridimensional ao “desligarmos” sua armadilha, levando-se em conta o potencial puramente dipolar (consideramos também o comprimento de espalhamento átomo-átomo igual a 7 vezes o raio de Bohr). Note que a figura é uma projeção da densidade do condensado no plano xy com $z = 0$. Utilizamos o teorema virial independente do tempo para checarmos os estados fundamentais, e o teorema virial dependente do tempo para checarmos a dinâmica dos condensados.

Por causa da diminuição do passo de tempo na evolução temporal do cálculo em condensados dipolares, o tempo de execução de cada “trabalho” tornou-se proibitivo (em média de duas semanas a um mês). Com isso, procuramos testar outros métodos para melhorar o desempenho, inclusive programação em paralelo.

Ao checarmos os resultados com a nossa metodologia, percebemos que houve falta de precisão na obtenção do estado fundamental, o que passou a inviabilizar a evolução temporal. Por esse motivo, mudamos o método de obtenção do estado fundamental baseados no trabalho de Yang [113], no qual é utilizado um método modificado dos gradientes conjugados. Além de ser muito preciso, é extremamente rápido se comparado aos métodos tradicionais.

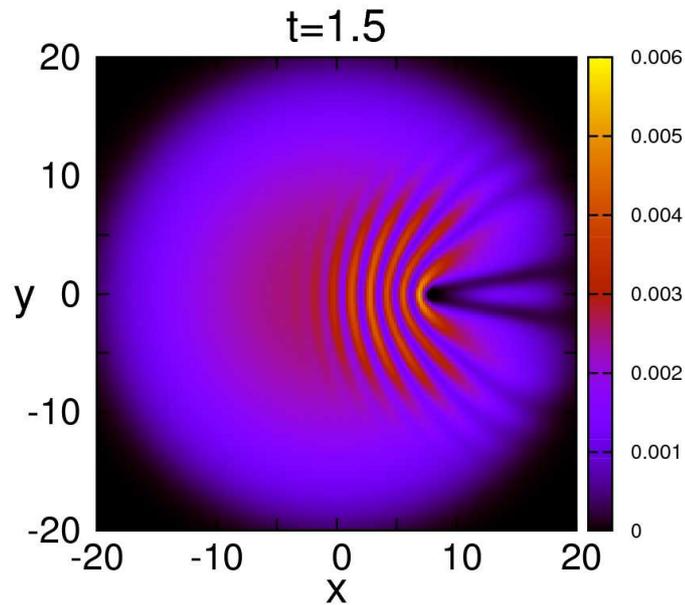
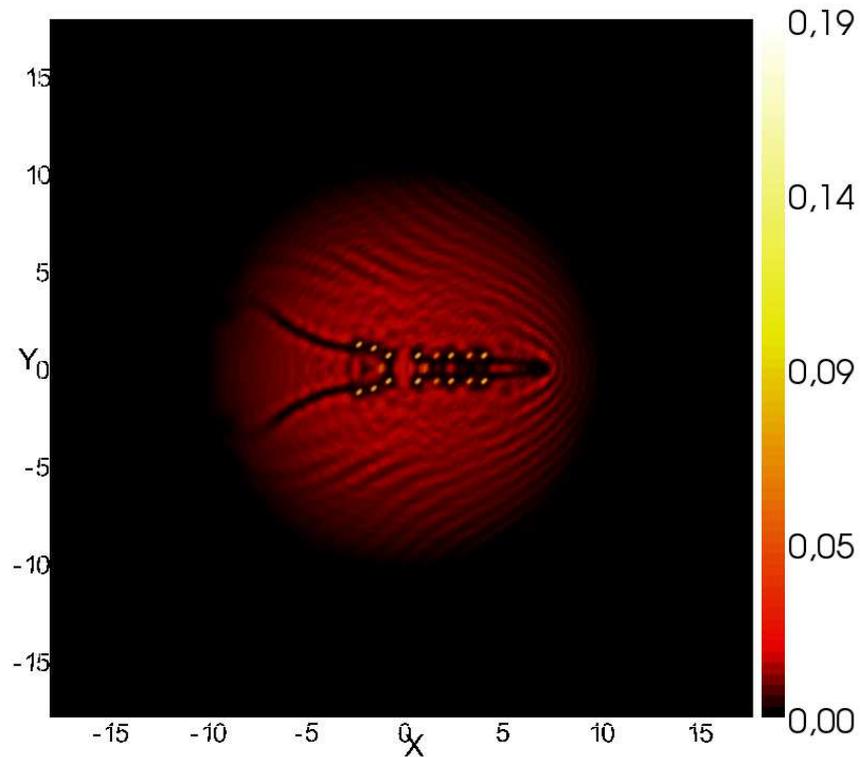
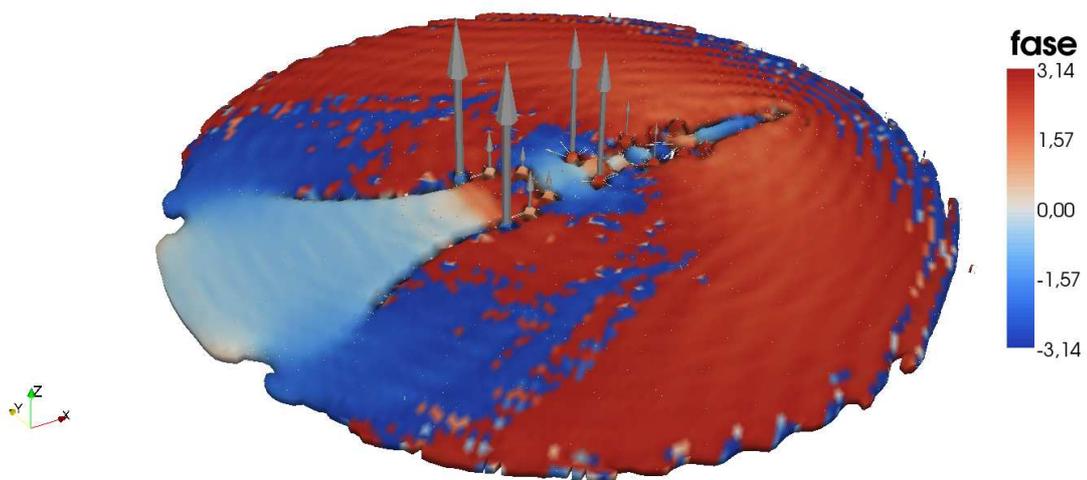


