UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE FÍSICA

**Ondas de choque em condensados de Bose-Einstein e
espalhamento inelástico de átomos em um potencial de
dois poços**

Eder Santana Annibale

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. Marcelo Martinelli (IFUSP)

Prof. Dr. Marcelo Takeshi Yamashita (IFT/UNESP)

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

São Paulo

2011

FICHA CATALOGRÁFICA

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

Annibale, Eder Santana

Ondas de choque em condensados de Bose-Einstein e
espalhamento inelástico de átomos em um potencial de dois
poços. - São Paulo, 2011.

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. Ondas de
Choque; 3. Mecânica Quântica; 4. Mecânica dos Fluidos;
5. Física da Matéria Condensada.

USP/IF/SBI-027/2011

Resumo

Nesta tese estudamos dois problemas diferentes na área de átomos ultra frios: “Ondas de choque em condensados de Bose-Einstein” e “Espalhamento inelástico de átomos em um potencial de dois poços”.

No primeiro problema, estudamos o fluxo supersônico de um condensado de Bose-Einstein (BEC) através de um obstáculo macroscópico impenetrável delgado no sistema da equação de Schrödinger não-linear (NLS) bidimensional. Assumindo-se que a velocidade do fluxo é suficientemente alta, reduzimos assintoticamente o problema bidimensional original de valor de contorno para o fluxo estacionário através de um obstáculo alongado ao problema do pistão dispersivo unidimensional descrito pela NLS 1D dependente do tempo, no qual a coordenada original x reescalada faz o papel de tempo e o movimento do pistão está vinculado à geometria do obstáculo. Duas ondas de choque dispersivas (DSWs) são geradas no fluxo, cada uma sendo formada em uma extremidade (frontal e traseira) do obstáculo. A DSW frontal é descrita analiticamente construindo-se soluções de modulação exatas para as equações de Whitham e a para a DSW traseira, empregamos a regra de quantização de Bohr-Sommerfeld generalizada para descrever a distribuição dos sólitons escuros. Propomos uma extensão da solução de modulação tradicional, a fim de incluir o padrão de *ship-wave* linear formado fora da região da DSW frontal. Realizamos simulações numéricas 2D completas e verificamos a validade das previsões analíticas. Os resultados deste problema podem ser relevantes para experimentos recentes sobre o fluxo de BECs através de obstáculos.

No segundo problema, estudamos uma mistura atômica de dois átomos fermiônicos leves de spin $1/2$ e dois átomos pesados em um potencial de dois poços. Processos de espalhamento inelástico entre ambas as espécies atômicas excitam os átomos pesados e renormalizam a taxa de tunelamento e a interação entre os átomos leves (efeito polarônico). A interação efetiva dos átomos leves muda de sinal e se torna atrativa quando o espalhamento inelástico é forte. Observamos também o cruzamento de níveis de energia, de um estado onde cada poço contém apenas um férmion (espalhamento inelástico fraco) para um estado onde um poço contém um par de férmions e ou outra está vazio (espalhamento inelástico forte). Identificamos o efeito polarônico e o cruzamento dos níveis de energia estudando-se a dinâmica quântica do sistema.

Abstract

In this thesis we study two different problems in the field of ultracold atoms: “Shock waves in Bose-Einstein condensates” and “Inelastic scattering of atoms in a double well”.

In the first problem, we study the supersonic flow of a Bose-Einstein condensate (BEC) past a slender impenetrable macroscopic obstacle in the framework of the two-dimensional (2D) defocusing nonlinear Schrödinger equation (NLS). Assuming the oncoming flow speed sufficiently high, we asymptotically reduce the original boundary-value problem for a steady flow past a slender body to the one-dimensional dispersive piston problem described by the nonstationary NLS equation, in which the role of time is played by the stretched x -coordinate and the piston motion curve is defined by the spatial body profile. Two steady oblique spatial dispersive shock waves (DSWs) spreading from the pointed ends of the body are generated in both half-planes. These are described analytically by constructing appropriate exact solutions of the Whitham modulation equations for the front DSW and by using a generalized Bohr-Sommerfeld quantization rule for the oblique dark soliton fan in the rear DSW. We propose an extension of the traditional modulation description of DSWs to include the linear ship-wave pattern forming outside the nonlinear modulation region of the front DSW. Our analytic results are supported by direct 2D unsteady numerical simulations and are relevant to recent experiments on Bose-Einstein condensates freely expanding past obstacles.

In the second problem, we study a mixture of two light spin-1/2 fermionic atoms and two heavy atoms in a double well potential. Inelastic scattering processes between both atomic species excite the heavy atoms and renormalize the tunneling rate and the interaction of the light atoms (polaron effect). The effective interaction of the light atoms changes its sign and becomes attractive for strong inelastic scattering. This is accompanied by a crossing of the energy levels from singly occupied sites at weak inelastic scattering to a doubly occupied and an empty site for stronger inelastic scattering. We are able to identify the polaron effect and the level crossing in the quantum dynamics.

Acknowledgements

Em primeiro lugar, agradeço ao **Prof. Arnaldo Gammal** por TUDO! Raramente um orientador tem tanta paciência, boa vontade e principalmente, interesse e dedicação com seus orientandos. Agradeço-lhe pela oportunidade de poder trabalhar no seu grupo em temas tão interessantes. Também lhe agradeço por me introduzir na arte do cálculo numérico. Obrigado pela paciência de saber lidar com o profundo bom humor e eterno positivismo de Annibale.

Ich danke Herrn **Prof. Klaus Ziegler** für die Gelegenheit, in Ihrer Gruppe in Augsburg - Deutschland arbeiten zu können. Dank Ihnen konnte ich an zwei interessante Projekte arbeiten, viel Physik lernen und zwei Jahre in der schönen Stadt Augsburg leben.

I would like to thank **Prof. Gennady El** (Loughborough - UK), **Prof. Anatoly Kamchatnov** (Troitsk - Russia) and **Vadim Khodorovskii** (Loughborough - UK) for the fruitful collaboration.

I also thank (now Dr.) **Oleksandr Fialko** (Sasha) for the friendship and collaboration in Augsburg. You always insisted that I should see “the Physics behind my beautiful figures”.

Meinen Kollegen in Augsburg: **Antonio, Alexey, Armin, David, Georg, Leonardo, Sekhar, Sinner** und **Yunyun**. Dank für die Geduld mit Annibale.

Aos meus amigos e colegas de grupo em São Paulo: **Eduardo, Hedhio, Karine, Marijana** e **Vicente**. Muito obrigado pelas inúmeras discussões acadêmicas e não acadêmicas. Em particular, agradeço ao **Sr. Grow**, pela sua grandeza e grandiosidade como pessoa e ao **Sr. Egkhamis**, por sempre me alegrar com suas animações muito úteis. Agradeço também ao **Rone**, com quem eu me preparei para o exame de ingresso do IFUSP.

Às secretárias da FEP **Edi, Ivanei** e **Juliane**, que tornaram a minha vida muito mais fácil desde o início deste trabalho e também a **todos os funcionários da CPG**, novos e antigos, que sempre foram muito prestativos e atenciosos.

Ao **IME**, por ter me abrigado durante um semestre.

À **CAPES**, por ter patrocinado Annibale durante esses quatro anos, em particular, durante um ano em Augsburg - Alemanha. Agradeço ao **DAAD** por ter facilitado muito minha vida nas terras germânicas e à **Universität Augsburg**, pelos dois anos que lá passei. Também agradeço ao **CNPq** e à **FAPESP** pelo apoio financeiro parcial, incluindo pelo nosso querido ar condicionado.

À **minha família**, pelo apoio incondicional.

A **todos os cidadãos de bem** que pagaram seus impostos em dia, permitindo que as agências de fomento patrocinassem Annibale. Cidadãos de bem, paguem seus impostos!

Roteiro

Nesta tese estudamos dois problemas distintos na área de átomos ultrafrios: “Ondas de choque em condensados de Bose-Einstein” e “Espalhamento inelástico de átomos em um potencial de dois poços”.

O primeiro problema é discutido nos capítulos 2 e 3 e foi consequência de uma colaboração com os professores Gennady El (Loughborough - UK), Anatoly Kamchatnov (Troitsk - Russia) e Vadim Khodorovskii.

O segundo problema é discutido no capítulo 4 e foi realizado em Augsburg-Alemanha durante estágio de doutorado sanduíche. Trata-se de uma colaboração com o Prof. Klaus Ziegler e o Dr. Oleksandr Fialko.

O primeiro e o segundo trabalhos resultaram, respectivamente, nas seguintes publicações:

- *Two-dimensional supersonic nonlinear Schrödinger flow past an extended obstacle*, G. A. El, A. M. Kamchatnov, V. V. Khodorovskii, E. S. Annibale, and A. Gammal, Phys. Rev. E **80**, 046317 (2009);
- *Inelastic scattering of atoms in a double well*, E. S. Annibale, O. Fialko, and K. Ziegler, aceito recentemente em Phys. Rev. A.

É importante observar que os dois problemas tratados nesta tese são independentes.

Finalmente, apresentamos no final desta tese alguns apêndices que podem ser úteis para a compreensão deste trabalho.

Conteúdo

1	Introdução: Ondas de choque em condensados de Bose-Einstein	1
2	Hidrodinâmica quântica em BEC	7
2.1	Formação de vórtices	10
2.2	Formação de sólitons escuros	11
3	Fluxo bidimensional de BEC através de um obstáculo alongado	21
3.1	Introdução	21
3.2	Aproximação ao problema do pistão	22
3.3	Teoria da modulação de Whitham	25
3.4	Fluxo através de uma cunha	36
3.5	Fluxo através de uma asa	46
3.6	Sumário	61
4	Espalhamento inelástico de átomos em um potencial de dois poços	63
4.1	Introdução	63
4.2	Modelo de Holstein-Hubbard	66
4.3	Potencial de dois poços com no máximo uma excitação fonônica	69
4.4	Hamiltoniana efetiva para um número arbitrário de fônons	69
4.5	Dinâmica em um potencial de dois sítios	76
4.6	Discussão	82

5 Conclusão	85
A Métodos Numéricos	89
Métodos Numéricos	89
A.1 Diferenciação Numérica	89
A.2 Matrizes tridiagonais	91
A.3 Método de Crank-Nicolson	92
A.4 Método de Split-Step	94
A.5 Fluxo bidimensional de um BEC	96
B Problema do pistão 1D dispersivo	101
Problema do pistão 1D dispersivo	101
C Método de projeções recursivo	107
Método de projeções recursivo	107
Bibliografia	119

Introdução: Ondas de choque em condensados de Bose-Einstein

Na dinâmica de fluidos compressíveis existem duas situações típicas nas quais pode ocorrer a geração de ondas de choque. Em uma delas, a formação do choque acontece devido à quebra de um perfil de densidade (velocidade) suave ou descontínuo em evolução e é descrita pelas soluções generalizadas dos problemas de valor inicial para as equações da dinâmica de fluidos ideais. A segunda forma de geração de uma onda de choque acontece no fluxo supersônico de um fluido através de um corpo ou devido ao movimento de um pistão dentro de um tubo preenchido com um líquido ou gás (ver por exemplo [1–3]) e está associada a problemas de valores de contorno. Em um fluido viscoso, a onda de choque pode ser representada como uma região estreita na qual acontecem processos de grande dissipação e os parâmetros termodinâmicos e hidrodinâmicos do fluxo sofrem uma grande mudança. Contudo, se o efeito da viscosidade é suficientemente pequeno com relação aos efeitos dispersivos, a singularidade do choque é resolvida com a emissão de um trem de onda não-linear chamado de *onda de choque dispersiva* (DSW). Uma característica notável da DSW é a geração de sólitons a partir de uma de suas bordas, de forma que frequentemente toda a estrutura pode ser assintoticamente descrita como um “trem de sólitons”¹.

Uma teoria analítica sobre DSWs unidimensionais foi desenvolvida inicialmente por Gurevich and Pitaevskii [5] e é baseada na hipótese de que a estrutura oscilatória de uma DSW pode ser assintoticamente descrita por uma solução periódica (ou quase-periódica) modulada das equações dispersivas que descrevem o problema. As variações lentas (modulações) dos parâmetros da onda periódica viajante, tais como a amplitude, o número de onda etc são governadas pelas chamadas *equações de Whitham*. Estas são obtidas tomando-se as médias das leis de conservação dispersivas sobre um período da

¹Um bom livro introdutório sobre a teoria de sólitons é [4].

Figura 1.1: Ondas de choque em fluidos clássicos. **À esquerda:** Formação de um *undular bore* em um rio. **À direita:** Movimento supersônico de uma bala de revólver.

onda viajante. Analisando-se a estrutura da DSW calculada numericamente, Gurevich e Pitaevskii propuseram um sistema especial de condições de contorno livres não-lineares para o sistema KdV-Whitham ² e obtiveram uma solução de modulação global auto-similar para o problema do decaimento de uma descontinuidade inicial para a equação KdV. Um problema análogo para a equação de Schrödinger não-linear (defocusing NLS) foi formulado e resolvido em [7, 8] (ver também uma análise detalhada em [9, 10], onde uma formulação diferente foi usada). As soluções de modulação para casos mais gerais de quebra de perfis iniciais foram obtidas em [11–13] (equação KdV) e em [14, 15] (defocusing NLS) empregando-se o método de transformação hodográfica generalizado de Tsarev [16].

O estudo de DSWs bidimensionais estacionárias em fluxos supersônicos dispersivos através de obstáculos foi iniciado em [17, 18], onde o sistema de equações 2D estacionário para um plasma sem colisões foi assintoticamente reduzido à equação KdV 1D ao longo das características lineares (linhas de Mach) com a coordenada transversal rescalonada fazendo o papel de tempo (ver também [19]) e assim, as soluções de modulação foram construídas e interpretadas em termos do problema original 2D estacionário.

A descrição assintótica do fluxo supersônico dispersivo através de um corpo no sistema da KdV captura um conjunto grande de características do padrão de onda no fluxo, mas pode falhar quando a amplitude das ondas é suficientemente grande. Para superar esta limitação, foi proposta em [20] uma aproximação diferente usando expansões inversas do número de Mach no contexto da dinâmica de plasma sem colisões. Em [20] o problema do fluxo supersônico dispersivo através de um corpo delgado foi reduzido ao chamado problema do pistão (esta transformação é conhecida na dinâmica de gases

²Um ótimo *review* sobre a equação KdV e métodos analíticos para o seu tratamento pode ser encontrado em [6].

Figura 1.2: Cone de Mach (Cherenkov) em um meio não-dispersivo. Temos que $\sin \chi = \frac{c_s t}{vt} = \frac{1}{M}$, onde $M = \frac{v}{c_s}$ é o número de Mach e c_s é a velocidade do som no meio [2] .

clássicos como transformação “hipersônica” - ver [2,21]). Esta transformação foi aplicada em [22] para o problema do fluxo supersônico através de um corpo delgado descrito pela NLS 2D, o qual foi mapeado no problema do pistão para a NLS 1D. Foi mostrado como o problema do pistão dispersivo para a NLS pode ser assintoticamente reduzido a um problema de valor inicial.

Na primeira parte desta tese estudamos sistematicamente as DSWs geradas no fluxo supersônico 2D através de obstáculos no sistema da equação NLS 2D. Um dos problemas mais relevantes neste contexto é o fluxo de condensados de Bose-Einstein (BECs) através de obstáculos (feixes de laser), assunto que vem sendo estudado intensamente tanto experimental quanto teoricamente (ver, por exemplo, [23–26] sobre trabalhos experimentais e [27–37] e referências inclusas sobre alguns trabalhos teóricos). É importante notar que a maior parte dos trabalhos na literatura consideram apenas o problema de fluxos através de obstáculos pontuais (“impurezas”), cuja dimensão é da ordem do comprimento de coerência do meio i.e., o *healing length*. Nesta tese, consideramos o caso de obstáculos, cujo tamanho é muito maior que o *healing length*. O estudo do fluxo de BEC através de um corpo delgado (*slender body*) é muito importante, visto que ele é a versão dispersiva do problema do fluxo através de uma asa na dinâmica clássica de gases (ver [1,2]) e tem a vantagem de poder ser tratado analiticamente através da aproximação ao problema do pistão dispersivo [22]. Não obstante, a solução deste problema explica os mecanismos macroscópicos da geração de sólitons escuros e *ship-waves* em BECs observados experimental e numericamente [23,24,29,31–33,35]. A compreensão deste problema pode auxiliar no estudo do fluxo de BEC em sistemas de *atom-chip* (ver, por exemplo [38,39] e referências inclusas).

Recentemente, o problema do pistão dispersivo 1D dependente do tempo descrito pela NLS 1D foi tratado para o caso em que o pistão se move com velocidade constante [40] (o que corresponde ao fluxo 2D através de uma cunha infinita – ver seção 3.4). Nesta tese, contruímos soluções de modulação analíticas completas para este caso de movimento uniforme do pistão e também para casos de movimentos arbitrários, o que é necessário para a descrição do fluxo através de uma asa.

Uma característica incomum da solução do problema do pistão para a NLS 1D é a geração de uma *onda periódica não-linear não-modulada* na região entre o pistão (superfície do obstáculo) e a borda interna da DSW para velocidades suficientemente grandes. Mostraremos que estas “ondas de transição” observadas na solução numérica em [40] aparecem devido à reflexão de uma DSW de grande amplitude a partir da superfície do pistão — de forma que a interação entre as ondas de entrada e refletida leva à formação de uma região preenchida com ondas não-lineares puramente periódicas.

Em estudos recentes [29,31–33] do fluxo supersônico de BEC através de obstáculos pontuais, dois efeitos distintos no padrão de onda foram observados e investigados: as *ship-waves*, que correspondem aos modos de Bogoliubov espaciais e são geradas fora do cone de Mach, e sólitons escuros oblíquos localizados dentro do cone de Mach e gerados atrás do obstáculo. Uma característica importante destes sólitons escuros é a sua estabilidade, em contraste com a bem conhecida *snake instability* absoluta para sólitons escuros no sistema da NSL 2D, que leva ao decaimento destes sólitons em pares de vórtices e anti-vórtices [41–44]. Este aparente paradoxo foi resolvido em [30], onde foi mostrado que a presença do fundo no fluxo do BEC com velocidade maior que uma velocidade crítica estabiliza o sóliton escuro, de forma que ele se torna apenas convectivamente instável, i.e., praticamente estável no sistema de referência junto ao obstáculo.

Neste trabalho, mostramos que as *ship-waves* e os sólitons oblíquos escuros presentes no fluxo supersônico bidimensional através de um corpo delgado finito podem ser descritos como efeitos assintóticos da “evolução” espacial de duas DSWs diferentes, cada uma gerada a partir de uma extremidade do obstáculo (frontal e traseira). Apesar da origem comum, as DSWs frontal e traseira evoluem de forma muito diferente: a DSW frontal se transforma assintoticamente em um pacote de onda dispersivo linear (que será identificado como uma distribuição de *ship-waves*), enquanto que a DSW traseira se transforma em um leque (*fan*) de sólitons escuros. A onda frontal é gerada devido à compressão de uma elevação formada devido à desaceleração do fluxo de entrada próximo à superfície do obstáculo, enquanto que a onda traseira evolui de depressão da densidade formada atrás do corpo. Em termos da NLS 1D, a onda frontal corresponde ao espectro contínuo do problema espectral linear de Zakharov-Shabat e a onda traseira, ao espectro discreto.

Inicialmente apresentamos no capítulo 2 uma revisão dos principais conceitos e resultados sobre o fluxo de BECs através de obstáculos pontuais. No capítulo 3 nos con-

centramos então no fluxo de BECs através de obstáculos alongados. Neste capítulo, desenvolvemos a teoria para fluxos supersônicos através de uma cunha aplicando-se soluções de modulação [7, 8] ao problema do pistão dispersivo 1D associado (ver [40]). Comparamos então as previsões analíticas com os resultados da simulação numérica completa 2D e notamos que a aproximação ao problema do pistão 1D descreve muito bem o padrão de onda.

Investigamos em seguida o fluxo supersônico através de uma “asa” construindo-se soluções analíticas assintóticas 1D para as DSWs formadas nas extremidades frontal e traseira do obstáculo. Comparamos então as previsões analíticas com simulações numéricas completas 2D. A DSW frontal é descrita através de uma solução de modulação para o problema do pistão 1D associado, onde o movimento do pistão está vinculado à geometria da asa. Reescrevemos então esta solução 1D no contexto do problema do fluxo bidimensional original.

Notamos na solução numérica que as distribuições de onda no fluxo bidimensional através da cunha ou na parte frontal da asa se estendem para fora da região da DSW definida pelas bordas $[y^-(x), y^+(x)]$. Para descrevermos a distribuição das cristas de onda na região exterior da DSW, introduzimos um pacote de onda de pequena amplitude, como uma extensão natural da DSW e empregamos a teoria da modulação linear para esta descrição. As linhas de fase constante nesta solução de modulação linear determinam a posição das cristas de onda de pequenas amplitudes visíveis na solução numérica e em experimentos recentes. Juntamente com a DSW, elas formam uma estrutura que se transforma no padrão de *ship-wave* universal de Kelvin-Bogoliubov [31, 32]. O comportamento assintótico das soluções de modulação não-lineares descreve as distribuições da amplitude da onda nesta *ship-wave* como função da geometria do obstáculo.

Finalmente, consideramos as DSWs geradas a partir da extremidade traseira da asa. Estas DSWs transformam-se assintoticamente em um leque de sólitons escuros [29]. Descrevemos a distribuição de sólitons escuros usando a regra de quantização semi-clássica de Bohr-Sommerfeld generalizada para os autovalores obtidos da NLS [15, 45] através da transformada de espalhamento inverso (IST).

Finalmente, comparamos as previsões analíticas com os resultados das simulações numéricas 2D completas.

Hidrodinâmica quântica em BEC

Um condensado atômico de Bose-Einstein (BEC) diluído pode ser tratado como um fluido quântico não-linear, no qual é possível observar-se inúmeras propriedades e fenômenos físicos interessantes, tais como a formação de vórtices e sólitons.

A dinâmica de um BEC diluído ¹ pode ser descrita com boa aproximação pela equação de Gross-Pitaevskii (GP) [46–48]

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + V(\mathbf{r})\Psi + g|\Psi|^2\Psi, \quad (2.1)$$

onde $\Psi = \Psi(\mathbf{r}, t)$ é o parâmetro de ordem ² do BEC normalizado ao número de átomos N , $g = 4\pi\hbar^2 a_s/m$ é a constante de acoplamento, a_s é o comprimento de espalhamento de ondas s (*scattering length*) e $V(\mathbf{r})$ é o potencial externo que age sobre o condensado. A constante g é o coeficiente da não-linearidade, a qual descreve a interação entre as partículas do condensado. Assume-se na derivação da GP que a interação entre as partículas no BEC é uma interação dois corpos de contato [$V_{\text{int}}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) = g\delta(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)$]. Para $g > 0$, a interação interatômica é repulsiva, enquanto que para $g < 0$, a interação é atrativa. A GP é também conhecida como equação de Schrödinger não-linear (NLS) e quando $g > 0$, ela é conhecida como *defocusing* NLS.

A equação de Gross-Pitaevskii acima descreve a dinâmica de um BEC tridimensional. Neste trabalho vamos nos concentrar no estudo do fluxo de um BEC bidimensional (2D), de forma que $\mathbf{r} = (x, y)$. Na realidade, consideramos um BEC quase-2D, o qual está submetido a um potencial confinante muito intenso na direção vertical mas

¹Dizemos que um BEC é diluído quando $na_s^3 \ll 1$, onde n é a densidade média do gás e a_s é o comprimento de espalhamento.

²A equação GP é derivada segundo uma aproximação de campo médio (*mean field*). É muito comum o parâmetro de ordem Ψ ser chamado de função de onda na literatura.

livre para expandir no plano horizontal. Isto é uma hipótese razoável e pode ser realizado experimentalmente [49].

Inicialmente consideramos o caso de um condensado 2D homogêneo com interação interatômica repulsiva ($g > 0$). Introduzindo-se variáveis adimensionais

$$\tilde{\mathbf{r}} = \frac{\mathbf{r}}{\sqrt{2\xi}}, \quad \tilde{t} = \frac{c_s}{2\sqrt{2\xi}}t, \quad (2.2)$$

onde $\mathbf{r} = (x, y)$, $\xi = \hbar/\sqrt{2mn_0g}$ é o *healing length* do BEC, n_0 é a densidade característica de átomos no infinito e $c_s = \hbar/\sqrt{2m\xi}$ é a velocidade do som no BEC com densidade n_0 [50], a equação (2.1) pode ser reescrita na forma adimensional

$$i \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{1}{2}\Delta \Psi + |\Psi|^2 \Psi + V(\mathbf{r})\Psi, \quad (2.3)$$

com $\Delta = \partial_x^2 + \partial_y^2$ e sendo que o acento nas novas variáveis foi removido por conveniência.

Usando-se a seguinte transformação

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \sqrt{n(\mathbf{r}, t)} \exp(i\Theta(\mathbf{r}, t)), \quad (2.4)$$

com

$$\mathbf{u} = \nabla \Theta, \quad (2.5)$$

onde $\mathbf{u} = (u(x, y), v(x, y))$ é o campo de velocidade do BEC e Θ é a fase do parâmetro de ordem Ψ e usando ainda os seguintes reescalonamentos

$$\tilde{n} = \frac{n}{n_0}, \quad \tilde{\mathbf{u}} = \frac{\mathbf{u}}{c_s}, \quad c_s = \sqrt{n_0}, \quad (2.6)$$

podemos escrever a GP (2.3) na forma hidrodinâmica

$$\begin{aligned} n_t + \nabla \cdot (n\mathbf{u}) &= 0, \\ \mathbf{u}_t + (\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{u} + \nabla n + \nabla \left[\frac{(\nabla n)^2}{8n^2} - \frac{\Delta n}{4n} \right] &= 0, \\ \nabla \times \mathbf{u} &= 0, \end{aligned} \quad (2.7)$$

onde $\nabla \equiv (\partial_x, \partial_y)$ e os acentos foram novamente removidos. Note que estamos usando a seguinte notação $n_t \equiv \frac{\partial n}{\partial t}$ para a derivada parcial. A última equação do sistema de EDP's acima (2.7) é uma condição que garante que o fluxo de BEC é potencial, i.e., livre de vórtices. Esta é uma hipótese que assumimos para o tratamento analítico do problema.

Descreveremos nas próximas seções o problema do fluxo de um BEC através de um obstáculo e a consequente formação de vórtices e sólitons oblíquos escuros à frente do obstáculo.

Inicialmente um BEC (tridimensional - 3D) é ser preparado numa armadilha. Desligando-se o potencial confinante na direção radial (x, y) e mantendo-se ligado um potencial intenso na direção vertical z , o condensado sofre uma expansão no plano horizontal e podemos considerá-lo como um sistema bidimensional (2D). Liga-se então um feixe de laser repulsivo vertical a uma certa distância do centro da armadilha na qual o BEC foi preparado. Durante a expansão, o BEC atravessa este feixe de laser, o qual pode ser considerado como um obstáculo impenetrável. Observa-se então a formação de vórtices ou sólitons escuros à frente do obstáculo, dependendo da velocidade de expansão do BEC.

Resolvemos numericamente a GP (2.3) usando um método de *split-step*, no qual a parte cinética da equação é resolvida através do método de Crank-Nicolson (ver Apêndice A). Consequentemente, obtemos como solução o parâmetro de ordem para cada instante de tempo e em cada ponto da malha. Isto nos permite calcular inúmeros observáveis de interesse.

A densidade de átomos é definida como

$$n = \Psi^* \Psi \quad (2.8)$$

e a k -ésima componente da corrente de probabilidade é

$$j_k = \frac{1}{2i} (\Psi^* \partial_k \Psi - \Psi \partial_k \Psi^*) . \quad (2.9)$$

De acordo com (2.4), o parâmetro de ordem do BEC pode ser expresso em termos da densidade e da fase do condensado. Reciprocamente, dado $\Psi(\mathbf{r}, t)$, a fase pode ser obtida através de

$$\Theta = \arctan \left(\frac{\Im[\Psi]}{\Re[\Psi]} \right) , \quad (2.10)$$

onde $\Im[\Psi]$ e $\Re[\Psi]$ são as partes imaginária e real de Ψ , respectivamente. Note que esta fórmula está bem definida a menos de múltiplos de 2π .

Podemos ainda calcular as componentes do campo de velocidade, a saber

$$v_k = \frac{j_k}{n} \quad (2.11)$$

e a vorticidade ³ é dada por

$$\Upsilon = \nabla \times \mathbf{u} . \quad (2.12)$$

³Notamos que na Eq. (2.5) assumimos que o fluxo de BEC é potencial, i.e., livre de vórtices ($\Upsilon = 0$). Contudo, veremos que dependendo da velocidade do fluxo, ocorre a formação de vórtices. Apesar de não existir viscosidade em um BEC diluído, existe tensão de cisalhamento devido a gradientes de pressão. Isto cria a possibilidade de emissão de vórtices e arrasto no fluxo mesmo na ausência de viscosidade [51].

Figura 2.1: Solução numérica da GP (2.3) para fluxo uniforme subsônico de BEC através de um obstáculo impenetrável de raio unitário localizado em $(x, y) = (0, 0)$ no instante $t = 50$. O fluxo é da esquerda para a direita e o valor da velocidade assintótica do fluxo (número de Mach) está indicado em cada figura. **Topo:** Observamos a geração de pares de vórtices e anti-vórtices à frente do obstáculo e notamos ainda que a frequência de geração destes vórtices aumenta com o aumento da velocidade do fluxo. **Base:** Apresentamos os respectivos gráficos da fase do sistema.

2.1 Formação de vórtices

Se o obstáculo (feixe de laser) está localizado a uma distância suficiente do centro da armadilha na qual o BEC é preparado, podemos considerar que o fluxo de condensado que atravessa este obstáculo é uniforme. Neste caso, o número de Mach M é definido como a razão entre a velocidade assintótica do fluxo e a velocidade do som c_s no meio. Dizemos que o fluxo é subsônico se $M < c_s$ e supersônico se $M > c_s$.

Desta forma, consideramos como condição inicial que o parâmetro de ordem é uma onda plana $\Psi(x, y, t = 0) = \exp(iMx)$, o que corresponde a um fluxo uniforme de BEC na direção x com velocidade $u = M$. Consideramos como condição de contorno para este problema $\Psi = 1$ nas bordas de um retângulo.

Em [52] foi estudado numericamente o problema do fluxo uniforme *subsônico* de BEC através de um obstáculo impenetrável e observou-se a formação de pares de

vórtices/anti-vórtices à frente do obstáculo. Neste trabalho o obstáculo foi modelado como sendo uma região circular de raio $r = 5$ dentro da qual o parâmetro de ordem se anula $\Psi(\mathbf{r} = 5, t) = 0$. Observou-se que estes vórtices surgem a partir de uma velocidade crítica ⁴ $v_c \approx 0.45$ e que a frequência de geração dos mesmos aumenta com o aumento da velocidade do fluxo. O processo de geração destes vórtices e a quebra da superfluidez foi discutido também em [51].

Reproduzimos na Fig. 2.1 estes resultados considerando o fluxo uniforme de BEC através de um obstáculo impenetrável de raio $r = 1$ para diferentes valores da velocidade do fluxo. Observamos a geração de pares de vórtices e anti-vórtices à frente do obstáculo localizado em $(x, y) = (0, 0)$ para $M = 0.6$ e $M = 0.9$ e os respectivos gráficos das fases.

Recentemente o estudo de vórtices no fluxo de um BEC através de um obstáculo foi revisitado. Em [37] foi investigada numericamente a geração de “Bénard-von Kármán vortex street” e em [26] foi observada experimentalmente a dinâmica destes vórtices/antivórtices com grande precisão.

2.2 Formação de sólitons escuros

Para velocidades do fluxo suficientemente altas, a frequência de geração dos vórtices é tão grande que a distância média entre eles torna-se menor que o seu tamanho radial, de forma que o tempo para que eles se separem é muito longo e isto leva a formação de sólitons escuros oblíquos à frente do obstáculo.

