

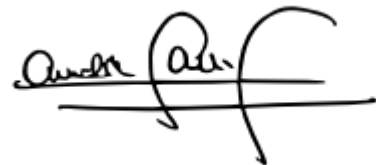
UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE FÍSICA

Estabilidade de anéis de vórtice em condensados de Bose-Einstein

Raphael Wicthy Sallatti

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

Orientador: Prof. Dr Arnaldo Gammal

A handwritten signature in black ink, appearing to read 'Arnaldo Gammal', written over a horizontal line.

São Paulo
2023

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

Sallatti, Raphael Wictky

Estabilidade de Anéis de Vórtice em condensados de Bose-Einstein.
São Paulo, 2023.

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

Orientador: Prof. Dr. Arnaldo Gammal

Área de Concentração: Matéria Condensada

Unitermos: 1. Condensado de Bose-Einstein; 2. Mecânica quântica;
3. Equação não-linear de Schrödinger; 4. Vórtices.

USP/IF/SBI-018/2023

UNIVERSITY OF SAO PAULO
INSTITUTE OF PHYSICS

Stability of vortex rings in Bose-Einstein condensates

Raphael Wicthy Sallatti

Master's dissertation presented to the
Institute of Physics at the University of
São Paulo, as a partial requirement to
obtain a Master's degree in Sciences.

Advisor: Prof. Dr Arnaldo Gam-
mal

São Paulo
2023

Para os meus filhos queridos: Sofia Fernanda, Luthien,
Miguel Felipe e Lurdinha Maria.

Agradecimentos

As páginas desse trabalho jamais seriam suficientes para agradecer a todos aqueles que ajudaram com que eu chegasse até aqui. Minha maior gratidão vai para minha companheira Vica que ficou ao meu lado em todos os momentos que precisava; sem seu carinho, atenção e amizade eu não teria chegado aqui, Vica. Em segundo lugar nessa folha, mas não tão distantes em meu coração, estão meus melhores amigos Ryan, Higor e Breno que há tantos anos me dão o maior presente que eu poderia ter: suas amizades. Também sou muito grato a minha mãe Luci e minha falecida avó Lourdes por terem me criado da melhor forma que conseguiram em meio ao grande caos que é o estágio da civilização em que vivemos; amo vocês duas demais! Gostaria de agradecer também minha irmã e professora de física favorita Ari juntamente com meu primo e grande amigo Danilo, por despertarem minha curiosidade para a física.

Deixo um agradecimento póstumo ao meu querido pai, Sidnei, que faz parte das melhores lembranças da minha infância.

No quesito acadêmico, gostaria de agradecer primeiramente o meu grande orientador Arnaldo, que abriu as portas para mim pra essa área maravilhosa da física e me deu a possibilidade de dar mais um passo na carreira acadêmica. Não posso também de deixar de destacar o ex-estudante de PhD do nosso grupo Alex por ser sempre muito paciente e me ensinar um milhão de coisas sobre cálculo numérico. Também fica meu agradecimento pros outros estudantes do nosso grupo, Leonardo, Gustavo e Jonata, que conviveram comigo volta e meia na nossa salinha. Para além disso, fica o meu grande voto de agradecimento pelo infinito conhecimento passado a mim nos Journal Club pelos professores Alfredo Piza e Emerson Passos.

O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Código de Financiamento 001.

Resumo

A equação de Gross-Pitaevskii é uma forma não linear da equação de Schrödinger que descreve sistemas de muitos bósons no campo médio. A não linearidade torna essa equação extremamente complexa de resolver de forma analítica, sendo necessário recorrer a ferramentas numéricas.

Um condensado de Bose-Einstein possui a propriedade de ser um superfluido e portanto apresenta várias características e fenômenos análogos aos observados em fluidos clássicos. Uma dessas características é uma excitação topológica de vórtice quântico, cuja diferença para a contraparte clássica é a quantização da carga do vórtice. Vórtices que se unem e formam uma linha de vórtices são conhecidos como filamentos de vórtice. Um filamento de vórtice que se feche em si mesmo recebe o nome de anel de vórtice.

Anéis de vórtice clássicos e quânticos tem a possibilidade de executar um movimento conhecido como *leapfrogging*. Dados dois anéis de vórtice coaxiais que andam na mesma direção, o anel que tem um raio maior se propaga com uma velocidade maior que o de raio menor. Naturalmente, conforme os anéis se propagam, o que está na frente vai tendo seu raio aumentado e o de trás o raio reduzido, dessa forma a velocidade do que está atrás aumenta e esse ultrapassa o primeiro. Este movimento tem a tendência de ir se realizando repetidamente.

O foco desse trabalho é compreender o fenômeno de *leapfrogging*, a princípio com uma abordagem clássica e depois com uma abordagem quântica, para depois estudar a estabilidade de anéis de vórtice que realizam este movimento. Para isso é necessário primeiro entender os fundamentos da condensação de Bose-Einstein e de sua abordagem em campo médio, tal como as equações clássicas que descrevem o movimento de vórtices. Também é necessário o desenvolvimento de ferramentas numéricas para abordar problemas que não possuem solução conhecida ou são impossíveis de se resolver de forma analítica.

Palavras chave: Condensação de Bose-Einstein, não-linearidades, vórtices quânticos, anéis de vórtice, estabilidade de vórtices

Abstract

The Gross-Pitaevskii equation is a nonlinear form of the Schrödinger equation that describes systems of many bosons in the mean field. The Nonlinearity makes this equation extremely complex to be solved analytically, being necessary to use numerical tools.

A Bose-Einstein condensate has the property of being a superfluid and therefore it both presents several characteristics and phenomena analogous to those observed in classical fluids. One such feature is a topological quantum vortex excitation, whose difference to the classical counterpart is the quantization of the vortex charge. Vortices that come together and form a line of vortices are known as vortex filaments. A self-closing vortex filament is called a vortex ring.

Classical and quantum vortex rings have the possibility to perform a movement known as leapfrogging. Given two coaxial vortex rings that travel in the same direction, the ring that has a larger radius propagates with a velocity greater than that of smaller radius. Naturally, as the rings propagate, the one at the front gets its radius increased and the one behind the radius reduced, in this way the speed of what is behind it increases and it overtakes the first. This movement has the tendency to go if performing repeatedly.

The focus of this work is to understand the phenomenon of leapfrogging, at first with a classical approach and then with a quantum approach, to then study the stability of vortex rings that carry out this movement. For this it is necessary first understand the fundamentals of Bose-Einstein condensation and its mean field approach, just like the classical equations describing the motion of vortices. It is also necessary to develop numerical tools to address problems that do not have a known solution or are impossible to solve analytically.

Keywords: Bose-Einstein condensation, nonlinearities, quantum vortices, vortex rings, vortex stability

Lista de acrônimos

BEC - Bose-Einstein condensate (condensado de Bose-Einstein)

GPE - Gross-Pitaevskii equation (equação de Gross-Pitaevskii)

DS - Dark Solitons (sólitons escuros)

BS - Bright Solitons (sólitons claros)

VR - Vortex Rings (anéis de vórtices)

VFM - Vortex Filament Model (modelo de filamento de vórtice)

LIA - Local Induction Approximation (aproximação da indução local)

Sumário

1	Condensação de Bose-Einstein	2
1.1	Distribuição de Bose-Einstein	2
1.2	Equação de Gross-Pitaevskii	4
1.3	Solução para a GPE sem interação	7
1.4	Solução para a GPE com interação forte e repulsiva	7
1.5	Solução para a GPE com interação atrativa	9
1.6	Interpretação de um condensado como um fluido	9
1.7	Superfluidez	11
2	Excitações topológicas	13
2.1	Sólitons Escuros	13
2.2	Sólitons Claros	15
2.3	Vórtices	16
2.4	Ondas de Kelvin	20
3	Métodos numéricos	21
3.1	Método de Adams-Bashforth	21
3.2	Split-Step	22
3.3	Método de diferenças finitas	24
3.4	Propagação em tempo imaginário	24
3.5	Método do gradiente conjugado	25
4	Movimento de Leapfrogging	28
4.1	Leapfrogging clássico	28
4.2	Leapfrogging quântico	30
4.3	Resultados para o leapfrogging clássico	35
4.4	Resultados para o leapfrogging quântico	35
5	Estabilidade de vórtices durante o leapfrogging	39
5.1	Estabilidade pela GPE	39
5.2	Estabilidade pelo VFM	40
6	Conclusão e perspectivas	49
A	Split-Step	50
B	Método do Gradiente Conjugado	51

Prefácio

O texto a seguir trata do estudo fenômeno de *leapfrogging* que ocorre na interação de dois anéis de vórtice que se propagam num condensado de Bose-Einstein. No capítulo 1 introduzimos o conceito de condensação de Bose-Einstein. No capítulo 2 e introduzimos excitações topológicas como sólitons, vórtices, anéis de vórtices e ondas de Kelvin. No capítulo 3 descrevemos diversas técnicas numéricas empregadas neste trabalho.

No capítulo 4 produzimos resultados utilizando o modelo do ponto de vórtice foram inspirados pelo trabalho de Love [1], os resultados seguintes que surgem da equação de Gross-Pitaevskii são originais. A ideia é utilizar os mesmos conceitos de coeficientes críticos utilizados por Love para procurar regiões nas quais os movimentos de *leapfrogging* ocorram e sejam instáveis ou estáveis. Dessa forma é possível compreender os regimes para a equação de Gross-Pitaevskii com base em um modelo clássico.

Os resultados obtidos no capítulo 5 são originais porém completamente inspirados nos produzidos pelo trabalho [2], que estuda a quebra de simetria pelo modelo de filamento de vórtice para três anéis de vórtice em posições iniciais diferentes em dois tipos de arranjo: um com os três anéis de mesmo raio e outro com o anel do meio com raio diferente dos outros dois, ambos os arranjos em posições iniciais diferentes para os três anéis. Os resultados do capítulo 5 diferem então por serem uma extensão tri-dimensional dos casos estudados no capítulo 4. Porém para o estudo de crescimento de instabilidade é mais útil utilizar as dinâmicas de anéis de mesmo raio espaçados por uma grande distância, já que é observado que a instabilidade criada por esse arranjo é muito maior e possui uma melhor visualização no crescimento de modos de instabilidade. Por isso, por uma questão de melhor compreensão de como o ruído inicial pode produzir a quebra da simetria axial, foi utilizado um arranjo diferente do capítulo.

1 Condensação de Bose-Einstein

Em 1924 Bose rederivou a fórmula de Planck para o corpo negro [3], assumindo que os fótons eram indistinguíveis. Em 1925 Einstein se inspirou no artigo de Bose e aplicou conceito de indistinguibilidade aos átomos de um gás e obteve o fenômeno que hoje conhecemos como condensação de Bose-Einstein (BEC) [4, 5]. Em temperaturas próximas do zero absoluto, Einstein previu a transição de fase de um gás não interagente para um estado em que todas as partículas ocupassem o mesmo estado quântico. Um pouco após a descoberta de superfluidez [6, 7] houve a ideia proposta por F. London de que a superfluidez estava relacionada com o fenômeno de BEC [8]. A primeira teoria de superfluidez foi proposta por Landau [9, 10], descrevendo a fração de superfluido a partir das excitações no fluido. A primeira descrição de um gás de Bose interagente surgiu em 1947 por Bogoliubov [11] e logo em seguida foi refinada por autores como Landau, Lifshitz, Penrose e Onsager [12]. O fenômeno de vórtices quantizados foi então proposto em teoria por Onsager e Feynman e depois realizado experimentalmente por Hall e Vinen em hélio líquido [13, 14, 15]. A primeira realização em laboratório de condensação em gases foi obtida somente então em 1995 [16] com a utilização de lasers e campos magnéticos para resfriar e aprisionar os átomos.

1.1 DISTRIBUIÇÃO DE BOSE-EINSTEIN

A distribuição de Bose-Einstein é particularmente importante para entender o fenômeno de BEC em sua totalidade. Uma das formas mais simples de chegar a essa distribuição é através do formalismo do ensemble grand canônico. Dadas N partículas em um estado de energia E_j dentro de um reservatório em equilíbrio térmico com temperatura $\beta = 1/k_B T$ e potencial químico μ , a probabilidade de encontrar uma configuração qualquer j é dada por

$$P(E_j) = e^{\beta(\mu N - E_j)} / Z(\beta, \mu), \quad (1.1)$$

onde $Z(\beta, \mu)$ é a função e partição do sistema dada por

$$Z(\beta, \mu) = \sum_{\text{estados}} e^{\beta(\mu N - E_j)}. \quad (1.2)$$

O número de partículas em um dado estado é dado por

$$N = \frac{\partial}{\partial \mu} (k_B T \ln Z). \quad (1.3)$$

Encontrando a função de partição é possível então determinar o número de partículas em cada auto-estado j . O problema se resume então a encontrar os auto-valores do

Hamiltoniano do sistema. A partir do formalismo de segunda quantização temos que um estado $|j\rangle$ é dado por

$$|j\rangle = (a_0^\dagger)^{n_0} (a_1^\dagger)^{n_1} \dots (a_j^\dagger)^{n_j} |0\rangle, \quad (1.4)$$

onde a_i^\dagger (a_i) é o operador de criação (aniquilação) para o i -ésimo estado, que obedecem as regras de comutação $[a_i, a_j^\dagger] = \delta_{ij}$. Dessa forma é possível concluir que qualquer número de bósons pode ocupar o mesmo auto-estado. Para férmions os operadores obedecem a regra de anti-comutação $\{a_i, a_j^\dagger\} = \delta_{ij}$, de modo que dois férmions não pode ocupar o mesmo auto-estado.

Dessa forma é possível encontrar que o número de bósons em um estado n_j é dado por

$$n_j = \frac{1}{\exp[\beta(E_j - \mu)] - 1}, \quad (1.5)$$

e o número total de bósons é dado por $N = \sum_j n_j$.

Para um gás de bósons não interagentes em uma caixa quadrada, o Hamiltoniano é dado por $H = \frac{p^2}{2m}$ e o número total de bósons é

$$N = \sum_{p \neq 0} \frac{1}{\exp[\beta(p^2/2m - \mu)] - 1} = \frac{V}{\lambda_T^3} g_{3/2}(e^{\beta\mu}), \quad (1.6)$$

onde V é o volume da caixa ocupada pelo gás de bósons e o comprimento de onda térmico λ_T é dado por

$$\lambda_T = \sqrt{\frac{2\pi\hbar^2}{mk_B T}}, \quad (1.7)$$

e a função $g_{2/3}$ é um caso especial da função de Bose dada por

$$g_p(z) = \frac{1}{\Gamma(p)} \int_0^\infty \frac{x^{p-1}}{z^{-1}e^x - 1} dx. \quad (1.8)$$

Adotando então o critério de temperatura crítica $N_T(T_c, \mu = E_0) = N$, obtém-se

$$k_B T_c = \frac{2\pi\hbar^2}{m} \left(\frac{n}{g_{3/2}(1)} \right)^{2/3}, \quad (1.9)$$

de modo que para a fração de átomos condensados vale

$$N_0(T)/N = 1 - \left(\frac{T}{T_c} \right)^{3/2}. \quad (1.10)$$

É possível observar que quando $T < T_c$ uma parcela significativa dos bósons se encontram no estado de menor energia N_0 . Esse é o principal resultado que sai a partir da distribuição de Bose-Einstein e ele mostra o motivo de condensados de Bose-Einstein serem um objeto de estudo teórico e experimental tão poderoso. Na temperatura $T = 0$ praticamente todos os bósons vão ocupar o mesmo estado e portanto vão ser descritos por um mesmo parâmetro de ordem Ψ , como veremos a seguir.