Figura 5.19: Evolução temporal do condensado tridimensional puramente dipolar. A figura é uma projeção da densidade do condensado no plano xy , com $z = 0$. Inicialmente, um condensado de ^{52}Cr está no estado fundamental sob a ação de um potencial harmônico que o deixa em forma de “pizza”. Com a retirada da armadilha, o condensado se expande e passa por um obstáculo impenetrável. Na evolução, observamos a formação de sólitons oblíquos escuros.

Passamos, então, a estudar o que acontece quando um feixe de *laser* passa sobre um condensado confinado puramente dipolar. Podemos ver nas Figs. (5.20a) e (5.20b), que a passagem do obstáculo pelo condensado forma estruturas desconhecidas. Entretanto, durante a evolução temporal numérica, os resultados ainda não puderam ser totalmente checados. Mesmo assim, tudo indica que descobrimos novas estruturas nestes condensados.



(a) Perfil da densidade,



(b) Padrões da fase e das velocidades (vetores) na isodensidade,

Figura 5.20: Evolução temporal do condensado tridimensional puramente dipolar. Nessa evolução, um feixe de *laser* passa com velocidade supersônica constante por um condensado de ^{52}Cr confinado, em forma de “pizza”, a partir do estado inicial fundamental. Observamos a formação de novas estruturas, provavelmente geradas por colapsos locais.

Capítulo 6

Conclusão

Nesta tese, verificamos a teoria da formação de choques dispersivos na propagação de feixes de luz intensos em sistemas ópticos fotorrefrativos por meio de cálculo numérico. Essa teoria é baseada nas modulações de Whitham na qual um choque dispersivo é descrito como uma onda modulada não-linear e periódica, e a lenta evolução ao longo do eixo de propagação é governada pela equação de modulação média.

Apesar da ausência da completa integrabilidade da equação que descreve a propagação de feixes de luz em meios fotorrefrativos, os principais parâmetros característicos de choques foram determinados por meio da aproximação desenvolvida em [31, 32, 33], e baseada no estudo de reduções das equações de Whitham para os regimes da onda realizados nas fronteiras do choque dispersivo. Em particular, as “velocidades” das bordas do choque dispersivo, assim como a amplitude do sóliton na borda detrás do choque, foram encontradas recentemente como funções do salto da intensidade através do choque. Então, comparamos estes resultados com simulações numéricas. O número de sólitons produzidos a partir de uma perturbação inicial finita foi determinado numericamente e comparado com o resultado analítico, também obtido recentemente, para distribuições iniciais que satisfazem a condição de onda simples.

A teoria analítica concordou muito bem com as nossas simulações numéricas enquanto não houve um ponto de vácuo no choque, ou seja, um ponto com densidade muito próxima a zero. O aparecimento de um ponto de vácuo gera a formação de uma singularidade na

distribuição do vetor de onda “transverso”, e essa drástica mudança no comportamento da onda não pode ser tratada pela aproximação desenvolvida. Porém, essa situação ocorre quando há entradas muito altas da intensidade de um feixe de luz em um meio de modo que, para propósitos práticos, a teoria desenvolvida fornece uma aproximação suficientemente precisa. Embora a teoria seja essencialmente unidimensional (isto é, com uma coordenada espacial transversa) ela pode dar uma explicação qualitativa de experimentos com outras geometrias, a qual é ilustrada pelos resultados de nossas simulações numéricas.

Nosso cálculo numérico também permitiu a verificação da teoria que descreve a formação de um padrão de difração da onda na propagação da luz em um meio não-linear fotorrefrativo com um fio refletor incorporado nesse meio. O feixe de luz está supostamente inclinado em relação ao fio, o qual cria um “fluxo de luz que passa por um obstáculo”, análogo aos experimentos realizados com condensados de Bose-Einstein, nos quais estudam o fluxo de superfluidos que passam por um obstáculo. Uma analogia entre a propagação de feixes de luz e a dinâmica de superfluidos sugere que o padrão de difração que calculamos numericamente, e verificamos analiticamente, poderá ser encontrado nos experimentos em meios ópticos.