A seguir apresentamos resultados analíticos sobre sólitons oblíquos escuros no fluxo uniforme de BEC através de um obstáculo pontual e o tratamento numérico deste problema resolvendo-se a GP [Eq. (2.3)].

2.2.1 Tratamento analítico

Em [29] foi analisada analítica e numericamente a geração destes sólitons escuros.

Assumindo-se um fluxo uniforme, temos as seguintes condições

$$\begin{cases} n &= 1 \\ u &= M, \quad v = 0 \end{cases} \quad (2.13)$$

para $|x| \rightarrow \infty$, o que significa que existe um fluxo uniforme de BEC com velocidade constante $\mathbf{u} = (M, 0)$ no infinito. Como no sistema adimensional a velocidade do som é

⁴ v_c depende do tamanho e da intensidade do obstáculo e da interação interatômica [37, 52].

igual a unidade no infinito (i.e., $c_s = 1$), a velocidade de entrada do fluxo coincide com o número de Mach M .

Como no caso da teoria clássica dos gases, podemos nos concentrar, no caso de fluxo supersônico, em um padrão de ondas estacionário bem estabelecido. Podemos então procurar por soluções estacionárias da equação (2.7) sob as condições (2.13) e reescrever (2.7) como

$$\begin{aligned} (nu)_x + (nv)_y &= 0, \\ uu_x + vu_y + n_x + \left(\frac{n_x^2 + n_y^2}{8n^2} - \frac{n_{xx} + n_{yy}}{4n} \right)_x &= 0, \\ uv_x + vv_y + n_y + \left(\frac{n_x^2 + n_y^2}{8n^2} - \frac{n_{xx} + n_{yy}}{4n} \right)_y &= 0, \\ u_y - v_x &= 0. \end{aligned} \quad (2.14)$$

Assumimos que o sistema de equações (2.14) tem como solução um sólito escuro que se propaga ao longo da direção $\zeta = x - \alpha y$, onde $\alpha = \cot \theta$ e θ é o ângulo entre a direção ζ e o eixo x . Integrando-se o sistema (2.14) com respeito a nova variável ζ e usando-se as condições de contorno dadas na Eq. (2.13), obtemos o perfil de densidade do sólito escuro [29]

$$n(x, y) = 1 - \frac{1 - M^2 \sin^2 \theta}{\cosh^2 \left[\sqrt{1 - M^2 \sin^2 \theta} (x \sin \theta - y \cos \theta) \right]}. \quad (2.15)$$

As componentes horizontal e vertical da velocidade são dadas por

$$u(x, y) = M \left[1 + \sin^2 \theta \left(\frac{1}{n(x, y)} - 1 \right) \right] \quad (2.16)$$

e

$$v(x, y) = M \sin \theta \cos \theta \left(\frac{1}{n(x, y)} - 1 \right), \quad (2.17)$$

respectivamente e a expressão para a fase é dada por

$$\Theta(x, y) = Mx - \arctan \left\{ \frac{M \sin \theta}{\sqrt{1 - M^2 \sin^2 \theta} \tanh \left[\sqrt{1 - M^2 \sin^2 \theta} (x \sin \theta - y \cos \theta) \right]} \right\}. \quad (2.18)$$

De fato, podemos verificar a expressão acima lembrando da hipótese de que o fluxo é potencial, i.e., $(u, v) = (\partial_x \Theta, \partial_y \Theta)$.

Figura 2.2: Solução numérica da GP (2.3) para fluxo uniforme supersônico de BEC com $M = 5$ através de um obstáculo impenetrável de raio unitário localizado em $(x, y) = (0, 0)$. Observamos a emergência de um par de sólitons escuros oblíquos à frente do obstáculo (estrutura escura em forma de V), bem como a emissão de pares de vórtices/antivórtices a partir das extremidades dos sólitons. As três figuras ilustram, de cima para baixo, a evolução do sistema nos instantes $t = 10$, $t = 20$ e $t = 30$.

Desta forma, o parâmetro de ordem do condensado é dado por [53]

$$\Psi(x, y) = \left\{ \sqrt{1 - M^2 \sin^2 \theta} \tanh \left[\sqrt{1 - M^2 \sin^2 \theta} (x \sin \theta - y \cos \theta) \right] - iM \sin \theta \right\} e^{iMx} . \quad (2.19)$$

Ou seja, os sólitons escuros podem ser gerados apenas dentro do cone de Mach

$$-\arcsin(1/M) < \theta < \arcsin(1/M) . \quad (2.20)$$

Foi mostrado em [30] que estes sólitons escuros são convectivamente instáveis, i.e. estáveis a uma distância não muito grande do obstáculo, quando a velocidade do fluxo é maior que um certo valor crítico, $M \cong 1.46$.

Recentemente foi publicado um bom *review* sobre os avanços teóricos e experimentais na área de sólitons escuros em BECs [53].

Figura 2.3: Gráfico de densidade gerado a partir da solução numérica da GP (2.3) para fluxo supersônico ($M = 5$) uniforme de BEC através de um obstáculo impenetrável de raio unitário localizado em $(x, y) = (0, 0)$ no instante $t = 40$. Neste gráfico observamos um par de sólitons escuros oblíquos dentro e ondas lineares fora do cone de Mach. O cone de Mach é representado pelas linhas tracejadas.

Figura 2.4: Corte da distribuição de densidade em $x = 100$ e $t = 40$ (linha pontilhada) resolvendo-se numericamente a GP (2.3). Este resultado é comparado com o perfil analítico do sóliton dado na Eq. (2.15) (linha sólida).

2.2.2 Tratamento numérico

Na Fig. 2.2 apresentamos a evolução temporal do fluxo supersônico ($M = 5$) uniforme de BEC através de um obstáculo impenetrável de raio unitário. Observamos a formação

Figura 2.5: Corte ao longo do eixo y das componentes $u(x, y)$ (**esquerda**) e $v(x, y)$ (**direita**) do campo de velocidade para $x = 100$. Ambas as componentes foram obtidas usando-se o parâmetro de ordem calculado numericamente e a expressão (2.11). Notamos, em ambos os casos, a existência de picos exatamente nas posições onde os sólitons se localizam. No caso da componente horizontal, a velocidade assintótica $u \rightarrow 5$, enquanto que no caso da componente vertical, $v \rightarrow 0$.

de um par de sólitons escuros oblíquos à frente do obstáculo (estrutura escura em forma de V) e também ondas lineares atrás. Notamos ainda que os sólitons escuros irradiam vórtices e anti-vórtices (“vortex street”) a partir de suas extremidades.

Na Fig. 2.3 apresentamos um gráfico de densidade para o fluxo de BEC com velocidade $M = 5$. Notamos que os sólitons escuros estão localizados dentro do cone de Mach (ver Eq. 2.20), enquanto que as ondas lineares (*Kelvin ship-waves*) localizam-se na região exterior do cone [31, 32].

Mostramos na Fig. 2.4 um corte da distribuição de densidade ilustrado na Fig. 2.3 ao longo do eixo y . Nesta figura apresentamos a solução numérica e o perfil analítico do sólito dado na Eq. (2.15) e notamos um excelente acordo entre os cálculos analítico e numérico.

Usando-se então a Eq. (2.11), podemos calcular a partir do resultado numérico o valor das componentes do campo de velocidade. Na parte superior da Fig. 2.5 vemos um corte da componente horizontal $u(\tilde{x}, y)$ ao longo do eixo y , para $\tilde{x} = 100$. Notamos que há um pico exatamente sobre a posição de cada sólito e que a velocidade assintótica é $u = M = 5$. Analogamente, vemos na parte inferior da Fig. 2.5 um corte da componente vertical $v(\tilde{x}, y)$ do campo de velocidade, para $\tilde{x} = 100$. Notamos que há um pico na posição onde cada sólito se localiza e que esta componente da velocidade tende a zero no infinito.

Finalmente podemos ver na Fig. 2.6 o gráfico da fase do BEC obtida numericamente e usando-se a Eq. (2.10), além de um corte ao longo do eixo y . Observamos que, como esperado, a fase sofre um salto ao passar pelo valor mínimo de cada sólito escuro (um resultado análogo foi observado em [54] para sólitons escuros em meios fotorrefrativos).

Figura 2.6: Gráfico da fase do BEC (**topo**) e o respectivo corte ao longo do eixo y (**base**) para $x = 100$ obtido numericamente. Notamos que a fase Θ do parâmetro de ordem sofre um salto ao passar pelo valor mínimo de cada sólito escuro.

Quando consideramos um obstáculo com raio maior, notamos o surgimento de mais pares de sólitons escuros à frente do obstáculo (cf. Fig. 2.7). Todos os sólitons estão localizados dentro do cone de Mach e os sólitons mais internos ao cone são mais profundos, enquanto que os mais próximos à superfície do cone são mais rasos.

Ao invés de considerar um obstáculo impenetrável (que é implementado como uma condição de contorno sobre o parâmetro de ordem), é possível modelar o obstáculo como

Figura 2.7: Gráfico de densidade gerado a partir da solução numérica da GP (2.3) para fluxo supersônico ($M = 5$) uniforme de BEC através de um obstáculo impenetrável de raio $r = 5$ localizado em $(x, y) = (0, 0)$ no instante $t = 40$. Neste gráfico observamos pares de sólitons escuros oblíquos e ondas lineares. Notamos que os sólitons mais próximos do eixo horizontal ($y = 0$) são mais profundos, enquanto que os demais são mais rasos.

sendo um potencial gaussiano repulsivo muito intenso

$$V(\mathbf{r}) = V_0 \exp\left(\frac{-(x^2 + y^2)}{2\kappa}\right) . \quad (2.21)$$

Realizamos várias simulações e notamos que resultados análogos aos obtidos com o obstáculo impenetrável podem ser obtidos usando-se, por exemplo, $V_0 = 100$ e $\kappa = 0.1$, o que caracteriza uma gaussiana bem alta e estreita. Para valores pequenos de V_0 , o obstáculo é parcialmente penetrável e valores grandes de κ representam um obstáculo grande.

Não obstante, como foi estudado em [55], podemos estudar o fluxo de um BEC através de um obstáculo a partir de um estado inicial radialmente simétrico, onde o fluxo do condensado não é uniforme. Tomamos como estado inicial uma gaussiana bidimensional

$$\Psi(x, y, t = 0) = \sqrt{\sigma} \exp\left(\frac{-(x^2 + y^2)}{2\sigma^2}\right) , \quad (2.22)$$

o que é uma escolha bem realista, considerando-se uma armadilha harmônica confinante.

Apresentamos na Fig. 2.8 dois gráficos obtidos resolvendo-se a GP [Eq. (2.3)] numericamente e partindo-se de estados iniciais dado pela equação (2.22) com valores

diferentes de σ . No primeiro caso (topo) usamos $\sigma = 22$ e observamos a geração de pares de vórtices e antivórtices, analogamente como foi observado no fluxo uniforme subsônico de BEC (ver Fig. 2.1). No segundo gráfico (base), usamos $\sigma = 8$ e observamos um par de sólitons escuros oblíquos à frente do obstáculo, análogo ao caso de fluxo uniforme supersônico (ver Fig. 2.3).

Figura 2.8: Gráficos de densidade gerados a partir da solução numérica da equação (2.3) partindo-se de estados iniciais gaussianos dados por (2.22). Trata-se da expansão radial de BEC através de um obstáculo impenetrável de raio unitário localizado em $(x, y) = (25, 0)$. No primeiro gráfico (**topo**) usamos $\sigma = 22$ e observamos a geração de pares de vórtices e antivórtices à frente do obstáculo no instante $t = 10$. No segundo gráfico (**base**), usamos $\sigma = 8$ e observamos um par de sólitons escuros oblíquos no instante $t = 30$.

Finalmente, existe mais uma maneira de estudarmos ondas de choque em BECs. É possível preparar o condensado em uma armadilha e passar um obstáculo por este BEC aprisionado. Esta técnica vem sendo realizada experimentalmente [26] e teoricamente [37] com bastante sucesso. A grande vantagem desta técnica para as simulações numéricas é que podemos usar malhas bem menores àsquelas usadas para o problema de expansão do condensado.

Fluxo bidimensional de BEC através de um obstáculo alongado

3.1 Introdução

Um problema fundamental na Mecânica de Fluidos Clássica é o movimento de um objeto alongado e delgado (*slender-body*) num fluido clássico. Um exemplo típico é o movimento de uma asa de um avião no ar.

Nesta seção consideramos o fluxo supersônico bidimensional de um BEC na presença de um obstáculo alongado. Experimentalmente este obstáculo pode ser produzido por um feixe de laser.

Da mesma forma que fizemos no capítulo anterior para o problema do fluxo de BEC através de um obstáculo pontual, descreveremos este sistema através da equação de Gross-Pitaevskii [ver Eq. (2.3)]

$$i \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{1}{2} \Delta \Psi + |\Psi|^2 \Psi + V(x, y) \Psi$$

e para o tratamento analítico, utilizaremos a representação hidrodinâmica estacionária da GP dada na Eq. (2.14)

$$\begin{aligned} (nu)_x + (nv)_y &= 0, \\ uu_x + vv_x + n_x + \left(\frac{n_x^2 + n_y^2}{8n^2} - \frac{n_{xx} + n_{yy}}{4n} \right)_x &= 0, \\ uv_x + vv_y + n_y + \left(\frac{n_x^2 + n_y^2}{8n^2} - \frac{n_{xx} + n_{yy}}{4n} \right)_y &= 0, \\ u_y - v_x &= 0. \end{aligned}$$

Figura 3.1: Fluxo através de uma asa.

Consideramos o obstáculo como um objeto localizado na parte superior do plano (x, y) (ver Fig. 3.1) e descrito por uma função $y = F(x) > 0$, para $x \in (0, L)$, $F(0) = F(L) = 0$ e $F(x) = 0$ para $x \notin [0, L]$, sendo L o comprimento do obstáculo em unidades adimensionais. O sistema (2.14) deve então ser resolvido usando-se as seguintes condições de contorno

$$\begin{aligned} n &\rightarrow 1, \\ \mathbf{u} &\rightarrow (M, 0), \end{aligned} \quad (3.1)$$

quando $|\mathbf{r}| \rightarrow \infty$ e a condição de impenetrabilidade sobre o obstáculo

$$\mathbf{u} \cdot \mathbf{N}|_S = 0, \quad (3.2)$$

onde $\mathbf{N}$ denota o vetor normal unitário que aponta para fora da superfície S do obstáculo. Logo, temos que $\mathbf{N} \propto (F'(x), -1)$ e as condições de contorno (3.1) e (3.2) transformam-se em

$$n = 1, \quad u = M, \quad v = 0 \quad (3.3)$$

para $x^2 + y^2 \rightarrow \infty$ e

$$v = u F'(x) \quad (3.4)$$

em $y = F(x)$, i.e., sobre a superfície do obstáculo.

Na resolução numérica podemos considerar o obstáculo em todo o plano (x, y) simétrico com relação ao eixo x , como uma parábola, elipse ou uma cunha.

3.2 Aproximação ao problema do pistão

O sistema (2.14) junto com as condições (3.3) e (3.4) ainda é muito complicado para ser tratado analiticamente. Contudo, no caso de fluxos altamente supersônicos (hipersônicos), i.e., $M \gg 1$, o problema estacionário do fluxo bidimensional através de um

obstáculo delgado pode ser transformado **assintoticamente** em um problema unidimensional do fluxo “não estacionário” ao longo do eixo y , com a coordenada x reescalada fazendo o papel de “tempo”. Para isto, substituímos na equação (2.14) as novas variáveis

$$\begin{aligned} u &= M + u_1 + O(1/M), \\ T &= x/M, \\ Y &= y, \end{aligned} \tag{3.5}$$

assumindo-se que a velocidade assintótica do fluxo é muito alta, i.e., $M^{-1} \ll 1$. Desta forma, obtemos o sistema

$$\begin{aligned} n_T + (nv)_Y &= 0, \\ v_T + vv_Y + n_Y \left(\frac{n_Y^2}{8n^2} - \frac{n_{YY}}{4n} \right)_Y &= 0, \\ u_1 &= 0. \end{aligned} \tag{3.6}$$

As equações acima representam a forma hidrodinâmica da *defocusing* NLS unidimensional

$$i \Psi_T + \frac{1}{2} \Psi_{YY} - |\Psi|^2 \Psi = 0 \tag{3.7}$$

para um campo complexo

$$\Psi = \sqrt{n} \exp \left(i \int^Y v(Y', t) dY' \right), \tag{3.8}$$

o que nos permite aplicar métodos analíticos bem conhecidos. É notável que no caso do corpo delgado, para o qual $M\alpha = O(1)$, onde $\alpha = \max |F'(x)|$ é o ângulo de abertura do obstáculo, a condição de contorno (3.4) se reduz à condição do pistão clássico [2]

$$v = v_p = \frac{df}{dT} \tag{3.9}$$

em $Y = f(T)$ (ou seja, na superfície do obstáculo), onde $f(T) = F(MT)$ descreve o movimento do pistão. A condição (3.1) no infinito pode ser expressa como

$$n = 1, \quad v = 0 \tag{3.10}$$

quando $Y \rightarrow \infty$. Assim reduzimos o problema bidimensional do fluxo em torno de um obstáculo alongado ao *problema do pistão* para um fluxo unidimensional dentro de um tubo no qual o pistão se move de acordo com a equação (3.9) (ver discussão sobre o problema do pistão dispersivo 1D no Apêndice B e a Fig. 3.2 como ilustração da

Figura 3.2: Correspondência entre o problema do fluxo bidimensional através de um obstáculo alongado e o problema do pistão dispersivo 1D. A componente vertical v da velocidade do fluxo bidimensional corresponde à velocidade do pistão v_p no tubo [ver Eq. (3.9)]. O movimento do pistão está vinculado à geometria da superfície do obstáculo $Y = f(T)$.

correspondência entre o fluxo 2D através de um obstáculo e o problema do pistão 1D). Em contraste com a dinâmica de um gás clássico, o problema do pistão neste caso é formulado em termos das equações dispersivas (3.6).

A redução do fluxo bidimensional supersônico dispersivo e não-dissipativo ao problema do pistão clássico foi proposta inicialmente em [20] e em [22] foi formulada para o caso do fluxo de BEC (descrito pela NLS). Em [40] o problema do pistão dispersivo no contexto da *defocusing* NLS unidimensional foi estudado para o caso de um pistão se movendo com velocidade constante (o que é equivalente ao fluxo de BEC na presença de uma obstáculo infinito com forma de cunha, como será discutido na Sec. 3.4).

Na dinâmica de gases clássicos viscosos, o fluxo supersônico ao longo de uma asa leva à geração de duas ondas de choque espaciais, uma em cada extremidade desta asa [2] (ver Fig. 3.3). Em termos do problema do pistão, isto corresponde a formação de dois choques em duas situações diferentes: movimento do pistão para frente e para trás.

Assumimos aqui que o comprimento do obstáculo é muito maior que o comprimento (de coerência) dispersivo típico do meio. Então, na hidrodinâmica dispersiva, ambos os choques gerados a partir das extremidades do obstáculo transformam-se em zonas oscilatórias não-lineares em expansão, *as ondas de choque dispersivas espaciais*. A distâncias finitas do obstáculo, estas duas DSWs tem estrutura similar: cada uma representa uma onda não-linear modulada que adquire uma forma próxima a uma cadeia de sólitons oblíquos em uma borda da região oscilatória, e degenera-se em uma onda linear, na outra borda. Contudo, longe do obstáculo as duas DSWs apresentam comportamentos muito diferentes: na parte traseira (*cauda*) do obstáculo, os choques dispersivos

Figura 3.3: Diferentes regiões do fluxo de BEC através de uma asa (semi-plano superior). O obstáculo é representado pela região escura. As linhas $Y_f^\pm$ representam as bordas da DSW frontal (região II) e as linhas $Y_r^\pm$, as bordas da DSW traseira (região IV). Nas regiões I e V o fluxo é constante e na região III dizemos que o fluxo (suave) é posto em movimento pelo pistão.

transformam-se em um trem de sólitons escuros oblíquos enquanto que na parte frontal do obstáculo (*nariz*), os choques degeneram-se completamente em um pacote de onda linear dispersivo cuja amplitude decai a zero.

3.3 Teoria da modulação de Whitham

A teoria das DSWs é baseada no estudo de um certo problema não-linear de fronteira livre para as equações de modulação de Whitham, o chamado problema de Gurevich-Pitaevskii. Nesta seção fazemos uma breve revisão da teoria de modulação para a *defocusing* NLS. Uma derivação detalhada das equações de modulação pode ser encontrada em [56, 57].

3.3.1 Ondas viajantes e equações de modulação

A solução de onda viajante periódica da equação de Schrödinger não-linear (3.6) é obtida integrando-se formalmente esta equação [57] e pode ser expressa em termos da função elíptica de Jacobi “sn” [58]. Ela é caracterizada por quatro parâmetros constantes $\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \lambda_3 \leq \lambda_4$,

$$n = \frac{1}{4}(\lambda_4 - \lambda_3 - \lambda_2 + \lambda_1)^2 + (\lambda_4 - \lambda_3)(\lambda_2 - \lambda_1) \operatorname{sn}^2 \left(\sqrt{(\lambda_4 - \lambda_2)(\lambda_3 - \lambda_1)} \theta, m \right), \quad (3.11)$$

$$v = U - \frac{C}{n}, \quad (3.12)$$

onde $C = \frac{1}{8}(-\lambda_1 - \lambda_2 + \lambda_3 + \lambda_4)(-\lambda_1 + \lambda_2 - \lambda_3 + \lambda_4)(\lambda_1 - \lambda_2 - \lambda_3 + \lambda_4)$,

$$\theta = Y - UT - \theta_0, \quad U = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^4 \lambda_i, \quad (3.13)$$

sendo U a velocidade de fase da onda não-linear e θ_0 a fase inicial. O módulo $0 \leq m \leq 1$ é definido como

$$m = \frac{(\lambda_2 - \lambda_1)(\lambda_4 - \lambda_3)}{(\lambda_4 - \lambda_2)(\lambda_3 - \lambda_1)} \quad (3.14)$$

e a amplitude da onda é

$$a = (\lambda_4 - \lambda_3)(\lambda_2 - \lambda_1). \quad (3.15)$$

O comprimento de onda é

$$\mathfrak{L} = \int_{\lambda_3}^{\lambda_4} \frac{d\lambda}{\sqrt{(\lambda - \lambda_1)(\lambda - \lambda_2)(\lambda - \lambda_3)(\lambda_4 - \lambda)}} = \frac{2K(m)}{\sqrt{(\lambda_4 - \lambda_2)(\lambda_3 - \lambda_1)}}, \quad (3.16)$$

sendo $K(m)$ a integral elíptica completa de primeiro tipo [58].

No limite $m \rightarrow 1$ (i.e., quando $\lambda_3 \rightarrow \lambda_2$) a solução de onda viajante (3.11) transforma-se em um sólon escuro em um “pedestal” de densidade n_0

$$n = n_0 - \frac{a}{\cosh^2(\sqrt{a}(Y - UT - \theta_0))}, \quad (3.17)$$

onde a densidade de fundo n_0 , a amplitude do sólon a e a velocidade do sólon U são expressas em termos de λ_1, λ_2 e λ_4 como

$$\begin{aligned} n_0 &= \frac{1}{4}(\lambda_4 - \lambda_1)^2, \\ a &= (\lambda_4 - \lambda_2)(\lambda_2 - \lambda_1), \\ U &= \frac{1}{2}(\lambda_1 + 2\lambda_2 + \lambda_4). \end{aligned} \quad (3.18)$$

Permitindo-se que os parâmetros λ_j s variem lentamente como funções de Y e T , obtemos uma onda periódica não-linear modulada, na qual a evolução dos λ_j s é governada pelas equações de modulação de Whitham

$$\frac{\partial \lambda_i}{\partial T} + V_i(\lambda) \frac{\partial \lambda_i}{\partial Y} = 0, \quad (3.19)$$

com $i = 1, 2, 3, 4$, as quais podem ser obtidas tomando-se as médias das leis de conservação da NLS sobre um período da solução da onda viajante (3.11) (ver [3, 56, 57] para uma

descrição detalhada sobre método de Whitham). As velocidades características podem ser calculadas usando-se as seguintes fórmulas [11, 56]

$$V_i(\lambda) = \left(1 - \frac{\mathfrak{L}}{\partial_i \mathfrak{L}} \partial_i\right) U, \quad (3.20)$$

com $\partial_i \equiv \partial/\partial\lambda_i$, e $i = 1, 2, 3, 4$. Substituindo-se a Eq. (3.16) na (3.20) obtemos

$$\begin{aligned} V_1 &= \frac{1}{2} \sum \lambda_i - \frac{(\lambda_4 - \lambda_1)(\lambda_2 - \lambda_1)K}{(\lambda_4 - \lambda_1)K - (\lambda_4 - \lambda_2)E}, \\ V_2 &= \frac{1}{2} \sum \lambda_i + \frac{(\lambda_3 - \lambda_2)(\lambda_2 - \lambda_1)K}{(\lambda_3 - \lambda_2)K - (\lambda_3 - \lambda_1)E}, \\ V_3 &= \frac{1}{2} \sum \lambda_i - \frac{(\lambda_4 - \lambda_3)(\lambda_3 - \lambda_2)K}{(\lambda_3 - \lambda_2)K - (\lambda_4 - \lambda_2)E}, \\ V_4 &= \frac{1}{2} \sum \lambda_i + \frac{(\lambda_4 - \lambda_3)(\lambda_4 - \lambda_1)K}{(\lambda_4 - \lambda_1)K - (\lambda_3 - \lambda_1)E}, \end{aligned} \quad (3.21)$$

onde $E = E(m)$ é a integral elíptica completa de segundo tipo [58].

Uma solução de onda modulada assintótica é obtida substituindo-se a solução das equações de modulação (3.19) na expressão da onda viajante (3.11). A fase inicial θ_0 na Eq. (3.13) é removida ao tomarmos as médias das leis de conservação. Logo a onda modulada resultante é definida com uma precisão a menos de um deslocamento de um período.

Para a análise da DSW a seguir, precisaremos das reduções das fórmulas (3.21) para os casos limites quando $m = 0$ e $m = 1$. No limite *harmônico* temos $m = 0$ e este pode ser atingido de duas formas:

Quando $\lambda_2 = \lambda_1$:

$$V_2 = V_1 = \lambda_1 + \frac{\lambda_3 + \lambda_4}{2} + \frac{2(\lambda_3 - \lambda_1)(\lambda_4 - \lambda_1)}{2\lambda_1 - \lambda_3 - \lambda_4}, \quad (3.22)$$

$$V_3 = \frac{3}{2}\lambda_3 + \frac{1}{2}\lambda_4, \quad V_4 = \frac{3}{2}\lambda_4 + \frac{1}{2}\lambda_3.$$

Quando $\lambda_3 = \lambda_4$:

$$V_3 = V_4 = \lambda_4 + \frac{\lambda_1 + \lambda_2}{2} + \frac{2(\lambda_4 - \lambda_2)(\lambda_4 - \lambda_1)}{2\lambda_4 - \lambda_2 - \lambda_1}, \quad (3.23)$$

$$V_1 = \frac{3}{2}\lambda_1 + \frac{1}{2}\lambda_2, \quad V_2 = \frac{3}{2}\lambda_2 + \frac{1}{2}\lambda_1.$$

No limite *solitônico* temos $m = 1$, ou seja $\lambda_2 = \lambda_3$. Portanto

$$\begin{aligned} V_2 = V_3 &= \frac{1}{2}(\lambda_1 + 2\lambda_2 + \lambda_4), \\ V_1 &= \frac{3}{2}\lambda_1 + \frac{1}{2}\lambda_4, \quad V_4 = \frac{3}{2}\lambda_4 + \frac{1}{2}\lambda_1. \end{aligned} \quad (3.24)$$

Logo, tanto no limite harmônico ($m \rightarrow 0$) quanto no limite solitônico ($m \rightarrow 1$) o sistema de modulação de quarta ordem [Eqs. (3.19) e (3.21)] se reduz a um sistema de três equações, duas das quais são desacopladas. Não obstante, em todos os casos limites considerados, as equações desacopladas concordam com o *limite não-dispersivo* da equação NLS (3.6). De fato, o limite não-dispersivo da NLS é o sistema de águas rasas ideal

$$\begin{aligned} n_T + (nv)_Y &= 0, \\ v_T + vv_Y + n_Y &= 0, \end{aligned} \quad (3.25)$$

o qual pode ser representado na forma diagonal introduzindo-se os invariantes de Riemann

$$\lambda_{\pm} = \frac{1}{2}v \pm \sqrt{n} \quad (3.26)$$

para obtermos as equações de modulação

$$\frac{\partial \lambda_{\pm}}{\partial T} + V_{\pm}(\lambda_+, \lambda_-) \frac{\partial \lambda_{\pm}}{\partial Y} = 0, \quad (3.27)$$

com as velocidades características

$$V_+ = \frac{3}{2}\lambda_+ + \frac{1}{2}\lambda_-, \quad V_- = \frac{3}{2}\lambda_- + \frac{1}{2}\lambda_+. \quad (3.28)$$

3.3.2 Condições de correspondência de fronteira livre para as equações de modulação

No estudo das DSWs, as equações de Whitham (3.19) devem ser equipadas com certas condições de contorno para os invariantes de Riemann λ_i s [7]. Estas condições para a NLS são análogas às condições de Gurevich-Pitaevskii [5] para ondas de choque dispersivas da equação KdV.

Formulamos a seguir condições de contorno para a DSW que se propaga para a direita, o que corresponde à DSW espacial gerada no semi-plano superior no problema do

Figura 3.4: Divisão do semi-plano YT no problema de Gurevich-Pitaevskii para a *defocusing* NLS. Na região da DSW $[Y^-(T), Y^+(T)]$ o fluxo oscilatório é descrito por quatro equações de Whitham (3.19) para os invariantes de Riemann λ_j s. Nas regiões externas $(-\infty, Y^-(T))$ e $(Y^+(T), +\infty)$ o fluxo é governado pelo limite não-dispersivo da NLS [Eqs. (3.27) e (3.28)] para os invariantes de Riemann $\lambda_{\pm}$.

fluxo supersônico da NLS através de um obstáculo. Assumimos que a formação da DSW começa na origem do plano (Y, T) . Na formulação de Gurevich-Pitaevskii, o semi-plano superior (Y, T) é dividido em três regiões (ver Fig. 3.4): $(-\infty, Y^-(T))$, $[Y^-(T), Y^+(T)]$ e $(Y^+(T), +\infty)$.

Nas regiões “externas” $(-\infty, Y^-(T))$ e $(Y^+(T), +\infty)$ o fluxo é governado pelo limite não-dispersivo da NLS, i.e., pelo sistema de águas rasas [Eqs. (3.27) e (3.28)] para os invariantes de Riemann $\lambda_{\pm}$. Na região da DSW $[Y^-(T), Y^+(T)]$ o fluxo oscilatório é descrito por quatro equações de Whitham (3.19) para os invariantes de Riemann λ_j s com as seguintes condições de correspondência nas bordas interna $Y^-(T)$ e externa $Y^+(T)$ da DSW (mais detalhes em [7, 14]):

$$\begin{aligned} \text{em } Y = Y^-(T) : \quad & \lambda_3 = \lambda_2, \quad \lambda_4 = \lambda_+, \quad \lambda_1 = \lambda_-, \\ \text{em } Y = Y^+(T) : \quad & \lambda_3 = \lambda_4, \quad \lambda_2 = \lambda_+, \quad \lambda_1 = \lambda_-. \end{aligned} \quad (3.29)$$

Aqui $\lambda_{\pm}(Y, T)$ são os invariantes de Riemann no limite não-dispersivo da NLS na forma hidrodinâmica [Eqs. (3.27) e (3.28)]. As bordas livres $Y^{\pm}(T)$ são definidas pelas condições cinemáticas

$$\begin{aligned} \frac{dY^-}{dT} &= V_2(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_2, \lambda_4) = V_3(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_2, \lambda_4), \\ \frac{dY^+}{dT} &= V_3(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_4, \lambda_4) = V_4(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_4, \lambda_4) \end{aligned} \quad (3.30)$$

e da mesma forma as características múltiplas do sistema de Whitham. As velocidades características múltiplas $V_2 = V_3$ e $V_3 = V_4$ na Eq. (3.30) são dadas explicitamente por (3.24) e (3.23), respectivamente. A determinação das bordas $Y^\pm(T)$ é uma parte essencial na construção da solução modulada completa. Devemos enfatizar que as condições de correspondência (3.29) são consistentes nos limites do sistema de Whitham (3.19) para $m = 0$ e $m = 1$ [ver Eqs. (3.23) e (3.24)] e refletem a estrutura oscilatória espacial das DSW na hidrodinâmica da NLS (a DSW tem um sóiton escuro ($m = 1$) na borda interna e degenera em ondas harmônicas de amplitude decrescente ($m = 0$) na borda externa —ver [7, 8, 59, 60]).