1.2 EQUAÇÃO DE GROSS-PITAIEVSKII

Para chegar à GPE é necessário primeiro entender o formalismo criado por Bogoliubov para descrever um gás de Bose [11]. A matriz de densidade de um corpo é dada por [17, 18]

$$n^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \langle \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r})\hat{\Psi}(\mathbf{r}') \rangle, \quad (1.11)$$

onde $\hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r})$ ($\hat{\Psi}(\mathbf{r})$) é o operador de criação (aniquilação) da partícula na posição \mathbf{r} . Para um sistema de bósons os operadores de campo obedecem a relação

$$[\hat{\Psi}(\mathbf{r}), \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}')] = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad [\hat{\Psi}(\mathbf{r}), \hat{\Psi}(\mathbf{r}')] = [\hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}), \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}')] = 0. \quad (1.12)$$

Ao colocar $\mathbf{r} = \mathbf{r}'$ na equação (1.11) obtém-se a matriz de densidade diagonal do sistema $n(\mathbf{r})$, de modo que a normalização do sistema é dada por

$$N = \int n(\mathbf{r})d\mathbf{r} = \int n^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{r})d\mathbf{r}. \quad (1.13)$$

A matriz de densidade n pode ser diagonalizada a partir de seus auto-vetores ϕ_i dados por

$$\int n^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')\phi_i(\mathbf{r}') = n_i\phi(\mathbf{r}'), \quad (1.14)$$

então a matriz de densidade pode ser escrita como

$$n^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_i n_i\phi_i^*(\mathbf{r})\phi_i(\mathbf{r}'), \quad (1.15)$$

e os auto-valores n_i podem ser interpretados no contexto de segunda quantização como sendo o número de ocupação de uma partícula relativo ao estado ϕ_i .

A BEC ocorre quando uma parcela significativa das partículas ocupam o mesmo estado de menor energia $i = 0$, de modo que a matriz de densidade pode ser escrita de forma alternativa

$$n^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = N_0\phi_0^*(\mathbf{r})\phi_0(\mathbf{r}') + \sum_{i \neq 0} n_i\phi_i^*(\mathbf{r})\phi_i(\mathbf{r}'), \quad (1.16)$$

no limite termodinâmico quando $N \rightarrow \infty$ a soma pode ser substituída por uma integral que tende a zero para distâncias $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$ muito longas [17].

Outra funcionalidade dos auto-vetores encontrados é que eles podem ser usados para escrever o operador de campo $\hat{\Psi}(\mathbf{r})$ como

$$\hat{\Psi}(\mathbf{r}) = \sum_i \phi_i\hat{a}_i, \quad (1.17)$$

onde \hat{a}_i (a_i) é o operador de criação (aniquilação) que obedece as regras de comutação

$$[\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger] = \delta_{ij}, \quad [\hat{a}_i, \hat{a}_j] = [\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_j^\dagger] = 0. \quad (1.18)$$

Tal como no caso da matriz de densidade, o operador de campo também pode ser separado em duas partes: uma parte relativa ao auto-valor da ocupação macroscópica e a outra parte

$$\hat{\Psi}(\mathbf{r}) = \phi_0(\mathbf{r})\hat{a}_0 + \sum_{i \neq 0} \phi_i(\mathbf{r})\hat{a}_i. \quad (1.19)$$

A aproximação de Bogoliubov consiste em substituir os operadores de criação e destruição pelo *c-number* $\sqrt{N_0}$. A interpretação física dessa aproximação é o equivalente de ignorar a não comutatividade entre os operadores \hat{a} e \hat{a}^\dagger e é uma boa aproximação para descrever o fenômeno de BEC, isso pelo fato de que $N_0 = \langle a_0 a_0^\dagger \rangle \gg 1$. Isso é o equivalente a tratar a componente do campo $\phi_0 \hat{a}_0$ como um campo clássico. Dessa forma a equação (1.19) pode ser reescrita como

$$\hat{\Psi}(\mathbf{r}) = \Psi_0(\mathbf{r}) + \delta\hat{\Psi}(\mathbf{r}), \quad (1.20)$$

onde $\Psi_0(\mathbf{r}) = \phi_0(\mathbf{r})\sqrt{N_0}$ e $\delta\hat{\Psi}(\mathbf{r}) = \sum_{i \neq 0} \phi_i(\mathbf{r})\hat{a}_i$. Se a parte não condensada $\delta\hat{\Psi}(\mathbf{r})$ do operador for ignorada o operador vai ser igual ao campo clássico Ψ_0 . Esse caso é o equivalente à aproximação que leva a eletrodinâmica quântica para a eletrodinâmica clássica.

O parâmetro Ψ_0 é conhecido como parâmetro de ordem e é uma quantidade clássica dada por

$$\Psi_0(\mathbf{r}) = |\Psi_0(\mathbf{r})|e^{iS(\mathbf{r})}. \quad (1.21)$$

A equação (1.20) quer dizer que o valor esperado $\langle \hat{\Psi} \rangle$ do operador de campo é um valor diferente de zero. Portanto para temperaturas muito baixas o operador de campo $\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t)$ pode ser substituído pelo parâmetro de ordem $\Psi_0(\mathbf{r}, t)$. Para entender melhor esse procedimento, basta olhar para a equação de Heisenberg que governa o operador de campo

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) &= [\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t), \hat{H}] \\ &= \left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_{ext}(\mathbf{r}, t) + \int \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}', t) V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r}' \right) \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t). \end{aligned} \quad (1.22)$$

A substituição de $\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t)$ por $\Psi_0(\mathbf{r}, t)$ pode então ser realizada para um potencial efetivo V_{eff} de contato onde a aproximação de Born pode ser aplicada. Assumindo que o parâmetro de ordem varie bem pouco na distância de interação entre as partículas, é possível substituir o potencial por uma interação tipo $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ e, ignorando o índice zero de Ψ_0 obter então a equação conhecida como equação de Gross-Pitaveskii para o parâmetro de ordem

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = \left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_{ext}(\mathbf{r}, t) + g|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 \right) \Psi(\mathbf{r}, t), \quad (1.23)$$

onde V_{ext} é o potencial da armadilha que aprisiona a nuvem de condensados e com $g = \int V_{eff}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}$. Se essa integral for expressa em termos do comprimento de espalhamento a , pode-se reescrever como

$$g = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m}. \quad (1.24)$$

A GPE foi encontrada independentemente por Gross e Pitaevskii em 1961 e é a principal ferramenta para estudar a condensação de Bose-Einstein para um gás não uniforme de Bose em temperaturas baixas. Essa equação tem a aparência típica de uma equação de campo médio.

Uma particularidade que torna a GPE interessante é a sua não linearidade que surge a partir do parâmetro de interação g entre as partículas. Devido a esse fato, a GPE não possui uma solução geral e deve ser analisada caso a caso para cada potencial e geometria, muitas vezes sendo necessário recorrer a ferramentas numéricas.

A GPE é válida para sistemas com muitos átomos e a temperatura deve ser baixa o suficiente, dessa forma é possível ignorar os efeitos de troca de temperatura. O parâmetro de ordem é então normalizado para o número total de átomos $N = \int |\Psi|^2 d\mathbf{r}$, isso implica que a densidade do condensado coincide com a densidade do gás $n(\mathbf{r}, t) = |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2$.

Usando a expressão para a normalização do parâmetro de ordem é possível obter a energia de um condensado descrito pela GPE

$$E = \int \left(\frac{\hbar^2}{2m} |\nabla \Psi|^2 + V_{ext} |\Psi|^2 + \frac{g}{2} |\Psi|^4 \right) d\mathbf{r}, \quad (1.25)$$

cada um dos termos da integral expressa a energia oriunda de uma fonte: o primeiro termo vem da energia cinética E_{kin} do condensado, o segundo é equivalente a energia potencial E_{pot} devido a armadilha, e o último E_{int} tem origem nas interações entre os átomos do condensado. Dessa forma a expressão da energia pode ser expressa de maneira mais simples como

$$E = E_{kin} + E_{pot} + E_{int}. \quad (1.26)$$

Considerando agora uma solução da equação (1.23) da forma $\Psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r})e^{-i\mu t/\hbar}$, a GPE se torna então

$$\mu\psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V_{ext}(\mathbf{r}) + g|\psi|^2\psi. \quad (1.27)$$

A equação (1.27) é conhecida como equação de Gross-Pitaevskii independente do tempo.

É conveniente trabalhar com a GPE em sua forma adimensional [19]. Para isso é conveniente definir algumas quantidades: o parâmetro de ordem de um condensado uniforme em repouso $\Psi_0 = \sqrt{\mu/g}$, o comprimento de cura $\xi = \hbar/\sqrt{m\mu}$ que é a distância mínima no qual a densidade do condensado varia e Ψ_0 a densidade correspondente a $n_0 = \mu/g$. Define-se também o tempo $\tau = \hbar/\mu$. Dessa forma, são feitas as seguintes substituições em (1.23)

$$x' = \frac{x}{\xi}, \quad y' = \frac{y}{\xi}, \quad z' = \frac{z}{\xi}, \quad (1.28)$$

de forma que $\mathbf{r} = \mathbf{r}'/\xi$ e

$$t' = \frac{t}{\tau}, \quad \Psi' = \frac{\Psi}{\Psi_0}. \quad (1.29)$$

De modo que as derivadas espaciais e temporais se tornam

$$\nabla = \frac{1}{\xi} \nabla', \quad \nabla^2 = \frac{1}{\xi^2} \nabla'^2, \quad \frac{d}{dt} = \frac{1}{\tau} \frac{d}{dt'}. \quad (1.30)$$

Dessa forma, omitindo as linhas ', a GPE pode ser reescrita como

$$i \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \left(-\frac{1}{2} \nabla^2 + V_{ext} + |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 \right) \Psi(\mathbf{r}, t). \quad (1.31)$$

Então a dimensão espacial fica em unidades de comprimento de cura e o tempo fica em unidades de τ .

1.3 SOLUÇÃO PARA A GPE SEM INTERAÇÃO

Caso a equação (1.23) sem interação ($g = 0$) esteja sujeita a um potencial do tipo harmônico esfericamente simétrico dado por

$$V(\mathbf{r}) = \frac{m\omega_r^2 r^2}{2}, \quad (1.32)$$

com ω_r sendo a frequência da armadilha e $r = x^2 + y^2 + z^2$, a equação (1.27) se torna

$$\mu\psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + \frac{m\omega_r^2 r^2}{2} \psi, \quad (1.33)$$

cuja solução é uma função Gaussiana de três dimensões

$$\frac{N^{1/2}}{\pi^{3/4} l_r^{3/2}} \exp\left(-\frac{r^2}{2l_r^2}\right), \quad (1.34)$$

com l_r sendo o comprimento característico do oscilador dado por $l_r = \sqrt{\hbar/m\omega_r}$.

1.4 SOLUÇÃO PARA A GPE COM INTERAÇÃO FORTE E REPULSIVA

Considerando um caso com interações fortes e repulsivas do tipo $g = Na/l_r \gg 1$. Tomando a aproximação de Thomas-Fermi em que o termo cinético ∇^2 é ignorado, a equação (1.27) se torna

$$\mu\psi = g|\psi|^2\psi + V_{ext}\psi, \quad (1.35)$$

e considerando a armadilha harmônica dada pela equação (1.32) e substituindo $n = |\psi|^2$ obtém-se

$$n(r) = \frac{2\mu - m\omega_r^2 r^2}{2g}. \quad (1.36)$$

Como a densidade não pode ser negativa, é conveniente impor que $n(r) = 0$ na região em que $2\mu \leq m\omega_r^2 r^2$. Essa expressão define o raio de Thomas-Fermi R_r dado por

$$\mu = \frac{1}{2} m\omega_r^2 R_r^2. \quad (1.37)$$

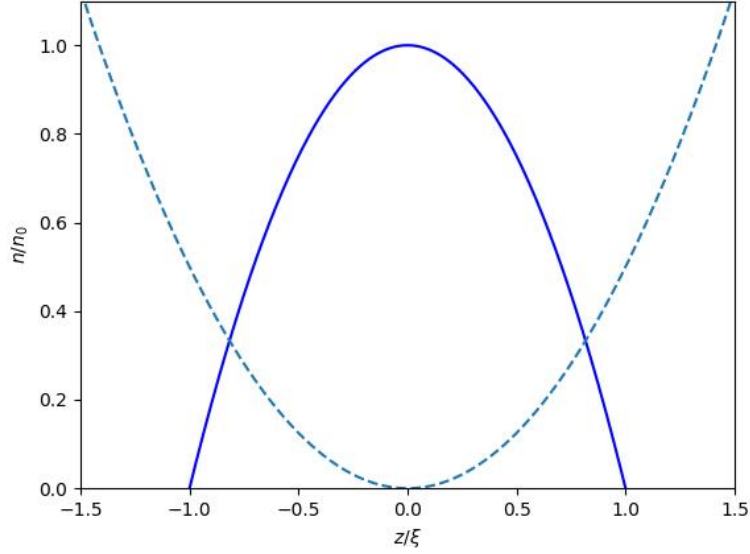


Figura 1.1: Perfil de densidade para a aproximação de Thomas-Fermi dado pela equação (1.38) (linha azul) e potencial da armadilha harmônica (linha azul tracejada).

Portanto o perfil de densidade para a aproximação de Thomas-Fermi é

$$n(r) = \frac{\mu}{g} \left(1 - \frac{r^2}{R_r^2} \right) = \frac{m\omega_r^2(R_r^2 - r^2)}{2g}, \quad (1.38)$$

para $r \leq R_r$ e

$$n(r) = 0,$$

para $r > R_r$.

Na figura 1.1 está disponível o perfil da armadilha e da densidade para a aproximação de Thomas-Fermi.

No caso de uma armadilha não simétrica do tipo

$$V_{ext}(x, y, z) = \frac{m}{2}(\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2), \quad (1.39)$$

as fronteiras da aproximação de Thomas-Fermi são dadas pela superfície elíptica

$$\frac{x^2}{R_x^2} + \frac{y^2}{R_y^2} + \frac{z^2}{R_z^2} = 1, \quad (1.40)$$

com os raios de Thomas-Fermi dados por

$$\mu = \frac{1}{2}m\omega_x^2 R_x^2 = \frac{1}{2}m\omega_y^2 R_y^2 = \frac{1}{2}m\omega_z^2 R_z^2. \quad (1.41)$$

A densidade nesse caso é dada por

$$n(x, y, z) = \frac{\mu}{g} \left(1 - \frac{x^2}{R_x^2} - \frac{y^2}{R_y^2} - \frac{z^2}{R_z^2} \right) \quad (1.42)$$

para a região dentro do elipsoide e

$$n(x, y, z) = 0 \quad (1.43)$$

para a região fora do elipsoide.

1.5 SOLUÇÃO PARA A GPE COM INTERAÇÃO ATRATIVA

Para caso com interação atrativa sujeito a um potencial harmônico, portanto com $Na/l_r < 0$, é necessário utilizar um método variacional para encontrar a solução. Para o caso com $g = 0$ a solução é uma função Gaussiana, então utilizando um ansatz Gaussiano com um parâmetro variacional σ na forma

$$\psi(\mathbf{r}) = \left(\frac{N}{\pi^{3/2} \sigma^3 l_r^3} \right)^{1/2} \exp \left(-\frac{r^2}{2\sigma^2 l_r^2} \right). \quad (1.44)$$

Substituindo o ansatz na equação (1.25) e integrando, a energia se torna

$$E(\sigma) = \hbar\omega_r N \left[\frac{3}{4\sigma^2} + \frac{3\sigma^2}{4} + \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left(\frac{Na}{l_r} \right) \frac{1}{\sigma^3} \right]. \quad (1.45)$$

A solução variacional ocorre para o valor σ_{min} que a energia $E(\sigma)$ for mínima. Na figura 1.2 está disponível o gráfico de $E/\hbar N\omega_r$ em função de σ . É possível observar que para $g > 0$ ($a > 0$) a energia diverge para infinito tanto para $\sigma \rightarrow 0$ quanto para $\sigma \rightarrow \infty$. Para $g = 0$ ($a = 0$) tem-se que $\sigma_{min} = 1$, confirmando a solução do tipo gaussiana. Para $g < 0$ ($a < 0$) a energia se comporta de forma que E diverge para menos infinito quando $\sigma \rightarrow 0$. A solução é então um pacote de onda de comprimento zero e portanto um estado colapsado. No entanto, o condensado não colapsa devido à um efeito combinado da pressão quântica e armadilha e o que acontece é um efeito muito parecido com o de supernovas em estrelas. A linha pontilhada representa o valor variacional de $k \equiv Na/l_r = -0.67$ para qual o condensado em armadilha esférica começa a colapsar. Valores de números críticos resolvendo numericamente a eq. (1.27) para armadilhas assimétricas podem ser encontrados em [20, 21] e experimentos em [22, 23].