Mostramos que o padrão de difração consiste em duas regiões separadas pelo “cone de Mach”. Na região externa ao cone de Mach, são geradas as conhecidas “ondas de navio”, enquanto que, dentro do cone de Mach, são localizados os choques dispersivos não-lineares, os quais se transformam em trens de sólitons oblíquos.

O caso mais simples, quando apenas um único sóliton é gerado, foi estudado detalhadamente. Os parâmetros principais do sóliton óptico oblíquo foram determinados numericamente e comparados com a recente teoria desenvolvida. Como a execução de experimentos em óptica aparentemente são mais simples do que a execução de experimentos com gases ultra frios, esperamos que nossas previsões possam ser verificadas experimentalmente em meios ópticos fotorrefrativos.

Ao estudarmos a expansão de um condensado de Bose-Einstein, que não está preso em uma armadilha, verificamos que ao passar por um obstáculo fixo, há formação de sólitons.

Porém, para que essa formação seja visível, o condensado teve que expandir-se por um longo tempo, tornando-se muito diluído, e isso inviabilizou esse método de estudo.

Passamos, então, a estudar condensados confinados e, ao invés de criarmos um fluxo do superfluido sobre um obstáculo, fizemos o contrário. Mantivemos o condensado parado sob a ação de uma armadilha, de modo a deixá-lo em forma de “pizza”, e passamos um obstáculo (feixe de *laser*) por ele a uma velocidade constante. Se o número de partículas do condensado fosse infinito, ou seja, se a região que o condensado ocupa fosse muito maior que o tamanho do obstáculo, teríamos o comportamento análogo a um fluxo de condensado sobre um obstáculo. Porém, nos atuais experimentos com condensados, o número de partículas é limitado a poucos milhões e as partículas são delimitadas por uma região com cerca de algumas dezenas de micrometros, insuficientes para uma perfeita analogia entre um obstáculo fixo e um móvel.

A passagem de um obstáculo móvel sobre um condensado confinado também promoveu a geração de sólitons e vórtices, assim como foi previsto nos meios ópticos. Pudemos calcular a força de arrasto de modo a entendermos melhor a dinâmica do sistema. Surpreendentemente, no fim deste trabalho constatamos que parte dessas previsões foram verificadas em um experimento com condensados de Bose-Einstein [126]! Previsões numéricas semelhantes também foram recentemente publicadas em [127] e [128].

No caso particular de condensados puramente dipolares, também em forma de “pizza”, não há nesta tese uma analogia com os meios ópticos por causa da adição do termo de interação dipolar, e da ausência do termo de interação de dois corpos. Ao procurarmos a formação de sólitons com a passagem de um obstáculo móvel, encontramos novas estruturas e não pudemos ter certeza, até o momento, se há ou não a formação de sólitons e vórtices nesse tipo de condensado confinado. Porém, se “desligarmos” a armadilha, o condensado dipolar se expande; e, ao colidir-se com um obstáculo fixo, há formação de sólitons oblíquos escuros.

6.1 Perspectivas e planos futuros

Como perspectivas e planos futuros contamos:

-
- Antes de tudo, buscaremos investigar quais são as novas estruturas encontradas em condensados puramente dipolares. Para nos certificarmos de que essas novas estruturas não são artefatos numéricos, precisamos modificar a grade e/ou o passo de tempo no cálculo. Isso só será possível se paralelizarmos o código atual. Poderemos nos beneficiar também de técnicas recentes de utilização de placas desenvolvidas para a computação de alto desempenho, as quais são conhecidas como placas *NVIDIA*. Com o advento da arquitetura *CUDA* de computação paralela, poderemos ter ganhos significativos na performance da computação;
 - Pretendemos realizar o experimento da difração não-linear de feixes de luz que se propagam em meios fotorrefrativos com um fio refletor incorporado nesse meio;
 - E pretendemos estudar a passagem do obstáculo móvel ou “balístico” sobre um condensado com diferentes geometrias, variando a velocidade do obstáculo ao mesmo tempo que passa pelo condensado.