3.3.3 Problema do pistão como um problema de valor inicial

O problema geral do pistão dispersivo [Eqs. (3.9) e (3.10)] para a NLS (3.6) é difícil de ser tratado diretamente. Por isso, reformulamos este problema em termos de um problema de valor inicial bem mais conhecido. Para isso, empregamos a descrição semi-clássica de Whitham, a qual é válida quando o deslocamento característico do pistão é muito maior que a unidade, enquanto que a velocidade do pistão é da ordem $O(1)$ (isto corresponde formalmente ao fluxo supersônico através de um corpo alongado de comprimento $L \gg M$ no nosso sistema original formulado na seção 3.1. Esperamos, contudo, que os resultados sejam ainda válidos para corpos com comprimentos moderados.).

Dividimos o semi-plano superior (Y, T) do problema do pistão em cinco regiões distintas (ver Figs. 3.3 e 3.5). Nas regiões I e V o fluxo é *constante* e portanto, temos que o valor da densidade é $n = 1$ e a componente vertical da velocidade é $v = 0$. Os invariantes de Riemann “não-dispersivos” correspondentes [Eq. (3.26)] são $\lambda_\pm = \pm 1$.

Na região III para $Y > f(T)$, dizemos que *o gás é posto em movimento pelo pistão* que se move de acordo com a Eq. (3.9) e próximo ao pistão, o movimento do gás pode ser descrito pelo limite não-dispersivo da NLS [Eqs. (3.27) e (3.28)]. Contudo, a solução formal das equações hidrodinâmicas não-lineares (3.27) e (3.28) não pode ser estendida para todo o plano (Y, T) , visto que as derivadas de Y divergem ao longo de certas linhas neste plano. Portanto, a região III, na qual o *fluxo é suave*, é separada das regiões de fluxo constante I e V por duas regiões de DSW II e IV, as quais tem origem nos pontos $(0, 0)$ (extremidade frontal do obstáculo) e $(0, L/M)$ (extremidade traseira do obstáculo), respectivamente.

Denotamos as bordas externa e interna da DSW frontal (região II nas Figs. 3.3 e 3.5) por $Y_f^+(T)$ e $Y_f^-(T)$, respectivamente. Analogamente, para as bordas da DSW traseira (região IV nas Figs. 3.3 e 3.5), usamos a notação $Y_r^\pm(T)$.

Formulamos agora condições de correspondência para ambas as DSWs usando a

Figura 3.5: Plano (Y, T) do problema do pistão dispersivo. A linha tracejada representa a trajetória do pistão $Y = f(T)$ vinculada a geometria do obstáculo. As linhas $Y_f^\pm(T)$ e $Y_r^\pm(T)$ são as bordas das DSWs frontal e traseira, respectivamente. Comparar com a Fig. 3.3 que ilustra as regiões I – V no fluxo 2D através de um corpo alongado.

regra geral (3.29). Temos para a DSW frontal

$$\begin{aligned} \text{em } Y = Y_f^-(T) : \quad & \lambda_3 = \lambda_2, \quad \lambda_4 = \lambda_+, \quad \lambda_1 = \lambda_-, \\ \text{em } Y = Y_f^+(T) : \quad & \lambda_3 = \lambda_4, \quad \lambda_2 = 1, \quad \lambda_1 = -1. \end{aligned} \quad (3.31)$$

Analogamente, para a DSW traseira, temos

$$\begin{aligned} \text{em } Y = Y_r^-(T) : \quad & \lambda_3 = \lambda_2, \quad \lambda_4 = 1, \quad \lambda_1 = -1, \\ \text{em } Y = Y_r^+(T) : \quad & \lambda_3 = \lambda_4, \quad \lambda_2 = \lambda_+, \quad \lambda_1 = \lambda_-. \end{aligned} \quad (3.32)$$

A fim de satisfazer as equações (3.19) e (3.27) e as condições de correspondência (3.31) e (3.32), exigimos que

$$\lambda_1 = \lambda_- = -1 \quad (3.33)$$

dentro dos domínios de definição de λ_1 (regiões II e IV) e de λ_- (regiões I, III e V).

Portanto, da Eq. (3.26) temos que no “pistão” $\lambda_- = v_p/2 - \sqrt{n_p} = -1$, o que nos leva à densidade do gás

$$n_p = \frac{1}{4}(v_p + 2)^2 \quad (3.34)$$

Figura 3.6: Esquema das condições iniciais assintoticamente equivalentes para os invariantes de Riemann $\lambda_{\pm}$ no problema do fluxo supersônico bidimensional através de um corpo delgado cujo perfil obedece $f'(0) = f'(l) = 0$.

na região entre o pistão e a DSW. Usando-se então as Eqs. (3.9) e (3.26), obtemos a condição de contorno em $Y = f(T)$

$$\lambda_- = -1, \quad \lambda_+ = \frac{df}{dT} + 1. \quad (3.35)$$

Podemos agora reescrever estas condições de contorno no “pistão” como condições iniciais em $T = 0$. De fato, temos $\lambda_- = -1$ e λ_+ obedece a equação de onda simples oriunda das Eqs. (3.27) e (3.28)

$$\frac{\partial \lambda_+}{\partial T} + \frac{1}{2}(3\lambda_+ - 1) \frac{\partial \lambda_+}{\partial Y} = 0. \quad (3.36)$$

Esta é uma equação diferencial parcial de primeira ordem que pode ser resolvida pelo método de características [61]. Assim, usando as condições de contorno (3.35) em (3.36), obtemos

$$\begin{aligned} \lambda_+ &= f'(\xi) + 1, \\ Y &= f(\xi) + \left(\frac{3}{2}f'(\xi) + 1 \right) (T - \xi), \end{aligned} \quad (3.37)$$

onde ξ é um parâmetro ao longo da curva do pistão $Y = f(T)$.

Logo, para $T = 0$ em (3.37), obtemos a distribuição inicial dos invariantes de Riemann λ_+ :

$$\begin{aligned} \lambda_+ &= f'(\xi) + 1, \\ Y &= f(\xi) - \left(\frac{3}{2}f'(\xi) + 1 \right) \xi. \end{aligned} \quad (3.38)$$

A distribuição (3.38) juntamente com a condição inicial

$$\lambda_-(Y, 0) = -1 \quad (3.39)$$

definem, através de (3.26), condições iniciais para a equação NLS na forma hidrodinâmica (3.6).

Podemos agora fazer algumas previsões qualitativas sobre a estrutura assintótica do fluxo. Assumimos que $f(0) = f(l) = f'(0) = f'(l) = 0$, onde $l = L/M$, e que por simplicidade $\lambda_+(Y, 0)$, definida parametricamente por (3.38), é uma função a um valor. Logo, da Eq. (3.38) vemos que o perfil inicial do invariante de Riemann λ_+ correspondente ao fluxo através de uma asa tem a forma de um pulso “bipolar”¹ de larga escala com suporte em $[-l, 0]$ (ver Fig. 3.6), enquanto que o invariante λ_- é constante. Assim, o método semi-clássico para a transformada de espalhamento inverso para a equação NLS nos permite associar o “poço” do perfil inicial de λ_+ a uma distribuição assintótica de sólitons escuros na parte traseira da asa (região IV), enquanto que a “barreira” no pulso é responsável pela radiação dispersiva linear na região II quando $T \rightarrow \infty$. Estes dois casos serão discutidos posteriormente.

Vamos agora tratar o caso de uma asa mais realista (como ilustrado na Fig. 3.1), onde $f(0) = f(l) = f'(0^-) = f'(l^+) = 0$, mas $f'(0^+) \neq 0$ e $f'(l^-) \neq 0$, sendo $f'(a^+)$ e $f'(a^-)$, respectivamente, as derivadas da função f no ponto a pela direita e pela esquerda. Neste caso, o comportamento qualitativo da solução permanece o mesmo, mas a análise quantitativa requer algumas modificações técnicas. Vemos que de (3.38), a descontinuidade da derivada $f'(\xi)$ em $\xi = l$ implica que a vizinhança da extremidade traseira da asa é mapeada no intervalo $[Y_2, Y_1]$, onde

$$Y_2 = -l, \quad Y_1 = -\left(\frac{3}{2}f'(l^-) + 1\right)l. \quad (3.40)$$

Da Eq. (3.38), vemos que a função $\lambda_+(Y, 0)$ assume nestes pontos os valores

$$\lambda_+(Y_2, 0) = 1, \quad \lambda_+(Y_1, 0) = 1 + f'(l^-). \quad (3.41)$$

No intervalo $[Y_1, Y_2]$ a função $\lambda_+(Y, 0)$ é linear

$$\lambda_+(Y, 0) = 1 - \frac{2}{3}(1 + Y/l) \quad (3.42)$$

e $\lambda_+(Y_2, 0) = 1$ para $Y < Y_2$. A função $\lambda_+(Y, 0)$ é contínua em todos os pontos, exceto em $Y = 0$ onde o perfil $\lambda_+(Y, 0)$ tem uma descontinuidade

$$\lambda_+(0, 0) = 1 + f'(0^+) > 1, \quad \text{e} \quad \lambda_+(Y, 0) = 1 \quad \text{para} \quad Y > 0. \quad (3.43)$$

Figura 3.7: Esquema da condição inicial assintoticamente equivalente para λ_+ no problema do fluxo supersônico bidimensional através de uma asa delgada com $f'(0^+) \neq 0$ e $f'(l^-) \neq 0$.

Da Eq. (3.38) notamos que o ponto x_0 , onde a função $F(x)$ atinge seu valor máximo (i.e., valor máximo do perfil do obstáculo), é mapeado ao ponto $Y_0 = f(x_0/M) - x_0/M$ no eixo Y , de forma que $\lambda_+(Y_0, 0) = 1$. Um perfil típico da função $\lambda_+(Y, 0)$ é mostrado na Fig. 3.7.

Um exemplo: uma “asa” parabólica

Ilustramos aqui o mapeamento do perfil do obstáculo ao perfil inicial dos invariantes de Riemann λ_+ para uma “asa” parabólica com ângulo de abertura α e comprimento L localizada no semi-plano superior e descrita pela função

$$F(x) = \alpha x(1 - x/L), \quad (3.44)$$

para $0 \leq x \leq L$. Logo, a função que descreve o movimento do pistão é $f(T) = F(MT) = \alpha MT(1 - T/l)$, onde $l = L/M$. As distribuições iniciais dos invariantes de Riemann não-dispersivos $\lambda_{\pm}$ são dadas pelas equações (3.38), (3.39) e (3.42), ou seja temos para $\lambda_+(Y, 0)$

$$\begin{cases} \lambda_+ &= 1 + \alpha M(1 - 2\xi/l), \\ Y &= -\xi \left(1 + \frac{\alpha M}{2} (1 - 4\xi/l) \right), \end{cases} \quad \text{para } Y_1 < Y < 0, \quad (3.45)$$

$$\lambda_+(Y, 0) = 1 - \frac{2}{3} (1 + Y/l) \quad \text{para } Y_2 < Y < Y_1 \quad \text{e} \quad (3.46)$$

¹Note que a função $f(T)$ na Eq. (3.38) é crescente em $(0, x_0/M)$, $f(x_0/M) = 0$ e é decrescente em $(x_0/M, L/M)$.

$$\lambda_+(Y, 0) = 1 \quad \text{para} \quad -\infty < Y < Y_2 \quad \text{e} \quad Y > 0. \quad (3.47)$$

Aqui [ver Eqs. (3.41) e (3.40)]

$$Y_1 = -l \left(1 - \frac{3}{2} \alpha M \right), \quad Y_2 = -l, \quad (3.48)$$

de forma que o valor mínimo de λ_+ é $\lambda_+(Y_1, 0) = 1 - \alpha M$. Temos ainda que

$$Y_0 = f(l/2) - l/2 = -l/2(1 - \alpha M/2), \quad \lambda_+(Y_0, 0) = 1. \quad (3.49)$$

e $\lambda_+(0, 0) = 1 + \alpha M$.

Estes resultados serão usados na Sec. 3.5, quando discutiremos o problema do fluxo 2D através de uma asa.

3.4 Fluxo através de uma cunha

A fim de estudarmos as DSWs na parte frontal de um obstáculo alongado, consideramos inicialmente o fluxo através de uma cunha infinita, que é o caso mais simples de fluxo através de um obstáculo alongado e tal que a velocidade v_p do pistão associado é constante.

3.4.1 Tratamento analítico

Consideramos o problema do fluxo de BEC através de uma cunha infinita definida pela função

$$F(x) = \begin{cases} 0 & , \quad x < 0; \\ \alpha x & , \quad x \geq 0, \end{cases} \quad (3.50)$$

onde $\alpha > 0$ é uma constante (ver Fig. 3.8).

Figura 3.8: Fluxo supersônico dispersivo através de uma cunha. A velocidade do fluxo e a densidade na região entre a cunha e as DSW são $v_p = \alpha M$ e $n_p = (v_p + 2)^2/4$.

Para aplicarmos a aproximação do pistão, assumimos que $\alpha \sim M^{-1} \ll 1$ (i.e., consideramos um obstáculo delgado e fluxo hipersônico), de forma que a curva do pistão na Eq. (3.35) é $f(T) = \alpha MT$, ou seja, a velocidade do pistão é

$$v_p = \frac{df}{dT} = \alpha M. \quad (3.51)$$

Usando-se (3.34), os parâmetros do fluxo, na aproximação do pistão na região entre a superfície do corpo e a DSW são dados por

$$u = M, \quad v = v_p = \alpha M, \quad n = n_p = (M\alpha + 2)^2/4. \quad (3.52)$$

A partir das Eqs. (3.38) e (3.39) obtemos as condições iniciais assintoticamente equivalentes para a NLS (3.6) em termos dos invariantes de Riemann $\lambda_{\pm}$ [cf. (3.26)]. Para $T = 0$, temos que

$$\lambda_- = -1 \quad , \quad \lambda_+ = \begin{cases} A^+ \geq 1 & , \quad Y \leq 0; \\ 1 & , \quad Y > 0, \end{cases} \quad (3.53)$$

onde

$$A^+ = 1 + \alpha M. \quad (3.54)$$

No caso do fluxo através de uma cunha, a solução está bem definida apenas para $Y \geq Y_p = \alpha MT$. Logo, o problema se reduz ao problema do decaimento de uma descontinuidade inicial para a NLS (ver [7, 8]) com algumas restrições sobre o domínio da solução.

De acordo com as condições de correspondência (3.31) e a Eq. (3.30), a solução de modulação tem a forma de um leque característico centrado [62]

$$\lambda_1 = -1, \quad \lambda_2 = 1, \quad \lambda_4 = A^+, \quad (3.55)$$

$$\frac{Y}{T} = V_3(-1, 1, \lambda_3, A^+) \quad (3.56)$$

ou explicitamente [ver Eq. (3.21)]

$$\frac{Y}{T} = \frac{1}{2}(\lambda_3 + 1 + \alpha M) - \frac{(1 + \alpha M - \lambda_3)(\lambda_3 - 1)K(m)}{(\lambda_3 - 1)K(m) - \alpha ME(m)}, \quad (3.57)$$

onde [ver Eq. 3.14]

$$m = \frac{2(1 + \alpha M - \lambda_3)}{\alpha M(\lambda_3 + 1)}. \quad (3.58)$$

A DSW é confinada em uma região em expansão $\tau^- T \leq Y \leq \tau^+ T$, onde os valores das “velocidades” $\tau^{\pm}$ das bordas desta região são calculados a partir de (3.57) como sendo os valores de contorno da variável de similaridade $\tau = Y/T$:

$$\tau^- = \tau(m = 1) = 1 + \frac{\alpha M}{2}, \quad (3.59)$$

$$\tau^+ = \tau(m = 0) = \frac{2(\alpha M)^2 + 4(\alpha M) + 1}{1 + \alpha M}, \quad (3.60)$$

onde $\lambda_3(m = 0)$ e $\lambda_3(m = 1)$ na Eq. (3.57) são determinados pela Eq. (3.58) para $m = 0$ e $m = 1$, respectivamente.

A inclinação do sólton escuro oblíquo formado na borda da DSW próxima à superfície do obstáculo é dada por

$$s^- = \frac{\tau^-}{M} = \frac{1}{M} + \frac{\alpha}{2} \quad (3.61)$$

e a sua amplitude é

$$a^- = (\lambda_4 - \lambda_3)(\lambda_2 - \lambda_1) = 2(A^+ - 1) = 2\alpha M. \quad (3.62)$$

O perfil de densidade do sólton é definido pela fórmula (3.17), na qual substituímos o pedestal de densidade $n_0 = n_p = (M\alpha + 2)^2/4$, a amplitude $a = 2\alpha M$ e a “velocidade” $U = \tau^-$ [ver (3.18)]. Da equação (3.61), notamos que no problema do fluxo através da cunha, o sólton escuro oblíquo é formado *fora* do cone de Mach “convencional”, cuja inclinação é $1/\sqrt{M^2 - 1} \approx 1/M$. Aparentemente isto está em desacordo com o padrão descrito em [29, 63], onde foi mostrado que o sólton escuro está localizado necessariamente *dentro* do cone de Mach. Contudo, o sólton escuro estudado em [29, 63] foi gerado no fluxo através de um obstáculo *pontual*. Naquele caso, a densidade de fundo do fluxo e a velocidade do som eram iguais a unidade (i.e., $n = 1$ e $c_s = 1$), de forma que o número de Mach no fluxo de fundo era igual a M em qualquer lugar. No problema do fluxo através de uma cunha, o sólton escuro oblíquo é gerado em um fundo de densidade não-unitário ($n \neq 1$), o que faz com que a velocidade do som *local* tenha um valor diferente e portanto, o cone de Mach *local* é definido como $M_l = M/\sqrt{n_p}$. Consequentemente, o ângulo de Mach ajustado torna-se $1/\sqrt{M_l^2 - 1} \approx 1/M + \alpha/2$, o que coincide com a inclinação do sólton escuro oblíquo na Eq. (3.61). Assim, no fluxo supersônico da NLS através de uma cunha, um sólton escuro oblíquo é formado ao longo da linha de Mach real. Isto está de acordo com o resultado apresentado em [7], onde foi mostrado que o sólton escuro interno na DSW propaga-se com a velocidade do som. Como $s^+ = \tau^+/M > s^-$, a DSW está localizada completamente fora do cone de Mach.

O comportamento dos invariantes de Riemann na solução de modulação (3.55) e (3.57) é ilustrado na Fig. 3.9. No problema do fluxo supersônico através de um corpo (ou pistão), a solução (3.57) está definida somente para $Y \geq v_p T = \alpha MT$. Logo, quando a velocidade da borda interna da DSW é igual a velocidade do pistão, temos que $\tau^- = v_p = \alpha M$ e assim obtemos das Eqs. (3.51) e (3.59) o valor crítico $v_p = 2$ para o qual o sólton escuro de maior amplitude na DSW é gerado exatamente na *superfície do corpo* (ver Fig. 3.9, lado direito). Este valor v_p também implica que a densidade no mínimo deste sólton torna-se zero, o que caracteriza o surgimento de um *ponto de vácuo* na borda interna da DSW [8, 57]. De fato, da Eq. (3.11) o valor mínimo da densidade na solução da onda viajante é $n_{min} = \frac{1}{4}(\lambda_4 - \lambda_3 - \lambda_2 + \lambda_1)^2$, visto que $\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \lambda_3 \leq \lambda_4$. Substituindo-se (3.55) nesta expressão, obtemos a distribuição para o mínimo local de

Figura 3.9: Comportamento dos invariantes de Riemann para $T > 0$. A linha vertical dupla em $Y = Y_p$ representa a posição do “pistão” (superfície do obstáculo). **À esquerda:** velocidade subcrítica do pistão $v_p < 2$; **à direita:** velocidade crítica do pistão $v_p = 2$ — formação de um sóliton “preto” na borda interna $Y^- = Y_p$.

n na DSW

$$n_{\min}(m) = \frac{1}{4}(\alpha M - \lambda_3(m) - 1)^2, \quad (3.63)$$

onde a dependência $\lambda_3(m)$ é dada pela Eq. (3.58). Assim, dado que $n_{\min}(m = 1) = 0$, temos que $\alpha M = 2$. Tomando-se $\alpha M > 2$ na Eq. (3.63), obtemos para $n_{\min}(m) = 0$

$$m^* = \frac{4}{(\alpha M)^2} < 1, \quad (3.64)$$

i.e., o ponto de vácuo ocorre dentro da DSW. Como no ponto de vácuo temos

$$\lambda_1 = -1, \lambda_2 = 1, \lambda_3 = \alpha M - 1, \lambda_4 = 1 + \alpha M,$$

a velocidade de fase [Eq. (3.13)] no ponto de vácuo é $U^* = \alpha M$, ou seja, é igual a velocidade do pistão. Aparentemente isto implica que a DSW está ligada ao pistão e é gerada apenas parcialmente com o módulo m variando de 0 a m^* . Contudo, não podemos ligar a DSW diretamente ao pistão. Precisamos na verdade introduzir uma onda de transição periódica (TW) adicional com $m = m^*$ entre a DSW e o pistão [40]. O ponto de vácuo está presente em cada período desta onda de transição. O motivo da geração desta onda não-linear periódica não-modulada no problema do pistão é o seguinte. A velocidade de fase do ponto de vácuo U^* coincide com a velocidade de grupo não-linear somente quando $m^* = 1$, i.e., para o sóliton escuro, quando a velocidade característica múltipla $V_2 = V_3 = U$ é a velocidade do sóliton. No caso geral quando $m^* \neq 1$, temos $V_2 \neq V_3 \neq v_p$ e conseqüentemente, devemos introduzir uma onda refletida no pistão. Como conseqüência da interação não-linear da onda, obtemos uma onda periódica não-modulada de amplitude finita, que pode ser vista como uma onda não-linear estacionária.

Figura 3.10: Invariantes de Riemann para a velocidade do pistão supercrítica, $v_p > 2$. A onda de transição periódica localiza-se na região $[Y^p, Y^*]$, onde $Y^* = \tau^* T$ [ver Eq. (3.65)].

O comportamento dos invariantes de Riemann na solução de modulação supercrítica é ilustrada esquematicamente na Fig. 3.10.

A região da onda periódica intermediária expande-se com velocidade [ver Eq. (3.21)]

$$\tau^* = V_3(-1, 1, \alpha M - 1, 1 + \alpha M) = \alpha M - \frac{2(\alpha M - 2)K(m^*)}{(\alpha M - 2)K(m^*) - \alpha M E(m^*)}, \quad (3.65)$$

onde $m^* = 4/(\alpha M)^2$ [ver Eq. (3.64)]. A amplitude da onda de transição é [ver Eq. (3.15)]

$$a^* = (\lambda_4 - \lambda_3)(\lambda_2 - \lambda_1) = 4, \quad (3.66)$$

a qual não depende do valor $\alpha M > 2$. Este valor afeta apenas a largura da onda de transição $\tau^* T$ (e sua forma local via m^*). Isto está em contraste com o problema do pistão dissipativo clássico, onde o salto de densidade através do choque cresce sem limites a medida que a velocidade do pistão aumenta [ver Fig. 3.11]. Notamos ainda que no plano físico xy a onda de transição está localizada entre a superfície do corpo e a linha de inclinação $s^* = \tau^*/M$. O perfil de densidade oscilatório na onda de transição no plano físico xy é [ver Eq. (3.11)]

$$n = 4 \operatorname{sn}^2(\alpha M(y - \alpha x), m^*) \quad (3.67)$$

e o comprimento de onda da onda de transição (3.67) para qualquer seção de x é dado por [ver Eq. (3.16)]

$$\mathfrak{L} = \frac{2}{\alpha M} K(m^*). \quad (3.68)$$

Figura 3.11: Dependência entre a densidade do fluxo n_p próximo à superfície da cunha e a componente vertical da velocidade v_p para fluxo com $M = 5$ e $M = 10$. A linha tracejada representa a dependência (3.52) obtida na aproximação do pistão dispersivo. As estrelas e os círculos são os resultados da simulação numérica 2D completa para $M = 5$ e $M = 10$, respectivamente. Podemos ver que o acordo entre a solução numérica 2D completa e a solução do problema do pistão dispersivo 1D é excelente para fluxos hipersônicos ($M = 10$). A linha contínua representa a dependência $n_p(v_p)$ para o problema do pistão clássico dissipativo.

3.4.2 Comparação com os resultados numéricos

Vamos agora comparar nossas previsões analíticas com nossas simulações numéricas para o problema do fluxo supersônico bidimensional através de uma cunha. Para isso, dividimos o nosso estudo em duas partes. Em primeiro lugar, calculamos a evolução temporal (solução numérica completa não-estacionária) do fluxo bidimensional supersônico ($M = 10$) através de uma cunha impenetrável com ângulos de abertura α diferentes, a saber $\alpha = 0.1$, $\alpha = 0.2$ e $\alpha = 0.3$. Realizamos paralelamente simulações numéricas para o problema do pistão dispersivo unidimensional associado [Eqs. (3.7) – (3.10)] para os respectivos valores da velocidade do pistão $v_p = M\alpha$, onde consideramos sempre $M = 10$ e o parâmetro α é o ângulo da cunha correspondente. Em ambos os casos empregamos um método de diferenças finitas (Crank-Nicolson—ver Apêndice A) e implementamos a condição de impenetrabilidade sobre o obstáculo assumindo que o parâmetro de ordem se anula na região descrita pelo mesmo (ou na superfície do pistão). Comparamos então os resultados das nossas simulações com a solução analítica modulada obtida na subseção anterior. Consideramos o obstáculo nas simulações numéricas como uma cunha simétrica de ângulo α com respeito ao eixo horizontal, diferente do cálculo analítico, onde nos

Figura 3.12: **À esquerda:** Gráfico de densidade 2D para o fluxo supersônico ($M = 10$) de BEC através de uma cunha com ângulo de abertura $\alpha = 0.1$ sobre o eixo x . **À direita:** Perfil de densidade $n(y)$ em $x = 50$. *Topo:* solução modulada analítica; *meio:* solução numérica do problema do pistão 1D associado; *base:* corte 1D da solução numérica completa 2D no instante $t = 15$. Os pontos y^- e y^+ representam as bordas interna e externa da DSW previstas pela solução de modulação. A superfície do obstáculo (pistão) está localizada em $y = 5$.

restringimos ao semi-plano superior.

Inicialmente comparamos a condição de transição da DSW, a qual é expressa pela fórmula (3.52) para os parâmetros do fluxo constante entre a DSW e a superfície da cunha, dado que os parâmetros do fluxo de entrada são $u = M$, $v = 0$, $n = 1$.

Na Fig. 3.11 apresentamos a dependência entre a densidade do fluxo n_p próximo à superfície da cunha e a componente vertical da velocidade v_p para os fluxos com $M = 5$ e $M = 10$. Nesta figura comparamos a dependência obtida na aproximação do pistão dispersivo (ver Eq. 3.52) com os valores da solução numérica completa bidimensional e também com a dependência $n_p(v_p)$ para o problema do pistão dissipativo clássico, cuja condição de salto correspondente é dada pela equação [2]

$$v_p = (n_p - 1) \sqrt{\frac{1 + n_p}{2n_p}} \quad .$$

Vemos que o acordo entre a curva analítica para o pistão dispersivo e os valores obtidos da solução numérica completa para o fluxo 2D através da cunha com $M = 10$ é excelente. Isto justifica o emprego da redução ao problema do pistão 1D para fluxos hipersônicos. Vemos também um desvio notável da curva do pistão dispersivo com relação à curva do pistão clássico. Os dados da solução numérica e a curva do pistão dispersivo 1D separam-se quando a velocidade do pistão é $v_p = 2$ (i.e., em $\alpha = v_p/M = 0.2$, o que está de acordo

Figura 3.13: **À esquerda:** Gráfico de densidade 2D para o fluxo supersônico ($M = 10$) de BEC através de uma cunha com ângulo de abertura $\alpha = 0.2$ sobre o eixo x . **À direita:** Perfil de densidade $n(y)$ em $x = 30$. *Topo:* solução modulada analítica; *meio:* solução numérica do problema do pistão 1D associado; *base:* corte 1D da solução numérica completa 2D no instante $t = 15$. Os pontos y^- e y^+ representam as bordas interna e externa da DSW previstas pela solução de modulação. A superfície do obstáculo (pistão) está localizada em $y = 6$.

com nossas previsões anteriores, dado que para $M\alpha > 2$ a teoria prevê a formação de uma onda de transição, de forma que a região de fluxo constante entre a cunha e a DSW desaparece.

Nas Figs. 3.12–3.14 apresentamos os gráficos de densidade 2D (à esquerda) e as seções transversais 1D dos perfis de densidade (à direita) para os fluxos com $M = 10$ através de cunhas definidas pelos ângulos $\alpha = 0.1$, $\alpha = 0.2$ e $\alpha = 0.3$, respectivamente. As soluções analíticas (topo) são comparadas com a solução numérica do problema do pistão dispersivo 1D assintoticamente equivalente (meio) e com as seções transversais (x fixo) da solução numérica 2D completa. Vemos claramente que o acordo entre a solução do problema do pistão 1D e os resultados da simulação numérica 2D completa é notável. O acordo entre a solução analítica e a solução numérica 2D também é muito bom dentro da região da DSW. Notamos que a posição exata da onda na solução analítica é determinada a menos de um comprimento de coerência característico (meia largura do sóliton), visto que a fase inicial θ_0 na Eq. (3.11) não é definida pela teoria de modulação. Observamos na Fig. 3.13 a formação do ponto de vácuo na superfície do obstáculo para $\alpha M = 2$ e na Fig. 3.14 podemos ver claramente a geração de uma onda de transição não-modulada para $\alpha M > 2$. A posição $y^* = \tau^* x / M$ da borda externa (à direita) da onda de transição [ver Eq. (3.65)] também concorda muito bem com nossas simulações numéricas — ver Fig. 3.14.

Figura 3.14: **À esquerda:** Gráfico de densidade 2D para o fluxo supersônico ($M = 10$) de BEC através de uma cunha com ângulo de abertura $\alpha = 0.3$ sobre o eixo x . A linha tracejada em y^- indica o final da onda de transição prevista pela teoria. **À direita:** Perfil de densidade $n(y)$ em $x = 30$. *Topo:* solução modulada analítica; *meio:* solução numérica do problema do pistão 1D associado; *base:* corte 1D da solução numérica completa 2D no instante $t = 15$. Os pontos y^- e y^+ representam as bordas interna e externa da DSW previstas pela solução de modulação. A superfície do obstáculo (pistão) está localizada em $y = 9$.

Na Fig. 3.15 apresentamos comparações para a amplitude a^- [Eq. (3.62)] e para a inclinação s^- [Eq. (3.61)] do primeiro sólito escuro na DSW em função do ângulo α para cunhas com diferentes inclinações. O acordo para a amplitude do sólito é excelente e é muito bom para a sua inclinação. Devemos enfatizar que a precisão dentro da aproximação hipersônica (3.6) implica que a fórmula para a amplitude (3.62) é definida com precisão da ordem $O(1/M)$, enquanto que no caso da inclinação s^- dada pela (3.61), a precisão é da ordem de $O(1/M^2)$. Visto que a fórmula para a inclinação é $s^- = 1/M + \alpha/2$, podemos esperar que ocorra uma discrepância razoável entre os valores analíticos e numéricos de s^- quando o ângulo for pequeno, i.e., $\alpha \lesssim 0.1$. Isto contribuirá, na ordem de $O(x^*/M^2)$, no erro para se determinar analiticamente a localização espacial no eixo y do sólito escuro oblíquo para alguma seção transversal feita em $x = x^*$ (como nas Figs. 3.12 – 3.14). Notamos ainda que a previsão analítica da localização do sólito também está sujeita a um desvio da ordem de um comprimento de onda típico, por causa da teoria da modulação.