1.6 INTERPRETAÇÃO DE UM CONDENSADO COMO UM FLUIDO

A interpretação de um BEC a partir da GPE como sendo um fluido é importante para entender a origem de fenômenos como superfluidez e vorticidade quântica. O campo de velocidades $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$ de um fluido viscoso clássico, homogêneo e incompressível é governado pela equação de Navier-Stokes [24]

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} - \nu \nabla^2 \mathbf{u} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} + \nabla p = \mathbf{f} \quad (1.46)$$

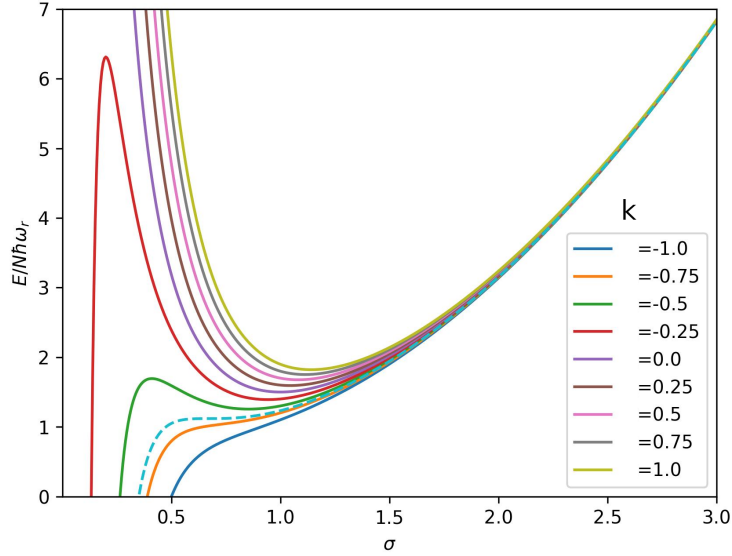


Figura 1.2: Energia em unidades de $N\hbar\omega_r$ em função de σ de acordo com o cálculo variacional. Valores de $k \equiv Na/l_r$ para cada curva estão representados no gráfico e a linha tracejada representa o valor de $k = -0.67$, que é o ponto de colapso do condensado.

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (1.47)$$

com ν sendo a viscosidade cinética do fluido, p a pressão e \mathbf{f} a força exercida no volume.

Fazendo a transformação de Madelung $\Psi(\mathbf{r}, t) = \sqrt{n(\mathbf{r}, t)}e^{iS(\mathbf{r}, t)}$ na equação (1.23), temos que $n(\mathbf{r}, t) = |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2$ se relaciona com a densidade e $S(\mathbf{r}, t)$ se relaciona com a velocidade $\mathbf{v}(\mathbf{r}, t)$ do fluido como

$$\mathbf{v}(\mathbf{r}, t) = \frac{\hbar}{m} \nabla S(\mathbf{r}, t). \quad (1.48)$$

Então é possível concluir que a movimentação do condensado tem como origem um fluxo de potencial com velocidade dada por $\hbar S/m$. Conclui-se também que o campo de velocidades do condensado deve ser irrotacional

$$\nabla \times \mathbf{v} = \frac{\hbar}{m} \nabla \times \nabla S = 0, \quad (1.49)$$

a dinâmica do condensado é então mais restrita do que a dinâmica de um fluido clássico. Ao fazer essas substituições na GPE é possível separá-la em duas equações: uma para a parte imaginária e uma para a parte real. Sendo a primeira

$$mn \left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} \right) + \nabla(P + P') + n \nabla V_{ext} = 0, \quad (1.50)$$

com

$$P = \frac{gn^2}{2}, \quad P' = -\frac{\hbar^2}{4m} n \nabla^2 (\ln n), \quad (1.51)$$

onde P representa a pressão e P' a pressão quântica. É possível observar que pressão depende apenas da densidade, de forma que regiões do condensado de densidade constante são também regiões de pressão constante. O termo de pressão quântica surge após a transformação devido ao termo de energia cinética, então esse termo é uma força que surge como resposta a qualquer tentativa de mudar a densidade do condensado em uma região. A outra equação que sai da transformação é

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \nabla \cdot (n\mathbf{v}) = 0, \quad (1.52)$$

que nada mais é que uma equação da continuidade para a conservação do número de átomos. Juntas as equações (1.50) e (1.52) recebem o nome de equações de um superfluido hidrodinâmico.

Comparando as equações (1.50) e (1.52) com as equações (1.46) e (1.47) é possível ver a semelhança entre elas. As diferenças estão na presença do termo de viscosidade na equação de Navier-Stokes e na presença do termo de pressão quântica na equação do superfluido. Pode-se então interpretar a equação de GPE como sendo uma equação de um fluido sem a presença de viscosidade. Dessa forma é possível compreender a origem de vórtices em um condensado, bem como a semente que dá origem para a superfluidez que será discutida mais detalhadamente na próxima seção.

A dinâmica do condensado é restrita a apenas a densidade e a fase já que esses são os únicos graus de liberdade presentes na função de onda. Fluidos clássicos, pelo contrário, tem muitos mais graus de liberdade e portanto suas movimentações são muito menos restritas do que a de um condensado. Isso acontece também porque para fluidos clássicos o choque entre as partículas gerado pela presença da energia cinética da temperatura é um fator a ser levado em consideração, enquanto para um condensado em temperatura zero a temperatura não produz efeitos cinéticos.

1.7 SUPERFLUIDEZ

A superfluidez é um fenômeno intimamente conectado com a existência da condensação de Bose-Einstein. O primeiro caso de superfluidez foi descoberto independentemente em 1938 por Kapitza para o ponto- λ do ^4He líquido [6] e por Allen e Misener [7]. Logo em seguida o efeito foi explicado por Landau [9] que mostrou que se o espectro de excitações satisfizessem um critério, conhecido hoje como critério de Landau, o fluido não produziria dissipações durante o seu movimento e seria portanto um superfluido. Nessa seção será reconstruído todo o argumento utilizado por Landau para a criação de seu critério.

Se um condensado for perturbado ele pode produzir excitações. Considere um condensado homogêneo no seu estado fundamental, com uma impureza que se mexe com velocidade constante \mathbf{v} . Como no referencial do condensado a impureza varia no espaço e no tempo, é mais conveniente passar para o referencial da mesma, portanto o referencial no qual a impureza não se move. Se a energia do sistema em outro ponto de referência for E e o seu momento \mathbf{p} , a energia no referencial que se move com velocidade \mathbf{v} é dada

pela transformação de Galileu

$$E(\mathbf{v}) = E - \mathbf{p} \cdot \mathbf{v} + \frac{1}{2}Mv^2, \quad (1.53)$$

onde $M = Nm$ é a massa total do sistema. Portanto no referencial que se move com a impureza a energia do sistema é

$$E(\mathbf{v}) = E_0 + \frac{1}{2}Nmv^2, \quad (1.54)$$

com E_0 sendo a energia do estado fundamental no referencial onde o fluido está em repouso e a impureza se mexe. Considerando agora um estado excitado do condensado com uma excitação de momento \mathbf{p} e energia ϵ_p , a energia no referencial da impureza é

$$E_{excit} = E_0 + \epsilon_p - \mathbf{p} \cdot \mathbf{v} + \frac{1}{2}Nmv^2. \quad (1.55)$$

Portanto a energia necessária para produzir uma excitação no condensado é dada por $\epsilon_p - \mathbf{p} \cdot \mathbf{v}$. No referencial da impureza, o potencial produzido é estático e portanto não transfere energia para o condensado. Somente então quando a fase da velocidade da excitação for igual a velocidade do fluido relativa a impureza é que será possível para a impureza transferir energia e criar uma excitação com momento paralelo à velocidade do fluido. Isso ocorre na velocidade

$$v_c = \min \left(\frac{\epsilon_p}{p} \right), \quad (1.56)$$

que é conhecida como velocidade crítica de Landau, ou critério de Landau de superfluidez.

Para velocidades menores que ϵ_p/p é impossível de se produzir excitações e portanto abaixo dessa velocidade o condensado apresenta características de um superfluido.

2 Excitações topológicas

Excitações topológicas são excitações características que surgem em condensados de Bose-Einstein quando um obstáculo (modelado como um potencial) se move numa velocidade maior que a velocidade crítica do critério de Landau, transferindo energia para o condensado. Essas excitações também surgem a partir do decaimento do condensado em um estado excitado para um estado de menor energia.

Um dos tipos de excitações assumem a forma de ondas solitônicas, conhecidas como sólitons, que se propagam sem que o seu formato mude. Os sólitons são divididos em dois tipos: sólitons brilhantes e sólitons escuros. Outra excitação característica é a vorticidade quântica, caracterizada por uma descontinuidade na fase do condensado ao redor de um ponto.

2.1 SÓLITONS ESCUROS

Os sólitons são excitações que surgem de sistemas que possuem dispersão e não linearidade [25], essas excitações possuem a forma de ondas que caminham sozinhas e sem perder o formato (solitary waves) e foram observadas pela primeira vez em 1844 pelo um engenheiro naval, J. S. Russel, que observava formação de ondas em um canal após a passagem de um barco. Russel observou que as ondas geradas por essa perturbação se propagavam por grandes distâncias do canal sem ter sua forma alterada [26]. Devido ao fato da GPE possuir o termo de não linearidade, as soluções naturais são do tipo sólitons. O perfil do sólitons depende do sinal da interação g na equação de Gross-Pitaevskii, sendo sólitons brilhantes (*bright solitons*) para interação atrativa e sólitons escuros (*dark solitons*) para interação repulsiva.

Um sóltion escuro é um pacote de sóltion que tem a forma de um buraco de densidade com um pulso de fase através do mínimo de densidade. Os sólitons escuros são a excitação topológica não linear mais fundamental que aparece na GPE para $g > 0$ e aparecem em diversos campos diferentes da física. As primeiras observações experimentais de sólitons escuros vem de experimentos de óptica quântica [27, 28]. Já os primeiros trabalhos teóricos desenvolvidos foram justamente no contexto de BEC com a solução solitônica exata para a GPE [29]. Um tempo após a já citada realização de BEC em laboratório, foi observada a primeira observação experimental de sóltions escuros em BEC em 2003 [30].

Partindo da GPE em uma dimensão na sua forma adimensional com $g = 1$, podemos considerar um potencial confinador do tipo harmônico

$$V(x) = \frac{1}{2}\Omega^2 x^2. \quad (2.1)$$

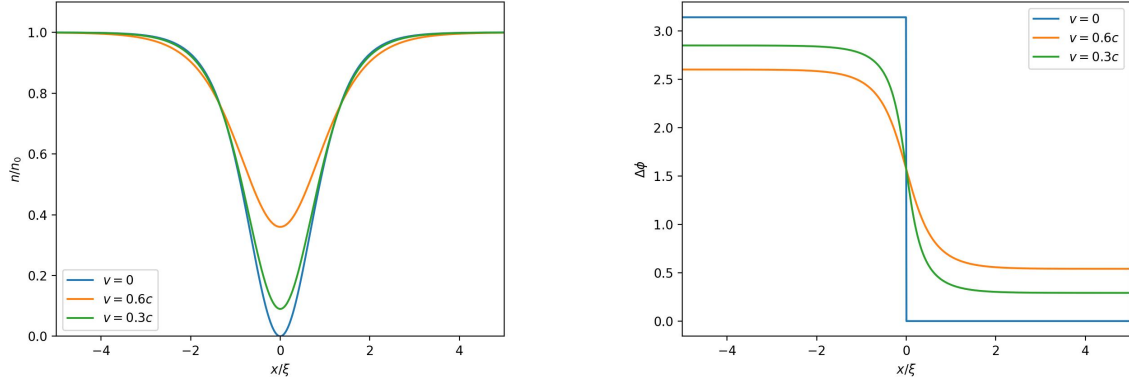


Figura 2.1: Perfil de densidade e de fase para sólitons escuros com velocidades $v = 0$, $v = 0.3c$ e $v = 0.6c$, onde c é a velocidade do som no condensado.

Considerando que $\Omega \ll 1$, pode-se ignorar o potencial $V(x)$ e a GPE se torna

$$i \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = \left(-\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + |\Psi(x, t)|^2 \right) \Psi(x, t). \quad (2.2)$$

A solução mais simples da equação (2.2) é um onda plana com número de onda k e frequência ω do tipo

$$\Psi(x, t) = \sqrt{n_0} \exp[i(kx - \omega t + \theta_0)], \quad (2.3)$$

onde n_0 é a densidade do condensado e θ_0 é uma fase qualquer. Um sóliton escuro é uma solução não-trivial de um estado excitado de pacote de onda e sua forma é

$$\Psi(x, t) = \sqrt{n_0} \left(B \tanh \left[\frac{n_0 B [x - x_0(t)]}{\xi} \right] + iA \right) \exp \left(-\frac{i\mu t}{\hbar} \right), \quad (2.4)$$

onde $x_0(t) = vt + x_0$ é o centro do soliton, com x_0 sendo um número real que indica a posição inicial do sóliton escuro e v sendo a velocidade relativa entre o sóliton e a densidade de fundo, dada por $v = A\sqrt{n_0}$. Finalmente, as amplitudes A e B são conectadas através da relação $A^2 + B^2 = 1$. É conveniente definir essas amplitudes em função de um parâmetro conhecido como ângulo de fase do sóliton ϕ

$$A = \sin \phi, \quad (2.5)$$

$$B = \cos \phi, \quad (2.6)$$

é possível observar que a fase para $x \rightarrow \infty$ é diferente da fase para $x \rightarrow -\infty$ de forma que existe um salto $\Delta\phi$ através DS, dado por

$$\Delta\phi = 2 \left(\arctan \frac{B}{A} - \frac{\pi}{2} \right) = -2 \arctan \frac{A}{B}. \quad (2.7)$$

Essa diferença de fase é dependente da velocidade v e define o quão escuro, ou seja, quão profundo é o buraco de densidade do sóliton. Para um sóliton em repouso ($v = 0$) o

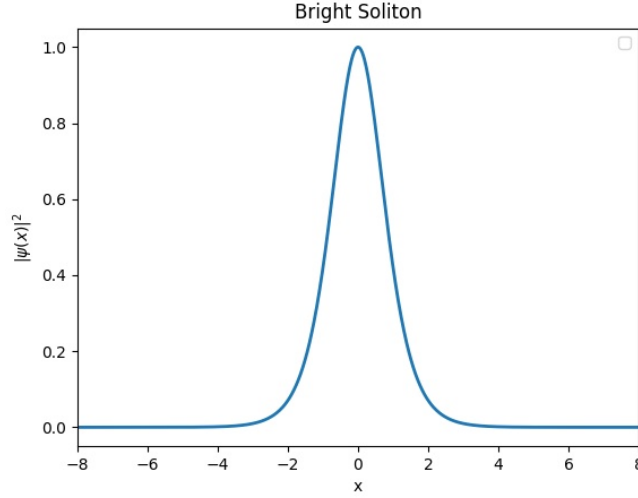


Figura 2.2: Perfil de um sóltion brilhante para $n_0 = 1$.

pulo da fase é de π e para $v \neq 0$ o salto da fase assume valores entre 0 e π . Essas duas variantes são conhecidas, respectivamente, como sóltion escuro e sóltion cinza. Na figura 2.1 está o exemplo do perfil e da fase de sóltions escuros e cinzas.