Referências Bibliográficas

- [1] W. J. Tomlinson, R. J. Hawkins, A. M. Weiner, J. P. Heritage, and R. N. Thurston, Dark optical solitons with finite-width background pulses, *J. Opt. Soc. Am. B* **6**(3), 329–334 (March 1989).
- [2] G. A. El, A. Gammal, E. G. Khamis, R. A. Kraenkel, and A. M. Kamchatnov, Theory of optical dispersive shock waves in photorefractive media, *Phys. Rev. A* **76**(5), 053813 (Nov 2007).
- [3] E. G. Khamis, A. Gammal, G. A. El, Y. G. Gladush, and A. M. Kamchatnov, Nonlinear diffraction of light beams propagating in photorefractive media with embedded reflecting wire, *Phys. Rev. A* **78**(1), 013829 (Jul 2008).
- [4] J. S. Russell, Report of the 14th Meeting of the British Association for the Advancement of Science, Report on Waves , pp. 311–390 (1844).
- [5] Y. S. Kivshar and G. Agrawal, *Optical solitons: From Fibers to Photonic Crystals*, Academic Press, 1st edition edition, March 2003.
- [6] W. Krolikowski, B. Luther-Davies, and C. Denz, Photorefractive solitons, *IEEE J. Quantum Electronics* **39**(1), 3–12 (Jan 2003).
- [7] G. B. Whitham, *Linear and Nonlinear Waves*, Wiley-Interscience, Aug 1974.
- [8] T. B. Benjamin and M. J. Lighthill, On Cnoidal Waves and Bores, *Proc. Roy. Soc. London A* **224**(1159), 448–460 (Jul 1954).
- [9] M. Khan, S. Ghosh, S. Sarkar, and M. R. Gupta, Ion acoustic shock waves in a dusty plasma, *Phys. Scr.* **2005**(T116), 53–56 (2005).
- [10] M. A. Hoefer, M. J. Ablowitz, I. Coddington, E. A. Cornell, P. Engels, and V. Schweikhard, Dispersive and classical shock waves in Bose-Einstein condensates and gas dynamics, *Phys. Rev. A* **74**(2), 023623 (Aug 2006).
- [11] A. M. Kamchatnov, New approach to periodic solutions of integrable equations and nonlinear theory of modulational instability, *Phys. Rep.* **286**(4), 199–270 (Jul 1997).
- [12] V. Vysloukh, V. Kutuzov, V. Petnikova, and V. Shuvalov, Formation of spatial solitons and spatial shock waves in photorefractive crystals, *Journal of Experimental and Theoretical Physics* **84**, 388–394 (1997).

-
- [13] Z. Chen, M. Mitchell, and M. Segev, Steady-state photorefractive soliton-induced Y-junction waveguides and high-order dark spatial solitons, *Opt. Lett.* **21**(10), 716–718 (1996).
- [14] Z. Chen, M. Segev, S. R. Singh, T. H. Coskun, and D. N. Christodoulides, Sequential formation of multiple dark photorefractive spatial solitons: experiments and theory, *J. Opt. Soc. Am. B* **14**(6), 1407–1417 (1997).
- [15] G. Couton, H. Maillotte, and M. Chauvet, Self-formation of multiple spatial photovoltaic solitons, *Journal of Optics B: Quantum and Semiclassical Optics* **6**(5), S223 (2004).
- [16] V. A. Brazhnyi and A. M. Kamchatnov, Creation and evolution of trains of dark solitons in a trapped one-dimensional Bose-Einstein condensate, *Phys. Rev. A* **68**(4), 043614 (Oct 2003).
- [17] W. Wan, S. Jia, and J. W. Fleischer, Dispersive superfluid-like shock waves in nonlinear optics, *Nat. Phys.* **3**(1), 46–51 (Jan 2007).
- [18] G. Rowlands and E. Infeld, *Nonlinear Waves, Solitons, and Chaos*, Cambridge University Press, Cambridge, England, 2nd edition, 2000.
- [19] A. M. Kamchatnov, *Nonlinear Periodic Waves and Their Modulations—An Introductory Course*, World Scientific, Singapore, 2000.
- [20] M. G. Forest and J. Lee, *Oscillation Theory, Computation, and Methods of Compensated Compactness*, volume 2, pages 35–69, Springer, New York, 1986.
- [21] M. V. Pavlov, Nonlinear Schrödinger equation and the bogolyubov-whitham method of averaging, *Theoretical and Mathematical Physics* **71**, 584–588 (1987).
- [22] A. V. Gurevich and A. L. Krylov, Nondissipative shock waves in media with positive dispersion, *ZhETF* **92**(5), 1684–1699 (1987).
- [23] G. A. El, V. V. Geogjaev, A. V. Gurevich, and A. L. Krylov, Decay of an initial discontinuity in the defocusing NLS hydrodynamics, *Physica D: Nonlinear Phenomena* **87**(1-4), 186–192 (1995), Proceedings of the Conference on The Nonlinear Schrodinger Equation.
- [24] G. A. El and A. L. Krylov, General solution of the Cauchy problem for the defocusing NLS equation in the Whitham limit, *Physics Letters A* **203**(2-3), 77–82 (1995).
- [25] S. Jin, C. D. Levermore, and D. W. McLaughlin, The semiclassical limit of the defocusing NLS hierarchy, *Comm. Pure Appl. Math.* **52**(5), 613–654 (May 1999).
- [26] F. R. Tian and J. Ye, On the Whitham equations for the semiclassical limit of the defocusing nonlinear Schrödinger equation, *Comm. Pure Appl. Math.* **52**(6), 655–692 (Jun 1999).