Notamos nos perfis de densidade nas Figs. 3.12 – 3.14 (à direita) uma característica importante do padrão de onda que não é capturado pelas soluções de modulação. Podemos observar oscilações de pequena amplitude além da borda harmônica externa y^+ da DSW (definida pela solução de modulação). Estas oscilações lineares representam

Figura 3.15: Parâmetros do primeiro sóliton escuro na DSW como função do ângulo de diferentes cunhas. **À esquerda:** amplitude do sóliton a^- ; **À direita:** inclinação do sóliton s^- . Os dados numéricos foram obtidos para $x = 50$.

uma parte essencial do padrão de onda observado e devem analisadas. Uma distribuição de onda similar foi considerada em [31–33] e relacionada com as Bogoliubov-Kelvin *ship-waves* geradas no fluxo supersônico de um BEC através de um obstáculo pontual (ver também em [24] detalhes deste padrão observado experimentalmente). Vamos construir na próxima seção uma solução de modulação estendida que descreve simultaneamente a DSW e também a distribuição de *ship-waves* lineares.

Finalmente, na região altamente não-linear próxima à superfície da cunha para grandes valores de x , podemos observar oscilações das linhas do sóliton escuro (ver o gráfico de densidade na Fig. 3.14 à esquerda). Isto é um efeito da chamada instabilidade *snake* dos sólitons escuros [41–43]. Contudo, para velocidades do fluxo suficientemente altas, estas perturbações instáveis são carregadas pelo fluxo ao longo dos sólitons e portanto, elas se tornam apenas convectivamente instáveis no sistema de referência do obstáculo [30]. Logo, como no nosso caso o número de Mach é grande, a estrutura da DSW pode ser considerada como sendo efetivamente estável e tratada como uma solução estacionária da NLS 2D.

Recentemente o problema do fluxo 2D de BEC através de uma cunha infinita também foi tratado em [64]. Neste trabalho foram consideradas cunhas com ângulos de abertura maiores que os discutidos nesta tese. Neste caso foram observadas a excitação espontânea de vórtices e o início de uma dinâmica turbulenta associada à cavitação do superfluido.

3.5 Fluxo através de uma asa

Consideramos agora o fluxo supersônico através de um obstáculo alongado, delgado e finito — uma asa. O ângulo de ataque é zero e portanto, vamos nos restringir para o tratamento analítico, por conveniência, ao padrão de onda no semi-plano superior.

Figura 3.16: Gráfico de densidade do fluxo supersônico bidimensional de BEC através de uma asa parabólica. O fluxo é da esquerda para a direita e tem velocidade $M = 10$. A linha verde tracejada representa o contorno da asa dado pela Eq. (3.44).

Apresentamos na Fig 3.16 o gráfico de densidade do fluxo bidimensional supersônico ($M = 10$) através de uma asa com forma parabólica simétrica determinada pela função (3.44): $F(x) = \alpha x(1 - x/L)$ com ângulo $\alpha = 0.15$ e comprimento $L = 100$. Podemos ver que o padrão de onda está de acordo com as previsões qualitativas feitas na seção 3.3.3. De fato, podemos ver que a DSW frontal tem estrutura similar ao caso do fluxo supersônico através de uma cunha descrito na seção 3.4. Vemos também um leque de sólitons escuros oblíquos emergindo a partir da extremidade traseira da asa. Diferentemente do caso da cunha, a DSW frontal não é caracterizada por um salto constante da densidade n e da velocidade v . Assim, a amplitude das oscilações decresce à medida que a distância do ponto de geração $(0, 0)$ aumenta, i.e., da extremidade frontal da asa. Consequentemente, a onda frontal degenera em uma onda dispersiva de pequena amplitude, cuja distribuição das cristas de onda tem forma similar ao padrão de *ship-waves* descrito em [31, 32].

Construiremos a seguir a solução de modulação completa para a DSW frontal e considerando-se seu comportamento assintótico para grandes valores de x e y apresentaremos as distribuições da amplitude e do comprimento de onda compatíveis com o

Figura 3.17: À esquerda: Parte frontal de uma asa no semi-plano superior. À direita: Condição inicial assintoticamente equivalente para λ_+ .

padrão de *ship-waves*. Para a DSW gerada na parte traseira da asa, utilizaremos a regra de quantização semiclássica generalizada de Bohr-Sommerfeld.

3.5.1 Fluxo na parte frontal da asa

Consideramos uma função $F(x)$ do tipo mostrado na Fig. 3.17 à esquerda, tal que $F = 0$ para $x \leq 0$, $F'(0^+) = \alpha \ll 1$, $F'(x) > 0$ para $0 < x \leq x_0$ e $F'(x) = 0$ para $x \geq x_0$. Vemos da Eq. (3.38) que para fluxos altamente supersônicos, a condição inicial assintoticamente equivalente para $\lambda_+ = \frac{1}{2}v + \sqrt{n}$ [ver Eq. (3.26)] tem a forma mostrada na Fig. 3.17 à direita (ver também Fig. 3.7). O outro invariante de Riemann é $\lambda_- = -1$ [ver Eq. (3.39)] e $Y_0 = f(\xi_0) - \xi_0$, onde $\xi_0 = x_0/M$. Em termos do problema do pistão, isto corresponde ao seu movimento para frente (compressão do gás). A velocidade inicial do pistão é $v_p = M\alpha$ (como no problema do fluxo através da cunha com ângulo α). Entretanto, o movimento do pistão desacelera até que ele eventualmente pare em $T = \xi_0$. Assumiremos que $\alpha M < 2$ para evitarmos a situação da geração de ondas de transição discutidas na seção anterior para o problema do fluxo através de uma cunha.

Como foi explicado na seção 3.3.3, a perturbação causada pela parte frontal da asa no fluxo supersônico de BEC transformar-se-á eventualmente (para $T \gg 1$) em uma onda dispersiva linear. Entretanto, para valores intermediários de T , a “evolução” espacial desta perturbação leva à formação de uma DSW com estrutura similar àquela gerada no fluxo através de uma cunha descrito na seção anterior. Ou seja, mesmo nesta configuração “livre de sólitons” (espectro contínuo de λ_+ – ver Figs. 3.7 e 3.17), temos ainda a formação da DSW e de sólitons escuros, embora como um padrão de onda intermediário. Enquanto nos problemas de evolução temporal este padrão de onda é transiente, no problema estacionário 2D a DSW frontal existe para todos os tempos e se transforma em ondas lineares somente para grandes distâncias do corpo. A diferença fundamental é que devido à presença da escala espacial x_0 , a dinâmica modulacional não

é mais auto-similar, resultando em variações do parâmetro de onda ao longo das linhas das cristas de onda, as quais tem agora geometria curva. Esperamos que o sóliton escuro oblíquo formado na borda interna da DSW terá inicialmente (i.e. para $x = 0, y = 0$) na aproximação de Whitham inclinação $s^- = \alpha/2 + 1/M$ e amplitude $a^- = 2\alpha M$, como no caso do fluxo através da cunha. Contudo, para grandes distâncias do corpo, a amplitude e a inclinação decrescem e podemos esperar que assintoticamente $a^- \rightarrow 0$ e $s^- \rightarrow 1/M$ para $x \rightarrow \infty$.

3.5.2 Solução de modulação

Usaremos as Eqs. (3.31) e (3.33) para formular as condições de correspondência para os invariantes de Riemann na DSW frontal (omitindo o subscrito em $Y_f^\pm$)

$$\begin{aligned} \text{Em } Y = Y^-(T) : \quad & \lambda_3 = \lambda_2, \quad \lambda_4 = \lambda_+, \quad \lambda_1 = -1, \\ \text{Em } Y = Y^+(T) : \quad & \lambda_3 = \lambda_4, \quad \lambda_2 = 1, \quad \lambda_1 = -1, \end{aligned} \quad (3.69)$$

onde $\lambda_+(Y, T)$ é a solução da equação de onda (3.36) com a condição inicial $\lambda_+(Y, 0)$ definida por (3.38). Temos então uma representação implícita para λ_+

$$Y - \frac{1}{2}(3\lambda_+ - 1)T = w(\lambda_+), \quad (3.70)$$

onde $w(\lambda_+)$ é a função inversa de $\lambda_+(Y, 0)$. A função $w(\lambda_+)$ deve ser escolhida de forma que a condição (3.35) seja satisfeita, o que implica

$$w(\lambda_+) = f(\xi) - \left(\frac{3}{2}f'(\xi) + 1 \right) \xi,$$

e ξ é determinado implicitamente pela Eq. (3.38). Na Fig. 3.18 apresentamos o comportamento esquemático dos invariantes de Riemann correspondentes às condições de correspondência (3.69).

Como o problema modulacional [Eqs. (3.19) e (3.69)] não é auto-similar, empregamos a transformação hodográfica [62] para resolvê-lo. Devemos observar que como $\lambda_1 = -1$ e $\lambda_2 = 1$ satisfazem as equações de modulação (3.19) e as condições de correspondência (3.69), temos que $\lambda_1 = -1$ e $\lambda_2 = 1$ em todos os pontos. Com isto, aplicando a transformação hodográfica [62], obtemos a inclinação da borda externa da DSW no plano xy físico

$$s^+ = \frac{y}{x} = \frac{2(\alpha M)^2 + 4(\alpha M) + 1}{M(1 + \alpha M)}. \quad (3.71)$$

Portanto, a borda externa da DSW espacial é determinada pelo ângulo de abertura α e não depende da geometria específica do obtáculo, i.e., da função $F(x)$. De fato, a

Figura 3.18: Comportamento esquemático dos invariantes de Riemann na solução de modulação para a DSW frontal.

Eq. (3.71) coincide com a expressão da inclinação da borda externa da DSW gerada no fluxo através de uma cunha de ângulo α [cf. Eq. (3.60)].

Finalmente, as distribuições assintóticas da amplitude e do número de onda em termos das variáveis x e y ($x, y \gg 1$) são [ver detalhes em [62]]

$$\begin{aligned} a &\cong \left(\frac{M}{x}\right)^{1/2} A\left(\frac{\tau + \sqrt{\tau^2 + 8}}{4}\right), \\ k &\cong \frac{1}{2} \sqrt{(\tau + \sqrt{\tau^2 + 8})^2 - 16} \end{aligned} \quad (3.72)$$

onde $\tau = M \frac{y}{x}$.

Notamos que $k \rightarrow 0$ quando $\tau \rightarrow 1$, o que representa a linha de Mach na aproximação supersônica. Vamos discutir este caso novamente na próxima seção quando mostraremos que a borda interna (sóliton) da DSW frontal se aproxima assintoticamente da linha de Mach a medida que $x \rightarrow \infty$. Note que a distribuição do número de onda k em (3.72) não depende da forma nem do tamanho do obstáculo. Isto nos permitirá construir uma descrição analítica do padrão universal de *ship-waves* gerado no fluxo supersônico através de corpos delgados.

Por outro lado, a distribuição da amplitude $a(x, y)$ na Eq. (3.72), depende da forma da asa através da função $A(\zeta)$. No caso do obstáculo parabólico definido pela Eq. (3.44), a função $w(z)$, que é a inversa de $\lambda_+(Y, 0)$ no intervalo $[Y_0, 0]$, pode ser facilmente calculada. Para isso, basta isolarmos o parâmetro ξ na primeira fórmula da Eq. (3.45)

$$\xi = \frac{l}{2\alpha M}(1 + \alpha M - \lambda_+)$$

Figura 3.19: Distribuições assintóticas $[(x/M) \gg 1]$ da amplitude a (**à esquerda**) e do comprimento de onda $2\pi/k$ (**à direita**) da DSW frontal gerada no fluxo supersônico ($M = 10$) de BEC através de uma asa parabólica (Eq. 3.44) com comprimento $L = 100$ e ângulo de abertura $\alpha = 0.15$. As comparações entre a solução de modulação assintótica (3.72) (linha contínua) e a solução numérica (círculos) são feitas para $x = 50$.

e substituímos esta expressão na segunda fórmula da Eq. (3.45) para obtermos

$$w(z) = -\frac{l}{2\alpha M}(\alpha M + 1 - z) \left(z - \frac{\alpha M}{2} \right) \quad (3.73)$$

e a função $A(\zeta)$ é dada por [62]

$$A(\zeta) = 4\sqrt{\frac{\zeta(\zeta + 1)}{\pi(2\zeta^2 + 1)}} (\zeta - 1)^{1/4} \left(\frac{l}{15\alpha M} (1 + \alpha M - \zeta)^{3/2} (8\zeta - 3\alpha M + 2) \right)^{1/2}. \quad (3.74)$$

Apresentamos na Fig 3.19 as comparações entre distribuições assintóticas [Eqs. (3.72) e (3.74)] e as distribuições de a e k obtidas da nossa solução numérica completa 2D. Notamos que o acordo é muito bom para ambas as distribuições.

3.5.3 Borda interna da DSW

Vamos agora determinar a borda interna $y^-(x)$ da DSW definida pela condição solitônica $m = 1$. Como no caso do fluxo através de uma cunha, vamos nos concentrar na derivação da amplitude e da inclinação do sóliton interno, já que sua posição real pode diferir da curva $y^-(x)$ obtida através da teoria da modulação devido a uma perda de fase.

Em termos do problema do pistão, desejamos encontrar a curva $Y = Y^-(T)$ que satisfaz a condição de correspondência (3.69). Como $\lambda_2 = 1$ satisfaz as equações (3.19)

e (3.69) em todos os pontos, a condição de correspondência (3.69) na borda interna $Y = Y^-(T)$ é

$$\lambda_3 = \lambda_2 = 1, \quad \lambda_4 = \lambda_+, \quad \lambda_1 = -1, \quad (3.75)$$

onde $\lambda_+(Y, T)$ obedece a equação da onda (3.70). Por outro lado, a curva $Y = Y^-(T)$ é determinada pela condição cinemática (3.30), na qual introduzimos os valores dos λ_j 's dados em (3.75) e lembramos que $V_2 = V_3 = \frac{1}{2}(\lambda_1 + 2\lambda_2 + \lambda_4)$ quando $m = 1$ [cf. Eq. (3.24)]. Consequentemente, obtemos o sistema

$$Y - \frac{1}{2}(3\lambda_+ - 1)T = w(\lambda_+), \quad \frac{dY}{dT} = \frac{1}{2}(1 + \lambda_+) \quad (3.76)$$

ao longo da borda interna. Introduzimos na Eq. (3.76) $Y = Y_s(\lambda^*)$, $T = T_s(\lambda^*)$ e $\lambda_+ = \lambda^*$, onde λ^* é o parâmetro ao longo da curva da borda interna, de forma que $Y_s(A^+) = 0$ e $T_s(A^+) = 0$ (com $\lambda^+(0, 0) = A^+$ —ver Fig. 3.17).

A inclinação local do sólito escuro interno está relacionada com a sua amplitude a^- segundo (ver Eq. [62])

$$s^- = \frac{dy^-}{dx} = \frac{1}{M} \left(1 + \frac{a^-}{4} \right). \quad (3.77)$$

Como próximo à origem $(x, y) \rightarrow (0, 0)$ temos $\lambda_3 \rightarrow \lambda_2 = 1$ e $\lambda_4 \rightarrow A^+ = 1 + \alpha M$, obtemos para a amplitude do sólito $a^-(0, 0) = 2(\lambda_4 - \lambda_3) = 2\alpha M$ e portanto, a inclinação inicial da borda interna é $s^-(0) = 1/M + \alpha/2$, a qual coincide com a inclinação do sólito escuro na DSW gerada no fluxo através de uma cunha [ver Eq. (3.61)].

No caso da asa parabólica descrita pela Eq. (3.44), temos que

$$T_s = \frac{l}{30\alpha M} \left((10 - 3\alpha M) \left(\frac{\alpha M}{\lambda^* - 1} \right)^{3/2} - 12\lambda^* + 15\alpha M + 2 \right) \quad (3.78)$$

e portanto, a função $y^-(x)$ que define a posição do sólito escuro interno é dada por

$$y = y^-(x) : \quad y = Y_s(\lambda^*), \quad x = MT_s(\lambda^*), \quad (3.79)$$

onde

$$Y_s = \frac{1}{2}(3\lambda^* - 1)T_s(\lambda^*) + w(\lambda^*). \quad (3.80)$$

Finalmente, $x \gg 1$ obtemos a expressão para a amplitude $a^-(x)$

$$x = \frac{l}{30\alpha} \left((10 - 3\alpha M) \left(\frac{2\alpha M}{a^-} \right)^{3/2} - 6a^- + 15\alpha M - 10 \right). \quad (3.81)$$

Figura 3.20: Decaimento da amplitude ao longo do sóliton escuro interno. A linha contínua representa a solução de modulação assintótica (3.81) e os círculos, os valores da amplitude obtidos da simulação numérica completa 2D.

Podemos observar que em $x = 0$ temos $a^- = 2\alpha M$ e $a^- \rightarrow 0$ quando $x \rightarrow \infty$. Em particular, para $x \gg 1$, temos o comportamento assintótico da amplitude ao longo do sóliton

$$a^- \simeq \left(\frac{l(10 - 3\alpha M)}{30\alpha} \right)^{2/3} \frac{2\alpha M}{x^{2/3}} \quad (3.82)$$

Comparamos na Fig. 3.20 o comportamento da amplitude (3.81) ao longo da borda interna da DSW com os resultados numéricos e verificamos um bom acordo para valores de x suficientemente grandes

3.5.4 Ship-waves

A solução de modulação obtida em [62] e descrita na seção 3.5.2 é definida no domínio $y^-(x) \leq y \leq y^+(x)$ e implica que a amplitude da onda (3.72) se anula na borda externa $y^+(x)$ da DSW e que fora desta região o fluxo é constante. Por outro lado, a borda $y^+(x)$, associada à velocidade de grupo linear, não é uma linha de crista de onda. Logo, devemos estender as cristas de onda além da borda externa da DSW. De fato, vemos claramente na solução numérica (ver os gráficos de densidade nas Figs. 3.12–3.14) que as cristas de onda não terminam na borda externa da solução de modulação e que as pequenas oscilações estão presentes fora da DSW. O fato de que a amplitude da solução de modulação da DSW deve se anular em $y = y^+(x)$ não implica necessariamente que a amplitude real da onda se anule; isto significa apenas que estas oscilações são lineares. A fim de capturar estas oscilações para $y > y^+(x)$, introduzimos um pacote de onda de

amplitude pequena como uma extensão natural da DSW e usamos a teoria da modulação linear para sua descrição.

Usando-se a definição da velocidade de fase U [ver Eq. (3.13)] e do número de onda $k = 2\pi/\mathfrak{L}$, onde $\mathfrak{L}$ é o comprimento de onda [ver Eq. 3.16], podemos mostrar que no limite linear $\lambda_3 \rightarrow \lambda_4$ temos, com $\lambda_1 = -1$ e $\lambda_2 = 1$, (ver [62])

$$\begin{aligned} k &= \frac{2\pi}{\mathfrak{L}(-1, 1, \lambda_4, \lambda_4)} = 2\sqrt{\lambda_4^2 - 1}, \\ U &= \lambda_4 = \sqrt{1 + k^2/4}. \end{aligned} \quad (3.83)$$

Assim, a fase angular local da onda “viajante” bidimensional é dada, a menos de uma fase inicial arbitrária $\Theta_0 \in [0, 2\pi]$ por [ver Eq. (3.13)],

$$\Theta = k_y \theta = k_y \left(y - U \frac{x}{M} \right) = k_y y - \frac{k_y}{M} \sqrt{1 + \frac{k_y^2}{4}} x, \quad (3.84)$$

e portanto, o vetor de onda da onda linear modulada é

$$\mathbf{k} = \left(-\frac{k_y}{M} \sqrt{1 + \frac{k_y^2}{4}}, k_y \right). \quad (3.85)$$

Como no caso do fluxo supersônico bidimensional através de um obstáculo pontual [31, 32], introduzimos o ângulo χ entre o vetor radial $\mathbf{r}$ e o eixo x , i.e., a direção do fluxo, e o ângulo η entre o vetor de onda $\mathbf{k}$ e o eixo $-x$ (ver Fig. 3.21 à esquerda)

$$\begin{aligned} \mathbf{r} &= (r \cos \chi, r \sin \chi), \\ \mathbf{k} &= (-|\mathbf{k}| \cos \eta, |\mathbf{k}| \sin \eta). \end{aligned} \quad (3.86)$$

Logo, igualando-se as componentes do vetor $\mathbf{k}$ na Eq. (3.86) e na Eq. (3.85), obtemos a seguinte expressão para o módulo do vetor de onda

$$|\mathbf{k}| = \frac{2\sqrt{M^2 \cot^2 \eta - 1}}{\sin \eta} \quad (3.87)$$

na aproximação hipersônica. Note que o número de onda k definido pela Eq. (3.83) é consistente com a componente y do vetor de onda $\mathbf{k}$ bidimensional na Eq. (3.85). Temos então

$$\lambda_4 = \sqrt{1 + k_y^2/4} = \sqrt{1 + |\mathbf{k}|^2 \sin^2 \eta/4} = M \cot \eta. \quad (3.88)$$

Foi mostrado em [62] que para $T \gg 1$

$$\frac{Y}{T} \cong V_3(-1, 1, \lambda_4, \lambda_4) = 2\lambda_4 - \frac{1}{\lambda_4}. \quad (3.89)$$

Figura 3.21: **À esquerda:** Geometria da crista de onda no padrão de *ship-wave* da NLS. O vetor de onda $\mathbf{k}$ é normal à linha da crista de onda ilustrada esquematicamente como uma curva. **À direita:** Linhas das cristas de onda teóricas no padrão de *ship-wave* (linhas sólidas); as fronteiras da DSW são determinadas pela solução de modulação e são representadas pelas linhas tracejadas.

Desta forma, substituindo-se (3.88) na Eq. (3.89) e usando-se (3.86), obtemos uma relação entre os ângulos χ e η

$$\tan \chi = 2 \cot \eta - \tan \eta / M^2. \quad (3.90)$$

Notamos então que as Eqs. (3.87) e (3.90) representam exatamente a aproximação hipersônica da teoria de *ship-waves* desenvolvida em [31,32] para o caso do fluxo através de um obstáculo pontual. De fato, nesta teoria o módulo do vetor de onda é dado por

$$|\mathbf{k}| = 2\sqrt{M^2 \cos^2 \eta - 1}, \quad (3.91)$$

que pode ser transformado na aproximação hipersônica em

$$|\mathbf{k}| = 2 \sin \eta \sqrt{M^2 \cot^2 \eta - 1}. \quad (3.92)$$

Isto é aproximadamente igual (3.87) se $\sin \eta \cong 1$, ou seja

$$\tan \eta \gg 1, \quad (3.93)$$

ou da Eq. (3.86)

$$|k_y/k_x| \gg 1. \quad (3.94)$$

Analogamente, a relação [31, 32]

$$\tan \chi = \frac{(1 + |\mathbf{k}|^2/2) \tan \eta}{M^2 - (1 + |\mathbf{k}|^2/2)} \quad (3.95)$$

entre os ângulos χ e η para o caso do obstáculo pontual no limite hipersônico pode ser escrita da seguinte maneira

$$\tan \chi \cong \frac{2 \tan \eta}{\tan^2 \eta - 1} - \frac{\tan^3 \eta}{M^2(\tan^2 \eta - 1)}, \quad (3.96)$$

usando-se a Eq. (3.92) na Eq. (3.95) e desprezando-se termos com $1/\cos^2 \eta$. Esta expressão se reduz a (3.90) com a condição (3.93), o que significa que os parâmetros do fluxo variam muito mais lentamente na direção x o que na direção y , que concorda com nossa hipótese inicial. Portanto, a solução das equações de Whitham que descreve a região da DSW coincide, para $x, y \gg 1$, com a aproximação correspondente da teoria linear de *ship-wave* que descreve as ondas fora da região da DSW. Logo, a solução assintótica (3.72) não está restrita à região da DSW e pode ser empregada na descrição de todo o fluxo para distâncias suficientemente grandes da parte frontal do obstáculo. Podemos portanto estender as linhas de cristas de onda para toda a região fora do cone de Mach.

A fórmula que descreve as oscilações de densidade na teoria das *ship-waves* produzidas no fluxo através de um obstáculo pontual (ver Eq. (20) em [32]) é

$$\delta n = \int \frac{V(\mathbf{k})|\mathbf{k}|^2 e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{(\mathbf{k} \cdot \mathbf{U})^2 - |\mathbf{k}|^2(1 + |\mathbf{k}|^2/4)} \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^2}, \quad (3.97)$$

onde $\mathbf{U} = (M, 0)$ e

$$V(\mathbf{k}) = \int V(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} d\mathbf{r} \quad (3.98)$$

é a imagem de Fourier do potencial $V(\mathbf{r})$ que representa o obstáculo, sendo $\mathbf{k}$ e $\mathbf{r}$ dados na Eq. (3.86). Na integral acima, realizada para $|\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}| \gg 1$ (ver [32]), a contribuição principal é dada por um ponto estacionário da fase $\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}$, o qual não depende da função $V(\mathbf{k})$. Isto leva à relação (3.95) e, conseqüentemente às fórmulas paramétricas para as linhas de crista de onda

$$\begin{aligned} x &= \frac{4\Theta}{|\mathbf{k}|^3} \cos \eta (1 - M^2 \cos 2\eta), \\ y &= \frac{4\Theta}{|\mathbf{k}|^3} \sin \eta (2M^2 \cos^2 \eta - 1), \end{aligned} \quad (3.99)$$

onde $\Theta = 2\pi, 4\pi, 6\pi, \dots$, o vetor de onda $|\mathbf{k}|$ é dado pela Eq. (3.91) e η está definido no domínio

$$-\arccos(1/M) \leq \eta \leq \arccos(1/M). \quad (3.100)$$

Figura 3.22: Padrão universal de *ship-wave* (3.99) para um corpo delgado (linhas tracejadas) com as linhas de crista de onda no fluxo supersônico de BEC através da parte frontal de uma asa parabólica (3.44) com ângulo $\alpha = 0.15$ e comprimento $L = 100$. A velocidade do fluxo (da esquerda para a direita) é $M = 10$.

No limite $\cos \eta \gg 1/M$, que corresponde à região localizada não muito distante da parte frontal do obstáculo, as linhas de crista de onda assumem a forma parabólica

$$x(y) \cong -\frac{\Theta}{2M} + \frac{M}{2\Theta}y^2. \quad (3.101)$$

Por outro lado, quando $\cos \eta \rightarrow 1/M$, as linhas de crista de onda convergem assintoticamente a linhas retas paralelas às linhas do cone de Mach

$$y \cong \frac{x}{M}. \quad (3.102)$$

Note que as expressões obtidas para a geometria das linhas de crista de onda não dependem do ângulo de abertura α do obstáculo e portanto, da inclinação da borda externa $y^+(x)$ da DSW. De fato, apesar da amplitude da onda se anular em $y^+(x)$ na aproximação de Whitham, as curvas das linhas de crista de onda podem ser continuadas para fora da borda externa da DSW, onde elas representam a distribuição espacial das ondas lineares de pequena amplitude. Assim, o padrão linear de *ship-waves* pode ser visto como uma continuação natural da distribuição das cristas de onda na DSW espacial oblíqua. Contudo, quando entramos na região da DSW ao longo da linha de crista de onda, a amplitude da DSW cresce gradualmente e a aproximação linear perde sua validade. No caso de uma DSW bem estabelecida (altamente não-linear), a forma das cristas de onda pode depender da forma do obstáculo. Contudo, para obstáculos cujo

Figura 3.23: **À esquerda:** perfil da parte traseira da asa no semi-plano superior. **À direita:** Condição inicial assintoticamente equivalente para o invariante de Riemann λ_+ .

perfil possui derivada com decaimento suficientemente rápido [$f''(\xi) \ll 1$], a aproximação linear funciona muito bem em uma região ampla em torno da extremidade frontal do obstáculo, inclusive na vizinhança da borda externa da DSW. Na Fig. 3.22 comparamos os resultados da previsão analítica com a solução numérica 2D completa.

3.5.5 Fluxo na parte traseira da asa

Consideramos agora a DSW gerada no fluxo através da extremidade traseira da asa. O perfil inicial do invariante de Riemann correspondente λ_+ é dado pela Eq. (3.38) para $Y_1 < Y < Y_0$ e pela Eq. (3.42) para $Y_2 < Y < Y_1$. Lembramos que $Y_0 = f(x_0/M) - x_0/M$, onde x_0 é o ponto onde a função $f(T)$ atinge seu valor máximo e tem derivada nula, $Y_1 = -(\frac{3}{2}f'(l^-) + 1)l$, $Y_2 = -l$ e $\lambda_+(Y_1, 0) = 1 + f'(l^-)$ [ver Eqs. (3.40) e (3.41)]. O outro invariante de Riemann é constante: $\lambda_- = -1$. A forma da função $\lambda_+(Y, 0)$ é ilustrada na Fig. 3.23 à direita. A evolução do “poço de potencial” $\lambda_+(Y, T)$ leva à quebra da onda em

$$T_b = \frac{Y_1 - Y_2}{V_+(1, -1) - V_+(\lambda_+(Y_1, 0), -1)} = l, \quad (3.103)$$

$$Y_b = Y_2 + V_+(1, -1)T_b = 0,$$

onde $V_+(\lambda_+, \lambda_-)$ é dado pela Eq. (3.28). A Eq. (3.103) implica que a DSW traseira é gerada a partir da extremidade traseira da asa $(T_b, Y_b) = (l, 0)$ (ver Fig. 3.5). O perfil de $\lambda_+(Y, T_b)$ pode ser visto na Fig. 3.24 à esquerda

Para $T > T_b$ ocorre a formação de uma DSW atrás da asa (ver região IV na Fig 3.5). Esta DSW pode ser descrita pela solução de onda viajante modulada análoga àquela construída na seção anterior para a DSW frontal. A principal diferença é que agora os invariantes de Riemann λ_2 e λ_3 variam dentro do domínio da solução de modulação,

Figura 3.24: **À esquerda:** perfil dos invariantes de Riemann $\lambda_{\pm}$ no ponto de quebra da onda $T = T_b$. **À direita:** comportamento dos invariantes de Riemann na solução de modulação para a DSW traseira para $T > T_b$.

enquanto que $\lambda_1 = -1$ e $\lambda_4 = 1$ (ver Fig. 3.24 à direita). Da solução de modulação temos que quando $T \rightarrow \infty$, $\lambda_2 \rightarrow \lambda_3$ (i.e., $m \rightarrow 1$) em todo lugar exceto em uma pequena vizinhança da borda externa onde $\lambda_3 = \lambda_4 = 1$ e $m \rightarrow 0$. Isto implica que a DSW traseira se transforma assintoticamente para $x \gg 1$, $y \gg 1$ em um trem de sólitons. Este comportamento é esperado, já que o perfil inicial de λ_+ (see Fig. 3.23 à direita) corresponde ao “poço de potencial” de larga escala no problema de espalhamento associado no formalismo da *inverse scattering transform* (IST) de Zakharov-Shabat para a NLS 1D. Isto leva a uma distribuição semi-clássica dos estados ligados, cada um relacionado a um sólito escuro na solução da NLS [15, 45]. Como estamos interessados no comportamento assintótico do fluxo em uma região suficientemente distante do obstáculo, onde a DSW traseira se transforma em um leque de sólitons espaciais bem separados entre si, não precisamos derivar a solução de modulação completa. Como foi demonstrado em [15, 45], cada sólito que evolui a partir do “poço” inicial é parametrizado pelo auto-valor $\lambda = \lambda_k$ obtido através da regra de quantização generalizada de Bohr-Sommerfeld, consistente com a aproximação de Whitham usada anteriormente,

$$\oint \sqrt{(\lambda - \lambda_+)(\lambda - \lambda_-)} dY = 2\pi \left(k + \frac{1}{2} \right), \quad (3.104)$$

onde $k = 0, 1, \dots, K$ e $\lambda_+ = \lambda_+(Y, 0)$ é dado pelas Eqs. (3.38) e (3.42), $\lambda_- = -1$ e a integração é realizada ao longo do círculo que engloba dois pontos de retorno definidos por $\lambda = \lambda_+(Y, 0)$. A amplitude a_k do k -ésimo sólito é dada em termos do autovalor λ_k por

$$a_k = 1 - \lambda_k^2. \quad (3.105)$$

Figura 3.25: Distribuição dos sólitons escuros oblíquos gerados a partir da cauda de uma asa parabólica. Apresentamos a parte traseira do obstáculo, cuja superfície é representada pela linha tracejada. Notamos que os sólitons escuros mais profundos se localizam próximos do eixo horizontal.