2.2 SÓLITONS CLAROS

De modo semelhante aos DS, os sóltions brilhantes surgem como solução da GPE, porém com o termo $g < 0$. Partindo da equação (2.2) com o termo de não linearidade com o sinal negativo

$$i \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = \left(-\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} - |\Psi(x, t)|^2 \right) \Psi(x, t), \quad (2.8)$$

é possível verificar que uma solução do estado excitado do pacote de onda é dada por

$$\Psi(x, t) = \sqrt{\frac{N}{2\xi_s}} A \operatorname{sech} \left(\frac{x - vt}{\xi_s} \right) \exp(i f(x, t) + i\phi), \quad (2.9)$$

onde ϕ é a fase global do sóltion, $\xi_s = 2\hbar^2/m|g|N$ um fator de característica do perfil de densidade e $f(x, t)$ é um fator de fase dependente do tempo, dado por

$$f(x, t) = \frac{mvx}{\hbar} - \frac{t}{\hbar} \left(\frac{mv^2}{2} - \frac{\hbar^2}{2m\xi_s} \right) \quad (2.10)$$

Ao contrário do DS, a fase do BS não possui uma descontinuidade. É possível perceber que o BS mantém o seu formato de densidade de secante hiperbólico para todo o tempo em que se propaga. Quanto maior for o valor do modulo da interação g mais estreito vai ser o perfil de densidade. Também diferente do DS, o perfil de densidade do BS não possui

conexão com a sua velocidade, assumindo o mesmo formato independente da velocidade v de propagação.

É possível mostrar que a densidade do BS é constante em todo o seu deslocamento através de um cálculo variacional. A equação (2.8) tem como densidade Lagrangiana a expressão

$$\mathcal{L} = \frac{i}{2} \left(\frac{\partial \Psi}{\partial t} \Psi^* - \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \Psi \right) - \frac{1}{2} \left| \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right|^2 + \frac{1}{2} |\Psi|^4. \quad (2.11)$$

Observando a equação (2.9) o ansatz com parâmetros variacionais α para a amplitude, β para a posição inicial do pico no eixo x , γ para a velocidade adequado deve ser da forma e λ para a fase deve ter a forma

$$\Psi(x, t) = 2\alpha \operatorname{sech}[2\alpha(x - \beta)] e^{i[2\gamma(x - \beta) + \lambda]}. \quad (2.12)$$

Então integrando de $-\infty$ a $+\infty$ a densidade Lagrangiana do sistema em x , obtém-se que a Lagrangiana é dada por

$$L = \frac{16}{3} \alpha^3 + 4\alpha \left(2\gamma \frac{\partial \beta}{\partial t} - \frac{\partial \lambda}{\partial t} \right) - 8 \left(\frac{\alpha^3}{3} + \gamma^2 \alpha \right). \quad (2.13)$$

Utilizando as equações de Euler-Lagrange se obtém então a equação para a amplitude α do BS

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} = 0, \quad (2.14)$$

portanto a amplitude é uma constante do movimento. É interessante também observar que para a equação do movimento para a velocidade γ temos

$$\frac{\partial \gamma}{\partial t} = 0. \quad (2.15)$$

Concluindo-se que a velocidade também é uma constante do movimento. Para o DS o calculo variacional é semelhante e também se encontra que a amplitude é uma constante do movimento tal como a velocidade.

2.3 VÓRTICES

Os vórtices em gases quânticos são desde o princípio um grande foco de estudo na área de BEC e na área de óptica quântica devido a característica de fluido da GPE. Um vórtice é caracterizado por uma descontinuidade na fase do parâmetro de ordem ao redor de uma singularidade de densidade. Em um BEC a vorticidade é quantizada de modo que é dada em múltiplos de números inteiros

$$\Gamma = \oint_C \mathbf{v} \cdot d\mathbf{l} = \frac{h}{m} \kappa, \quad (2.16)$$

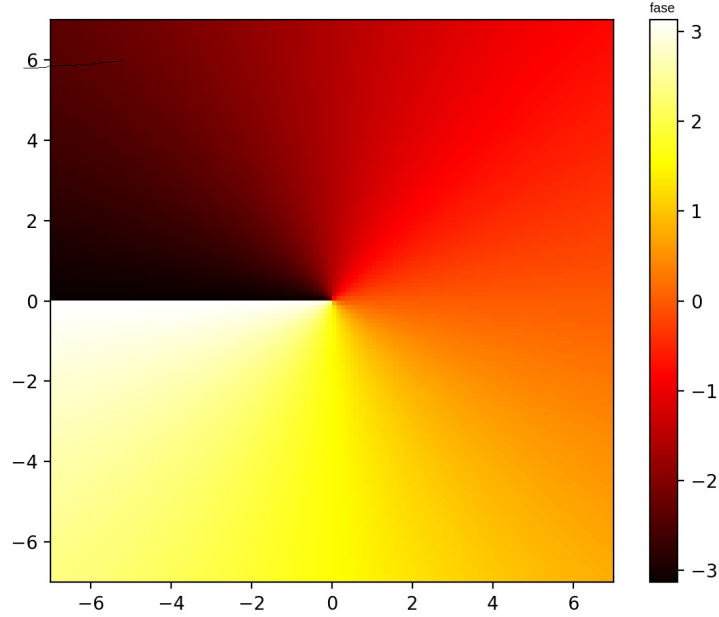


Figura 2.3: Fase para o parâmetro de ordem de um condensado bidimensional com um vórtice de carga $\kappa = 1$ no centro.

onde κ é a carga da vorticidade e é um número inteiro. O campo de velocidade do fluido a uma distância r da singularidade é dada por

$$v_{\theta} = \frac{\kappa \hbar}{2\pi m r}, \quad (2.17)$$

de modo que para valores de κ diferentes de zero tem-se que a velocidade do fluido ao redor da singularidade tende a zero no infinito e diverge no centro da singularidade. Se o valor de κ aumenta então a velocidade aumenta de forma discreta, já que κ só assume valores inteiros.

Caso os vórtices sejam um contínuo no sistema, eles recebem o nome de linha de vórtice. Uma linha de vórtice que se feche em si mesma é conhecida como um anel de vórtice. O VR é o análogo tridimensional do par vórtice-antivórtice, de modo que ao fazer um corte no plano de propagação do anel o perfil de densidade vai ser análogo ao de um dipolo. Isso faz com que o anel de vórtice induza uma velocidade em si mesmo.

Para entender um pouco melhor a natureza de um vórtice quântico, considere agora uma linha de vórtice em coordenadas cilíndricas (r, θ, z) em um condensado homogêneo com $V_{ext} = 0$. Utilizando o ansatz do tipo $\psi(r, \theta, z) = A(r)e^{i\kappa\theta}$, substituindo na equação 1.27 obtém-se a equação em função de $A(r)$

$$\mu A = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left(r \frac{dA}{dr} \right) + \frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m r^2} A + g A^3. \quad (2.18)$$

As condições de contorno impostas são de que $A(r) \rightarrow 0$ para $r \rightarrow 0$ e $A(r) \rightarrow \psi_0$ para $r \rightarrow \infty$. Essa equação não possui solução exata analítica, porém a solução aproximada

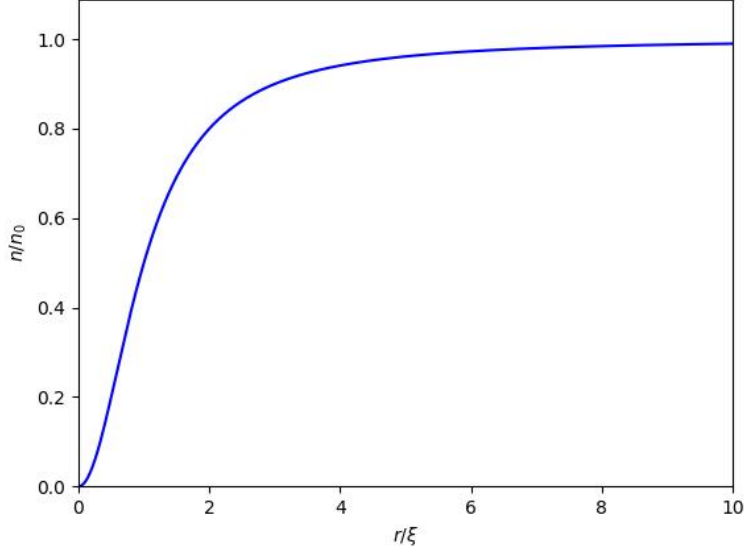


Figura 2.4: Densidade aproximada para um vórtice, dada pela equação (2.19)

para um vórtice individual carregado para a densidade $n(r) = A^2$ é dada por

$$n(r) = n_0 \left(1 - \frac{1}{1 + r'^2} \right), \quad (2.19)$$

onde $r' = r/\xi$. Na figura 2.4 é possível ver que o vórtice tem uma região de densidade zero de raio a_0 . A quantidade a_0 é conhecida como raio do núcleo do vórtice e seu valor aproximado é $a_0 \approx \xi$. Como a velocidade diverge quando $r \rightarrow 0$ a resposta da natureza para corrigir isso é fazer com que a densidade no local seja zero.

Um vórtice pode então ser interpretado como um buraco de densidade cercado por uma circulação quantizada. Vórtices criados como excitações da densidade do condensado são gerados em pares de vórtice-antivórtice de modo a conservar a carga total de vorticidade.

A interpretação do comprimento de cura ξ é de que caso um buraco seja feito no condensado, esse condensado tenta voltar para a densidade de fundo dada pela densidade $\tanh x/\xi$, mas isso não acontece com a densidade do vórtice, isso devido a energia cinética do fluido em circulação, que gera uma força centrífuga no condensado.

Os vórtices podem também ser criados aplicando uma rotação no sistema do condensado [31, 32], de modo que a aparição dos vórtices seja energeticamente favorável, dessa forma durante a rotação uma rede de vórtices é criada. A GPE com um termo de rotação para a criação de uma rede de vórtices pode ser escrita como

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + g|\psi|^2 + V_{ext} + \Omega L_z - \mu \right) \psi, \quad (2.20)$$

com ω sendo a frequência com que o sistema está sendo girado ao redor do eixo z e

$$L_z = i\hbar \left(y \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial y} \right) \quad (2.21)$$

é o operador de momento angular na direção z . Desde que a rotação Ω seja grande o suficiente [33], a rede de vórtice vai ser o estado fundamental desse sistema.

No contexto de vórtices sendo produzidos em pares há uma distância d esse sistema é conhecido como um dipolo de vórtice. Assim, um vórtice induz uma velocidade no outro de modo que cada uma das singularidades se propaga com uma velocidade dada por $v = \hbar/md$. Como a indução da velocidade depende da carga e o par produz cargas opostas, ambos os componentes do dipolo se propagam na mesma direção. Caso os dois pontos tivessem a mesma carga, os vórtices se propagariam em direções opostas. Tudo isso é válido apenas para distâncias $d \gg a_0$. É nesse contexto que surge o movimento de *leapfrogging*, quando dois pares de vórtices se propagam na mesma direção.

Uma alternativa à GPE para estudar vórtices em condensados de Bose-Einstein é o modelo do filamento de vórtice (VFM). O VFM surge pelo fato de que dado um campo de vorticidade $\boldsymbol{\omega}$ é possível obter um vetor potencial \mathbf{A} de acordo com a equação de Poisson

$$\nabla^2 \mathbf{A} = -\boldsymbol{\omega} = \nabla \times \mathbf{v}, \quad (2.22)$$

cujas soluções são

$$\mathbf{A}(\mathbf{s}, t) = \frac{1}{4\pi} \oint \frac{\boldsymbol{\omega}(\mathbf{r}, t)}{|\mathbf{s} - \mathbf{r}|} d\mathbf{r}, \quad (2.23)$$

que é conhecida como lei de Biot-Savart. De modo análogo, é possível encontrar a velocidade auto-induzida de uma configuração de vórtices que é dada por

$$\mathbf{v}^{auto}(\mathbf{s}) = -\frac{\kappa}{4\pi} \oint \frac{(\mathbf{s} - \mathbf{r})}{|\mathbf{s} - \mathbf{r}|^3} \times d\mathbf{r}. \quad (2.24)$$

Essa expressão pode ser aproximada pela aproximação de indução local (LIA)

$$\mathbf{v}^{auto}(\mathbf{s}) = \beta \mathbf{s}' \times \mathbf{s}'' \quad (2.25)$$

$$\beta = \frac{\kappa}{4\pi} \ln \frac{R}{a_0} \quad (2.26)$$

onde $\mathbf{s}' = ds/d\xi_0$ é o vetor tangente unitário ao ponto \mathbf{s} , com ξ_0 sendo o comprimento de arco do filamento, $\mathbf{s}'' = d^2\mathbf{s}/d^2\xi_0$ é o vetor normal ao ponto $R = 1/|\mathbf{s}''|$ é o raio de curvatura local e a_0 é o raio do núcleo do vórtice.

A interpretação da LIA é de que no ponto \mathbf{s} o vórtice se move na direção binormal com velocidade inversamente proporcional ao raio de curvatura local, de modo que uma linha de vórtice totalmente reta não se move, já que sua curvatura é zero.

2.4 ONDAS DE KELVIN

Ondas de Kelvin são excitações helicoidais que perturbam o núcleo de linhas de vórtice ao redor de sua posição de repouso. Foram descobertos primeiro por Lord Kelvin [34] e depois observadas em condensados de Bose-Einstein [35].

Uma onda de Kelvin de amplitude infinitesimal A e comprimento de onda $\lambda \gg a_0$ roda com velocidade angular

$$\omega_0 \approx \frac{\hbar k^2}{4\pi m} \left(\ln \left(\frac{1}{ka_0} \right) - 0.116 \right), \quad (2.27)$$

onde $k = 2\pi/\lambda$ é o número de onda. Portanto, ondas com um comprimento de onda menor rodam com uma velocidade maior. Anéis de vórtice também podem ser perturbados com ondas de Kelvin.

3 Métodos numéricos

A GPE é conhecida em todo ramo da matéria condensada como sendo uma equação não linear. Então a maioria dos problemas envolvendo a aproximação de campo médio para a condensação de Bose-Einstein não possuem soluções analíticas. As poucas soluções analíticas existentes são para geometrias muito específicas e com algumas aproximações, como por exemplo a de interações entre os átomos g muito pequenas.

Portanto métodos numéricos são extremamente essenciais para estudar e desenvolver trabalhos envolvendo BEC do ponto de vista de campo médio. Esse capítulo trata de diversos métodos uteis para resolver a GPE e outras equações não lineares para uma série de problemas diferentes.