-
- [27] A. M. Kamchatnov, R. A. Kraenkel, and B. A. Umarov, Asymptotic soliton train solutions of the defocusing nonlinear Schrödinger equation, *Phys. Rev. E* **66**(3), 036609 (Sep 2002).
- [28] G. Biondini and Y. Kodama, On the Whitham Equations for the Defocusing Nonlinear Schrodinger Equation with Step Initial Data, *Journal of Nonlinear Science* **16**, 435–481 (2006).
- [29] Y. Kodama, The Whitham Equations for Optical Communications: Mathematical Theory of NRZ, *SIAM Journal on Applied Mathematics* **59**(6), 2162–2192 (1999).
- [30] A. M. Kamchatnov, A. Gammal, and R. A. Kraenkel, Dissipationless shock waves in Bose-Einstein condensates with repulsive interaction between atoms, *Phys. Rev. A* **69**(6), 063605 (Jun 2004).
- [31] G. A. El, Resolution of a shock in hyperbolic systems modified by weak dispersion, *Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science* **15**(3), 037103 (2005).
- [32] A. V. Tyurina and G. A. El, Hydrodynamics of modulated finite-amplitude waves in dispersive media, *Journal of Experimental and Theoretical Physics* **88**(3), 615–625 (March 1999).
- [33] G. El, V. Khodorovskii, and A. Tyurina, Undular bore transition in bi-directional conservative wave dynamics, *Physica D: Nonlinear Phenomena* **206**(3-4), 232–251 (2005).
- [34] R. W. Boyd, *Nonlinear Optics*, Academic Press, Boston, 1992.
- [35] R. McLeod, K. Wagner, and S. Blair, (3+1)-dimensional optical soliton dragging logic, *Phys. Rev. A* **52**(4), 3254–3278 (Oct 1995).
- [36] A. C. Newell and J. V. Moloney, *Nonlinear Optics*, Addison-Wesley, Redwood City, California, 1992.
- [37] G. P. Agrawal, *Nonlinear Fiber Optics*, Academic Press, San Diego, 3rd edition, 2001.
- [38] Y. Kodama and A. Hasegawa, Nonlinear pulse propagation in a monomode dielectric guide, *Quantum Electronics, IEEE Journal of* **23**(5), 510–524 (May 1987).
- [39] N. V. Kukhtarev, V. B. Markov, S. G. Odulov, M. S. Soskin, and V. L. Vinetskii, Holographic storage in electrooptic crystals - i. steady state, *Ferroelectrics* **22**(3-4), 949–960 (1979).
- [40] M. Lax, W. H. Louisell, and W. B. McKnight, From Maxwell to paraxial wave optics, *Phys. Rev. A* **11**(4), 1365–1370 (Apr 1975).
- [41] B. E. A. Saleh and M. C. Teich, *Fundamentals of Photonics*, Wiley, New York, 2007.

- [42] Y. S. Kivshar and B. Luther-Davies, Dark optical solitons: physics and applications, *Phys. Rep.* **298**, 81–197 (May 1998).
- [43] G. C. Valley, M. Segev, B. Crosignani, A. Yariv, M. M. Fejer, and M. C. Bashaw, Dark and bright photovoltaic spatial solitons, *Phys. Rev. A* **50**(6), R4457–R4460 (Dec 1994).
- [44] D. N. Christodoulides and M. I. Carvalho, Bright, dark, and gray spatial soliton states in photorefractive media, *J. Opt. Soc. Am. B* **12**(9), 1628–1633 (1995).
- [45] S. Gatz and J. Herrmann, Propagation of optical beams and the properties of two-dimensional spatial solitons in media with a local saturable nonlinear refractive index, *J. Opt. Soc. Am. B* **14**(7), 1795–1806 (1997).
- [46] G. Duree, M. Morin, G. Salamo, M. Segev, B. Crosignani, P. Di Porto, E. Sharp, and A. Yariv, Dark Photorefractive Spatial Solitons and Photorefractive Vortex Solitons, *Phys. Rev. Lett.* **74**(11), 1978–1981 (Mar 1995).
- [47] J. J. Stoker, *Water Waves: The Mathematical Theory With Applications*, Interscience, New York, 1957.
- [48] L. Debnath, *Nonlinear Partial Differential Equations for Scientists and Engineers*, Birkhäuser, Boston, Mass, USA, 2nd edition, 2005.
- [49] L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Fluid Mechanics*, Pergamon, Oxford, 1987.
- [50] A. V. Gurevich and A. P. Meshcherkin, Expanding self-similar discontinuities and shock waves in dispersive hydrodynamics, *Sov. Phys. JETP* **60**, 732–740 (1984).
- [51] A. V. Gurevich and L. P. Pitaevskii, Nonstationary structure of a collisionless shock wave, *Sov. Phys. JETP* **38**, 291–297 (1974).
- [52] L. P. Pitaevskii and S. Stringari, *Bose-Einstein Condensation*, Cambridge University Press, Cambridge, 2003.
- [53] R. Z. Sagdeev, *Collective processes and shock waves in rarefied plasma*, volume 5 of *Problems of Plasma Theory*, Atomizdat, Moscow, 1964.
- [54] G. B. Whitham, Non-Linear Dispersive Waves, *Proc. Roy. Soc. London A* **283**(1393), 238–261 (Jan 1965).
- [55] A. V. Gurevich and L. P. Pitaevskii, Nonstationary structure of a collisionless shock wave, *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **65**(2), 590–604 (Aug 1973).
- [56] H. Flaschka, M. G. Forest, and D. W. McLaughlin, Multiphase averaging and the inverse spectral solution of the Korteweg-de Vries equation, *Comm. Pure Appl. Math.* **33**(6), 739–784 (1980).
- [57] B. A. Dubrovin and S. P. Novikov, Hydrodynamics of weakly deformed soliton lattices. Differential geometry and Hamiltonian theory, *Russian Math. Surveys* **44**(6), 35–124 (1989).