Voltando às coordenadas espaciais (3.5), obtemos o perfil de densidade do λ_k -sóliton (ver [15])

$$n_k(x, y) = 1 - \frac{1 - \lambda_k^2}{\cosh^2[\sqrt{1 - \lambda_k^2}(y - (\lambda_k/M)x)]}, \quad (3.106)$$

ou seja, o leque de sólitons escuros espaciais é formado de sólitons escuros localizados assintoticamente ao longo das linhas

$$y = (\lambda_k/M)x, \quad (3.107)$$

$k = 0, 1, \dots, K$, no semi-plano superior e analogamente um leque simétrico de sólitons é gerado no semi-plano inferior.

No caso de uma asa parabólica (3.44), a função $\lambda_+(Y, 0)$ correspondente à parte traseira da asa é dada pelas Eqs. (3.45) e (3.46) no intervalo $Y_2 < Y < Y_0$ e $\lambda_+ = 1$ fora deste intervalo. O seu valor mínimo ocorre em Y_1 : $\lambda_+(Y_1, 0) = 1 - \alpha M$. A integral em (3.104) é então calculada e obtemos uma expressão para os estados ligados $\lambda = \lambda_k$ [62]

$$\frac{l\sqrt{\lambda+1}}{15\alpha M}(\lambda - 1 + \alpha M)^{3/2}(3\alpha M + 8\lambda + 2) = 2\pi \left(k + \frac{1}{2}\right), \quad (3.108)$$

com $k = 0, 1, \dots, N$. As raízes com significado físico estão no intervalo $1 - \alpha M < \lambda_k < 1$. Como $\lambda_+ > \lambda_- = -1$, temos que $\alpha M < 2$ (para $\alpha M > 2$ devemos modificar a descrição,

dado que o ponto de vácuo aparece em $y = 0$). O valor da maior raiz λ_N é próximo da unidade, de forma que o número de sólitons no leque pode ser estimado tomando-se $\lambda_k = 1$ e $k = N$ em (3.108), i.e.,

$$N \approx \frac{1}{2\pi} \frac{\sqrt{2}l}{15} (\alpha M)^{1/2} (10 + 3\alpha M). \quad (3.109)$$

A fórmula semi-clássica (3.108) é válida assintoticamente, desde que $N \gg 1$, o que de acordo com (3.109) presume $l(\alpha M)^{1/2} \gg 1$. Contudo, como de costume com as distribuições de Bohr-Sommerfeld, a fórmula (3.108) funciona razoavelmente bem para uma ampla classe de parâmetros. No nosso caso, para $l = 10$, $\alpha = 0.15$ e $M = 10$ temos apenas 3 raízes físicas da equação (3.108), o que concorda com os três sólitons escuros observados na solução numérica (ver Fig. 3.16). As comparações entre as previsões de (3.108) e os resultados da simulação numérica para as amplitudes a_k e inclinações s_k dos sólitons escuros oblíquos podem ser encontradas na tabela abaixo.

k	λ_k	$a_k = 1 - \lambda_k^2$	a_k (num)	$s_k = \lambda_k/M$	s_k (num)
0	0.2915	0.9150	0.9170	0.0291	0.02
1	0.7101	0.4957	0.5689	0.0710	0.06
2	0.9649	0.0688	0.1903	0.0964	0.09

Levando-se em conta que o erro envolvido na aproximação hipersônica é da ordem de $O(1/M)$ para a amplitude do sólito e de $O(1/M^2)$ para sua inclinação, a comparação pode ser considerada como boa.

3.6 Sumário

Apresentamos agora os principais resultados contidos neste capítulo:

- Mostramos a geração de ondas de choque dispersivas no fluxo bidimensional hipersônico de BEC através de um corpo delgado, as quais possuem propriedades assintóticas distintas em cada uma das extremidades do obstáculo.
- Usando-se a aproximação do pistão dispersivo 1D, construímos soluções de modulação exatas para os problemas dos fluxos supersônicos 2D através de uma cunha infinita e de uma asa.
- Comparamos as soluções de modulação analíticas para o problema do pistão com as soluções numéricas 2D completas para fluxos através de uma cunha infinita e verificamos que esta aproximação funciona muito bem para fluxos hipersônicos (i.e., grandes valores do número de Mach M).
- Analisamos o comportamento assintótico da solução de modulação na DSW frontal no fluxo através de uma asa e derivamos as distribuições da amplitude a e do número de onda k para distâncias suficientes do obstáculo.
- A distribuição dos sólitons escuros oblíquos na DSW traseira foi obtida usando-se a regra de quantização generalizada de Bohr-Sommerfeld.

Espalhamento inelástico de átomos em um potencial de dois poços

4.1 Introdução

Gases bosônicos ou fermiônicos ultrafrios em redes óticas podem ser usados como uma “caixa de ferramentas” para a investigação de modelos fundamentais da Matéria Condensada [65]. Experimentos recentes abriram um novo campo para o estudo de estados quânticos em redes óticas, tais como estados de Mott e superfluidos [66, 67], onde a interação interatômica pode ser controlada via ressonância de Feshbach usando-se campos magnéticos externos [68]. Efeitos dependentes do spin [69–73], sistemas com frustração de spin [65], a formação de *dimers* de átomos fermiônicos [74, 75] e misturas com espécies atômicas diferentes [76–78] permitem a criação e o estudo de estados quânticos mais complexos.

As redes óticas são robustas e livres de fônons. Por outro lado, a interação elétron-fônon em um sólido leva a fenômenos físicos interessantes, como a supercondutividade, a instabilidade de Peierls, efeitos polarônicos e muitos outros. Com o avanço na física atômica e de lasers, o acoplamento de átomos ultrafrios a graus de liberdade bosônicos em uma rede ótica pode ser realizado e conseqüentemente, podemos simular a dinâmica dos elétrons na presença de fônons em um sólido. Recentemente, foi proposto o confinamento de átomos ultrafrios em um ressoador ótico para se estudar o efeito do acoplamento entre os átomos e o campo de fótons, o que leva a uma hamiltoniana efetiva de Hubbard com interação de longo alcance [79] e a um diagrama de fase interessante [80]. Misturas entre espécies atômicas bosônicas e fermiônicas podem também ajudar na compreensão do papel dos bósons na dinâmica dos férmions, onde os bósons condensados levam ao pareamento de férmions [81] e a ondas de densidade de carga de férmions [82]. Um exemplo interessante são os estados dimers, os quais foram discutidos em sistemas

do estado sólido [83], no modelo de Holstein-Hubbard [84] e também para um gás de Bose ultrafrio com *ring exchange* [85]. Gases atômicos ultrafrios também foram usados no estudo da dinâmica de estados quânticos, incluindo o comportamento de “colapso e renascimento” [86].

É importante distinguirmos sistemas finitos (pequenos) com poucos átomos de sistemas de muitos corpos com número de átomos muito grande [65]. Por exemplo, foi observado experimentalmente que em um sistema finito com dois átomos de spin-1/2, as dinâmicas do spin e de partícula são completamente separadas, análogo à separação entre carga e spin em sistemas unidimensionais [87,88]. Um outro exemplo de dinâmica restrita em sistemas atômicos finitos são estados emaranhados comprimidos (“entangled squeezed states”) em um BEC, cujos átomos estão distribuídos em poucos sítios de uma rede [89]. Estas observações indicam que a dinâmica de sistemas atômicos finitos pode ser restrita a um subespaço do espaço de Hilbert completo disponível para a hamiltoniana do modelo. Isto também pode significar que o sistema nunca atinge o estado fundamental da hamiltoniana se ele for preparado em um estado que não tem nenhuma interseção com o estado fundamental.

Em um sistema com dois átomos em um potencial de dois poços descrito pelo modelo de Hubbard, isto é uma consequência direta do fato que os auto-estados não misturam pares de sítios simplesmente ocupados com pares de sítios vazios e duplamente ocupados [90]. Por outro lado, a mistura destes estados em um sistema macroscópico, realizada devido ao espalhamento inelástico com outros átomos, pode levar a uma transição de fase quântica de primeira ordem, de sítios simplesmente ocupados para sítios duplamente ocupados e vazios. Isto foi observado em uma mistura de átomos leves e pesados, com estes últimos no estado de Mott [84]. Este sistema pode ser descrito por um modelo de Bose-Fermi conhecido na Física do estado sólido como modelo de Holstein-Hubbard (HH) [91,92]. Ajustando-se parâmetros físicos tais como a frequência e a amplitude do campo de laser em uma rede ótica e também a interação entre os átomos via ressonância de Feshbach, podemos preparar um sistema não apenas no seu estado fundamental, mas também em estados excitados e assim estudar sua dinâmica. Apesar de não ocorrer transição de fase para o estado fundamental em um sistema finito, as propriedades dinâmicas dos estados excitados podem mudar qualitativamente devido ao espalhamento inelástico descrito pelo modelo HH. Dentre os vários efeitos, ocorre a renormalização da taxa de tunelamento, conhecido como efeito polarônico, que foi recentemente discutido para uma impureza em um gás de Bose ultrafrio [93].

Desejamos estudar o efeito do espalhamento inelástico em um sistema com dois átomos fermiônicos de spin 1/2 em um potencial de dois poços, no qual os átomos fermiônicos estão sujeitos a uma interação de Hubbard repulsiva local e a um espalhamento com um átomo pesado (por exemplo, ^{87}Rb ou ^{40}K) em cada poço (ver Fig. 4.1). Podemos considerar os átomos pesados (HAs) como osciladores harmônicos, pelo

menos para baixas energias [94], e seus níveis energéticos são representados pelas linhas horizontais na Fig. 4.1. Cada um dos HAs com massa M tem um espectro do oscilador harmônico com espaçamento entre os níveis proporcional a $\sqrt{V_0/M}$, onde V_0 é a intensidade do campo de laser que forma o potencial periódico. O espaçamento entre os níveis de energia para os átomos fermiônicos leves (LFAs) é caracterizado pela taxa de tunelamento J através da barreira interna do potencial de dois poços. Logo, a dinâmica quântica é caracterizada pela troca de energia entre a energia de tunelamento (cinética) dos LFAs e o nível de energia de oscilador harmônico mais baixo dos HAs. O potencial de dois poços pode ser realizado experimentalmente superimpondo-se dois potenciais periódicos com diferentes frequências [88]. Isto nos permite variar a barreira de potencial interna, alterando a taxa de tunelamento dos LFAs entre os dois poços. Podemos ignorar o tunelamento dos HAs quando a barreira entre os poços é suficientemente alta. Desta forma, as excitações destes átomos acontecem devido a colisões com outros átomos. Para isso, acrescentamos ao sistema dois LFAs (e.g. ^6Li) preparados em dois estados hiperfinos $|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$. Estes átomos podem tunelar devido à baixa massa e podem ser espalhados pelos HAs. Durante o processo de espalhamento, o HA pode transferir energia aos LFAs. Os LFAs estão sujeitos à repulsão local.

Figura 4.1: Dois LFAs em um potencial de dois sítios com um HA em cada sítio. Os HAs são osciladores harmônicos e são representados pelas linhas horizontais (níveis de energia). Os LFAs podem tunelar de um sítio para o outro. Os sítios podem ser simplesmente ocupados (**à esquerda**) ou um sítio duplamente ocupado e o outro vazio (**à direita**).

4.2 Modelo de Holstein-Hubbard

Esta mistura atômica de LFAs e HAs pode ser bem descrita pelo modelo de Holstein-Hubbard [84, 91, 92]

$$H = -J \sum_{\langle \mathbf{j}, \mathbf{j}' \rangle} \sum_{\sigma=\uparrow, \downarrow} c_{\mathbf{j}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{j}'\sigma} + h.c. + \sum_{\mathbf{j}} \left[\omega_0 b_{\mathbf{j}}^\dagger b_{\mathbf{j}} + g(b_{\mathbf{j}}^\dagger + b_{\mathbf{j}})(n_{\mathbf{j}\uparrow} + n_{\mathbf{j}\downarrow}) + U n_{\mathbf{j}\uparrow} n_{\mathbf{j}\downarrow} \right]. \quad (4.1)$$

O primeiro termo descreve o tunelamento de um LFA com spin σ ($=\uparrow, \downarrow$) entre sítios vizinhos. Estes férmions são descritos por operadores fermiônicos de criação e aniquilação $c_{\mathbf{j}\sigma}^\dagger$ e $c_{\mathbf{j}\sigma}$, respectivamente. Os HAs formam um estado de Mott e são representados como osciladores harmônicos com frequência ω_0 em cada sítio. Assumimos que um HA num sítio é excitado independentemente do outro HA no outro sítio. Portanto eles podem ser considerados fônons locais e são descritos por operadores bosônicos de criação $b_{\mathbf{j}}^\dagger$ e aniquilação $b_{\mathbf{j}}$. Os fônons se acoplam aos LFAs e a constante de acoplamento é $g \sim \langle e | \hat{V} | f \rangle$, onde $\hat{V}$ é a interação entre os LFAs e HAs, $|f\rangle$ denota o estado fundamental de um HA e $|e\rangle$ o seu primeiro estado excitado. O quarto termo na hamiltoniana descreve a interação entre dois LFAs no mesmo sítio, onde U é a interação repulsiva local entre os LFAs. Num sistema no qual o número de partículas é igual ao número de sítios (*half-filled*), este modelo descreve uma transição de fase quântica entre estados com sítios simplesmente ocupados por LFAs (estados de Néel) e estados com sítios duplamente ocupados e vazios (estados *dimer*). Chamaremos o primeiro termo da hamiltoniana (4.1) de H_t (termo que descreve o tunelamento de LFAs e é não-diagonal)

$$H_t = -J \sum_{\langle \mathbf{j}, \mathbf{j}' \rangle} \sum_{\sigma=\uparrow, \downarrow} c_{\mathbf{j}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{j}'\sigma} + h.c.$$

e de H_I a hamiltoniana formada pelos demais termos, a qual tem ação local (no mesmo sítio)

$$H_I = \sum_{\mathbf{j}} \left[\omega_0 b_{\mathbf{j}}^\dagger b_{\mathbf{j}} + g(b_{\mathbf{j}}^\dagger + b_{\mathbf{j}})(n_{\mathbf{j}\uparrow} + n_{\mathbf{j}\downarrow}) + U n_{\mathbf{j}\uparrow} n_{\mathbf{j}\downarrow} \right].$$

Logo, podemos escrever $H = H_t + H_I$.

4.2.1 Transformação de Lang-Firsov

Para um dado conjunto de LFAs, representados por inteiros $n_{\mathbf{j}\sigma} = 0, 1$, a hamiltoniana local H_I pode ser diagonalizada em termos de estados produtos [84]

$$\prod_{\mathbf{j}} |N_{\mathbf{j}}; \sigma_{\mathbf{j}}\rangle, \quad (4.2)$$

onde $N_{\mathbf{j}} = 0, 1, 2, \dots$ é o número de fônons e $\sigma_{\mathbf{j}} = 0, \uparrow, \downarrow, \downarrow\uparrow$ representa os férmions no site $\mathbf{j}$.

O estado com $N_{\mathbf{j}}$ fônons e sem férmions no site $\mathbf{j}$

$$|N_{\mathbf{j}}; 0\rangle$$

é um auto-estado do operador número de fônons $b_{\mathbf{j}}^{\dagger}b_{\mathbf{j}}$ com autovalor $N_{\mathbf{j}}$. O produto destes estados (para cada sítio) é um auto-estado da hamiltoniana H_I . Para um férmion em cada sítio, temos o auto-estado

$$|N_{\mathbf{j}}; \sigma\rangle = c_{\mathbf{j}\sigma}^{\dagger} \exp\left[-\frac{g}{\omega_0}(b_{\mathbf{j}}^{\dagger} - b_{\mathbf{j}})\right] |N_{\mathbf{j}}; 0\rangle, \quad (\sigma = \uparrow, \downarrow) \quad (4.3)$$

e para dois férmions em cada sítio, temos

$$|N_{\mathbf{j}}; \downarrow\uparrow\rangle = c_{\mathbf{j}\uparrow}^{\dagger}c_{\mathbf{j}\downarrow}^{\dagger} \exp\left[-2\frac{g}{\omega_0}(b_{\mathbf{j}}^{\dagger} - b_{\mathbf{j}})\right] |N_{\mathbf{j}}; 0\rangle. \quad (4.4)$$

Portanto, o autovalor de $\prod_{\mathbf{j}} |N_{\mathbf{j}}, \sigma_{\mathbf{j}}\rangle$ com respeito a H_I é

$$\sum_{\mathbf{j}} \left[\omega_0 N_{\mathbf{j}} - \frac{g^2}{\omega_0} (n_{\mathbf{j}\uparrow} + n_{\mathbf{j}\downarrow})^2 + U n_{\mathbf{j}\uparrow} n_{\mathbf{j}\downarrow} \right], \quad (4.5)$$

onde os inteiros $n_{\mathbf{j}\sigma} = 0, 1$ contam o número de férmions no sítio $\mathbf{j}$ com spin σ . Nesta expressão vemos que a interação *atractiva* efetiva entre os férmions de intensidade g^2/ω_0 compete com a interação *repulsiva* entre férmions de intensidade U . Aplicando-se uma transformação unitária T na hamiltoniana H em (4.1), o sistema pode ser representado pela seguinte hamiltoniana transformada

$$H_{TU} = T H_t T^{\dagger} + \omega_0 \sum_{\mathbf{j}} b_{\mathbf{j}}^{\dagger} b_{\mathbf{j}} + \gamma \sum_{\mathbf{j}} n_{\mathbf{j}\uparrow} n_{\mathbf{j}\downarrow} - \frac{g^2}{\omega_0} \sum_{\mathbf{j}} (n_{\mathbf{j}\uparrow} + n_{\mathbf{j}\downarrow}) \quad (4.6)$$

com a constante de acoplamento efetiva de Hubbard

$$\gamma = U - 2g^2/\omega_0 \quad (4.7)$$

e o operador T é dado por

$$T = \prod_{\mathbf{j}} \left(\sum_{N_{\mathbf{j}} \geq 0} \sum_{\sigma=0, \uparrow, \downarrow, \downarrow\uparrow} e^{-\alpha_{\mathbf{j}} g (b_{\mathbf{j}}^{\dagger} - b_{\mathbf{j}})/\omega_0} |N_{\mathbf{j}}; \sigma\rangle \langle N_{\mathbf{j}}; \sigma| \right), \quad (4.8)$$

onde $\alpha_0 = 0$, $\alpha_{\uparrow} = \alpha_{\downarrow} = 1$ e $\alpha_{\downarrow\uparrow} = 2$. Os estados $|N_{\mathbf{j}}; \sigma\rangle$ contêm fônons mesmo quando $N_{\mathbf{j}} = 0$ devido ao termo exponencial nas Eqs. (4.3) e (4.4). Temos então para $N_{\mathbf{j}} = 0$ o

estado fundamental fonônico e para $N_j > 0$ excitações fonônicas. Note que ao aplicarmos a transformação unitária (4.8) sobre a hamiltoniana local H_I , **desacoplamos** os graus de liberdade bosônicos e fermiônicos. Uma boa discussão sobre a transformação de Lang-Firsov pode ser encontrada em [92]. Note que a aplicação de uma transformação unitária não altera a energia do sistema. De fato, $H|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle \Leftrightarrow THT^\dagger T|\Psi\rangle = ET|\Psi\rangle \Leftrightarrow H_{TU}|\Psi'\rangle = E|\Psi'\rangle$, onde $|\Psi'\rangle = T|\Psi\rangle$.

4.2.2 Modelo de Holstein-Hubbard para um potencial de dois poços

Restringimos agora o modelo de Holstein-Hubbard para uma rede (4.1) ao problema do potencial de dois poços e escolhemos as coordenadas $j = 1, 2$ para denotar cada sítio. Assim, a hamiltoniana transformada (4.6) restrita a dois sítios pode ser escrita como

$$H_\gamma = TH_tT^\dagger + \sum_{j=1,2} \left[\omega_0 b_j^\dagger b_j + \gamma n_{j\uparrow} n_{j\downarrow} - \frac{g^2}{\omega_0} (n_{j\uparrow} + n_{j\downarrow}) \right] \quad (4.9)$$

onde $\gamma = U - 2g^2/\omega_0$ [ver Eq. (4.7)]. Para um sistema com dois férmions com taxa de tunelamento nula (i.e., $J = 0$) a energia do estado fundamental de H_γ é dada por

$$E_0 = \epsilon - \gamma j \quad (4.10)$$

com

$$\epsilon = U - 4g^2/\omega_0 \quad (4.11)$$

e $2j$ é o número de sítios simplesmente ocupados. O acoplamento γ controla dois regimes distintos: para $\gamma > 0$, o estado fundamental tem dois sítios simplesmente ocupados ($j = 1$) e energia $-2(g^2/\omega_0)$, enquanto que para $\gamma < 0$, existe um sítio duplamente ocupado e outro vazio ($j = 0$) e a energia é ϵ . Portanto, para $\gamma = 0$, ocorre uma transição, onde o sistema muda de dois sítios simplesmente ocupados para um sítio duplamente ocupado e outro vazio. Não obstante, ambos os estados são degenerados mesmo para $\gamma \neq 0$, uma vez que a hamiltoniana H_γ não determina a configuração dos spins nem como os sítios duplamente ocupados e vazios estão distribuídos no potencial de dois sítios. O tunelamento na hamiltoniana H quebra esta degenerescência [91].

A hamiltoniana transformada H_γ na Eq. (4.9) pode ser escrita como

$$H_\gamma = H_{\gamma t} + H_{\gamma I},$$

onde $H_{\gamma t} = TH_tT^\dagger$ é o termo de tunelamento e $H_{\gamma I}$ descreve o termo local, ou seja, os demais termos na Eq. (4.9).

4.3 Potencial de dois poços com no máximo uma excitação fonônica por sítio

Mesmo para um potencial de dois poços com dois férmions, o espaço de Hilbert $\mathcal{H}$ da hamiltoniana na Eq. (4.1) tem dimensão infinita devido às excitações fonônicas. Quando a taxa tunelamento dos férmions J é não-nula, este problema se torna muito difícil de ser tratado. Contudo, a fim de estudarmos qualitativamente o efeito do espalhamento inelástico, podemos restringir o número de excitações fonônicas. O caso mais simples é o modelo no qual cada um dos HAs é um sistema de dois níveis, análogo ao modelo de Jaynes-Cummings na Ótica quântica [95]. Isto equivale considerarmos o sistema com no máximo uma excitação fonônica por sítio. A existência de apenas um fônon por sítio nos leva a uma matriz de ordem 16×16 . Resolvemos este problema exatamente e calculamos os níveis de energia.

Para $J = 0$ os quatro autovalores mais baixos são degenerados em pares como mostrado no gráfico à esquerda da Fig. 4.2. O estado fundamental tem uma cúspide mas não coincide com o estado fundamental exato para $J = 0$ dado na Eq. (4.10). A taxa de tunelamento J não-nula quebra esta degenerescência e os quatro autovalores se tornam distintos (cf. gráfico à esquerda na Fig. 4.3). Notamos que para grandes valores da constante de acoplamento g , as curvas não se juntam (i.e., as distâncias entre a primeira e a terceira e entre a segunda e a quarta curvas, respectivamente, permanecem finitas).

4.4 Hamiltoniana efetiva para um número arbitrário de excitações fonônicas

Consideramos agora o modelo de Holstein-Hubbard completo dado na Eq. (4.1) e tratamos suas propriedades espectrais de uma maneira aproximada. A idéia é estudar a evolução temporal do sistema quântico $|\Psi_t\rangle = e^{-itH}|\Psi_0\rangle$ a partir do estado inicial $|\Psi_0\rangle$. Esta evolução é um “passeio” por todo o espaço de Hilbert $\mathcal{H}$ acessível à hamiltoniana H . O método de projeções recursivo (RPM) (ver Apêndice C) organiza este passeio projetando-o iterativamente em uma sequência de subespaços. A grande vantagem deste método é que este passeio visita cada subespaço de $\mathcal{H}$ uma única vez [90, 96, 97]. Utilizamos uma aproximação dentro do RPM, que consiste em ignorar algumas partes do espaço de Hilbert que contribuem com baixa probabilidade para este passeio e isso leva a uma **hamiltoniana efetiva**.

Figura 4.2: Modelo sem tunelamento ($J = 0$): Quatro autovalores degenerados do problema de dois sítios com no máximo uma excitação fonônica por sítio (**à esquerda**) e os quatro polos mais baixos do resolvente da Eq. (4.16) com a hamiltoniana efetiva H_{eff} na Eq. (4.26) (**à direita**) para $U = 2$ e $\omega_0 = 50$. A curva 1 (curva 2) representa os níveis de energia com dois sítios simplesmente ocupados (um sítio vazio e o outro duplamente ocupado). **À esquerda**: As duas curvas se cruzam em $g \approx 7.6$. A energia do estado fundamental tem uma cúspide mas não coincide com o estado fundamental exato para $J = 0$ dado na Eq. (4.10). **À direita**: As duas curvas se cruzam em $g = 5\sqrt{2} \approx 7.07$.

4.4.1 O RPM aplicado ao modelo de Holstein-Hubbard para o problema de dois sítios

Podemos calcular diversas quantidades de interesse de um sistema atômico à temperatura T através da função de partição Z [84]. Esta pode ser representada em termos do resolvente $G(z) = (z - H)^{-1}$

$$Z = \text{Tr} [e^{-\beta H}] = \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} \text{Tr} [(z - H)^{-1}] e^{-\beta z} dz, \quad (4.12)$$

onde $\beta = 1/k_B T$, $\text{Tr}[\cdot]$ é o traço sobre todos os estados quânticos do sistema e Γ é um contorno no plano complexo que engloba todos os autovalores (reais) de H . A relação acima pode ser facilmente verificada usando-se o teorema dos resíduos [61]. Para baixas temperaturas, a maior contribuição para a função de partição vem dos estados de mais baixas energias (autovalores mais baixos de H). Logo, podemos aproximar $Z \approx Z_0$ da seguinte maneira

$$Z_0 = \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} \text{Tr} [P_0(z - H)^{-1} P_0] e^{-\beta z} dz, \quad (4.13)$$

Figura 4.3: Modelo com tunelamento ($J = 1$): Quatro autovalores do problema de dois sítios com no máximo uma excitação fonônica por sítio (**à esquerda**) e os quatro polos mais baixos do resolvente da Eq. (4.16) com a hamiltoniana efetiva H_{eff} na Eq. (4.26) (**à direita**) para $U = 2$ e $\omega_0 = 50$. **À esquerda**: A curva 2 e a curva 3 se cruzam em $g \approx 7.6$. Para grandes valores da constante de acoplamento g as distâncias entre a curva 1 e a curva 3, e entre a curva 2 e a curva 4, respectivamente, permanecem finitas (não-nulas). **À direita**: A curva 2 e a curva 3 se cruzam em $g \approx 7.1$. Para grandes valores de g as distâncias entre a curva 1 e a curva 3, e entre a curva 2 e a curva 4, respectivamente, tendem a zero segundo $\sim \tau^2/|\gamma|$. Isto é uma consequência do efeito polarônico, que causa o reescalonamento da taxa de tunelamento de férmions $J \rightarrow \tau = J e^{-g^2/\omega_0^2}$.

onde o traço é projetado pelo projetor P_0 sobre estados quânticos que são energeticamente próximos ao estado fundamental do sistema.

No caso do problema de dois sítios, escolhemos um projetor P_0 , o qual projeta no subespaço com estados sem excitações fonônicas ($N_j=0$)

$$P_0 = \prod_{\mathbf{j}} \left(\sum_{\sigma_{\mathbf{j}}} |0; \sigma_{\mathbf{j}}\rangle \langle 0; \sigma_{\mathbf{j}}| \right), \quad (4.14)$$

Chamaremos de $\mathcal{H}_0$ o espaço de Hilbert deste estados sem fônons. Note que excitações fonônicas virtuais devido ao termo $e^{-\beta H}$ na função de partição podem ocorrer.

Como foi discutido no Apêndice C, escolhido o projetor P_0 , definimos o projetor complementar P_1 da seguinte forma

$$P_1 \equiv \mathbf{1} - P_0 = \sum'_{N_{\mathbf{j}} \geq 0} \prod_{\mathbf{j}} \left(\sum_{\sigma_{\mathbf{j}}} |N_{\mathbf{j}}; \sigma_{\mathbf{j}}\rangle \langle N_{\mathbf{j}}; \sigma_{\mathbf{j}}| \right), \quad (4.15)$$

onde $\sum'$ restringe a soma para $\sum_{\mathbf{j}} N_{\mathbf{j}} \geq 1$, i.e., para estados com no mínimo uma excitação fonônica. Ou seja, P_1 projeta sobre estados com fônons, i.e., sobre o complementar do espaço $\mathcal{H}_0$: $\mathcal{H} \setminus \mathcal{H}_0$.

4.4.2 Hamiltoniana efetiva

Em [84] foi derivada uma hamiltoniana efetiva para o modelo de Holstein-Hubbard em uma rede com *half filling*. Apresentamos a seguir a derivação da hamiltoniana efetiva para o modelo HH restrito a dois sítios. Inicialmente, projetamos o espaço de Hilbert completo $\mathcal{H}$ da hamiltoniana H dada em (4.1) sobre o espaço de Hilbert $\mathcal{H}_0$ gerado pelos quatro estados de Fock $|\uparrow, \downarrow\rangle$, $|\downarrow, \uparrow\rangle$, $|0, \uparrow\downarrow\rangle$ e $|\uparrow\downarrow, 0\rangle$ usando o projector P_0 [ver Eq. (4.14)], de forma que o resolvente da hamiltoniana projetada é dado por

$$G_0(z) = P_0(z - H)^{-1}P_0 = \left(z - H_{\text{eff}}(z)\right)_0^{-1}. \quad (4.16)$$

Quando a taxa de tunelamento é pequena, i.e., $J \ll \omega_0$, podemos considerar apenas uma iteração no RPM. Isto equivale a considerarmos processos de tunelamento de no máximo dois corpos, o que é suficiente, visto que os polos de mais baixas energias dominam a função de partição (4.13). Logo, podemos escrever a hamiltoniana efetiva H_{eff} do resolvente G_0 como

$$H_{\text{eff}} = P_0 H P_0 + P_0 H G_2 H P_0 \quad (4.17)$$

e o resolvente $G_2 = (z - H_2)^{-1}$ com

$$H_2 = P_2 H_I P_2 + P_2 H_t P_2 + P_2 H G_4 H P_2, \quad (4.18)$$

onde G_4 é o resolvente do espaço $\mathcal{H}_4$. Vamos considerar nos cálculos a seguir a hamiltoniana transformada H_γ dada na Eq. (4.9).

Para o primeiro termo em (4.17), projetamos H_γ dada em (4.9) sobre $\mathcal{H}_0$

$$\begin{aligned} P_0 H_\gamma P_0 &= P_0 \left(T H_t T^\dagger + \sum_{\mathbf{j}=1,2} \left[\omega_0 b_{\mathbf{j}}^\dagger b_{\mathbf{j}} + \gamma n_{\mathbf{j}\uparrow} n_{\mathbf{j}\downarrow} - \frac{g^2}{\omega_0} (n_{\mathbf{j}\uparrow} + n_{\mathbf{j}\downarrow}) \right] \right) P_0 \\ &= e^{-g^2/\omega_0^2} P_0 H_t P_0 + (\epsilon - \gamma) + \gamma \sum_{\mathbf{j}=1,2} P_0 n_{\mathbf{j}\uparrow} n_{\mathbf{j}\downarrow} P_0. \end{aligned} \quad (4.19)$$

Vemos que, devido ao acoplamento entre os HAs e os LFAs, a taxa de tunelamento destes últimos é **renormalizada** segundo

$$J \rightarrow \tau = e^{-g^2/\omega_0^2} J, \quad (4.20)$$

que é o chamado *efeito polarônico*.