3.1 MÉTODO DE ADAMS-BASHFORTH

O método de Adams-Bashforth [36] é um método linear de vários passos que utiliza não apenas o passo anterior, como no método de Euler, como os n passos anteriores. Dado uma equação do tipo

$$\frac{du}{dt} = f(u(t), t), \quad (3.1)$$

com uma condição inicial do tipo

$$u(t_0) = a. \quad (3.2)$$

Dados os $n, n+1, \dots, n+s-1$ passos, a equação 3.1 é integrada de t^{n+s-1} até t^{n+s} , portanto

$$u^{(n+s)} = u^{(n+s-1)} + \int_{t^{n+s-1}}^{t^{n+s}} f(u(t), t) dt, \quad (3.3)$$

aproximando então $f(u(t), t)$ por um polinômio interpolador $p(t)$ na forma de Lagrange dado por

$$p(t) = \sum_{j=0}^{s-1} \left(f(t^{(n)}, u^{(n)}) \prod_{k=0, k \neq j}^{s-1} \frac{t - t^{(n-k)}}{t^{n+j} - t^{(n+k)}} \right), \quad (3.4)$$

portanto

$$u^{(n+s-1)} + \int_{t^{n+s-1}}^{t^{n+s}} f(u(t), t) dt = u^{(n+s-1)} + \int_{t^{n+s-1}}^{t^{n+s}} p(t) dt, \quad (3.5)$$

que pode ser reescrito como

$$u^{(n+s-1)} + h \sum_{j=0}^{s-1} \beta_j f(t^{(n)}, u^{(n)}), \quad (3.6)$$

com

$$\beta_j = \frac{1}{h} \int_{t^{n+s-1}}^{t^{n+s}} \prod_{k=0, k \neq j}^{s-1} \frac{t - t^{(n-k)}}{t^{n+j} - t^{(n+k)}}. \quad (3.7)$$

A equação (3.7) é então uma relação de recorrência para $u^{(n+s)}$.

Dado um grau s é possível então calcular as fórmulas de recorrência. Por exemplo para $s = 2$ tem-se que

$$u^{n+2} = u^{n+1} + \frac{h}{2} (3f(u^{(n+1)}, t^{(n+1)}) - f(u^{(n)}, t^{(n)})). \quad (3.8)$$

O primeiro valor u^{n+1} pode ser encontrado usando a fórmula de Euler [37]

$$u^{(n+1)} = u^{(n)} + hf(u^{(n)}, t^{(n)}). \quad (3.9)$$

3.2 SPLIT-STEP

A grande maioria dos problemas abordados atualmente na física não possuem soluções analíticas, ou possuem soluções que são extremamente complicadas. Por isso os métodos numéricos são ferramentas extremamente poderosas que encontram soluções que não seriam possíveis sem o advento da tecnologia. Como grande exemplo dessas equações extremamente complicadas está a GPE.

O método numérico conhecido como *split step* [38, 39] é extremamente útil para evoluir a GPE. Pode-se escrever

$$i \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = (T + V)\psi(\mathbf{r}, t), \quad (3.10)$$

onde T é o operador cinético dado por $-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2$ e V é o operador não linear dado por $V(\mathbf{r}) + \mathbf{g}|\psi(\mathbf{r}, t)|^2$. Essa equação é muito bem conhecida e no intervalo Δt possui solução dada por

$$\Psi(\mathbf{r}, t + \Delta t) = e^{-i\frac{\Delta t}{\hbar}(T+V)}\Psi(\mathbf{r}, t). \quad (3.11)$$

Portanto para obter a evolução inicial devemos escrever numericamente a expressão

$$e^{-i\frac{\Delta t}{\hbar}(T+V)}. \quad (3.12)$$

O desafio para implementação é escrever o termo cinético T , já que ele envolve essencialmente uma derivada do tipo ∇^2 . O truque então é utilizar um método pseudo-spectral, que consiste em utilizar a transformada de Fourier para passar do espaço de configurações para o espaço de momentos

$$\tilde{\Psi}(\mathbf{p}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi(\mathbf{r}, t) e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar} d\mathbf{r}. \quad (3.13)$$

Dessa forma nosso operador T tem como auto-valor simplesmente um número e fica trivial de implementar numericamente. Mas pelo fato de que $[T, V] \neq 0$ e usando a fórmula BKS

$$e^B e^A = e^{A+B+\frac{1}{2}[A,B]+\frac{1}{12}([A,[A,B]]+[B,[B,A]]+\dots)}. \quad (3.14)$$

É possível concluir

$$e^{-i\frac{t}{\hbar}(T+V)\Delta t} \neq e^{-i\frac{t}{\hbar}T\Delta t} e^{-i\frac{t}{\hbar}V\Delta t}. \quad (3.15)$$

Para encontrar uma forma aproximada, considere as seguintes expansões em Taylor

$$e^{\epsilon(A+B)} = 1 + \epsilon(A+B) + \frac{\epsilon^2}{2!}(A+B)^2 + \frac{\epsilon^3}{3!}(A+B)^3 + \dots, \quad (3.16)$$

$$\begin{aligned} e^{\epsilon B/2} e^{\epsilon A} e^{\epsilon B/2} &= \left(1 + \epsilon B/2 + \frac{\epsilon^2}{2!}(B/2)^2 + \frac{\epsilon^3}{3!}(B/2)^3 + \dots \right) \left(1 + \epsilon A + \frac{\epsilon^2}{2!}A^2 + \frac{\epsilon^3}{3!}A^3 + \dots \right) \\ &\times \left(1 + \epsilon B/2 + \frac{\epsilon^2}{2!}(B/2)^2 + \frac{\epsilon^3}{3!}(B/2)^3 + \dots \right). \end{aligned} \quad (3.17)$$

Comparando as equações (3.16) e (3.17) obtém-se

$$e^{\epsilon(A+B)} = e^{\epsilon B/2} e^{\epsilon A} e^{\epsilon B/2} + \mathcal{O}(\epsilon^3). \quad (3.18)$$

Portanto, para ϵ suficientemente pequeno é possível escrever o operador (3.12) como

$$e^{-i\frac{t}{\hbar}(T+V)\Delta t} \approx e^{-i\frac{t}{\hbar}\frac{V}{2}\Delta t} e^{-i\frac{t}{\hbar}T\Delta t} e^{-i\frac{t}{\hbar}\frac{V}{2}\Delta t}. \quad (3.19)$$

Assim, o algoritmo para obter a evolução temporal em um passo qualquer Δt se resume a:

1. Aplicar o operador não linear em meio passo de tempo;
2. Passar a função de onda para o espaço de Fourier;
3. Aplicar o operador cinético no espaço de Fourier;
4. Fazer a transformação inversa para voltar para o espaço de configurações;
5. Aplicar o operador não linear em meio passo de tempo uma última vez.

3.3 MÉTODO DE DIFERENÇAS FINITAS

O método de diferenças finitas [40] é um método de utilizado para resolver equações diferenciais parabólicas. Dado uma função $f(x)$, sua série de Taylor em segunda ordem dado um deslocamento $x + \delta x$ é dada por

$$f(x + \delta x) = f(x) + \delta x \frac{df}{dx} + \frac{\delta x^2}{2} \frac{d^2 f}{dx^2}, \quad (3.20)$$

então as derivadas em x podem ser expressas como

$$\frac{df}{dx} = \frac{f(x + \delta x) - f(x - \delta x)}{2\delta x}, \quad (3.21)$$

$$\frac{d^2 f}{dx^2} = \frac{f(x + \delta x) - 2f(x) + f(x - \delta x)}{\delta x^2}. \quad (3.22)$$

Portanto, dado as condições de contorno adequadas, é possível escrever as derivas primeira e segunda em termo das equações (3.21) e (3.22). Essas equações são de primeira ordem. Para as terceiras e quartas derivadas é necessária uma precisão de segunda ordem

$$\frac{d^3 f}{dx^3} = \frac{f(x + 2\delta x) - 2f(x + \delta x) + 2f(x - \delta x) - f(x - 2\delta x)}{2\delta x^3}. \quad (3.23)$$

$$\frac{d^4 f}{dx^4} = \frac{f(x + 2\delta x) - 4f(x + \delta x) + 6f(x) - 4f(x - \delta x) + f(x - 2\delta x)}{\delta x^4}. \quad (3.24)$$

Já as derivadas primeiro e segunda podem ser escritas em segunda ordem na forma

$$\frac{df}{dx} = \frac{3f(x + \delta x) - 4f(x - \delta x) + f(x - 2\delta x)}{2\delta x}, \quad (3.25)$$

$$\frac{d^2 f}{dx^2} = \frac{2f(x + \delta x) - 5f(x - \delta x) + 4f(x - 2\delta x) - f(x - 3\delta x)}{\delta x^2}. \quad (3.26)$$

3.4 PROPAGAÇÃO EM TEMPO IMAGINÁRIO

O método de propagação em tempo imaginário [41, 42] é um dos métodos utilizados para se encontrar o estado fundamental de uma função de onda qualquer desde que essa seja descrita por uma equação de Schrödinger dependente do tempo da forma

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H\Psi. \quad (3.27)$$

Considerando os autovalores de H como sendo da forma α_i com autovetores $|\alpha_i\rangle$, sendo $|\alpha_0\rangle$ o estado com menor autovalor α_0 e portanto menor energia. Expandindo Ψ na base desses autovetores tem-se

$$\Psi = \sum_{i=0}^{\infty} \alpha_i \phi_i. \quad (3.28)$$

O método consiste de substituir o tempo t da equação por um tempo imaginário τ da forma $t = -i\tau$. A equação (3.27) fica então

$$\hbar \frac{\partial \Psi(\tau)}{\partial \tau} = -H\Psi(\tau), \quad (3.29)$$

cuja solução é dada por

$$\Psi(\tau) = e^{-\frac{i}{\hbar}H\tau}\Psi(\tau = 0). \quad (3.30)$$

A energia média do sistema pode ser escrita como

$$E(\tau) = \frac{\langle \Psi(\tau) | H | \Psi(\tau) \rangle}{\langle \Psi(\tau) | \Psi(\tau) \rangle}, \quad (3.31)$$

Ao utilizar a expansão em autovetores, essa equação pode ser escrita como

$$E(\tau) = \frac{\alpha_0 + \sum \alpha_i e^{-\frac{2}{\hbar}\tau(\alpha_i - \alpha_0)} |\phi_i / \phi_0|^2}{1 + \sum \alpha_i e^{-\frac{2}{\hbar}\tau(\alpha_i - \alpha_0)} |\phi_i / \phi_0|^2}, \quad (3.32)$$

que é o mesmo que

$$E(\tau) = \alpha_0 + \frac{\sum (\alpha_i - \alpha_0) e^{-\frac{2}{\hbar}\tau(\alpha_i - \alpha_0)} |\phi_i / \phi_0|^2}{1 + \sum \alpha_i e^{-\frac{2}{\hbar}\tau(\alpha_i - \alpha_0)} |\phi_i / \phi_0|^2} \geq \alpha_0. \quad (3.33)$$

Tomando o limite $\tau \rightarrow \infty$ obtém-se

$$\lim_{\alpha \rightarrow \infty} E(\tau) = \alpha_0, \quad (3.34)$$

que é a energia do estado fundamental da função de onda. Portanto $\Psi(\tau)$ tende ao estado fundamental quando τ tende ao infinito.

3.5 MÉTODO DO GRADIENTE CONJUGADO

O método do gradiente conjugado é um método de minimização de uma função a partir do método de Newton que apresenta uma eficiência computacional muito grande em relação ao método do tempo imaginário [43]. Dessa forma em problemas que a otimização computacional se torna relevante é mais conveniente utilizar esse método para obter a função de menor energia.

Considerando uma função a ser minimizada do tipo

$$f(x) = \frac{1}{2}x^T A x - b^T x, \quad (3.35)$$

Onde A é uma matriz quadrada e positiva $n \times n$ e x e b são vetores $n \times 1$. Essa equação possui as mesmas soluções de

$$A x = b. \quad (3.36)$$

Minimizando a equação (3.35) é o mesmo que impor que

$$\frac{df(x^{(k)} + \alpha_k d)}{d\alpha_k} = 0 \quad (3.37)$$

onde

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha_k d^k, \quad (3.38)$$

onde d é a direção da derivada.

Mas o gradiente de f é dado por

$$\nabla f = \frac{1}{2}(A + A^T)x - b, \quad (3.39)$$

se for considerador que a matriz é simétrica $A = A^T$, a expressão pro gradiente fica

$$\nabla f = Ax - b. \quad (3.40)$$

A equação (3.36) é portanto um ponto mínimo de f . A expressão para a minimização se torna

$$\nabla f(x^{(k+1)}) \frac{dx^{(k+1)T}}{d\alpha_k} = 0. \quad (3.41)$$

Definindo então

$$-\nabla f = b - Ax^{(k)} = r^{(k)}, \quad (3.42)$$

a minimização acontece quando

$$\alpha_k = \frac{d^{(k)T} r^{(k)}}{d^{(k)T} A d^{(k)}}, \quad (3.43)$$

$$r^{(k+1)T} d^{(k)} = 0. \quad (3.44)$$

Escolhendo então o conjunto de direções $\{r^0, r^1 \dots\}$ de forma que seus elementos são conjugados a A , ou seja

$$r^{(k)T} A r^{(k)} = 0. \quad (3.45)$$

Então cada vetor direção $r^{(k)}$ pode ser escrito em termos dos geradores $\{R_0, \dots, R_{n-1}\}$ das contrapartes negativas de $r^{(k)}$, de forma que

$$d^{(k)} = R_k + \sum_{i=0}^{k-1} \beta_{ki} d^{(i)}, \quad (3.46)$$

onde

$$\beta_{ki} = -\frac{R_k^T A d^{(i)}}{d^{(i)T} A d^{(i)}}. \quad (3.47)$$

Definindo agora o erro ϵ como

$$\epsilon^{(k)} = x^{(k)} - x, \quad (3.48)$$

obtem-se que

$$r^{(k+1)} = r^{(k)} - \alpha_k A d^{(k)}, \quad (3.49)$$

$$\epsilon^{(k+1)} = \epsilon^{(k)} + \alpha_k d^{(k)}. \quad (3.50)$$

Para a n -ésima iteração tem-se

$$r^{(n)} = r^0 - \sum_{i=0}^{n-1} \alpha_i A d^{(i)}, \quad (3.51)$$

$$\epsilon^{(n)} = \epsilon^0 - \sum_{i=0}^{n-1} \alpha_i d^{(i)}, \quad (3.52)$$

mas como

$$d^{(j)T} A \epsilon^{(k)} = d^{(j)T} A \epsilon^{(0)}, \quad (3.53)$$

$$d^{(j)T} r^{(k)} = d^{(j)T} r^{(0)} \quad (3.54)$$

para $j \geq k$, e

$$-d^{(j)T} r^{(k)} = -d^{(j)T} r^{(0)} + d^{(j)T} r^{(j)} = 0, \quad (3.55)$$

$$-d^{(j)T} A \epsilon^{(k)} = -d^{(j)T} A \epsilon^{(0)} + \alpha_j d^{(j)T} A \epsilon^{(j)} = 0 = 0, \quad (3.56)$$

caso $j < 0$. Portanto temos a ortogonalidade entre os geradores R_n , de modo que

$$\alpha_k = \frac{|r^{(k)}|^2}{d^{(k)T} A d^{(k)}}. \quad (3.57)$$

Dessa forma o coeficiente β_{ki} se torna para i e $i - 1$

$$\beta_{i(i-1)} = \frac{1}{\alpha_{i-1}} \frac{|r^{(i)}|^2}{d^{(i-1)T} A d^{(i-1)}}, \quad (3.58)$$

ou então

$$\beta_{i(i-1)} = \frac{|r^{(i)}|^2}{|r^{(i-1)}|^2} \doteq \beta_i. \quad (3.59)$$

Dessa forma o algoritmo se resume em calcular

$$d^{i+1} = r^{i+1} + \beta_{i+1} d^i, \quad (3.60)$$

até o termo $|r^{(i)}|^2$ atingir a precisão desejada.