- [58] S. P. Tsarëv, The geometry of Hamiltonian systems of hydrodynamic type. The generalized hodograph method, *Mathematics of the USSR-Izvestiya* **37**(2), 397–419 (1991).
- [59] A. V. Gurevich, A. L. Krylov, and G. A. El, Evolution of a Riemann wave in dispersive hydrodynamics, *Sov. Phys. JETP* **74**, 957–962 (1992).
- [60] M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthews, C. E. Wieman, and E. A. Cornell, Observation of Bose-Einstein Condensation in a Dilute Atomic Vapor, *Science* **269**(5221), 198–201 (1995).
- [61] 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**(22), 3969–3973 (1995).
- [62] C. C. Bradley, C. A. Sackett, J. J. Tollett, and R. G. Hulet, Evidence of Bose-Einstein Condensation in an Atomic Gas with Attractive Interactions, *Phys. Rev. Lett.* **75**(9), 1687–1690 (1995).
- [63] B. Damski, Formation of shock waves in a Bose-Einstein condensate, *Phys. Rev. A* **69**(4), 043610 (Apr 2004).
- [64] T. P. Simula, P. Engels, I. Coddington, V. Schweikhard, E. A. Cornell, and R. J. Ballagh, Observations on Sound Propagation in Rapidly Rotating Bose-Einstein Condensates, *Phys. Rev. Lett.* **94**(8), 080404 (Mar 2005).
- [65] P. Engels and C. Atherton, Stationary and Nonstationary Fluid Flow of a Bose-Einstein Condensate Through a Penetrable Barrier, *Phys. Rev. Lett.* **99**(16), 160405 (Oct 2007).
- [66] N. Ghofraniha, C. Conti, G. Ruocco, and S. Trillo, Shocks in Nonlocal Media, *Phys. Rev. Lett.* **99**(4), 043903 (Jul 2007).
- [67] C. Barsi, W. Wan, C. Sun, and J. W. Fleischer, Dispersive shock waves with nonlocal nonlinearity, *Opt. Lett.* **32**(20), 2930–2932 (2007).
- [68] S. Jia, W. Wan, and J. W. Fleischer, Dispersive Shock Waves in Nonlinear Arrays, *Phys. Rev. Lett.* **99**(22), 223901 (Nov 2007).
- [69] V. I. Karpman, *Nonlinear Waves in Dispersive Media*, Nauka, Moscow, 1973.
- [70] A. V. Gurevich, A. L. Krylov, V. V. Khodorovsky, and G. A. El, Supersonic flow past bodies in dispersive hydrodynamics, *Journal of Experimental and Theoretical Physics* **81**, 87–96 (1995).
- [71] A. V. Gurevich, A. L. Krylov, V. V. Khodorovsky, and G. A. El, Supersonic flow past finite-length bodies in dispersive hydrodynamics, *Journal of Experimental and Theoretical Physics* **82**, 709–718 (1996).

- [72] G. El and A. Kamchatnov, Spatial dispersive shock waves generated in supersonic flow of Bose-Einstein condensate past slender body, *Physics Letters A* **350**(3-4), 192–196 (2006).
- [73] G. El and A. Kamchatnov, Erratum to: "Spatial dispersive shock waves generated in supersonic flow of Bose-Einstein condensate past slender body"[*Phys. Lett. A* 350 (2006) 192], *Physics Letters A* **352**(6), 554–555 (2006).
- [74] G. A. El, A. Gammal, and A. M. Kamchatnov, Oblique Dark Solitons in Supersonic Flow of a Bose-Einstein Condensate, *Phys. Rev. Lett.* **97**(18), 180405 (Nov 2006).
- [75] A. M. Kamchatnov and L. P. Pitaevskii, Stabilization of Solitons Generated by a Supersonic Flow of Bose-Einstein Condensate Past an Obstacle, *Phys. Rev. Lett.* **100**(16), 160402 (Apr 2008).
- [76] I. Carusotto, S. X. Hu, L. A. Collins, and A. Smerzi, Bogoliubov-Čerenkov Radiation in a Bose-Einstein Condensate Flowing against an Obstacle, *Phys. Rev. Lett.* **97**(26), 260403 (Dec 2006).
- [77] Y. G. Gladush, G. A. El, A. Gammal, and A. M. Kamchatnov, Radiation of linear waves in the stationary flow of a Bose-Einstein condensate past an obstacle, *Phys. Rev. A* **75**(3), 033619 (Mar 2007).
- [78] Y. Gladush and A. Kamchatnov, Generation of linear waves in Bose-Einstein condensate flow past an obstacle, *Journal of Experimental and Theoretical Physics* **105**, 520–525 (2007).
- [79] G. A. Swartzlander and C. T. Law, Optical vortex solitons observed in Kerr nonlinear media, *Phys. Rev. Lett.* **69**(17), 2503–2506 (Oct 1992).
- [80] O. Penrose and L. Onsager, Bose-Einstein Condensation and Liquid Helium, *Phys. Rev.* **104**(3), 576–584 (Nov 1956).
- [81] A. Griffin, A Brief History of Our Understanding of BEC: From Bose to Beliaev, arxiv:cond-mat/9901123 (1999).
- [82] P. E. Sokol, *Bose-Einstein Condensation*, page 51, Cambridge University Press, Cambridge, 1995.
- [83] C. C. Bradley, C. A. Sackett, and R. G. Hulet, Bose-Einstein Condensation of Lithium: Observation of Limited Condensate Number, *Phys. Rev. Lett.* **78**(6), 985–989 (1997).
- [84] 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**(18), 3811–3814 (1998).
- [85] S. L. Cornish, N. R. Claussen, J. L. Roberts, E. A. Cornell, and C. E. Wieman, Stable ^{85}Rb Bose-Einstein Condensates with Widely Tunable Interactions, *Phys. Rev. Lett.* **85**(9), 1795–1798 (2000).