Com relação ao segundo termo em (4.17), notamos que os dois últimos termos em (4.18) se anulam, pois $H_t P_2$ no segundo termo cria estados apenas fora do nosso espaço restrito $\mathcal{H}_2$, da mesma forma que HP_2 no terceiro termo [ver Apêndice C].

Logo, consideramos apenas o primeiro termo em (4.18) para a hamiltoniana efetiva H_2 , que é dado por

$$H_2 = P_2 H_{\gamma I} P_2 = (\epsilon - \gamma) + \sum_{\mathbf{j}=1,2} \left(\omega_0 P_2 b_{\mathbf{j}}^\dagger b_{\mathbf{j}} P_2 + \gamma P_2 n_{\mathbf{j}\uparrow} n_{\mathbf{j}\downarrow} P_2 \right) \quad (4.21)$$

Com isso, podemos calcular o resolvente $G_2 = (z - H_2)^{-1}$ e finalmente a hamiltoniana efetiva H_{eff} em (4.17). O primeiro termo da hamiltoniana efetiva já foi calculado em (4.19). O segundo termo $P_0 H G_2 H P_0$ pode ser dividido em duas partes, um termo H_s que descreve a troca de spins $(\downarrow, \uparrow) \longleftrightarrow (\uparrow, \downarrow)$ para $\sigma \neq \sigma'$

$$\begin{aligned} H_s &= \tau^2 \sum_{\mathbf{j}=1,2} \sum_{\sigma, \sigma'=\uparrow, \downarrow} P_0 c_{\mathbf{j}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{j}'\sigma} G_2 c_{\mathbf{j}'\sigma'}^\dagger c_{\mathbf{j}\sigma'} P_0 \\ &= \sum_{\sigma, \sigma'=\uparrow, \downarrow} \left(K_1(z) \left(c_{1\sigma}^\dagger c_{2\sigma} c_{2\sigma'}^\dagger c_{1\sigma'} + c_{2\sigma}^\dagger c_{1\sigma} c_{1\sigma'}^\dagger c_{2\sigma'} \right) \right), \end{aligned} \quad (4.22)$$

onde $K_1(z)$ é dado por

$$K_1(z) = 2\tau^2 \sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{m!} \frac{(2g^2/\omega_0^2)^m}{z - 2\epsilon + 2\gamma - \omega_0 m} \quad (4.23)$$

e um termo H_p que descreve a troca entre um par de férmions e um sítio vazio $(0, \downarrow\uparrow) \longleftrightarrow (\downarrow\uparrow, 0)$

$$\begin{aligned} H_p &= \tau^2 \sum_{\mathbf{j}=1,2} \sum_{\sigma, \sigma'=\uparrow, \downarrow} P_0 c_{\mathbf{j}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{j}'\sigma} G_2 c_{\mathbf{j}'\sigma'}^\dagger c_{\mathbf{j}\sigma'} P_0 \\ &= \sum_{\sigma, \sigma'=\uparrow, \downarrow} \left(K_2(z) \left(c_{1\sigma}^\dagger c_{2\sigma} c_{1\sigma'}^\dagger c_{2\sigma'} + c_{2\sigma}^\dagger c_{1\sigma} c_{2\sigma'}^\dagger c_{1\sigma'} \right) \right), \end{aligned} \quad (4.24)$$

com $K_2(z)$ dado por

$$K_2(z) = 2\tau^2 \sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{m!} \frac{(-2g^2/\omega_0^2)^m}{z - 2\epsilon - \omega_0 m}. \quad (4.25)$$

Portanto, assumindo-se que a taxa de tunelamento J dos LFAs é pequena em comparação com os demais parâmetros do sistema (i.e., $J \ll \omega_0$, $J \ll U$ e $J \ll g$)

obtemos a hamiltoniana efetiva para o problema do potencial de dois sítos

$$H_{\text{eff}}(z) \approx \sum_{\sigma, \sigma'=\uparrow, \downarrow} \left[-\tau c_{1\sigma}^\dagger c_{2\sigma} + K_1(z) c_{1\sigma}^\dagger c_{2\sigma} c_{2\sigma'}^\dagger c_{1\sigma'} + K_2(z) c_{1\sigma}^\dagger c_{2\sigma} c_{1\sigma'}^\dagger c_{2\sigma'} + h.c. \right. \\ \left. + \frac{\gamma}{2} (n_{1\sigma} n_{1\sigma'} + n_{2\sigma} n_{2\sigma'}) \right]. \quad (4.26)$$

Esta hamiltoniana inclui o tunelamento de férmions com taxa τ (primeiro termo), troca de spins com taxa $K_1(z)$ (segundo termo), tunelamento de pares de férmions com taxa $K_2(z)$ (terceiro termo) e a interação local entre os férmions com intensidade γ (quarto termo). O tunelamento é renormalizado segundo a Eq. (4.20) devido ao efeito polarônico [91].

Para evitarmos as singularidades dos coeficientes K_1 e K_2 , exigimos que $\omega_0 \gg U$ e $\omega_0 \gg g$. Estas condições equivalem a um potencial de dois sítos com poços profundos e apertados.

Os níveis de energia do sistema são dados pelos polos da Eq. (4.16). Logo, o parâmetro z é fixado resolvendo-se a seguinte equação

$$\det[z - H_{\text{eff}}(z)] = 0. \quad (4.27)$$

Para resolver esta equação, diagonalizamos a hamiltoniana efetiva H_{eff} para um parâmetro z fixo e obtemos seus autovalores $\lambda_j(z)$ ($j = 1, \dots, 4$). Resolvemos então $z = \lambda_j(z)$ para cada autovalor $\lambda_j(z)$, a fim de determinarmos os polos do resolvente na Eq. (4.16). Um auto-estado $|E\rangle$ (com $H_{\text{eff}}|E\rangle = E|E\rangle$) pode ser escrito como uma combinação dos quatro estados de Fock

$$|E\rangle = a_1(z)|\uparrow, \downarrow\rangle + a_2(z)|\downarrow, \uparrow\rangle + a_3(z)|0, \uparrow\downarrow\rangle + a_4(z)|\uparrow\downarrow, 0\rangle, \quad (4.28)$$

onde os coeficientes $a_j(z)$ assumem valores sobre todos os polos z . Nesta base de estados de Fock, a hamiltoniana efetiva na Eq. (4.26) pode ser escrita na forma matricial

$$\hat{H}_{\text{eff}}(z) = \begin{pmatrix} K_1 + \epsilon - \gamma & -K_1 & -\tau & -\tau \\ -K_1 & K_1 + \epsilon - \gamma & \tau & \tau \\ -\tau & \tau & K_1 + \epsilon & K_2 \\ -\tau & \tau & K_2 & K_1 + \epsilon \end{pmatrix}, \quad (4.29)$$

cujos autovalores e os coeficientes dos respectivos auto-estados (não-normalizados) [ver Eq. (4.28)] são, para sítos duplamente ocupados

$$\lambda_1(z) = K_1(z) - K_2(z) + \epsilon : \quad a_1 = a_2 = 0; \quad a_3 = -1; \quad a_4 = 1 \quad (4.30)$$

e para sítios simplesmente ocupados

$$\lambda_2(z) = -\gamma + \epsilon : \quad a_1 = a_2 = 1; \quad a_3 = a_4 = 0 . \quad (4.31)$$

Existem também estados com uma mistura de sítios simplesmente e duplamente ocupados. Usando-se $\Xi = \sqrt{16\tau^2 + (-K_1(z) + K_2(z) + \gamma)^2}$, temos

$$\lambda_3(z) = \frac{1}{2} (3K_1(z) + K_2(z) - \gamma - \Xi + 2\epsilon) \quad (4.32)$$

com

$$a_1 = \frac{-K_1(z) + K_2(z) + \gamma + \Xi}{4\tau} = -a_2; \quad a_3 = a_4 = 1 \quad (4.33)$$

e

$$\lambda_4(z) = \frac{1}{2} (3K_1(z) + K_2(z) - \gamma + \Xi + 2\epsilon) \quad (4.34)$$

com

$$a_1 = \frac{-K_1(z) + K_2(z) + \gamma - \Xi}{4\tau} = -a_2; \quad a_3 = a_4 = 1 . \quad (4.35)$$

Nos gráficos à direita das Figs. 4.2 e 4.3 apresentamos os quatro polos mais baixos do resolvente na Eq. (4.16) com a hamiltoniana efetiva H_{eff} na Eq. (4.26) em função de g . Em particular na Fig. 4.3, a curva 1 representa a solução de $z = \lambda_3(z)$, a curva 2 a solução de $z = \lambda_2(z)$, a curva 3 a solução de $z = \lambda_1(z)$ e a curva 4 a solução de $z = \lambda_4(z)$. Comparamos estes quatro polos com os quatro autovalores do modelo restrito com no máximo uma excitação fonônica por sítio da Sec. 4.3 mostrados nos gráficos à esquerda das Figs. 4.2 e 4.3.

Quando não há tunelamento, (i.e., $J = 0$), obtemos estados degenerados e somente dois autovalores diferentes, os quais se cruzam, estão disponíveis (ver Fig. 4.2 à direita). O estado fundamental tem uma cúspide em $g = \sqrt{U\omega_0}/2 \approx 7.1$ e coincide com o estado fundamental exato do modelo de Holstein-Hubbard para tunelamento nulo dado pela Eq. (4.10). Isto não foi observado porém quando consideramos na seção anterior a solução exata do problema de dois sítios com no máximo uma excitação fonônica por sítio.

O tunelamento não-nulo quebra a degenerescência, fazendo com que o estado fundamental seja único. Os autovalores para tunelamento finito e para $U = 2$ e $\omega_0 = 50$ são mostrados na Fig. 4.3. Os dois estados excitados mais baixos ainda se cruzam em $g \approx 7.1$, enquanto que o estado fundamental é único e portanto, o sistema não exibe a transição discutida na Sec. 4.2. Como consequência do efeito polarônico, as taxas de tunelamento renormalizadas τ , K_1 e K_2 se anulam para grandes valores de g . Isto implica o seguinte comportamento assintótico para os autovalores

$$\lambda_1 \sim \lambda_4 \sim -4g^2/\omega_0, \quad \lambda_2 \sim \lambda_3 \sim -2g^2/\omega_0 . \quad (4.36)$$

Figura 4.4: Coeficientes a_i (ver Eq. (4.28)) para o estado fundamental da hamiltoniana efetiva na Eq. (4.26) (i.e. curva 1 na Fig. 4.3 à direita) com $J = 1$, $U = 2$ e $\omega_0 = 50$. Eles se cruzam muito próximo do ponto de cruzamento dos autovalores na Fig. 4.3. A dominação de estados singletos $|\uparrow, \downarrow\rangle$ para pequenos valores de g é alterada para a dominação de estados *dimer* para grandes valores de g .

Isto também pode ser visto no gráfico à direita da Fig. 4.3, enquanto que no caso do problema de dois sítios com no máximo uma excitação fonônica, os autovalores não se juntam para grandes valores de g (cf. gráfico à esquerda da Fig. 4.3).

Apresentamos o gráfico com os coeficientes a_i [ver Eq. (4.28)] para o estado fundamental da hamiltoniana efetiva na Fig. 4.4. Há uma transição entre a dominação de estados singletos $|\uparrow, \downarrow\rangle$ (para pequenos valores de g , quando a interação efetiva é repulsiva, $\gamma > 0$), para a dominação de estados *dimer* (para grandes valores de g , quando a interação efetiva é atrativa, i.e., $\gamma < 0$).

Para discutir as consequências do cruzamento dos autovalores sobre os observáveis dinâmicos, estudamos na próxima seção a dinâmica dos estados quânticos e o *spin imbalance* dos LFAs. Esta investigação inclui a densidade espectral do modelo.

4.5 Dinâmica em um potencial de dois sítios

A descrição da dinâmica do nosso sistema quântico é baseada no conhecimento dos níveis de energia, do estado inicial e da superposição dos auto-estados de energia com o estado inicial. Em outras palavras, se o sistema com níveis de energia E_j é preparado

inicialmente no estado $|\Psi_0\rangle$, o seu estado quântico $|\Psi_t\rangle$ evolui no tempo como

$$|\Psi_t\rangle = e^{-itH}|\Psi_0\rangle = \sum_j e^{-itE_j}|E_j\rangle\langle E_j|\Psi_0\rangle . \quad (4.37)$$

Os níveis de energia E_j e a superposição com o estado inicial $\langle E_j|\Psi_0\rangle$ podem ser descritos pela densidade espectral.

4.5.1 Densidade espectral

A probabilidade de retorno do sistema ao estado inicial é calculada através da transformada de Laplace inversa do resolvente projetado na Eq. (4.16) [90]

$$\langle\Psi_0|\Psi_t\rangle = \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} e^{-izt} \langle\Psi_0|(z - H_{\text{eff}}(z))_0^{-1}|\Psi_0\rangle dz . \quad (4.38)$$

onde o contorno Γ engloba todos os polos do resolvente. A densidade espectral de muitos corpos é dada então por

$$\rho_{\delta}(E) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \langle\Psi_0|(z - H_{\text{eff}}(z))_0^{-1}|\Psi_0\rangle , \quad (4.39)$$

onde $z = E + i\delta$ e $\delta \ll 1$. Para um espaço de Hilbert de dimensão finita, esta é uma função racional com polos $z = E_j$ ($j = 0, 1, 2, \dots$).

$$\rho_{\delta}(E) = \delta \sum_j \frac{|\langle\Psi_0|E_j\rangle|^2}{(E - E_j)^2 + \delta^2} . \quad (4.40)$$

Esta expressão representa picos lorentzianos nas posições E_j cujos pesos são $|\langle\Psi_0|E_j\rangle|^2/\delta$. Plotando-se $\rho_{\delta}(E)$ em função de E , podemos identificar os polos E_j do resolvente G_0 [ver Eq. (4.16)] e a superposição entre o estado $|\Psi_t\rangle$ e o estado inicial $|\Psi_0\rangle$.

Calculamos a densidade espectral para o estado inicial $\Psi_0 = |\uparrow, \downarrow\rangle$ para diferentes valores do acoplamento g . Note que o estado inicial é simplesmente ocupado e não possui superposição com o auto-estado duplamente ocupado da Eq. (4.30). Os resultados podem ser vistos na Fig. 4.5 para baixas energias. Observamos três picos, os quais correspondem às energias mostradas na Fig. 4.3. O pico central representa o nível de energia dominante para a dinâmica. Notamos a ausência de um pico (correspondente à curva 3 na Fig. 4.3), já que o estado $(|\uparrow\downarrow, 0\rangle - |0, \uparrow\downarrow\rangle)/\sqrt{2}$ não pode ser alcançado a partir do estado inicial $\Psi_0 = |\uparrow, \downarrow\rangle$. Observamos ainda que antes ($g = 4$) e depois ($g = 10$) do ponto de cruzamento dos autovalores, existe um pico central dominante e dois outros picos mais baixos. As frequências características do *spin imbalance* são dadas pelas diferenças entre

Figura 4.5: Densidade espectral na Eq. (4.40) para o estado inicial $|\Psi_0\rangle = |\uparrow, \downarrow\rangle$ e $J = 1$, $U = 2$, $\omega_0 = 50$, $\delta = 0.02$ e diferentes valores de g . Observamos apenas três picos, porque o quarto auto-estado (ver Fig. 4.3) é ortogonal ao estado inicial. O pico central representa o nível de energia dominante e para grandes valores de g (por exemplo, $g = 15$), a contribuição de um pico é muito pequena. As frequências do *spin imbalance* são dadas pelas diferenças entre o nível de energia dominante e os outros níveis.

a energia do pico central e as energias dos outros picos. Próximo do ponto de cruzamento ($g = 7.06$), os dois outros picos são simétricos com relação ao pico central. Portanto, temos apenas uma frequência na dinâmica no ponto de cruzamento. Isto também será visto no *spin imbalance* na próxima seção. Para grandes valores de g , observamos dois grandes picos que são próximos e um outro pico muito pequeno distante do pico central. Isto implica a existência de uma frequência dominante baixa, como poderá ser visto no *spin imbalance* (cf. Fig. 4.8)

Figura 4.6: *Spin imbalance* $N_{1,2}(t)$ [ver Eq. (4.41)] sem espalhamento inelástico ($g = 0$, **à esquerda**) e com forte espalhamento inelástico ($g = 10$, **à direita**) para $J = 1$, $U = 2$ e $\omega_0 = 50$. Existem dois modos com frequências $\omega_1 \approx 3.24$ e $\omega_2 \approx 1.24$ (**à esquerda**) e $\omega_1 \approx 3.17$ e $\omega_2 \approx 1.16$ (**à direita**) que contribuem para a dinâmica.

4.5.2 Spin imbalance

Um trabalho experimental recente sobre a dinâmica de dois átomos de spin $1/2$ com forte repulsão em um potencial de dois poços revelou que, partindo-se de um estado inicial com sítios simplesmente ocupados, a ocupação simples dos sítios é estática, enquanto que o spin oscila periodicamente entre os dois sítios com duas frequências características [87,88]. Esta observação foi interpretada através de uma dinâmica efetiva baseada no modelo de Heisenberg. Este último pode ser entendido usando-se uma aproximação de acoplamento forte do modelo de Hubbard [88] ou o método de projeções recursivo para um acoplamento qualquer [90]. Experimentalmente, isto foi observado medindo-se o *spin imbalance* entre os dois poços

$$N_{1,2}(t) = \frac{1}{2} \langle \Psi_t | n_{\uparrow 1} - n_{\downarrow 1} + n_{\downarrow 2} - n_{\uparrow 2} | \Psi_t \rangle . \quad (4.41)$$

No modelo de Holstein-Hubbard, variando-se a constante de acoplamento g entre os LFAs e os HAs, temos uma interação adicional. Vimos no estudo da densidade espectral que não existe nenhuma superposição entre o estado com sítios simplesmente ocupados e o estado com sítios duplamente ocupados. Consequentemente, esperamos um comportamento análogo ao observado no modelo de Hubbard. Contudo, no nosso modelo HH podemos também variar continuamente a constante de acoplamento átomo-átomo γ , passando de uma interação atrativa para uma interação repulsiva. Desta forma, passamos por um ponto de degenerescência no qual a interação efetiva se anula ($\gamma = 0$). A existência de apenas três picos na densidade espectral na Fig. 4.5 explica o fato de o

Figura 4.7: Spin imbalance $N_{1,2}(t)$ [ver Eq. (4.41)] no ponto de cruzamento $g = 7.06541$ para $J = 1$, $U = 2$ e $\omega_0 = 50$. Neste, caso apenas um modo com frequência $\omega_1 \approx 1.96$ contribui para a dinâmica .

spin imbalance ser caracterizado por apenas duas frequências, as quais são dadas pelas diferenças entre a energia do nível dominante e dos outros níveis.

Para $g = 0$ temos o modelo de Fermi-Hubbard sem excitações fonônicas, o que corresponde ao experimento acima citado [87, 88]. Neste caso, se o estado inicial é $|\uparrow, \downarrow\rangle$, então a dinâmica do *spin imbalance* é caracterizada por duas frequências, $U/2 \left(\sqrt{(4J/U)^2 + 1} \pm 1 \right)$ (ver [88, 90]). O *spin imbalance* correspondente para $U = 2$, $J = 1$ e $\omega_0 = 50$ é mostrado na Fig. 4.6.

Para acoplamento g não-nulo, a dinâmica é afetada pela presença dos fônons, mas é ainda caracterizada por duas frequências, as quais são dadas pelas diferenças entre a segunda e a primeira e a segunda e a quarta curvas na Fig. 4.3, respectivamente, i.e., $\omega_1 = \lambda_2 - \lambda_3$ e $\omega_2 = \lambda_2 - \lambda_4$. Consequentemente, no ponto de cruzamento, a dinâmica do *spin imbalance* é caracterizada por apenas uma frequência, uma vez que as diferenças entre as curvas tem o mesmo valor, como mostrado na Fig. 4.7. Para acoplamentos fortes (grandes valores de g), as duas frequências aparecem novamente, como pode ser verificado na 4.6.

Portanto, medindo-se a diferença entre as duas frequências $\Delta = |\omega_2 - \omega_1|$, podemos detectar o ponto de cruzamento experimentalmente, dado que Δ se anula neste ponto como mostrado na Fig. 4.9 e o *spin imbalance* é caracterizado por apenas uma frequência. Para valores de g muito grandes, o *spin imbalance* possui uma componente de frequência baixa com amplitude muito grande e uma modulação adicional de alta frequência e baixa amplitude. Isto é mostrado na 4.8. A componente de frequência baixa oscila com frequência $\omega_2 \approx 4\tau^2/|\gamma|$, onde τ é dado na Eq. (4.20) e $\gamma = U - 2g^2/\omega_0$. Logo, $\omega_2 \rightarrow 0$ quando $g \rightarrow \infty$, o que é uma consequência direta do efeito polarônico.

Figura 4.8: Spin imbalance $N_{1,2}(t)$ [ver Eq. (4.41)] para $g = 20$, $J = 1$, $U = 2$ e $\omega_0 = 50$. Para grandes valores do acoplamento g , temos uma componente com baixa frequência e grande amplitude e uma modulação adicional com alta frequência e baixa amplitude. A componente lenta oscila com frequência $\omega_2 \approx 4\tau^2/|\gamma|$. Isto é uma consequência direta do efeito polarônico, já que este faz com que a taxa de tunelamento dos férmions decaia exponencialmente $\tau = J e^{-g^2/\omega_0^2}$.

Figura 4.9: A diferença $\Delta = |\omega_2 - \omega_1|$ entre as frequências dos modos que contribuem para a dinâmica do *spin imbalance*. Esta diferença se anula no ponto de cruzamento dos dois primeiros níveis excitados.

4.6 Discussão

Para baixas energias, o modelo de Holstein-Hubbard restrito com no máximo uma excitação fonônica por sítio apresenta comportamento qualitativamente semelhante ao modelo com número arbitrário de excitações fonônicas, o qual é descrito pela hamiltoniana efetiva na Eq. (4.26). Isto é ilustrado nas Figs. 4.2 and 4.3, onde os quatro níveis de energia mais baixos para ambos os casos são comparados. Contudo, o espaço de Hilbert do modelo geral pode ter dimensão infinita e portanto, existem muitos estados excitados com níveis de energia maiores que aqueles mostrados nas Figs. 4.2 e 4.3. Desconsideramos estes estados, pois estamos interessados nos estados com baixa energia. Devido aos elementos K_1 and K_2 na hamiltoniana efetiva na Eq. (4.29), estes níveis superiores estão relacionados com os níveis do oscilador harmônico com frequência ω_0 .

Na ausência de tunelamento (i.e. $J = 0$), o sistema muda de uma configuração na qual cada poço possui um único LFA (pequenos valores de g) para o caso onde um poço possui um par de férmions e o outro está vazio (grandes valores de g). Esta transição está associada à mudança do sinal da constante de acoplamento efetiva $\gamma = U - 2g^2/\omega_0$.

Quando a taxa de tunelamento é não-nula (i.e. $J \neq 0$), o estado fundamental, dado pelos coeficientes na Eq. (4.33), muda suavemente variando-se a constante g . Sua energia é dada pela solução de $\lambda_3(z) = z$, onde $\lambda_3(z)$ é definido na Eq. (4.32). Contudo, ocorre uma transição devido ao cruzamento do primeiro e do segundo níveis excitados (cf. Fig. 4.3). Verificamos que o acoplamento entre os LFAs e os HAs renormaliza a taxa de tunelamento dos LFAs, fato conhecido como efeito polarônico. Estudamos a densidade espectral e o *spin imbalance* do sistema, o que permite identificar o ponto de cruzamento experimentalmente.

O modelo de Holstein-Hubbard é válido quando $J_{HA} \ll J_{LFA}$, onde J_{HA} e J_{LFA} são as taxas de tunelamento dos HAs e LFAs, respectivamente. Não obstante, a nossa aproximação da hamiltoniana efetiva na Eq. (4.26) é válida para $J_{LFA} \ll U, \hbar\omega_0$ e $g \sim U$. Logo, em termos de parâmetros experimentais, as seguintes condições devem ser satisfeitas, a fim de verificarmos as nossas previsões teóricas:

- (i) $M_{LFA} \ll M_{HA}$, onde M_{LFA} é a massa do LFA e M_{HA} é a massa do HA;
- (ii) $V_0 > E_R$, onde V_0 é a intensidade do laser e $E_R = \hbar^2\pi^2/(2Md^2)$ é a energia de recuo (*recoil energy*), sendo d é a distância entre os dois poços;
- (iii) para os comprimentos de espalhamento a_s entre os LFAs e entre os LFAs e HAs exigimos que $a_s/d < (V_0/E_R)^{-1/4}$ para justificarmos a aproximação de uma banda com interação local [94].

Para que nosso modelo seja realizado experimentalmente, propomos uma mistura atômica com átomos de ^{87}Rb e ^6Li em um potencial de dois poços gerado por um campo de laser estacionário. A relação entre as massas das espécies atômicas é $M_{HA}/M_{LFA} = 14.5$, o que claramente satisfaz a condição (i). Nos experimentos atuais, o parâmetro d da rede ótica é da ordem do comprimento de onda do laser e pode variar de 100 nm a $1\mu\text{m}$. Para átomos de ^{87}Rb , V_0/E_R pode variar de 6 a 44 e a razão J/U pode atingir valores bem pequenos, e.g., $J/U = 0.048$ [88]. Para poços profundos ($V_0 \gg E_R$), temos as seguintes relações [98]:

- (a) $J/E_R = 4\pi^{-1/2}(V_0/E_R)^{3/4}e^{-2(V_0/E_R)^{1/2}}$ para as taxas de tunelamento J_{LFA} and J_{HA} ;
- (b) $U/E_R \sim a_s/d(V_0/E_R)^{3/4}$ para a interação local U ;
- (c) $\hbar\omega_0/E_R \sim (V_0/E_R)^{1/2}$ para a separação dos níveis de energia (*energy gap*) $\hbar\omega_0$.

Portanto, para os parâmetros experimentais usuais, a relação (a) pode ser facilmente satisfeita para uma escolha conveniente da intensidade do laser. Dado que os comprimentos de espalhamento a_s variam tipicamente entre $10^{-7} \dots 10^{-9}$ m e o comprimento de onda pode ser ajustado entre 10^{-7} m and 10^{-6} m, as relações (b) e (c) também podem ser satisfeitas para ambas as espécies atômicas.

Finalmente, como foi discutido no Apêndice C, para uma hamiltoniana do tipo $H = H_t + H_I$, o termo de tunelamento H_t conecta os subespaços $\mathcal{H}_{2j}$ e $\mathcal{H}_{2j+2}$ do espaço de Hilbert completo $\mathcal{H}$. No problema tratado neste trabalho, a cada passo no RPM o sistema visita o próximo subespaço $\mathcal{H}_{2j+2}$ e isto está associado ao processo de tunelamento de mais um corpo. Na derivação da hamiltoniana efetiva (4.26), consideramos apenas uma iteração no RPM, o que equivale considerar tunelamento de no máximo dois corpos, i.e., temos o tunelamento de um férmion, a troca de spins e a troca entre um sítio duplamente ocupado e um sítio vazio. Como foi visto na Eq. (4.20), a taxa de tunelamento dos LFAs é renormalizada segundo $J \rightarrow \tau = e^{-g^2/\omega_0^2}J$. No caso de tunelamento de dois férmions, vimos que os coeficientes K_1 e K_2 são proporcionais a τ^2 [ver Eqs. (4.23) e (4.25)] e o tunelamento de mais corpos dependerá de potências de τ . Portanto, para taxa de tunelamento $J \ll 1$, é razoável truncarmos o RPM após poucas iterações.

Conclusão

Nesta tese estudamos dois problemas distintos na área de átomos ultrafrios: “A formação de ondas de choque no fluxo bidimensional supersônico de BEC através de um obstáculo” e o “Espalhamento inelástico de átomos em um potencial de dois poços”.

No primeiro tópico, contruímos uma teoria assintótica para o problema do fluxo supersônico de BEC através de um obstáculo alongado. Este problema foi tratado empregando-se a equação de Gross-Pitaevskii (ou NLS) para o fluxo uniforme de BEC com número de Mach M no infinito e a com a condição de impenetrabilidade sobre o obstáculo. Assumimos que o fluxo é altamente supersônico, ou seja $M \gg 1$, que o obstáculo é delgado, o que implica $\alpha \ll 1$, e que $M\alpha = O(1)$, onde α é o ângulo de abertura do obstáculo (parâmetro que define a espessura do obstáculo). Sob estas condições, reduzimos o problema original do fluxo bidimensional estacionário de valor de contorno descrito pela NLS 2D independente do tempo ao problema do pistão dispersivo unidimensional descrito pela NLS 1D, no qual a coordenada x do problema 2D faz o papel do tempo $T = x/M$ e a coordenada y faz o papel de variável espacial.

O fluxo é descrito globalmente usando-se a aproximação semi-clássica da NLS, quando a solução é governada pelas equações não-dispersivas (sistema de águas rasas) nas regiões de fluxo constante/suave e pelas equações de modulação de Whitham nas regiões de ondas de choque dispersivas. Empregamos a formulação de Gurevich-Pitaevskii do problema para conectar as soluções das equações de Whitham com as soluções das equações de águas rasas nas bordas da DSW. Construímos soluções de modulação completas para dois problemas: o fluxo supersônico através de uma cunha infinita e através de uma asa.

No caso do fluxo hipersônico através da cunha infinita, observamos três situações de interesse, dependendo do valor da velocidade do pistão $v_p = M\alpha$, i.e., dependendo do ângulo de abertura α da cunha. Para uma dada velocidade assintótica $M \gg 1$ do fluxo, quando $\alpha < 0.2$ observamos a formação de uma DSW a partir da extremidade

do obstáculo; quando $\alpha = 0.2$, notamos a formação de um ponto de vácuo junto à superfície do corpo; para $\alpha > 0.2$ observamos o surgimento de uma onda de transição não-modulada periódica não-linear entre o obstáculo e a DSW.

Já no caso do fluxo através de uma asa, notamos duas regiões de interesse. Na parte frontal da asa, a DSW transforma-se assintoticamente em um pacote de onda dispersivo (ship-waves), enquanto que na parte traseira, a DSW transforma-se em um fan de sólitons oblíquos escuros. Derivamos expressões para as distribuições de amplitude e do número de onda para a DSW frontal e para a distribuição dos sólitons escuros oblíquos na parte traseira da asa.

Finalmente, verificamos a validade da teoria comparando as previsões analíticas com os resultados das simulações numéricas 2D dependentes do tempo.

No segundo tópico desta tese, estudamos uma mistura atômica de dois átomos pesados e dois átomos fermiônicos leves de spin-1/2 em um potencial de dois poços. Os HAs estão sujeitos localmente a um potencial de oscilador harmônico. Os LFAs podem tunelar entre os poços, interagir com os HAs e entre si no mesmo sítio. Modelamos este problema usando a hamiltoniana de Holstein-Hubbard, que é o sistema mais simples que simula a presença de fônons em um sólido. Aplicamos então o método de projeções recursivo, o qual reduz a complexidade do espaço de Hilbert completo e resulta em uma hamiltoniana efetiva. Esta hamiltoniana age sobre um espaço quadridimensional em cada sítio gerado pelos vetores $|0\rangle, |\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle$ e descreve processos de tunelamento de um ou dois férmions entre os poços. Os fônons (excitações dos HAs) são criados pelo operador unitário T e aparecem nos autovalores da hamiltoniana como excitações de m fônons.

À medida que aumentamos a constante de acoplamento g entre os LFA e HA, o sistema sofre uma transição, passando de poços simplesmente ocupados por LFAs para um poço duplamente ocupado e outro vazio. Esta transição é revelada pelo cruzamento entre o segundo e o terceiro autovalores da hamiltoniana efetiva. O acoplamento entre os HA e os LFA renormaliza a taxa de tunelamento deste últimos, o que caracteriza o efeito polarônico. A dinâmica do sistema é dominada pelos três principais níveis de energia na densidade espectral. Isto faz com que o spin imbalance dos LFAs tenha comportamento periódico e seja caracterizado por duas frequências. No ponto de cruzamento dos dois estados excitados, estas frequências coincidem. Portanto, o comportamento oscilatório do spin imbalance pode ser usado para detectar-se este ponto de cruzamento experimentalmente.