4 Movimento de Leapfrogging

Como descrito no capítulo anterior, quando uma linha de vórtice se fecha em si mesma um anel de vórtice é formado. O primeiro a estudar esse fenômeno foi Helmholtz [44, 45] que observou logo em seguida o movimento de dois anéis de vórtice coaxiais. Helmholtz percebeu que se os dois anéis influenciam-se mutualmente e que se os dois tem o mesmo sinal de vorticidade, ambos se propagam na mesma direção. Então o raio do anel que está à frente diminui durante a propagação, enquanto o raio do que está atrás aumenta, de forma que se as velocidades não são tão diferentes o VR de trás passa por fora do anel que está na frente e o movimento se repete outra vez. Este é o fenômeno conhecido como *leapfrogging* que tende a permanecer infinitamente até ser quebrado por alguma instabilidade.

4.1 LEAPFROGGING CLÁSSICO

O movimento de *leapfrogging* é muito bem descrito classicamente pelas equações de Euler e tem uma literatura muito vasta, que vem do século XIX até os dias atuais [46, 47, 48, 49, 50, 51, 1, 52]. O movimento, apesar de ser mais bem visualizado em 3D, também pode ser estudado em 2D. Em duas dimensões o *leapfrogging* ocorre do ponto de vista de um corte no VR no plano de propagação, de forma que o VR é visto como sendo um par de vórtice-antivórtice andando na direção do eixo de propagação. O movimento bidimensional é portanto uma ótima ferramenta para compreender os fundamentos do fenômeno.

Tendo um sistema de N vórtices com vorticidade κ_i , com $i = 1, \dots, N$, a velocidade de cada vórtice em um instante qualquer de tempo é influenciada por cada um dos outros vórtices. Considerando um fluido incompressível, o campo de velocidades é dado pela equação de Euler [53, 54]

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} = -\frac{\nabla p}{\rho} + \mathbf{f}, \quad (4.1)$$

com a condição de incompressibilidade sendo

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0. \quad (4.2)$$

Em duas dimensões, tomando a definição de vorticidade da equação (2.22) e o rotacional da equação (4.1) obtém-se a equação de evolução da vorticidade

$$\frac{\partial \omega}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \omega = 0, \quad (4.3)$$

onde $\boldsymbol{\omega}(\mathbf{r}) = \omega(\mathbf{r})\hat{z}$. Esta expressão pode ser interpretada com uma equação e continuidade para a vorticidade, implicando na conservação de vorticidade através do fluxo do fluido.

Considerando agora o caso no qual os vórtices estão restritos a serem pontuais, ou seja, os pontos de vórtice são singularidades em $\omega(\mathbf{r})$, portanto

$$\omega(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^N \Gamma_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i), \quad (4.4)$$

onde Γ_i é a circulação do i -ésimo vórtice na posição \mathbf{r}_i e δ é o delta de Dirac.

Introduzimos agora a função de corrente $\Lambda \equiv \Lambda(x, y)$ definida como

$$v_x = \frac{\partial \Lambda}{\partial y}, \quad v_y = -\frac{\partial \Lambda}{\partial x}, \quad (4.5)$$

onde v_x e v_y são as velocidades do fluido na direção x e y , respectivamente.

Substituindo a equação (4.5) na equação (2.22) obtém-se

$$\nabla^2 \Lambda(\mathbf{r}) = -\omega(\mathbf{r}), \quad (4.6)$$

que nada mais é do que uma equação de Poisson com ω como uma fonte de fluxo. Essa equação tem como solução

$$\Lambda(\mathbf{r}) = \int G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \omega(\mathbf{r}') d\mathbf{r}', \quad (4.7)$$

onde $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ é a função de Green com $\nabla^2 G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$. Em duas dimensões a função de Green dessa equação é dada por

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\frac{1}{4\pi} \ln(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^2). \quad (4.8)$$

Substituindo as eqs. (4.8) e (4.4) em (4.7), a função de corrente é $\Lambda(\mathbf{r})$ portanto dada por

$$\Lambda(\mathbf{r}) = -\frac{1}{4\pi} \sum_{i=1}^N \Gamma_i \ln(|\mathbf{r} - \mathbf{r}_i|^2). \quad (4.9)$$

Substituindo a eq. (4.9) em (4.5) temos que as velocidades \dot{x}_i e \dot{y}_i do centro cada um dos N vórtices de carga $2\pi\kappa$ é dada pelas seguintes equações não lineares [1]

$$\frac{dx_i}{dt} = - \sum_{j=1, j \neq i}^N \frac{\kappa_j (y_i - y_j)}{r_{i,j}^2}, \quad (4.10)$$

$$\frac{dy_i}{dt} = \sum_{j=1, j \neq i}^N \frac{\kappa_j (x_i - x_j)}{r_{i,j}^2}, \quad (4.11)$$

onde

$$r_{i,j}^2 = (x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2. \quad (4.12)$$

Esse é conhecido como modelo de ponto de vórtice. Para dois VR em duas dimensões, portanto para 2 pares de vórtice-antivórtice, tem-se $N = 4$ e as cargas são dadas por

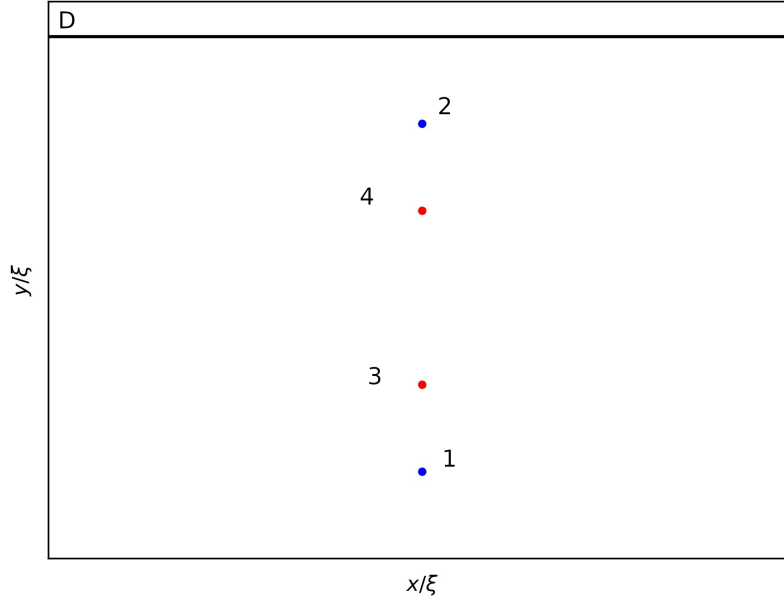


Figura 4.1: Esquema utilizado para a configuração de vórtices iniciais. As cargas são dadas por $\kappa_1 = -1$ e $\kappa_2 = 1$ para o anel 1 (azul) e $\kappa_3 = -1$ e $\kappa_4 = 1$ para o anel 2 (vermelho).

$\kappa_1 = -1$ e $\kappa_2 = 1$ para o anel 1 e $\kappa_3 = -1$ e $\kappa_4 = 1$ para o anel 2. É conveniente limitar os valores de y de modo que $0 \leq y \leq D$ onde D é um parâmetro que equivale a duas vezes a largura do canal no eixo y e fixar a coordenada inicial $x = 0$ para estudar os movimentos. Fazendo então que o raio de cada anel R_n deve ser $R_2/R_1 < 1$ é possível encontrar o parâmetro α_c para os quais o movimento ocorre e o parâmetro α'_c para qual o movimento é estável, onde tem-se que $R_2/R_1 = \alpha$. Na figura 4.1 está o esquema utilizado.

4.2 LEAPFROGGING QUÂNTICO

Anéis de vórtice são objetos de muitos estudos em BEC [55, 56, 57, 58, 59, 60, 61, 62, 63, 64, 65]. Devido a característica de superfluido de um condensado de Bose-Einstein, os anéis de vórtice conseguem executar o movimento de *leapfrogging* tal como nos fluidos clássicos. As principais diferenças que surgem em relação ao movimento clássico são devidas ao fato da vorticidade presente no condensado ser quantizada. O *leapfrogging* em condensados, ao contrário da sua contraparte clássica, não possui referências tão vastas. Nos últimos anos uma gama maior de artigos teóricos foi publicado sobre o assunto [66, 67], demonstrando um crescimento no interesse na área. Trabalhos experimentais ainda não foram realizados com esse fenômeno.

Os vórtices devem ser colocados no condensado à "força". Os pares de vórtice-

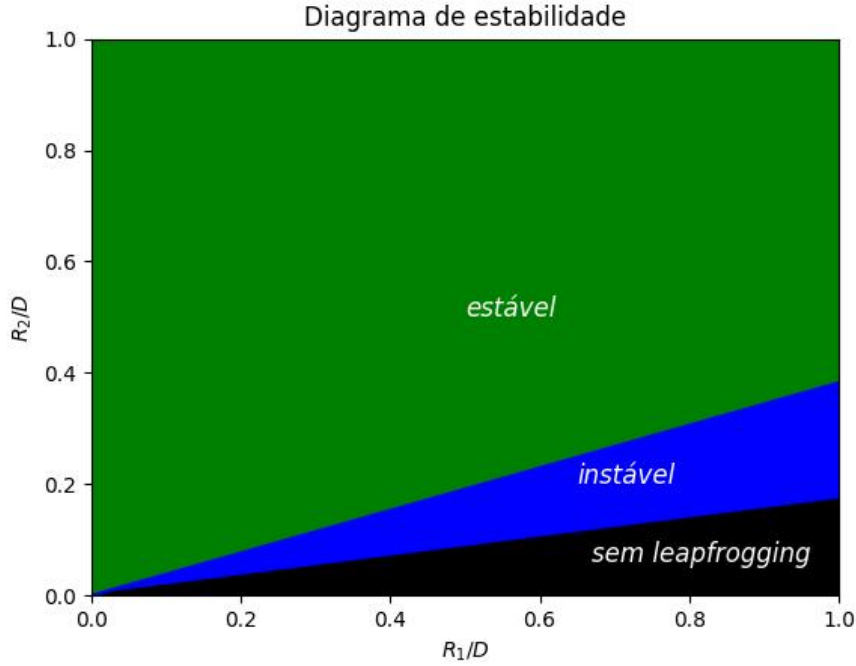


Figura 4.2: Diagrama de estabilidade para o movimento de *leapfrogging* com os valores de $\alpha_c = 0.17$ e $\alpha'_c = 0.38$. Na região preta o movimento não acontece e os pares de vórtice se propagam no eixo x sem a alternância de raio. Na região azul o movimento é possível, porém é instável para pequenas perturbações. Na região verde o movimento ocorre e é estável durante todo o movimento.

antivórtice podem ser criados forçando uma descontinuidade de $\pm\kappa 2\pi$ ao redor do pontos de vórtice em questão. A equação que descreve o movimento dos vórtices pode ser tanto GPE quanto o VFM, para três dimensões, e o modelo de ponto de vórtice para duas dimensões. O modelo que será utilizado pode depender de diversos fatores da sua simulação.

Quando a GPE for utilizada e resolvida de forma numérica, muitos fatores estarão fazendo parte do cálculo. O parâmetro de ordem vai carregar informação sobre a densidade e fase não apenas das regiões onde o vórtice foi colocado, mas também de todo o condensado em questão. No quesito computacional, o modelo de GPE é muito mais lento do que o VFM, que só carrega informação sobre a posição dos vórtices. O VFM, porém, só é válido para uma aproximação de incompressibilidade, portanto apenas quando a distância entre dois filamentos de vórtice é maior que o comprimento de cura ξ do condensado.

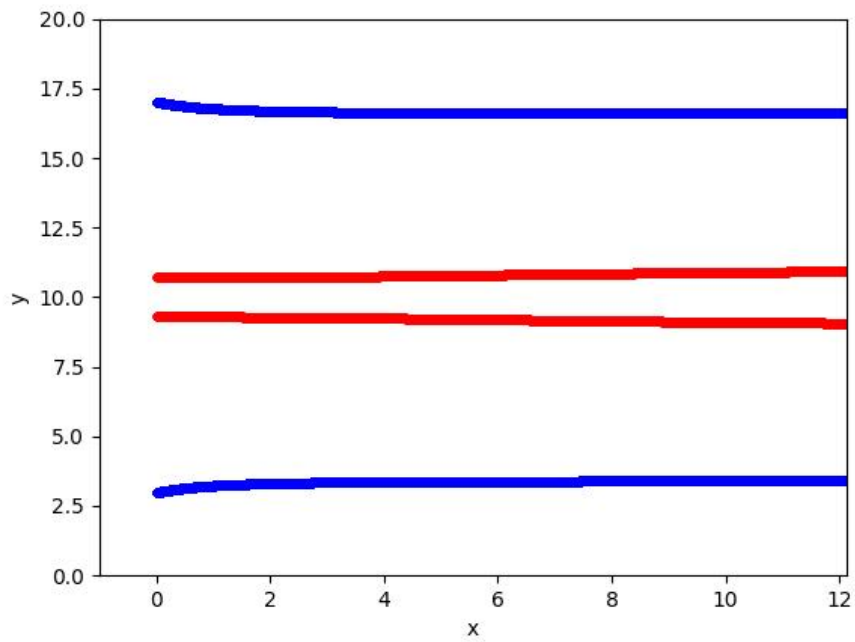


Figura 4.3: Resultados obtidos com o modelo de ponto de vórtice para parâmetros de $R_1 = 7$ e $R_2 = 1$ para os quais o movimento de *leapfrogging* não ocorre no sistema clássico. Linhas azuis e vermelhas são diferentes pares de vórtice-antivórtice.

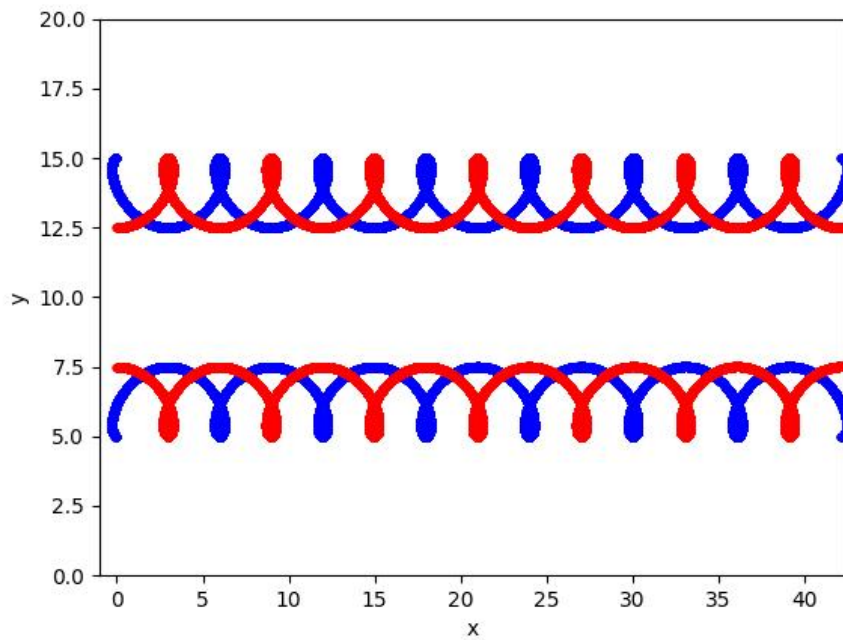


Figura 4.4: Evolução temporal do *leapfrogging* clássico e estável obtido através do modelo de ponto de vórtice para parâmetros $R_1 = 7$ e $R_2 = 5$. Linhas azuis e vermelhas são diferentes pares de vórtice-antivórtice.