- [86] E. A. Donley, N. R. Claussen, S. L. Cornish, J. L. Roberts, E. A. Cornell, and C. E. Wieman, Dynamics of collapsing and exploding Bose–Einstein condensates, *Nature* **412**, 195–299 (2001).
- [87] J. L. Roberts, N. R. Claussen, S. L. Cornish, E. A. Donley, E. A. Cornell, and C. E. Wieman, Controlled Collapse of a Bose-Einstein Condensate, *Phys. Rev. Lett.* **86**(19), 4211–4214 (2001).
- [88] 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**(5516), 461–464 (2001).
- [89] F. P. D. Santos, J. Léonard, J. Wang, C. J. Barrelet, F. Perales, E. Rasel, C. S. Unnikrishnan, M. Leduc, and C. Cohen-Tannoudji, Bose-Einstein Condensation of Metastable Helium, *Phys. Rev. Lett.* **86**(16), 3459–3462 (2001).
- [90] F. Dalfovo, S. Giorgini, L. P. Pitaevskii, and S. Stringari, Theory of Bose-Einstein condensation in trapped gases, *Rev. Mod. Phys.* **71**(3), 463–512 (1999).
- [91] R. Fitzgerald, An Optical Spoon Stirs Up Vortices in a Bose–Einstein Condensate, *Phys. Today* **53**(8), 19–21 (August 2000).
- [92] V. M. Pérez-García, H. Michinel, and H. Herrero, Bose-Einstein solitons in highly asymmetric traps, *Phys. Rev. A* **57**(5), 3837–3842 (May 1998).
- [93] A. Gammal, T. Frederico, and L. Tomio, Critical number of atoms for attractive Bose-Einstein condensates with cylindrically symmetrical traps, *Phys. Rev. A* **64**(5), 055602 (Oct 2001).
- [94] K. E. Strecker, G. B. Partridge, A. G. Truscott, and R. G. Hulet, Formation and propagation of matter-wave soliton trains, *Nature (London)* **417**(6885), 150–153 (May 2002).
- [95] 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**(5571), 1290–1293 (May 2002).
- [96] P. G. Drazin and R. S. Johnson, *Solitons: an introduction*, Cambridge University Press, 1989.
- [97] A. M. Kamchatnov, A. Gammal, F. K. Abdullaev, and R. A. Kraenkel, Formation of soliton trains in Bose-Einstein condensates as a nonlinear Fresnel diffraction of matter waves, *Phys. Lett. A* **319**(3-4), 406–412 (2003).
- [98] L. D. Carr and J. Brand, Spontaneous Soliton Formation and Modulational Instability in Bose-Einstein Condensates, *Phys. Rev. Lett.* **92**(4), 040401 (Jan 2004).
- [99] L. D. Carr and J. Brand, Pulsed atomic soliton laser, *Phys. Rev. A* **70**(3), 033607 (Sep 2004).

- [100] C. Cohen-Tannoudji and C. Robilliard, Wave functions, relative phase and interference for atomic Bose-Einstein condensates, *Comptes Rendus de l'Academie des Sciences Series IV Physics* **2**(3), 445–477 (April 2001).
- [101] C. Cohen-Tannoudji, *Leçons du Collège de France*, acessado em 03/11/2010, <http://www.phys.ens.fr/cours/college-de-france/1998-99/3-11-98/3-11-98.pdf>.
- [102] C. Cohen-Tannoudji, *Leçons du Collège de France*, acessado em 03/11/2010, <http://www.phys.ens.fr/cours/college-de-france/1998-99/8-12-98/8-12-98.pdf>.
- [103] J. Stuhler, A. Griesmaier, T. Koch, M. Fattori, T. Pfau, S. Giovanazzi, P. Pedri, and L. Santos, Observation of Dipole-Dipole Interaction in a Degenerate Quantum Gas, *Phys. Rev. Lett.* **95**(15), 150406 (Oct 2005).
- [104] T. Koch, T. Lahaye, J. Metz, B. Fröhlich, A. Griesmaier, and T. Pfau, Stabilization of a purely dipolar quantum gas against collapse, *Nat. Phys.* **4**(3), 218–222 (2008).
- [105] M. Abad, M. Guilleumas, R. Mayol, M. Pi, and D. M. Jezek, Vortices in Bose-Einstein condensates with dominant dipolar interactions, *Phys. Rev. A* **79**(6), 063622 (Jun 2009).
- [106] P. L. DeVries, *A First Course in Computational Physics*, John Wiley & Sons, Inc, New York, NY, USA, 1st edition, Aug 1993.
- [107] L. Yu, M. Huang, M. Chen, W. Chen, W. Huang, and Z. Zhu, Quasi-discrete Hankel transform, *Optics Letters* **23**(6), 409–411 (1998).
- [108] V. P. de Barros, *Perturbações temporais em condensados de Bose-Einstein diluídos e vórtice em condensados densos*, PhD thesis, Universidade de São Paulo, 2007.
- [109] K. Góral and L. Santos, Ground state and elementary excitations of single and binary Bose-Einstein condensates of trapped dipolar gases, *Phys. Rev. A* **66**(2), 023613 (Aug 2002).
- [110] Y. Susuki and K. Varga, *Stochastic Variational Approach to Quantum-Mechanical Few-Body Problems*, Springer Press, Cambridge, 1st edition, 1996.
- [111] S. Ronen, D. C. E. Bortolotti, and J. L. Bohn, Bogoliubov modes of a dipolar condensate in a cylindrical trap, *Phys. Rev. A* **74**(1), 013623 (Jul 2006).
- [112] J. Shewchuk, An Introduction to the Conjugate Gradient Method Without the Agonizing Pain, Technical Report CMU-CS-94-125, Carnegie Mellon University, <http://www.cs.cmu.edu/~quake-papers/painless-conjugate-gradient.pdf>, August 1994.
- [113] J. Yang, Newton-conjugate-gradient methods for solitary wave computations, *Journal of Computational Physics* **228**(18), 7007–7024 (2009).
- [114] G. A. El, R. H. J. Grimshaw, and N. F. Smyth, Unsteady undular bores in fully nonlinear shallow-water theory, *Physics of Fluids* **18**(2), 027104 (2006).