Perspectivas

A pesquisa na área de átomos frios é muito promissora, dados os avanços experimentais e teóricos recentes.

Na área de ondas de choque em BECs, existem muitas perspectivas. Um tópico relevante, é a investigação sistemática do problema do fluxo de BECs através de obstáculos. Apesar dos inúmeros resultados existentes, é desejável o estudo detalhado deste problema, variando-se cuidadosamente os parâmetros físicos disponíveis tais como velocidade do fluxo, intensidade e forma do obstáculo, para que possamos entender todo o processo de geração de ondas de choque, desde a emissão de vórtices até a geração de sólitons escuros.

O estudo de ondas de choque em meios não-lineares tem despertado também o interesse das comunidades de ótica e de semicondutores. Já existem estudos sobre a geração de ondas de choque em cristais fotorrefrativos e muito recentemente foi observada no fluxo de éxcitons-poláritons a geração de sólitons escuros oblíquos através de um obstáculo.

Outro tema muito importante é a simulação de modelos de matéria condensada usando-se átomos ultrafrios. Alguns problemas de interesse são o estudo de uma mistura de átomos fermiônicos leves e átomos pesados em uma rede triangular. Desejamos saber qual é o efeito dos fônons locais sobre a frustração de spins dos átomos fermiônicos e sobre a degenerescência dos estados do sistema. Outro problema interessante é o estudo de misturas atômicas em uma rede de vários sítios.

Finalmente, o estudo de métodos numéricos eficientes em Física Computacional é essencial para a simulação de sistemas tridimensionais e também de muitas partículas.

Métodos Numéricos

Nesta seção descrevemos os principais métodos numéricos empregados para a resolução numérica da GP. Apresentamos inicialmente o método de Crank-Nicolson (CN) unidimensional para a equação de difusão e o método de split-step para a equação de Schrödinger. Apresentamos então o método CN bidimensional e o método de D'yakonov.

A.1 Diferenciação Numérica

Apresentamos agora alguns conceitos básicos de diferenciação numérica (ver [99]).

Seja $f : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ uma função de classe $\mathcal{C}^4([a, b])$. Dado um ponto $x_0 \in (a, b)$, expandimos $f(x)$ em uma série de Taylor em torno de x_0

$$\begin{aligned} f(x) = & f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) + f''(x_0)\frac{(x - x_0)^2}{2} \\ & + f'''(x_0)\frac{(x - x_0)^3}{6} + \mathcal{O}((x - x_0)^4) \end{aligned} \quad (\text{A.1})$$

Dado Δx tal que $0 < \Delta x \ll 1$, avaliamos f no ponto $x_- = x_0 - \Delta x$

$$f(x_0 - \Delta x) = f(x_0) - \Delta x f'(x_0) + \frac{\Delta x^2}{2} f''(x_0) - \frac{\Delta x^3}{6} f'''(x_0) + \mathcal{O}(\Delta x^4), \quad (\text{A.2})$$

de forma que

$$f'(x_0) = \frac{f(x_0) - f(x_0 - \Delta x)}{\Delta x} + \frac{\Delta x}{2} f''(x_0) - \frac{\Delta x^2}{6} f'''(x_0) + \mathcal{O}(\Delta x^3) \quad . \quad (\text{A.3})$$

Temos então uma aproximação para $f'(x_0)$ através uma fórmula de Diferenças Finitas Atrasada

$$f'(x_0) \approx D_B^{(1)}[f](x_0) = \frac{f(x_0) - f(x_0 - \Delta x)}{\Delta x} \quad (\text{A.4})$$

com um erro local

$$E_B^{(1)}[f](x_0) = \frac{\Delta x}{2} f''(x_0) - \frac{\Delta x^2}{6} f'''(x_0) + \mathcal{O}(\Delta x^3) \quad . \quad (\text{A.5})$$

Analogamente podemos derivar uma fórmula de Diferenças Finitas Avançada para a derivada da função f num ponto $x_+ = x_0 + \Delta x$

$$f'(x_0) \approx D_F^{(1)}[f](x_0) = \frac{f(x_0 + \Delta x) - f(x_0)}{\Delta x}, \quad (\text{A.6})$$

com um erro local

$$E_F^{(1)}[f](x_0) = -\frac{\Delta x}{2} f''(x_0) - \frac{\Delta x^2}{6} f'''(x_0) + \mathcal{O}(\Delta x^3) \quad . \quad (\text{A.7})$$

Finalmente, combinando-se as Eqs. (A.4) - (A.7), obtemos uma fórmula de Diferenças Finitas Centrada para a função $f \in \mathcal{C}^5([a, b])$ num ponto x_0

$$f'(x_0) \approx D_C^{(1)}[f](x_0) = \frac{f(x_0 + \Delta x) - f(x_0 - \Delta x)}{2\Delta x} \quad (\text{A.8})$$

com um erro local

$$E_C^{(1)}[f](x_0) = -\frac{\Delta x^2}{6} f'''(x_0) + \mathcal{O}(\Delta x^4) \quad . \quad (\text{A.9})$$

Dada $f : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ e um ponto $x_0 \in (a, b)$, podemos derivar uma fórmula de Diferenças Finitas Centrada para aproximar o valor da segunda derivada f'' no ponto x_0

$$f''(x_0) \approx D_C^{(2)}[f](x_0) = \frac{f(x_0 + \Delta x) - 2f(x_0) + f(x_0 - \Delta x)}{\Delta x^2} \quad (\text{A.10})$$

com um erro local

$$E_C^{(2)} = -\frac{\Delta x^2}{12} f^{(iv)}(x_0) + \mathcal{O}(\Delta x^4) \quad . \quad (\text{A.11})$$

Estas fórmulas são fundamentais para a derivação do método de Crank-Nicolson apresentado a seguir.

A.2 Matrizes tridiagonais

Dizemos que $M \in \mathbb{M}_n(\mathbb{R})$ é uma matriz tridiagonal se apenas os seus elementos da diagonal principal e das subdiagonais superiores e inferiores são diferentes de zero, i.e.

$$M = \begin{bmatrix} m_{11} & m_{12} & 0 & \cdots & 0 \\ m_{21} & m_{22} & m_{23} & \cdots & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & m_{n-1,n-2} & m_{n-1,n-1} & m_{n-1,n} \\ 0 & \cdots & 0 & m_{n,n-1} & m_{n,n} \end{bmatrix}. \quad (\text{A.12})$$

Para sistemas lineares tridiagonais podemos aplicar algoritmos de fatoração adaptados para este tipo de matriz, já que as entradas nulas da matriz M assumem uma forma bem determinada e existem apenas $3n - 2$ elementos não nulos. A matriz M pode ser fatorada no produto de duas matrizes triangulares L e U , onde

$$L = \begin{bmatrix} l_{11} & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ l_{21} & l_{22} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & l_{n,n-1} & l_{n,n} \end{bmatrix} \quad (\text{A.13})$$

e

$$U = \begin{bmatrix} 1 & u_{12} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & u_{n-1,n} \\ 0 & \cdots & \cdots & 0 & 1 \end{bmatrix}. \quad (\text{A.14})$$

As matrizes L e U possuem $2n - 1$ e $n - 1$ entradas indeterminadas, respectivamente, as quais podem ser obtidas pelo produto $M = LU$, a saber

$$\begin{aligned} m_{11} &= l_{11}; \\ m_{i,i-1} &= l_{i,i-1}, & i &= 2, 3, \dots, n \\ m_{i,i} &= l_{i,i-1} u_{i-1,i} + l_{i,i}, & i &= 2, 3, \dots, n \\ m_{i,i+1} &= l_{i,i} u_{i,i+1}, & i &= 1, 2, \dots, n-1. \end{aligned} \quad (\text{A.15})$$

Uma vez obtidos as entradas das matrizes L e U , podemos resolver o sistema linear tridiagonal $Ax = b$ fazendo-se $Ly = b$ e $Ux = y$.

A.3 Método de Crank-Nicolson

Existem inúmeros métodos numéricos para a resolução de equações diferenciais parciais (EDP). Vamos nos concentrar na resolução de EDP's parabólicas, que é o caso da GP. O Método de Crank-Nicolson é um método de diferenças finitas implícito incondicionalmente estável, i.e., estável para todos Δx e Δt .

A distribuição de temperatura numa barra unidimensional de comprimento L é descrita pela equação de difusão (equação do calor)

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \sigma \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \quad (\text{A.16})$$

onde $u = u(x, t)$ é a função que descreve a temperatura na barra no instante t e na posição x e σ é a constante de difusão. Consideramos que este problema está definido no domínio $\Omega = (0, L) \times (0, T)$, onde L é o comprimento da barra e T é o tempo final.

Esta equação está sujeita às seguintes condições de contorno e inicial

$$u(0, t) = u(L, t) = 0 \quad t > 0 \quad (\text{A.17})$$

e

$$u(x, 0) = f(x) \quad 0 \leq x \leq L, \quad (\text{A.18})$$

respectivamente, sendo $f(x)$ a distribuição inicial de temperatura.

A fim de aplicarmos um método de diferenças finitas, dividimos então o domínio Ω em m intervalos regulares espaciais e n intervalos regulares temporais, de forma que cada intervalo espacial é definido como $\Delta x = L/m$ e cada intervalo temporal como $\Delta t = T/n$. Chamamos de malha este domínio discretizado e de passo (no tempo e no espaço) um intervalo regular nesta malha (Δt e Δx). Cada ponto espacial da malha será denotado por x_i , com $i = 1, \dots, m-1$ e cada ponto temporal por t_j , com $j = 1, \dots, n-1$.

O Método de Crank-Nicolson para a equação (A.16) é construído através da média entre o Método de Diferenças Avançadas no j -ésimo passo em t

$$\frac{u_{i,j+1} - u_{i,j}}{\Delta t} - \sigma \frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{\Delta x^2} = 0, \quad (\text{A.19})$$

com um erro local de truncamento

$$E_F = \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}(x_i, \mu_j) + \mathcal{O}(\Delta x^2). \quad (\text{A.20})$$

e o Método de Diferenças Atrasadas no $(j + 1)$ -ésimo passo em t

$$\frac{u_{i,j+1} - u_{i,j}}{\Delta t} - \sigma \frac{u_{i+1,j+1} - 2u_{i,j+1} + u_{i-1,j+1}}{\Delta x^2} = 0, \quad (\text{A.21})$$

com um erro local de truncamento

$$E_B = \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}(x_i, \tilde{\mu}_j) + \mathcal{O}(\Delta x^2). \quad (\text{A.22})$$

Considerando-se que os erros dos métodos de diferenças avançadas e atrasadas são aproximadamente iguais

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}(x_i, \mu_j) \approx \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}(x_i, \tilde{\mu}_j) \quad (\text{A.23})$$

obtemos o método de Crank-Nicolson para a equação de difusão

$$\frac{u_{i,j+1} - u_{i,j}}{\Delta t} - \frac{\sigma}{2} \left[\frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{\Delta x^2} + \frac{u_{i+1,j+1} - 2u_{i,j+1} + u_{i-1,j+1}}{\Delta x^2} \right] \quad (\text{A.24})$$

Este método admite a seguinte representação matricial

$$A \mathbf{u}^{(j+1)} = B \mathbf{u}^{(j)} \quad j = 0, 1, 2, \dots \quad (\text{A.25})$$

com uma constante característica

$$r = \sigma \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \quad (\text{A.26})$$

e o vetor $\mathbf{w}^j$ e as matrizes A e B são dados por

$$\mathbf{u}^{(j)} = (u_{1,j}, \dots, u_{m-1,j})^t, \quad (\text{A.27})$$

$$A = \begin{bmatrix} (1+r) & -\frac{r}{2} & 0 & \cdots & 0 \\ -\frac{r}{2} & (1+r) & -\frac{r}{2} & \cdots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & -\frac{r}{2} & (1+r) & -\frac{r}{2} \\ 0 & \cdots & 0 & -\frac{r}{2} & (1+r) \end{bmatrix} \quad (\text{A.28})$$

e

$$B = \begin{bmatrix} (1-r) & \frac{r}{2} & 0 & \cdots & 0 \\ \frac{r}{2} & (1-r) & \frac{r}{2} & \cdots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \frac{r}{2} & (1-r) & \frac{r}{2} \\ 0 & \cdots & 0 & \frac{r}{2} & (1-r) \end{bmatrix}. \quad (\text{A.29})$$

Ou seja, devemos resolver um sistema linear dado por (A.25). Como A é uma matriz tridiagonal, podemos utilizar o método da decomposição LU para resolver este sistema linear.

A.4 Método de Split-Step

Nesta seção apresentamos o método de split-step para resolver a equação de Schrödinger unidimensional na forma adimensional (ver [100])

$$\begin{aligned} i \frac{\partial \psi}{\partial t} &= -\frac{1}{2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V(x) \psi \\ &= (\hat{T} + \hat{V}) \psi, \end{aligned} \quad (\text{A.30})$$

onde $\psi = \psi(x, t)$ é uma função complexa e $\hat{T} \equiv -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$ e $\hat{V}$ são os termos cinético e potencial, respectivamente. Note que $\hat{T}$ é um operador de derivação e $\hat{V}$ é uma função que multiplica ψ .

A solução formal da equação de Schrödinger (A.30) é

$$\psi(x, t) = e^{-i(\hat{T} + \hat{V})(t-t_0)} \psi(x, t_0) \quad (\text{A.31})$$

onde $\psi(x, t_0)$ é o estado inicial (condição inicial) no instante t_0 .

A exponencial de um operador $\hat{A}$ é definida como

$$e^{\lambda \hat{A}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\lambda \hat{A})^n}{n!} = \hat{1} + \lambda \hat{A} + \frac{\lambda^2}{2} \hat{A} \hat{A} + \dots, \quad (\text{A.32})$$

onde $\hat{1}$ é o operador identidade e λ é um escalar.

O comutador entre dois operadores $\hat{A}$ e $\hat{B}$ é

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A} \hat{B} - \hat{B} \hat{A}. \quad (\text{A.33})$$

A exponencial da soma de dois operadores $\hat{A}$ e $\hat{B}$ é dada portanto por

$$e^{\lambda(\hat{A} + \hat{B})} = \hat{1} + \lambda(\hat{A} + \hat{B}) + \frac{\lambda^2}{2}(\hat{A} + \hat{B})^2 + \frac{\lambda^3}{6}(\hat{A} + \hat{B})^3 + \dots \quad (\text{A.34})$$

que é equivalente a

$$e^{\lambda(\hat{A} + \hat{B})} = \hat{1} + \lambda \hat{A} + \lambda \hat{B} + \frac{\lambda^2}{2}(\hat{A} \hat{A} + \hat{A} \hat{B} + \hat{B} \hat{A} + \hat{B} \hat{B}) + \mathcal{O}(\lambda^3) \quad (\text{A.35})$$

Por outro lado, a multiplicação das exponenciais dos operadores $\hat{A}$ e $\hat{B}$ é dada por

$$\begin{aligned} e^{\lambda \hat{A}} e^{\lambda \hat{B}} &= \left(\hat{1} + \lambda \hat{A} + \frac{\lambda^2}{2} \hat{A} \hat{A} + \mathcal{O}(\lambda^3) \right) \left(\hat{1} + \lambda \hat{B} + \frac{\lambda^2}{2} \hat{B} \hat{B} + \mathcal{O}(\lambda^3) \right) \\ &= \hat{1} + \lambda \hat{A} + \lambda \hat{B} + \frac{\lambda^2}{2}(\hat{A} \hat{A} + \hat{B} \hat{B} + 2 \hat{A} \hat{B}) + \mathcal{O}(\lambda^3) \end{aligned} \quad (\text{A.36})$$

Subtraindo-se a expressão (A.35) de (A.36), obtemos

$$e^{\lambda(\hat{A}+\hat{B})} = e^{\lambda\hat{A}} e^{\lambda\hat{B}} - \frac{\lambda^2}{2} [\hat{A}, \hat{B}] + \mathcal{O}(\lambda^3) \quad (\text{A.37})$$

Portanto, se $\hat{A}$ e $\hat{B}$ não comutarem, podemos aproximar a exponencial da soma de operadores pelo produto das exponenciais com um erro da ordem de λ^2 . Podemos ainda melhorar esta aproximação dividindo-se o produto das duas exponenciais em três produtos, a saber

$$e^{\lambda\frac{\hat{A}}{2}} e^{\lambda\hat{B}} e^{\lambda\frac{\hat{A}}{2}} = \hat{1} + \lambda\hat{A} + \lambda\hat{B} + \frac{\lambda^2}{2} (\hat{A}\hat{A} + \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A} + \hat{B}\hat{B}) + \mathcal{O}(\lambda^3) \quad (\text{A.38})$$

Subtraindo-se então (A.35) de (A.38), temos

$$e^{\lambda(\hat{A}+\hat{B})} = e^{\lambda\frac{\hat{A}}{2}} e^{\lambda\hat{B}} e^{\lambda\frac{\hat{A}}{2}} + \mathcal{O}(\lambda^3) \quad (\text{A.39})$$

Ou seja, dividindo-se o produto de exponenciais em três produtos, obtemos uma aproximação para a exponencial da soma de operadores com erro da ordem de λ^3 .

Vamos agora aplicar estas propriedades para a solução da equação de Schrödinger (A.31). Sejam $\hat{A} = \hat{V}$, $\hat{B} = \hat{T}$ e $\lambda = -i\Delta t$. Podemos escrever a exponencial em (A.31) como

$$e^{-i(\hat{V}+\hat{T})\Delta t} = e^{-i\hat{V}\frac{\Delta t}{2}} e^{-i\hat{T}\Delta t} e^{-i\hat{V}\frac{\Delta t}{2}} + \mathcal{O}(\Delta t^3) \quad (\text{A.40})$$

com um erro da ordem de Δt^3 .

A aproximação numérica para a solução da equação de Schrödinger (A.31) pode ser escrita como

$$\psi(x, t_0 + \Delta t) = e^{-i(\hat{V}+\hat{T})\Delta t} \psi(x, t_0) = e^{-i\hat{V}\frac{\Delta t}{2}} e^{-i\hat{T}\Delta t} e^{-i\hat{V}\frac{\Delta t}{2}} \psi(x, t_0) + \mathcal{O}(\Delta t^3) \quad (\text{A.41})$$

Esta técnica é conhecida como método de *split-step*. Dado um estado inicial $\psi(x, t_0)$ para a Eq. (A.30), podemos calcular numericamente a evolução temporal do sistema, calculando-se a evolução temporal dos termos cinético e potencial separadamente. Usando-se Δt suficientemente pequeno, o erro, que é da ordem de Δt^3 , torna-se bastante pequeno.

A resolução numérica da EDP (A.30) é realizada da seguinte maneira. Dada uma condição inicial $\psi(x, t_0)$, aplicamos o termo potencial e obtemos uma aproximação parcial $\psi_1(x, \Delta t) = e^{-i\hat{V}\frac{\Delta t}{2}} \psi(x, t_0)$. Aplicamos então o termo cinético, o que consiste em utilizar o método de Crank-Nicolson para obter uma segunda aproximação $\psi_2(x, \Delta t) = \mathcal{CN}[\psi_1(x, \Delta t)]$. Finalmente aplicamos novamente o termo potencial e obtemos a aproximação $\psi(x, \Delta t) = e^{-i\hat{V}\frac{\Delta t}{2}} \psi_2(x, \Delta t)$. Este processo deve ser repetido a

cada passo no tempo para se obter a solução $\psi(x, t)$ no instante t . Abaixo segue um esquema do processo a cada passo no tempo.

$$\left\{ \begin{array}{lcl} i \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{V} \psi(x, t_0) & \Longleftrightarrow & \psi_1(x, \Delta t) = e^{-i\hat{V} \frac{\Delta t}{2}} \psi(x, t_0) \\ i \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{T} \psi_1(x, \Delta t) & \Longleftrightarrow & \psi_2(x, \Delta t) = \mathcal{CN}[\psi_1(x, \Delta t)] \\ i \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{V} \psi_2(x, \Delta t) & \Longleftrightarrow & \psi(x, \Delta t) = e^{-i\hat{V} \frac{\Delta t}{2}} \psi_2(x, \Delta t) \end{array} \right. \quad (\text{A.42})$$

Como a equação de Gross-Pitaevskii é uma equação de Schrödinger não-linear, cuja não-linearidade é $|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2$, podemos resolvê-la utilizando o método de split-step descrito acima, sendo que a não-linearidade é incluída no termo potencial $\hat{V}$ e o termo cinético é resolvido usando-se o método de Crank-Nicolson.

A.5 Fluxo bidimensional de um BEC

Nesta seção descrevemos dois esquemas que nos permitem resolver numericamente o problema do fluxo uniforme bidimensional de BEC. No primeiro esquema, utilizamos o método de split-step descrito na seção acima e o termo cinético da equação é resolvido usando-se o método de Crank-Nicolson para as duas direções espaciais x e y separadamente. No segundo esquema empregamos o método de D'yakonov, que é um método de direções alternadas (ADI), e que nos permite resolver os termos cinético e potencial simultaneamente, sem precisarmos utilizar o método de split-step.

No caso de fluxo uniforme de BEC, é conveniente transformar a GP

$$i \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{1}{2} \Delta \Psi + |\Psi|^2 \Psi + V(\mathbf{r}) \Psi$$

na seguinte equação [51, 52]

$$2i \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + 2iM \frac{\partial \Psi}{\partial x} + 2(-\rho_0 + |\Psi|^2) \Psi + 2V(x, y) \Psi, \quad (\text{A.43})$$

onde ρ_0 garante que a condição de contorno na borda da malha é constante, i.e., $\Psi \equiv 1$ e o termo $2iM \frac{\partial \Psi}{\partial x}$ garante que o BEC está se movendo na direção x para a direita com velocidade constante $u = M$.

A.5.1 Método de Crank-Nicolson 2D

No capítulo 2 descrevemos o fluxo uniforme de BEC através de um obstáculo. Para isso, resolvemos numericamente a Eq. (A.43) usando o método de split-step descrito acima e o método de Crank-Nicolson bidimensional (CN2D) para o termo cinético. Como foi visto anteriormente, quando o passo no tempo Δt é suficientemente pequeno, o método de split-step tem ótima precisão. Analogamente ao que foi feito na Eq. (A.41), aplicamos este método agora para os termos potencial e cinético da GP, a saber

$$\psi(x, y, t_0 + \Delta t) = e^{-i(\hat{V} + \hat{T})\Delta t} \psi(x, y, t_0) \quad (\text{A.44})$$

$$= e^{-i\hat{V}\frac{\Delta t}{2}} \mathcal{CN} \left[y, \frac{\Delta t}{2} \right] \mathcal{CN} [x, \Delta t] \mathcal{CN} \left[y, \frac{\Delta t}{2} \right] e^{-i\hat{V}\frac{\Delta t}{2}} \psi(x, y, t_0) \quad (\text{A.45})$$

$$+ \mathcal{O}(\Delta t^3) \quad , \quad (\text{A.46})$$

onde $\mathcal{CN} [x, \Delta t]$ representa a aplicação do método de CN unidimensional na direção x com passo temporal Δt . Ou seja, resolvemos o termo cinético bidimensional ao longo das duas direções coordenadas separadamente. Dividimos a resolução ao longo da direção y em duas etapas, para minimizar o erro do cálculo numérico. Notamos que no método CN2D original, o termo cinético é resolvido sem o uso do método de split-step para o termo cinético. Contudo, é necessário resolver um sistema linear pentadiagonal (ver [101]), ao invés de um sistema linear tridiagonal como no caso do CN unidimensional.

A.5.2 Método de D'yakonov

Apresentamos aqui o método de D'yakonov para resolver a Eq. (A.43).

O método de Crank-Nicolson bidimensional para a equação de difusão 2D é descrito pela equação:

$$\left[1 - \frac{r_x}{2} \delta_x^2 - \frac{r_y}{2} \delta_y^2 \right] U_{i,j}^{k+1} = \left[1 + \frac{r_x}{2} \delta_x^2 + \frac{r_y}{2} \delta_y^2 \right] U_{i,j}^k \quad (\text{A.47})$$

onde $\delta_x^2 U_{i,j} \equiv U_{i+1,j} - 2U_{i,j} + U_{i-1,j}$, $r_x = \frac{\Delta t}{\Delta x^2}$ e $r_y = \frac{\Delta t}{\Delta y^2}$. Sabemos que o método de Crank-Nicolson tem erro de truncamento da ordem de $\mathcal{O}(\Delta x^2 + \Delta y^2 + \Delta t^2)$ [101]. Como

$$r_x r_y \delta_x^2 \delta_y^2 (U_{i,j}^{k+1} - U_{i,j}^k) = \Delta t^3 U_{xxyy} (x_i, y_j, t_{k+1/2}) + \mathcal{O}(\Delta t^4 + \Delta t^3 \Delta x \Delta y)$$

segue que o método de diferenças abaixo:

$$\left[1 - \frac{r_x}{2} \delta_x^2 \right] \left[1 - \frac{r_y}{2} \delta_y^2 \right] U_{i,j}^{k+1} = \left[1 + \frac{r_x}{2} \delta_x^2 \right] \left[1 + \frac{r_y}{2} \delta_y^2 \right] U_{i,j}^k \quad (\text{A.48})$$

é equivalente ao método de (CN) a menos de uma constante da ordem do erro de truncamento do método de (CN).

O Método de D'yakonov para a equação de difusão 2D é descrito pelas equações abaixo:

$$\left(1 - \frac{r_x}{2}\delta_x^2\right) U_{i,j}^* = \left(1 + \frac{r_x}{2}\delta_x^2\right) \left(1 + \frac{r_y}{2}\delta_y^2\right) U_{i,j}^k \quad (\text{A.49})$$

$$\left(1 - \frac{r_y}{2}\delta_y^2\right) U_{i,j}^{k+1} = U_{i,j}^* \quad (\text{A.50})$$

Ou seja, o cálculo é dividido em duas etapas em cada passo no tempo. Inicialmente calculamos $U_{i,j}^*$, que é uma aproximação parcial para a função $U(x, y)$ e em seguida $U_{i,j}^{k+1}$ é o valor numérico no instante $t + \Delta t$.

Desta forma, usando-se $\lambda_x = \frac{i\Delta t}{\Delta x^2}$, $\lambda_y = \frac{i\Delta t}{\Delta y^2}$ e $\tau = \frac{t}{2}$, derivamos o método de D'yakonov para resolver a Eq. (A.43)

$$\left(1 - \frac{\lambda_x}{2}\delta_x^2\right) \Psi_{i,j}^* = \left(1 + \frac{\lambda_x}{2}\delta_x^2\right) \left(1 + \frac{\lambda_y}{2}\delta_y^2\right) \Psi_{i,j}^k \quad (\text{A.51})$$

$$+ \frac{M}{2} \frac{\Delta\tau}{\Delta x} (\Psi_{i+1,j}^k - \Psi_{i-1,j}^k) \quad (\text{A.52})$$

$$+ \frac{M}{2} \frac{\Delta\tau}{\Delta x} (\Psi_{i+1,j}^* - \Psi_{i-1,j}^*) \quad (\text{A.53})$$

$$- i\Delta\tau (-\rho_0 + 2\bar{\Psi}_{i,j}^k \Psi_{i,j}^k + V_{i,j}) \Psi_{i,j}^k \quad (\text{A.54})$$

$$- i\Delta\tau (-\rho_0 + 2\bar{\Psi}_{i,j}^* \Psi_{i,j}^* + V_{i,j}) \Psi_{i,j}^* \quad (\text{A.55})$$

$$\left(1 - \frac{r_y}{2}\delta_y^2\right) \Psi_{i,j}^{k+1} = \Psi_{i,j}^* \quad (\text{A.56})$$

onde $\bar{\Psi}$ é o complexo conjugado de Ψ .

Portanto, a cada passo no tempo calculamos a aproximação $\Psi_{i,j}^*$ na Eq. (A.51) - (A.55) e usamos em (A.56) para obter a aproximação do parâmetro de ordem.

A grande vantagem deste método é que podemos resolver os termos potencial e cinético na GP simultaneamente, sem termos que utilizar o método de split-step. Isto torna o método numérico mais estável, quando consideramos um potencial muito intenso, já que podemos ter problemas numéricos quando temos que calcular a exponencial deste potencial no método de split-step.

Como o termo potencial é não-linear em Ψ , a cada passo no tempo precisamos utilizar um método iterativo para determinar Ψ , já que no lado direito de (A.51) - (A.49), temos também $\Psi_{i,j}^*$.

Implementamos este método para o problema de fluxo uniforme bidimensional de BEC através de um obstáculo e notamos que o resultado concorda com a solução obtida usando-se o método CN2D e é mais estável.

Problema do pistão 1D dispersivo

O problema do pistão é um problema clássico na teoria de ondas de choque viscosas (VSW). Neste problema, um gás uniforme encontra-se em repouso em um cilindro longo com um pistão (“êmbolo”) em uma das extremidades (ver Fig. B.1). Quando o pistão é posto em movimento com velocidade *constante* em direção ao gás, forma-se uma região de alta densidade entre o pistão e uma onda de choque que se propaga para frente. Consideramos aqui um problema análogo (ver [40]), onde um “pistão” se move com

Figura B.1: Cilindro preenchido com gás com um pistão se movendo com velocidade v_p para à direita.

velocidade constante em um fluido estacionário e *dispersivo*, por exemplo um BEC. O pistão neste problema é essencialmente um potencial do tipo degrau que se move com velocidade constante. Experimentalmente, este sistema pode ser realizado com o fluxo de BEC ao longo de uma armadilha quase unidimensional e um feixe de laser móvel fazendo o papel do pistão (ver [25]).

Para tratarmos este problema, consideramos a GP 1D

$$i\varepsilon \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\varepsilon^2}{2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + |\Psi|^2 \Psi + V(x, t) \Psi. \quad (\text{B.1})$$

onde o parâmetro $\varepsilon \ll 1$ é inversamente proporcional ao número de átomos no BEC. Após uma transformação de Madelung $\Psi = \sqrt{n} \exp\left(\frac{i}{\varepsilon} \int_0^x u(x', t) dx'\right)$, obtemos a versão hidrodinâmica da GP (B.1)

$$\begin{aligned} n_t + (nu)_x &= 0, \\ (nu)_t + \left(nu^2 + \frac{1}{2}n^2\right)_x &= \frac{\varepsilon^2}{4} \left(n(\log n)_{xx}\right)_x - nV_x, \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

onde n é a densidade e u é a velocidade do fluido dispersivo. Estas equações são similares às equações de Navier-Stokes e de águas rasas da mecânica clássica de fluidos. Porém, no nosso caso ao invés do termo de viscosidade, temos o termo dispersivo de coeficiente $\varepsilon^2/4$.

O problema do pistão dispersivo 1D foi discutido em [40] e pretendemos aqui apenas apresentar as idéias principais sobre este problema e traçar a conexão com o problema do fluxo 2D através de um obstáculo alongado tratado no capítulo 3.

No instante $t = 0^+$ assumimos que existe uma descontinuidade nas variáveis do fluido devido ao início do movimento do pistão em $t = 0$. A condição inicial para a densidade é

$$n(x, 0^+) = \begin{cases} n_L & , \quad x = 0, \\ n_R & , \quad x > 0 \end{cases} \quad (\text{B.3})$$

e para a velocidade é

$$u(x, 0^+) = \begin{cases} u_L = v_p & , \quad x = 0, \\ u_R = 0 & , \quad x > 0, \end{cases} \quad (\text{B.4})$$

onde v_p é a velocidade do pistão.

Em [40] este problema foi tratado analiticamente e numericamente. Para o tratamento analítico foi empregada a teoria da modulação de Whitham, analogamente ao que fizemos no capítulo 3 para o fluxo sobre um obstáculo alongado.