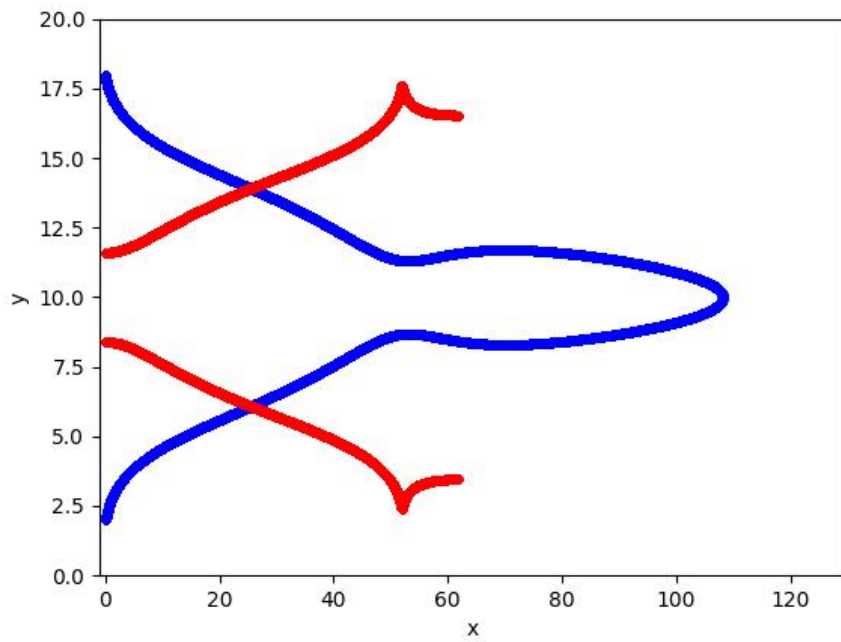


Figura 4.5: Movimento de *leapfrogging* instável obtido através do modelo de ponto de vórtice para valores de $R_1 = 8$ e $R_2 = 2$. Linhas azuis e vermelhas são diferentes pares de vórtice-antivórtice.

4.3 RESULTADOS PARA O LEAPFROGGING CLÁSSICO

Os resultados obtidos para o *leapfrogging* clássico foram obtidos resolvendo as equações (4.10) e (4.11) utilizando o método de Adams–Bashforth de segunda ordem, utilizando o passo de $dt = 10^{-6}$. O parâmetro limitador utilizado foi $D = 10$. O raio de cada um dos anéis é dado por R_1 e R_2 que são parâmetros que obedecem $R_1 < 1$ e $R_2 < R_1$. Para encontrar os parâmetros de estabilidade α_c e α'_c foi fixado um valor de $y_1 = 7.5$ e $y_2 = 12.5$ e foram variados os parâmetros y_3 e y_4 . Dessa forma foram encontrados os valores de $\alpha_c = 0.17$ e $\alpha'_c = 0.38$, que possuem um excelente concordância com a literatura [1, 68]. Um diagrama com as regiões de R_1 e R_2 nas quais o movimento de *leapfrogging* é possível e estável está disponível na figura 4.2.

Na figura 4.3 está apresentado o movimento de um VR com $R_1 = 7$ e $R_2 = 1$ no qual o movimento não ocorre. É possível observar que a abertura que acontece no anel que se propaga atrás e o fechamento do anel da frente é quase imperceptível, de modo que a troca de liderança entre os anéis nunca ocorre.

Na figura 4.4 está o resultado de um cálculo com parâmetros de $R_1 = 7$ e $R_2 = 5$ e portanto o movimento ocorre de forma estável. Neste caso, o movimento é completamente imune a pequenas perturbações no sistema.

As pequenas perturbações para testar a estabilidade foram feitas de modo que a posição inicial de um dos pontos de vórtice era deslocada na direção x por um pequeno fator de $\epsilon = 0.0001$. Na figura 4.5 está o resultado para $R_1 = 8$ e $R_2 = 2$. Nesse caso, antes do movimento completar um período completo a instabilidade quebra a harmonia e os vórtices começam a se propagar sem realizar o *leapfrogging*.

4.4 RESULTADOS PARA O LEAPFROGGING QUÂNTICO

As simulações para o *leapfrogging* utilizando vórtices quânticos em um condensado de Bose-Einstein foram feitas evoluindo a equação (1.31) pelo método pseudo-espectral. O parâmetro espacial está em unidades do comprimento de cura ξ e portanto é necessário um espaçamento grande o suficiente para que o raio do núcleo dos vórtices a_0 seja menor que ξ . A equação foi resolvida utilizando o método pseudo-espectral com uma grade de 320×320 com espaçamento entre os pontos de 0.25ξ . O passo temporal utilizado foi de $dt = 0.01$. Os valores se estendem de forma que $-1 \leq x \leq 80$ e $0 \leq y \leq 50$ com condições periódicas de contorno impostas nas bordas e com os vórtices iniciais bem distantes da parede de potencial, de modo que efeitos de carga de vórtice imaginária não pudessem ser observados. O parâmetro de controle da largura do canal utilizado foi $D = 40$, de modo que foi imposto um potencial da forma

$$V(x, y) = 0 \quad > \quad \text{para } y < 2D, \quad (4.13)$$

$$V(x, y) = 10 \quad \text{para } y > 2D. \quad (4.14)$$

Esse potencial é o análogo do condensado estar dentro de uma caixa retangular de altura muito maior que a largura.

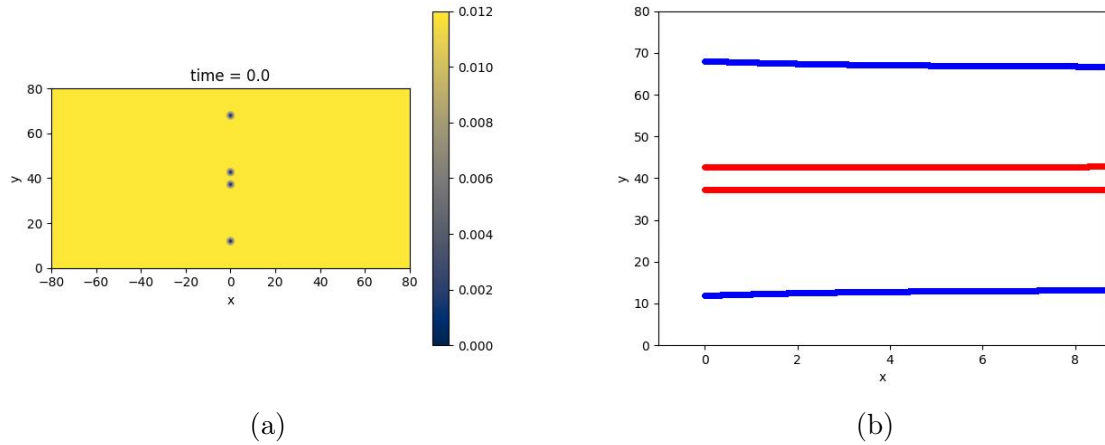


Figura 4.6: Resultados obtidos com a GPE para parâmetros $R_1 = 28$ e $R_2 = 3.9$ de modo a reproduzir os parâmetros de R_1/D e R_2/R_1 da figura 4.3. (a) Densidade inicial para o parâmetro de ordem, onde a cor roxa expressa o mínimo e a amarela o máximo de densidade; (b) Evolução temporal dos pares de vórtice-antivórtice, sendo o azul o par R_1 e vermelho o par R_2 .

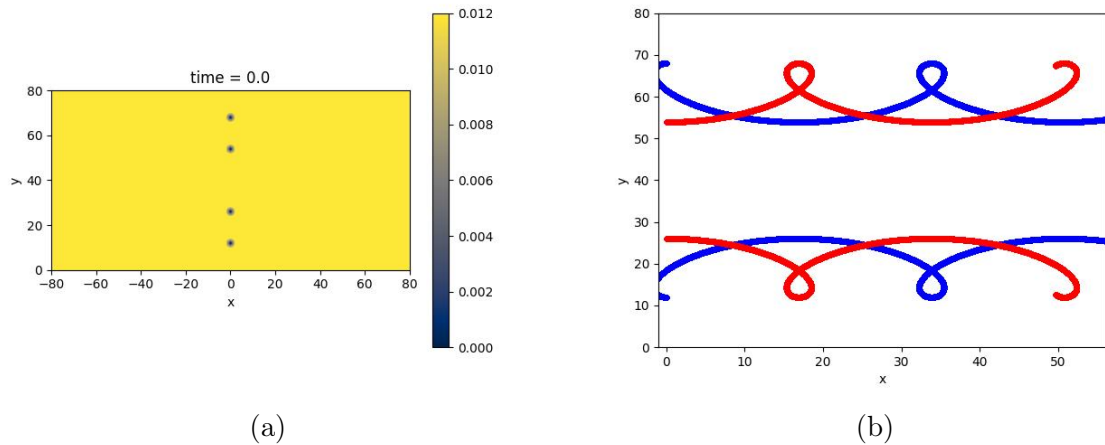


Figura 4.7: Resultados obtidos com a GPE para parâmetros $R_1 = 28$ e $R_2 = 19.9$ de modo a reproduzir os parâmetros de R_1/D e R_2/R_1 da figura 4.4. (a) Densidade inicial para o parâmetro de ordem, onde a cor roxa expressa o mínimo e a amarela o máximo de densidade; (b) Evolução temporal dos pares de vórtice-antivórtice, sendo o azul o par R_1 e vermelho o par R_2 .

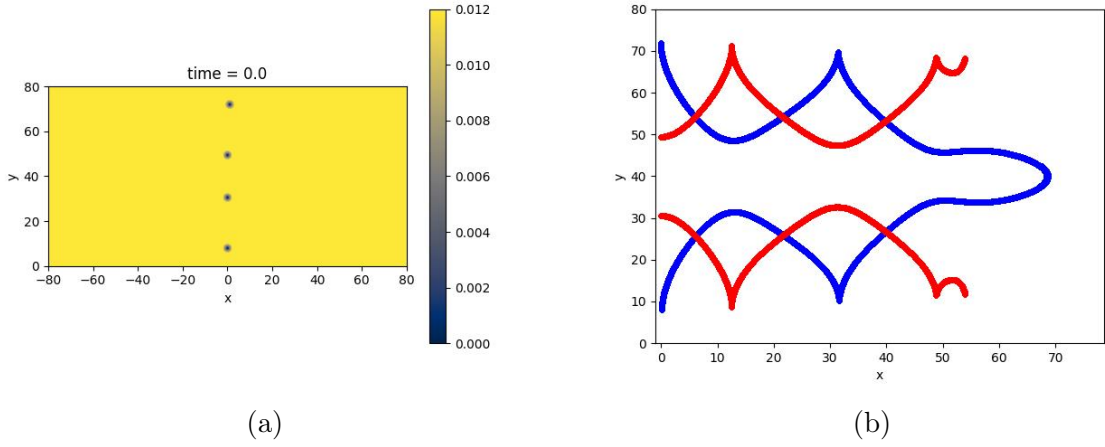


Figura 4.8: Resultados obtidos com a GPE para parâmetros $R_1 = 32$ e $R_2 = 11.8$ de modo a reproduzir os parâmetros de R_1/D e R_2/R_1 da figura 4.5. (a) Densidade inicial para o parâmetro de ordem, onde a cor roxa expressa o mínimo e a amarela o máximo de densidade; (b) Evolução temporal dos pares de vórtice-antivórtice, sendo o azul o par R_1 e vermelho o par R_2 .

Os vórtices foram colocados no condensado homogêneo criando uma descontinuidade ao redor da posição inicial do vórtice, tal como na figura 2.3 e depois evoluindo durante um curto período de tempo com o método do tempo imaginário para o sistema adquirir a nova fase. A normalização utilizada no sistema foi

$$\int |\Psi|^2 dx dy = 1. \quad (4.15)$$

Como a resolução da GPE exige muito mais poder computacional não é viável variar parâmetros como no caso clássico e portanto o objetivo foi utilizar parâmetros de R_2/R_1 idênticos aos do *leapfrogging* clássico para verificar a compatibilidade dos regimes de estabilidade dados pela figura 4.2.

Nas figuras 4.6a e 4.6b está o resultado para um parâmetro α igual ao da figura 4.3 no qual segundo a figura 4.2 o movimento não acontece. É possível verificar, dadas as proporções dimensionais, que o *leapfrogging* realmente não ocorre e é muito semelhante.

As figuras 4.7a e 4.7b possuem o parâmetro α igual ao da figura 4.4, de modo que se verifica que o *leapfrogging* ocorre como no movimento clássico. Nesse caso é importante observar que caso a distância entre os vórtices quânticos seja menor do que 5ξ o fenômeno de conexão irá ocorrer entre os vórtices, impossibilitando o *leapfrogging* de acontecer. É necessário então impor uma nova condição para o diagrama

$$R_1 - R_2 > 5\xi. \quad (4.16)$$

O caso de movimento instável está disponível nas figuras 4.8a e 4.8b, reproduzindo o parâmetro α do caso produzido na figura 4.5. Para testar a estabilidade um pequeno ruído aleatório proporcional a $|\Psi(x, y)|$ no ponto foi imposto a função de onda inicial dada

pela figura 4.8a. O movimento se demonstra instável como na sua contraparte clássica, porém com o fenômeno de aniquilação dos vórtices sendo observado no momento em que o par de vórtice-antivórtice se encontra próximo à região de $y = 40$. Dessa forma o movimento não apenas instabiliza como deixa de acontecer com a aniquilação de um dos pares, fazendo com que o outro par passe a se propagar em linha reta pelo resto do trajeto.

Baseado nos parâmetros testados, é possível concluir que caso os valores de D/ξ sejam suficientemente grandes, de modo que o comprimento de cura ξ possa ser desprezado e respeitando a condição dada pela equação (4.16), o *leapfrogging* quântico é idêntico ao clássico. Para os casos em que o comprimento de cura começa a aparecer, o termo de pressão quântica da equação (1.50) não pode mais ser desprezado e o movimento perde sua semelhança com o descrito pela equação de Navier-Stokes.

5 Estabilidade de vórtices durante o leapfrogging

No capítulo anterior foi estudada a estabilidade de VR realizando o *leapfrogging* sujeito a uma perturbação espacial em um fluido clássico. Em BEC ao utilizar a redução dimensional para analisar o problema em duas dimensões o VR não apresenta instabilidade. Resta então observar qual o efeito de uma perturbação que quebra a simetria axial dos anéis em um condensado em três dimensões. Serão adotados tanto o modelo da GPE quanto o VFM para verificar a compatibilidade dos dois no regime em que o núcleo dos filamentos de vórtice é menor do que ξ , para em seguida utilizar apenas o VFM pela sua maior velocidade de execução, para então realizar um cálculo semi-analítico com o VFM.

5.1 ESTABILIDADE PELA GPE

A equação utilizada para estudar a instabilidade devido a quebra de simetria axial nos anéis é a GPE na sua forma adimensional. O termo de interação g da equação é escolhido de modo a ser positivo. O sistema está sujeito a um potencial do tipo cilíndrico com raio R_V e comprimento L na direção z , modelado pela função V da forma

$$\begin{aligned} V(\mathbf{r}) &= 0, & \text{para } r_{\perp} < R_V, \\ V(\mathbf{r}) &= V_0, & \text{para } r_{\perp} \geq R_V, \end{aligned} \quad (5.1)$$

com $r_{\perp} = \sqrt{x^2 + y^2}$. O parâmetro V_0 é escolhido de modo a ser muito maior que o potencial químico μ . O parâmetro de ordem é normalizado de acordo com o volume da armadilha cilíndrica

$$\int |\Psi|^2 d\mathbf{r} = \pi R_V^2 L. \quad (5.2)$$

Após uma propagação em tempo imaginário para se obter o estado fundamental, os anéis de vórtice são forçados multiplicando a função de onda por $\exp(i\phi(\mathbf{r}))$, onde $\phi(\mathbf{r})$ é dado pelo ansatz [2]

$$\phi(\mathbf{r}) = \sum_{j=1}^N \sum_{n=-n_z}^{n_z} \left(\arctan \frac{z - Z_j - nL}{r_{\perp} + R_j} - \arctan \frac{z - Z_j - nL}{r_{\perp} - R_j} \right), \quad (5.3)$$

com N sendo o número de anéis, Z_j a coordenada z do j -ésimo anel, R_j o raio do j -ésimo anel. Os termos presentes no arco tangente servem de modo a cancelar o fluxo radial $\partial\phi/\partial r_{\perp}$ no eixo z para valores de n_z que sejam suficientemente grandes. Dessa forma, esse ansatz garante as condições periódicas de contorno mesmo após o *imprint* da fase. Após a fase ser forçada, o sistema é evoluído para se ajustar à fase por um breve período de tempo pelo método de propagação no tempo imaginário.