- [115] G. El, R. Grimshaw, and N. Smyth, Asymptotic description of solitary wave trains in fully nonlinear shallow-water theory, *Physica D: Nonlinear Phenomena* **237**(19), 2423–2435 (2008).
- [116] I. M. Khalatnikov, *An Introduction to the Theory of Superfluidity*, Perseus Publishing, Cambridge, 2000.
- [117] R. P. Feynman, *Progress in Low Temperature Physics*, volume 1, page 17, North-Holland, Amsterdam, 1957.
- [118] C. Raman, M. Köhl, R. Onofrio, D. S. Durfee, C. E. Kuklewicz, Z. Hadzibabic, and W. Ketterle, Evidence for a Critical Velocity in a Bose-Einstein Condensed Gas, *Phys. Rev. Lett.* **83**(13), 2502–2505 (Sep 1999).
- [119] R. Onofrio, C. Raman, J. M. Vogels, J. R. Abo-Shaeer, A. P. Chikkatur, and W. Ketterle, Observation of Superfluid Flow in a Bose-Einstein Condensed Gas, *Phys. Rev. Lett.* **85**(11), 2228–2231 (Sep 2000).
- [120] S. Inouye, S. Gupta, T. Rosenband, A. P. Chikkatur, A. Görlitz, T. L. Gustavson, A. E. Leanhardt, D. E. Pritchard, and W. Ketterle, Observation of Vortex Phase Singularities in Bose-Einstein Condensates, *Phys. Rev. Lett.* **87**(8), 080402 (Aug 2001).
- [121] T. Winiecki, J. F. McCann, and C. S. Adams, Pressure Drag in Linear and Nonlinear Quantum Fluids, *Phys. Rev. Lett.* **82**(26), 5186–5189 (Jun 1999).
- [122] E. G. Khamis and A. Gammal, Trapped condensates traversed by a subsonic and supersonic Gaussian obstacle, presented in 18th Laser Physics Workshop, Barcelona, http://www.fep.if.usp.br/~gammal/agammal_files/talks/vortice.gif, 2009.
- [123] E. G. Khamis and A. Gammal, Trapped condensates traversed by a subsonic and supersonic Gaussian obstacle, presented in 18th Laser Physics Workshop, Barcelona, http://www.fep.if.usp.br/~gammal/agammal_files/talks/soliton.gif, 2009.
- [124] R. M. Wilson, S. Ronen, J. L. Bohn, and H. Pu, Manifestations of the Roton Mode in Dipolar Bose-Einstein Condensates, *Phys. Rev. Lett.* **100**(24), 245302 (Jun 2008).
- [125] S. Ronen, D. C. E. Bortolotti, and J. L. Bohn, Radial and Angular Rotons in Trapped Dipolar Gases, *Phys. Rev. Lett.* **98**(3), 030406 (Jan 2007).
- [126] T. W. Neely, E. C. Samson, A. S. Bradley, M. J. Davis, and B. P. Anderson, Observation of Vortex Dipoles in an Oblate Bose-Einstein Condensate, *Phys. Rev. Lett.* **104**(16), 160401 (Apr 2010).
- [127] K. Fujimoto and M. Tsubota, Dynamics of Vortices and Solitons in a Bose-Einstein Condensate by an Oscillating Potential, [arxiv:cond-mat/1006.2922](https://arxiv.org/abs/cond-mat/1006.2922) (2010).
- [128] K. Fujimoto and M. Tsubota, Synergy Dynamics of Vortices and Solitons in Atomic Bose-Einstein Condensate Excited by an Oscillating Potential, [arxiv:cond-mat/1007.3063](https://arxiv.org/abs/cond-mat/1007.3063) (2010).