Neste problema existem três situações distintas. Para v_p suficientemente pequeno ($v_p < 2\sqrt{n_R}$), observamos apenas a formação de uma única DSW. Quando $v_p = 2\sqrt{n_R}$, um “estado de vácuo” é criado. Para $v_p \geq 2\sqrt{n_R}$, temos a criação do estado de vácuo e também de uma onda viajante uniforme (TW) com velocidade v_p entre a parede do pistão e a região da DSW.

No caso de baixas velocidades v_p , uma DSW é formada à frente do pistão e as velocidades das bordas desta região ondulatória em expansão são

$$\begin{aligned} v^- &= \frac{1}{2}v_p + \sqrt{n_R} \\ v^+ &= \frac{(2v_p^2 + 4v_p\sqrt{n_R} + n_R)}{v_p + \sqrt{n_R}}, \end{aligned} \quad (\text{B.5})$$

onde v^- e v^+ se referem às bordas à esquerda e à direita da DSW, respectivamente. Os valores máximos da densidade e da velocidade ocorrem entre o pistão e a DSW:

$$\begin{aligned} n_{max} &= n_L = \left(v_p/2 + \sqrt{n_R}\right)^2 \\ u_{max} &= u_L = v_p. \end{aligned} \quad (\text{B.6})$$

Já os valores mínimos ocorrem na fronteira à esquerda da DSW e seus valores são, respectivamente

$$\begin{aligned} n_{min} &= \left(\sqrt{n_R} - \frac{1}{2}v_p\right)^2, \\ u_{min} &= -v_p \left(\frac{\sqrt{n_R} + \frac{1}{2}v_p}{\sqrt{n_R} - \frac{1}{2}v_p}\right). \end{aligned} \quad (\text{B.7})$$

Vemos de (B.5) que a velocidade do pistão pode ser maior que a velocidade v^- da borda à esquerda da DSW quando $v_p > 2\sqrt{n_R}$. Quando $v_p = 2\sqrt{n_R}$ (ver Eq. (B.7)), a densidade n se anula sobre o pistão, o que caracteriza a formação do ponto de vácuo. Note que neste caso $v^- = v_p$ [cf. (B.5)]. Ou seja, para $v_p > 2\sqrt{n_R}$ é necessário introduzirmos uma onda viajante localmente periódica (TW) entre o pistão e a borda à esquerda da DSW. Note ainda de (B.7) que a velocidade do fluido não está bem definida no ponto de vácuo [57].

Quando a velocidade do pistão é elevada ($v_p > 2\sqrt{n_R}$), a densidade entre o pistão e a DSW oscila entre os valores $0 < n < 4n_R$ independentemente da velocidade do pistão e a TW nesta região se propaga com velocidade $u_{TW} = v_p$.

No capítulo 3 reduzimos o problema do fluxo bidimensional estacionário através de um obstáculo alongado ao problema do pistão dispersivo 1D. Consideramos a densidade de fundo do fluido $n_R = 1$ e relacionamos a velocidade do pistão com a função que descreve a geometria do obstáculo, i.e., $v_p = \frac{df}{dT}$. No caso do fluxo através de uma cunha, $f(T) = \alpha MT$, onde α é o ângulo de abertura da cunha e M é o número de Mach (velocidade assintótica do fluxo 2D). Portanto, temos que $v_p = \alpha M$. Naquele caso, mantivemos a velocidade assintótica do fluxo 2D fixa ($M = 10$) e consideramos valores diferentes para o ângulo α . Concluímos que o estado de vácuo surge quando $v_p = 2$ ($\alpha = 0.2$) e quando $v_p > 2$ ($\alpha > 0.2$) notamos o surgimento das ondas periódicas de transição TW.

Vale a pena notar que no caso do fluxo 2D através de uma cunha, a velocidade do pistão associado é constante. Já no problema do fluxo através de um asa, a velocidade do pistão associado não é mais constante, pois depende da função f que descreve esta asa.

Realizamos simulações numéricas para estudar o problema do pistão dispersivo para diferentes valores da velocidade v_p . Em [40] os autores consideraram o movimento

de um potencial do tipo degrau através de um BEC em repouso [$V_0(x) = V_{max}H(v_p t - x)$, $H(y)$ é a função de Heaviside]. Nós, por outro lado, consideramos que o BEC flui em direção ao pistão com velocidade assintótica v_p e modelamos o pistão como sendo uma barreira impenetrável fixa.

Apresentamos na Fig. B.2 os resultados da simulação numérica para $v_p = 1$. Vemos a formação de uma DSW à frente do pistão e que esta decai em ondas de baixa amplitude (lineares) para grandes valores de x . Na Fig. B.3 apresentamos o caso $v_p = 2$. Notamos a formação do ponto de vácuo junto ao pistão. Finalmente vemos na Fig. B.4 os resultados para a velocidade $v_p = 3$. Notamos a formação de TW entre o pistão e a DSW e que a velocidade nos pontos de vácuo na TW não estão bem definidos.

Figura B.2: Solução numérica da Eq. (B.1) para $v_p = 1$. No gráfico à esquerda apresentamos o perfil de densidade do fluido. Notamos uma região de densidade constante próxima à superfície do pistão e a formação de uma DSW à frente desta região. Vemos ainda que para grandes valores de x esta onda decai em ondas lineares de baixa amplitude. À direita apresentamos o gráfico da velocidade.

Figura B.3: Solução numérica da Eq. (B.1) para $v_p = 2$. No gráfico à esquerda apresentamos o perfil de densidade do fluido. Notamos a formação de uma DSW junto ao pistão e a formação do ponto de vácuo. À direita apresentamos o gráfico da velocidade — esta não está bem definida no ponto de vácuo.

Figura B.4: Solução numérica da Eq. (B.1) para $v_p = 3$. No gráfico à esquerda apresentamos o perfil de densidade do fluido. Notamos a formação de uma TW entre o pistão e a DSW. À direita apresentamos o gráfico da velocidade — esta não está bem definida na região da TW devido à presença dos pontos de vácuo.

Método de projeções recursivo

Atualmente um sistema de átomos frios pode ser preparado em diferentes estados iniciais $|\Psi_0\rangle$. Este estado inicial pode ser um estado excitado e não-estacionário. Após sua preparação em um certo estado inicial $|\Psi_0\rangle$, o sistema de hamiltoniana H evolui no tempo de acordo com

$$|\Psi_t\rangle = e^{-iHt}|\Psi_0\rangle. \quad (\text{C.1})$$

A estrutura deste sistema físico é determinada pela hamiltoniana H que age sobre o espaço de Hilbert $\mathcal{H}$. No método de projeções recursivo (RPM) [84,90,96,97], a dinâmica do sistema começa a partir de um estado inicial $|\Psi_0\rangle$ que mora em um subespaço $\mathcal{H}_0 \subset \mathcal{H}$. Desta forma, a dinâmica decide qual parte de $\mathcal{H}$ é relevante, o que depende das energias associadas ao restante do espaço de Hilbert $\mathcal{H} \setminus \mathcal{H}_0$ e das probabilidades de transição entre o estado inicial e os auto-estados de H . O subespaço $\mathcal{H}_0$ é o espaço que contém os estados com energias mais baixas do sistema. Mais especificamente, este subespaço é gerado por uma base de estados dinamicamente separados, i.e, a Hamiltoniana não permite movimento direto de um estado da base para outro. Uma vez que $\mathcal{H}_0$ é escolhido, o RPM é determinado pela hamiltoniana H e a dinâmica determina qual parte do espaço de Hilbert $\mathcal{H}$ é alcançada pelo sistema. Para controlarmos as trajetórias do sistema através de $\mathcal{H}$, podemos, ao invés de analisar o operador de evolução temporal, considerar o resolvente $G = (z - H)^{-1}$. A relação entre o resolvente e o operador de evolução temporal é dada por

$$e^{-iHt} = \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} (z - H)^{-1} e^{-izt} dz, \quad (\text{C.2})$$

onde Γ é um contorno que engloba todos os autovalores (reais) de H .

Projetamos então este resolvente no subespaço $\mathcal{H}_0$ com um projetor P_0 e obtemos o resolvente projetado

$$G_0(z) = P_0 (z - H)^{-1} P_0. \quad (\text{C.3})$$

A partir daí, o RPM consiste de dois passos

1. O subespaço de Hilbert $\mathcal{H}_{2j+2}$ ($j = 0, 1, \dots$) é criado ao aplicarmos o operador $(\mathbf{1} - P_0 - P_2 - \dots - P_{2j})HP_{2j}$ sobre $\mathcal{H}$.
2. Calculando-se o resolvente G_{2j} em $\mathcal{H}_{2j}$ através da seguinte relação

$$G_{2j} = \left(z - H'_{2j}\right)_{2j}^{-1} \quad (\text{C.4})$$

com a Hamiltoniana efetiva H'_{2j} sobre $\mathcal{H}_{2j}$

$$H'_{2j} = P_{2j}HP_{2j} + P_{2j}HG_{2j+2}HP_{2j}. \quad (\text{C.5})$$

Devemos observar que a construção da sequência de subespaços $\mathcal{H}_{2j}$, com $j = 1, 2, \dots$ implica que o espaço $\mathcal{H}_{2j}$ é ortogonal a $\mathcal{H}_{2j'}$ para $j \neq j'$. Não obstante, a relação de recorrência nunca retorna aos subespaços já visitados. Em outras palavras, podemos dizer que o RPM define um “passeio” do sistema pelo espaço de Hilbert. Contudo, este passeio tem uma direção preferida: o sistema visita o subespaço $\mathcal{H}_{2j}$ apenas uma vez e nunca retorna para o mesmo. Isto é ilustrado na Fig. C.1 como a estrutura de uma “*russian doll*”.

Figura C.1: Esta é uma ilustração esquemática da sequência de espaços de Hilbert $\mathcal{H}_{2j}$ $j = 0, 1, \dots$ criados a partir do espaço inicial $\mathcal{H}_0$ ao se aplicar a hamiltoniana H . O resolvente G_0 [ver Eq. (C.3)] é projetado sobre $\mathcal{H}_0$ e as outras camadas contribuem como polos de G_0 . A recursão remove uma camada após a outra até chegar na camada $\mathcal{H}_0$ (“*baby doll*”).

Como dissemos, dada a hamiltoniana H e uma vez escolhido o projetor P_0 , o RPM está totalmente definido. A partir do projetor inicial P_0 , definimos o seu complementar $P_1 = \mathbf{1} - P_0$. A partir daí, uma sequência é criada pela Hamiltoniana H . Por exemplo, o

projedor do espaço $\mathcal{H}_2$ é definido pela aplicação de H sobre P_0 e projetando-se HP_0 com o projetor P_1 , i.e., $P_2 = P_1HP_0$. Esta operação pode ser repetida tomando-se $P_3 = P_1 - P_2$ e definindo $P_4 = P_3HP_2$, o que define o espaço $\mathcal{H}_4$. Assim obtemos a sequência geral apresentada acima.

Note que a recursão termina em um espaço de Hilbert de dimensão finita com uma hamiltoniana efetiva

$$H'_{2n} = P_{2n}HP_{2n}, \quad (\text{C.6})$$

dado que conhecemos o projetor P_n .

Seja $k = n - j$ um índice para a relação de recorrência (C.4), com algum n fixo. Então, temos que

$$G_{2(n-k)} = \left(z - H'_{2(n-k)} \right)^{-1}_{2(n-k)}, \quad (\text{C.7})$$

e definindo-se $g_k \equiv G_{2(n-k)}$ e $h_k \equiv H'_{2(n-k)}$, obtemos

$$g_k = \left(z - h_k \right)^{-1}_{2(n-k)}, \quad (\text{C.8})$$

com

$$\begin{aligned} h_k &= P_{2(n-k)}HP_{2(n-k)} + P_{2(n-k)}Hg_{k-1}HP_{2(n-k)}, \\ h_0 &= P_{2n}HP_{2n}. \end{aligned} \quad (\text{C.9})$$

Ou seja, a fim de determinarmos o resolvente projetado G_0 (“*baby doll*”), precisamos conhecer as propriedades das demais camadas G_{2j} ($j = 1, \dots, n$) (“*mother dolls*”) iterando-se a relação de recorrência.

Para uma hamiltoniana H com a forma $H = H_t + H_I$, onde H_t é um termo de tunelamento e H_I é um termo local (por exemplo interação do tipo Hubbard), as projeções envolvidas no RPM tem as seguintes propriedades [96]

- (i) H_I permanece dentro do espaço de Hilbert projetado

$$H_IP_0 = P_0H_I = P_0H_IP_0;$$

- (ii) O termo de tunelamento H_t conecta $\mathcal{H}_{2j}$ em $\mathcal{H}_{2j+2}$

$$H_t : \mathcal{H}_{2j} \rightarrow \mathcal{H}_{2j+2}.$$

Uma das grandes vantagens do RPM é o fato de ele organizar o espaço de Hilbert $\mathcal{H}$ em subespaços $\mathcal{H}_{2j+2}$, de tal forma que conhecemos a probabilidade de o sistema

preparado inicialmente no estado $|\Psi_0\rangle$ atingir os estados em cada subespaço $\mathcal{H}_{2j+2}$. A propriedade (ii) acima nos diz que o termo de tunelamento H_t conecta os subespaços $\mathcal{H}_{2j}$ e $\mathcal{H}_{2j+2}$. Em geral, considerarmos mais iterações no RPM consiste em considerarmos processos de tunelamento de mais corpos. Isto significa que quando o espaço $\mathcal{H}$ é muito grande e a taxa de tunelamento é pequena, podemos truncar o RPM, permitindo apenas tunelamento de um certo número de partículas. Aplicamos esta idéia no problema de dois sítios discutido no Capítulo 4 e, apesar de o espaço de Hilbert acessível a este sistema ser enorme devido a presença de inúmeros fônons, obtivemos uma hamiltoniana efetiva que foi representada por uma matrix 4×4 , o que tornou a solução do problema muito mais simples, mesmo para um número arbitrário de fônons.

Bibliografia

- [1] R. Courant and K. Friedrichs, *Supersonic flow and shock waves*, Interscience Publishers, New York, 1st, edition, 1948.
- [2] L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Fluid mechanics*, Butterworth-Heinemann, Oxford, 2nd, edition, 1987.
- [3] G. B. Whitham, *Linear and nonlinear waves*, Wiley-Interscience, New York, 1974.
- [4] P. G. Drazin and R. S. Johnson, *Solitons: an Introduction*, Cambridge University Press, Cambridge, 1990.
- [5] A. V. Gurevich and L. P. Pitaevskii, *Nonstationary structure of a collisionless shock wave*, Sov. Phys. -JETP **38**(2), 291 (1974).
- [6] G. A. El, Korteweg – de Vries equation: solitons and undular bores, in *Solitary Waves in Fluids, Advances in Fluid Mechanics*, edited by R. H. J. Grimshaw, WIT Press, 2007.
- [7] A. V. Gurevich and A. L. Krylov, *Dissipationless shock waves in media with positive dispersion*, Sov. Phys. -JETP **65**(5), 944 (1987).
- [8] 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 (1995), Proceedings of the Conference on The Nonlinear Schrödinger Equation.
- [9] Y. Kodama, *The Whitham Equations for Optical Communications: Mathematical Theory of NRZ*, SIAM J. Appl. Math. **59**(6), 2162 (1999).

-
- [10] G. Biondini and Y. Kodama, *On the Whitham Equations for the Defocusing Non-linear Schrödinger Equation with Step Initial Data*, Journal of Nonlinear Science **16**, 435 (2006).
 - [11] A. V. Gurevich, A. L. Krylov, and G. A. El, *Evolution of a Riemann wave in dispersive hydrodynamics*, Sov. Phys. -JETP **74**(6), 957 (1992).
 - [12] A. L. Krylov, V. V. Khodorovskii, and G. A. El, *Evolution of a nonmonotonic perturbation in Korteweg-de Vries hydrodynamics*, JETP Letters **56**, 323 (1992).
 - [13] F. R. Tian, *Oscillations of the zero dispersion limit of the Korteweg-de Vries equation*, Communications on Pure and Applied Mathematics **46**(8), 1093 (1993).
 - [14] 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 (1995).
 - [15] 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 (2002).
 - [16] S.P.Tsarev, *On Poisson brackets and one-dimensional hamiltonian systems of hydrodynamic type*, Soviet Math. Doklady **31**, 488 (1985).
 - [17] A. V. Gurevich, A. L. Krylov, V. Khodorovsky, and G. El, *Supersonic flow past bodies in dispersive hydrodynamics*, JETP **81**, 87 (1995).
 - [18] A. V. Gurevich, A. L. Krylov, V. Khodorovsky, and G. El, *Supersonic flow past finite-length bodies in dispersive hydrodynamics*, JETP **82**, 709 (1996).
 - [19] V. I. Karpman, *Non-linear waves and dispersive media*, Pergamon Press, Oxford, 1st, edition, 1975.
 - [20] G. El, V. Khodorovskii, and A. Tyurina, *Hypersonic flow past slender bodies in dispersive hydrodynamics*, Physics Letters A **333**(3-4), 334 (2004).
 - [21] L. V. Ovsyannikov, *Lectures on the Foundations of Gas Dynamics*, Nauka, Moscow, 1981, [in Russian].
 - [22] 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 (2006), erratum: Phys. Lett. A **352**, 554 (2006).

- [23] E. A. Cornell, Experiments with linear, nonlinear, and topological excitations in a superfluid gas; Conference on Nonlinear Waves, Integrable Systems and their Applications, (unpublished); Available online at <http://jila.colorado.edu/bec/CornellGroup/publications.html>, 2005.
- [24] 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 (2006).
- [25] 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 (2007).
- [26] 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 (2010).
- [27] T. Winiecki, J. F. McCann, and C. S. Adams, *Pressure Drag in Linear and Nonlinear Quantum Fluids*, Phys. Rev. Lett. **82**(26), 5186 (1999).
- [28] G. E. Astrakharchik and L. P. Pitaevskii, *Motion of a heavy impurity through a Bose-Einstein condensate*, Phys. Rev. A **70**(1), 013608 (2004).
- [29] 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 (2006).
- [30] 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 (2008).
- [31] 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 (2007).
- [32] Y. G. Gladush, L. A. Smirnov, and A. M. Kamchatnov, *Generation of Cherenkov waves in the flow of a Bose-Einstein condensate past an obstacle*, Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics **41**(16), 165301 (2008).
- [33] T.-L. Horng, S.-C. Gou, T.-C. Lin, G. A. El, A. P. Itin, and A. M. Kamchatnov, *Stationary wave patterns generated by an impurity moving with supersonic velocity through a Bose-Einstein condensate*, Phys. Rev. A **79**(5), 053619 (2009).
- [34] R. G. Scott and D. A. W. Hutchinson, *Incoherence of Bose-Einstein condensates at supersonic speeds due to quantum noise*, Phys. Rev. A **78**(6), 063614 (2008).

- [35] Y. G. Gladush, A. M. Kamchatnov, Z. Shi, P. G. Kevrekidis, D. J. Frantzeskakis, and B. A. Malomed, *Wave patterns generated by a supersonic moving body in a binary Bose-Einstein condensate*, Phys. Rev. A **79**(3), 033623 (2009).
- [36] A. M. Leszczyszyn, G. A. El, Y. G. Gladush, and A. M. Kamchatnov, *Transcritical flow of a Bose-Einstein condensate through a penetrable barrier*, Phys. Rev. A **79**(6), 063608 (2009).
- [37] K. Sasaki, N. Suzuki, and H. Saito, *Bénard–von Kármán Vortex Street in a Bose-Einstein Condensate*, Phys. Rev. Lett. **104**(15), 150404 (2010).
- [38] R. Folman, P. Krüger, J. Schmiedmayer, J. Denschlag, and C. Henkel, *Microscopic atom optics: From wires to an atom chip*, volume 48 of *Advances In Atomic, Molecular, and Optical Physics*, page 263, Academic Press, 2002.
- [39] J. Fortágh and C. Zimmermann, *Magnetic microtraps for ultracold atoms*, Rev. Mod. Phys. **79**(1), 235–289 (2007).
- [40] M. A. Hoefer, M. J. Ablowitz, and P. Engels, *Piston Dispersive Shock Wave Problem*, Phys. Rev. Lett. **100**(8), 084504 (2008).
- [41] B. B. Kadomtsev and V. I. Petviashvili, *On the stability of solitary waves in weakly dispersing media*, Sov. Phys. Doklady **15**(6), 539 (1970).
- [42] V. E. Zakharov, *Instability and nonlinear oscillations of solitons*, JETP Lett. **22**(7), 172 (1975).
- [43] E. Kuznetsov and S. Turitsyn, *Instability and collapse of solitons in media with a defocusing nonlinearity*, Sov. Phys. JETP **67**, 1583 (1988).
- [44] B. P. Anderson, P. C. Haljan, C. A. Regal, D. L. Feder, L. A. Collins, C. W. Clark, and E. A. Cornell, *Watching Dark Solitons Decay into Vortex Rings in a Bose-Einstein Condensate*, Phys. Rev. Lett. **86**(14), 2926–2929 (2001).
- [45] S. Jin, C. D. Levermore, and D. W. McLaughlin, *The semiclassical limit of the defocusing NLS hierarchy*, Communications on Pure and Applied Mathematics **52**(5), 613 (1999).
- [46] E. H. Lieb and R. Seiringer, *Proof of Bose-Einstein Condensation for Dilute Trapped Gases*, Phys. Rev. Lett. **88**(17), 170409 (2002).
- [47] F. Dalfovo, S. Giorgini, L. P. Pitaevskii, and S. Stringari, *Theory of Bose-Einstein condensation in trapped gases*, Rev. Mod. Phys. **71**(3), 463 (1999).

- [48] C. Cohen-Tannoudji, Condensation de Bose-Einstein des gaz atomiques ultra froids: effets des interactions, Available online at <http://www.phys.ens.fr/cours/college-de-france/1998-99/1998-99.htm>, 1998.
- [49] L. Salasnich, A. Parola, and L. Reatto, *Effective wave equations for the dynamics of cigar-shaped and disk-shaped Bose condensates*, Phys. Rev. A **65**, 043614 (2002).
- [50] L. Pitaevskii and S. Stringari, *Bose-Einstein Condensation*, Oxford University Press, Oxford, 2003.
- [51] T. Winiecki, B. Jackson, J. F. McCann, and C. S. Adams, *Vortex shedding and drag in dilute Bose-Einstein condensates*, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **33**, 4069 (2000).
- [52] T. Frisch, Y. Pomeau, and S. Rica, *Transition to dissipation in a model of superflow*, Phys. Rev. Lett. **69**(11), 1644 (1992).
- [53] D. J. Frantzeskakis, *Dark solitons in atomic Bose-Einstein condensates: from theory to experiments*, J. Phys. A: Math. Theor. **43**(21), 213001 (2010).
- [54] 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**, 013829 (2008).
- [55] G. A. El, A. Gammal, and A. M. Kamchatnov, *Generation of oblique dark solitons in a supersonic flow of a Bose-Einstein condensate*, Nucl. Phys A **790**, 771c (2007).
- [56] A. M. Kamchatnov, *Nonlinear Periodic Waves and Their Modulations: An Introductory Course*, World Scientific Publishing Company, Singapore, 1st edition, 2000.
- [57] M. A. Hoefer, *Dispersive Shock Waves in Bose-Einstein Condensates and Nonlinear Nano-oscillators in Ferromagnetic Thin Films*, PhD thesis, Department of Applied Mathematics, University of Colorado, Boulder, 2006.
- [58] M. Abramowitz and I. A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions: with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*, Dover Publications, New York, 1965.
- [59] 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 (2004).

- [60] 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 (2006).
- [61] G. B. Arfken and H. J. Weber, *Mathematical Methods for Physicists*, Elsevier, Academic Press, 2005.
- [62] G. A. El, A. M. Kamchatnov, V. V. Khodorovskii, E. S. Annibale, and A. Gammal, *Two-dimensional supersonic nonlinear Schrödinger flow past an extended obstacle*, Phys. Rev. E **80**(4), 046317 (2009).
- [63] G. A. El, Y. G. Gladush, and A. M. Kamchatnov, *Two-dimensional periodic waves in supersonic flow of a Bose-Einstein condensate*, Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical **40**(4), 611 (2007).
- [64] M. A. Hoefer and B. Ilan, *Theory of two-dimensional oblique dispersive shock waves in supersonic flow of a superfluid*, Phys. Rev. A **80**, 061601 (2009).
- [65] M. Lewenstein, A. Sanpera, V. Ahufinger, B. Damski, A. Sen, and U. Sen, *Ultracold atomic gases in optical lattices: mimicking condensed matter physics and beyond*, Adv. Phys. **56**(2), 243 (2007).
- [66] M. Greiner, O. Mandel, T. Esslinger, T. W. Hänsch, and I. Bloch, *Quantum phase transition from a superfluid to a Mott insulator in a gas of ultracold atoms*, Nature **415**, 39 (2002).
- [67] I. Bloch, *Ultracold quantum gases in optical lattices*, Nature Physics **1**, 23 (2005).
- [68] S. Inouye, M. R. Andrews, J. Stenger, H.-J. Miesner, D. M. Stamper-Kurn, and W. Ketterle, *Observation of Feshbach resonances in a Bose-Einstein condensate*, Nature **392**, 151 (1998).
- [69] A. Görlitz, T. L. Gustavson, A. E. Leanhardt, R. Löw, A. P. Chikkatur, S. Gupta, S. Inouye, D. E. Pritchard, and W. Ketterle, *Sodium Bose-Einstein Condensates in the $F = 2$ State in a Large-Volume Optical Trap*, Phys. Rev. Lett. **90**(9), 090401 (2003).
- [70] O. Mandel, M. Greiner, A. Widera, T. Rom, T. W. Hänsch, and I. Bloch, *Coherent Transport of Neutral Atoms in Spin-Dependent Optical Lattice Potentials*, Phys. Rev. Lett. **91**(1), 010407 (2003).
- [71] H. Schmaljohann, M. Erhard, J. Kronjäger, M. Kottke, S. van Staa, L. Cacciapuoti, J. J. Arlt, K. Bongs, and K. Sengstock, *Dynamics of $F = 2$ Spinor Bose-Einstein Condensates*, Phys. Rev. Lett. **92**(4), 040402 (2004).

- [72] M. Köhl, H. Moritz, T. Stöferle, K. Günter, and T. Esslinger, *Fermionic Atoms in a Three Dimensional Optical Lattice: Observing Fermi Surfaces, Dynamics, and Interactions*, Phys. Rev. Lett. **94**(8), 080403 (2005).
- [73] G. B. Partridge, W. Li, Y. A. Liao, R. G. Hulet, M. Haque, and H. T. C. Stoof, *Deformation of a Trapped Fermi Gas with Unequal Spin Populations*, Phys. Rev. Lett. **97**(19), 190407 (2006).
- [74] K. E. Strecker, G. B. Partridge, and R. G. Hulet, *Conversion of an Atomic Fermi Gas to a Long-Lived Molecular Bose Gas*, Phys. Rev. Lett. **91**(8), 080406 (2003).
- [75] H. Uys, T. Miyakawa, D. Meiser, and P. Meystre, *Fluctuations in the formation time of ultracold dimers from fermionic atoms*, Phys. Rev. A **72**(5), 053616 (2005).
- [76] C. A. Stan, M. W. Zwierlein, C. H. Schunck, S. M. F. Raupach, and W. Ketterle, *Observation of Feshbach Resonances between Two Different Atomic Species*, Phys. Rev. Lett. **93**(14), 143001 (2004).
- [77] K. Günter, T. Stöferle, H. Moritz, M. Köhl, and T. Esslinger, *Bose-Fermi Mixtures in a Three-Dimensional Optical Lattice*, Phys. Rev. Lett. **96**(18), 180402 (2006).
- [78] C. Ospelkaus, S. Ospelkaus, K. Sengstock, and K. Bongs, *Interaction-Driven Dynamics of $^{40}\text{K} - ^{87}\text{Rb}$ Fermion-Boson Gas Mixtures in the Large-Particle-Number Limit*, Phys. Rev. Lett. **96**(2), 020401 (2006).
- [79] C. Maschler and H. Ritsch, *Cold Atom Dynamics in a Quantum Optical Lattice Potential*, Phys. Rev. Lett. **95**(26), 260401 (2005).
- [80] J. Larson, B. Damski, G. Morigi, and M. Lewenstein, *Mott-Insulator States of Ultracold Atoms in Optical Resonators*, Phys. Rev. Lett. **100**(5), 050401 (2008).
- [81] D.-W. Wang, *Strong-Coupling Theory for the Superfluidity of Bose-Fermi Mixtures*, Phys. Rev. Lett. **96**(14), 140404 (2006).
- [82] I. Titvinidze, M. Snoek, and W. Hofstetter, *Supersolid Bose-Fermi Mixtures in Optical Lattices*, Phys. Rev. Lett. **100**(10), 100401 (2008).
- [83] D. S. Rokhsar and S. A. Kivelson, *Superconductivity and the Quantum Hard-Core Dimer Gas*, Phys. Rev. Lett. **61**(20), 2376–2379 (1988).
- [84] K. Ziegler, *Dimer states in atomic mixtures*, Phys. Rev. A **77**(1), 013623 (2008).
- [85] C. Xu and M. P. A. Fisher, *Bond algebraic liquid phase in strongly correlated multiflavor cold atom systems*, Phys. Rev. B **75**(10), 104428 (2007).

- [86] M. Greiner, O. Mandel, T. W. Hänsch, and I. Bloch, *Collapse and revival of the matter wave field of a Bose-Einstein condensate*, Nature **419**, 51 (2002).
- [87] S. Fölling, S. Trotzky, P. Cheinet, M. Feld, R. Saers, A. Widera, T. Müller, and I. Bloch, *Direct observation of second-order atom tunnelling*, Nature **448**, 1029 (2007).
- [88] S. Trotzky, P. Cheinet, S. Fölling, M. Feld, U. Schnorrberger, A. M. Rey, A. Polkovnikov, E. A. Demler, M. D. Lukin, and I. Bloch, *Time-Resolved Observation and Control of Superexchange Interactions with Ultracold Atoms in Optical Lattices*, Science **319**, 295 (2008).
- [89] J. Estève, C. Gross, A. Weller, S. Giovanazzi, and M. K. Oberthaler, *Squeezing and entanglement in a Bose-Einstein condensate*, Nature **455**, 1216 (2008).
- [90] K. Ziegler, *Dynamics of two-site Fermi-Hubbard and Bose-Hubbard systems*, Phys. Rev. A **81**(3), 034701 (2010).
- [91] A. Alexandrov and S. N. Mott, *Polarons & Bipolarons*, World Scientific, 1995.
- [92] M. Hohenadler, *Numerical investigation of strongly correlated electron-phonon models*, PhD thesis, Institute for Theoretical Physics, TU Graz, 2004.
- [93] J. Tempere, W. Casteels, M. K. Oberthaler, S. Knoop, E. Timmermans, and J. T. Devreese, *Feynman path-integral treatment of the BEC-impurity polaron*, Phys. Rev. B **80**(18), 184504 (2009).
- [94] A. Georges, *Condensed-matter physics with light and atoms: Strongly correlated cold fermions in optical lattices*, in *Ultracold Fermi Gases, International School of Physics Enrico Fermi*, volume 164, IOS Press, 2008.
- [95] E. T. Jaynes and F. W. Cummings, *Comparison of quantum and semiclassical radiation theories with application to the beam maser*, Proc. IEEE **51**(1), 89 (1963).
- [96] K. Ziegler, *Two-component Bose gas in an optical lattice at single-particle filling*, Phys. Rev. A **68**(5), 053602 (2003).
- [97] K. Ziegler, *Jahn-Teller systems at half filling: Crossover from Heisenberg to Ising behavior*, Phys. Rev. B **74**(1), 014301 (2006).
- [98] W. Zwerger, *Mott-Hubbard transition of cold atoms in optical lattices*, J. Opt. B: Quantum Semiclass. Opt. **5**, S9 (2003).
- [99] R. L. Burden and J. D. Faires, *Numerical Analysis*, Brooks Cole, 2000.

-
- [100] P. L. DeVries, *A First Course in Computational Physics*, Wiley, 1993.
- [101] P. D. Chateau and D. W. Zachmann, *Applied Partial Differential Equations*, Dover Publications, 2002.