Os cálculos foram realizadas em uma caixa de tamanho $x \times y \times z = 32^3$ com espaçamento de $dx = dy = dz = 0.25$ e portanto com uma grade com 128^3 pontos. Para testar a estabilidade, um ruído aleatório proporcional ao valor da densidade em cada ponto foi imposto ao sistema. O parâmetro para o raio do potencial utilizado foi $R_V = 30$, o potencial utilizado $V_0 = 10$ e o limite da somatória imposto foi $n_z = 100$. O passo temporal utilizado foi de $dt = 0.01$. Na figura 5.1 está um exemplo de dois anéis de vórtice realizando o movimento sem quebra de simetria.

Na figura 5.2 está um caso no qual as instabilidades geram uma quebra da simetria axial. É notável a diferença para o caso bidimensional, no qual os pares de vórtice-antivórtice se aniquilam. Nesse caso, o anel começa a se deformar até que os filamentos de vórtice entre os anéis começam a se conectar [69], fazendo com que a harmonia do movimento seja quebrada. Isso não acontece nesse caso porque o anel atinge o fim do tubo antes de poder continuar o movimento e o código começa a instabilizar para tempos maiores. A reconexão não acontece antes porque a configuração inicial dos anéis faz com que eles estejam sempre muito distantes. Para entender melhor como a instabilidade cresce será utilizado o VFM na próxima seção.

A reconexão pode ser mais visível nos casos em que os VR tem o mesmo raio R porém começam em distâncias z diferentes, separados por uma distância Δ com um deles deslocado a uma pequena distância $\epsilon = 0.001$ do eixo de propagação. Nesse arranjo, os anéis instabilizam devido a assimetria no eixo de propagação. Um exemplo de instabilidade com reconexões está disponível na figura 5.3. É possível observar como a instabilidade vai crescendo com o passar do tempo e como acontecem reconexões quando a estabilidade está grande o suficiente e um anel passa pelo outro.

A vantagem de usar uma abordagem da GPE é então a possibilidade de observar essas conexões sem a necessidade de implementar algoritmos adicionais, porém o tempo computacional exigido é muito grande.

5.2 ESTABILIDADE PELO VFM

Utilizando o VFM tem-se que um vórtice localizado em \mathbf{r} e move com a velocidade dada por

$$\mathbf{v}(\mathbf{r}) = -\frac{\kappa}{4\pi} \oint \frac{(\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3} \times d\mathbf{r}' \quad (5.4)$$

e ao colocar o sinal dentro da subtração dos vetores posições a expressão se resume a

$$\mathbf{v}(\mathbf{r}) = \frac{\kappa}{4\pi} \oint \frac{(\mathbf{r}' - \mathbf{r})}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3} \times d\mathbf{r}'. \quad (5.5)$$

Com um sistema de N VR separados, o n -ésimo anel é representado por uma sequência de filamentos N_p posições no anel $S_1^{(n)}, \dots, S_N^{(n)}$, com $S_N^{(n+1)} = S_1^{(n)}$. Assim a equação (5.5) é reescrita como

$$\mathbf{v}(\mathbf{r}) = \frac{\kappa}{4\pi} \sum_{n=1}^N \sum_{j=1}^{N_p} \int_{S_j^{(n)}}^{S_{j+1}^{(n)}} \frac{(\mathbf{r}' - \mathbf{r})}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3} \times d\mathbf{r}'. \quad (5.6)$$

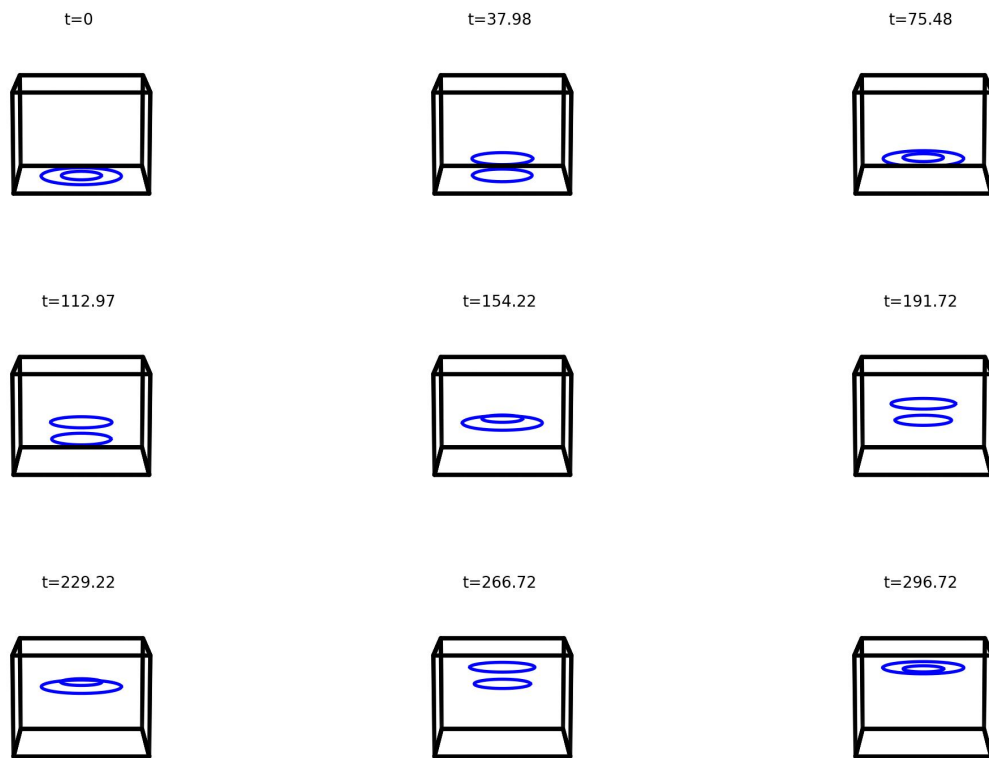


Figura 5.1: *Leapfrogging* para anéis de raio $R_1 = 25$ e $R_2 = 20$ se propagando na direção $+z$ a partir do ponto $z = -28$. Resultados obtidos com a GPE.

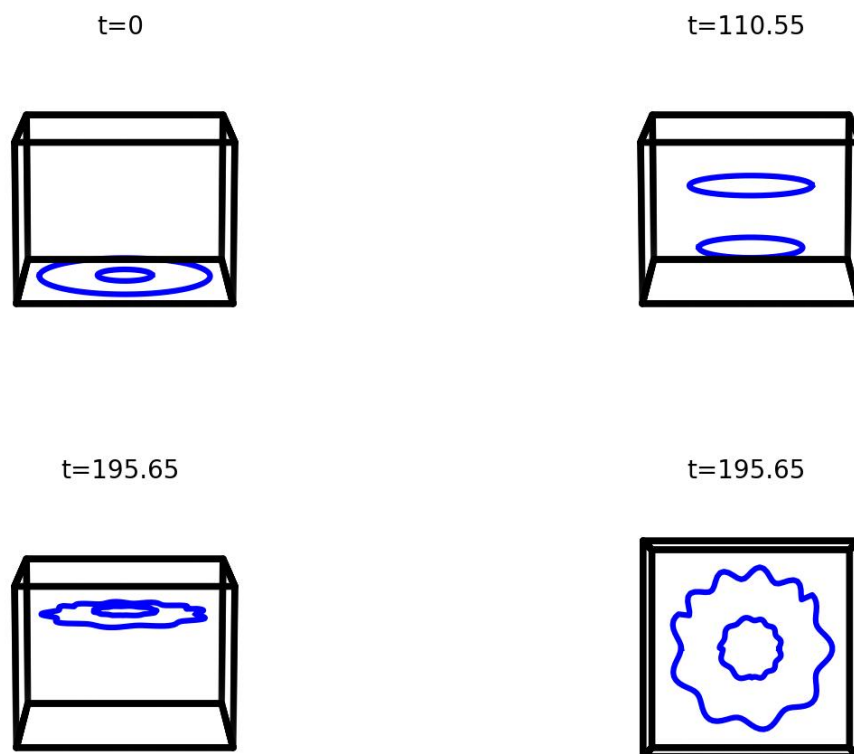


Figura 5.2: *Leapfrogging* de raios $R_1 = 25$ e $R_2 = 8$ se propagando na direção $+z$ a partir do ponto $z = -28$ e instabilizando por volta do tempo $t = 190$. Resultados obtidos com a GPE.

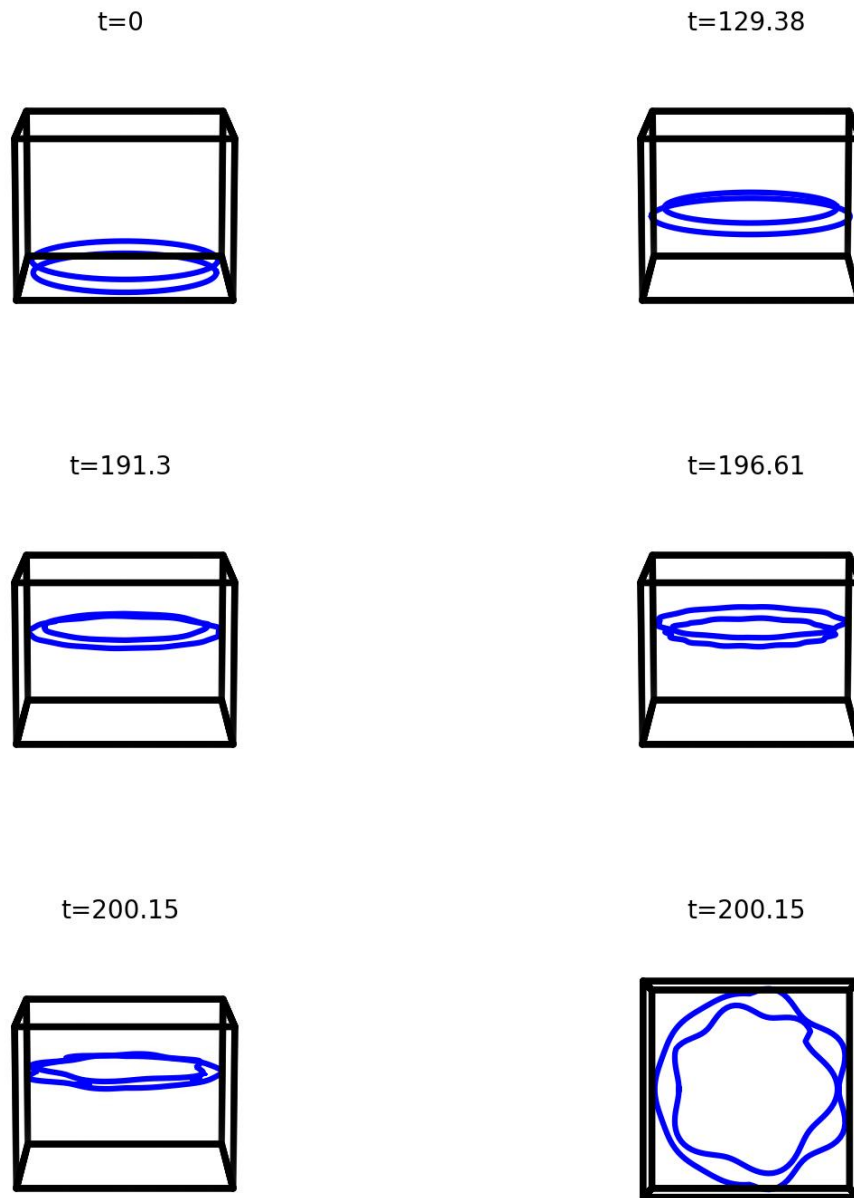


Figura 5.3: *Leapfrogging* para dois anéis de mesmo raio $R = 28$ com um espaçamento no eixo z de $\Delta = 5$ se propagando na direção $+z$. Resultados obtidos com a GPE.

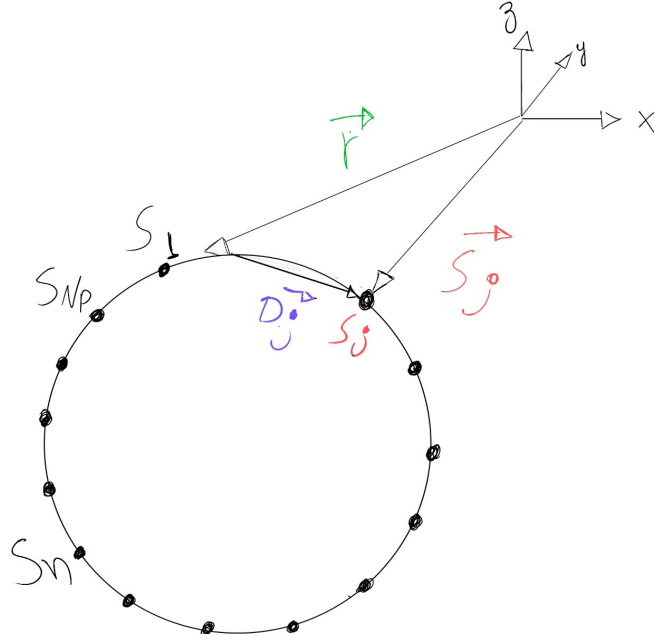


Figura 5.4: Esquema de discretização do anel de vórtice em N_p pontos de coordenada S_j e vetores correspondentes \mathbf{S}_j e o vetor $\mathbf{D}_j \equiv \mathbf{S}_j - \mathbf{r}$.

Dessa forma a equação (5.6) se torna uma equação para N anéis de vórtice, sendo que cada anel está dividido em pedaços de N_p filamentos diferentes que se conectam. Aproximando o filamento que liga os pontos $S_j^{(n)}$ e $S_{j+1}^{(n)}$ para uma linha reta [70] a integral se torna

$$\int_{S_j^{(n)}}^{S_{j+1}^{(n)}} \frac{(\mathbf{r}' - \mathbf{r})}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3} \times d\mathbf{r}' = \frac{(D_j^{(n)} + D_{j+1}^{(n)})(\mathbf{D}_j^{(n)} \times \mathbf{D}_{j+1}^{(n)})}{D_{j+1}^{(n)} D_j^{(n)} (D_j^{(n)} D_{j+1}^{(n)} + \mathbf{D}_j^{(n)} \cdot \mathbf{D}_{j+1}^{(n)})}, \quad (5.7)$$

onde $\mathbf{D}_j^{(n)} = \mathbf{S}_j^{(n)} - \mathbf{r}$. Na figura 5.4 está um esquema da discretização.

Para medir as instabilidades é conveniente definir as quantidades dadas pelo modo m de Fourier da coordenada radial

$$c_m^{(n)} = \sum_{j=0}^{N_p} \sqrt{(\mathbf{S}_j^{(n)} \cdot \hat{x})^2 + (\mathbf{S}_j^{(n)} \cdot \hat{y})^2} e^{-imj}, \quad (5.8)$$

e o modo m de Fourier na direção z

$$d_m^{(n)} = \sum_{j=1}^{N_p} \mathbf{S}_j^{(n)} \cdot \hat{z} e^{-imj}. \quad (5.9)$$

A estabilidade pode ser medida através da quantidade dada pela seguinte expressão

$$C_m = \sum_{n=1}^N (|c_m^{(n)}|^2 + |d_m^{(n)}|^2). \quad (5.10)$$

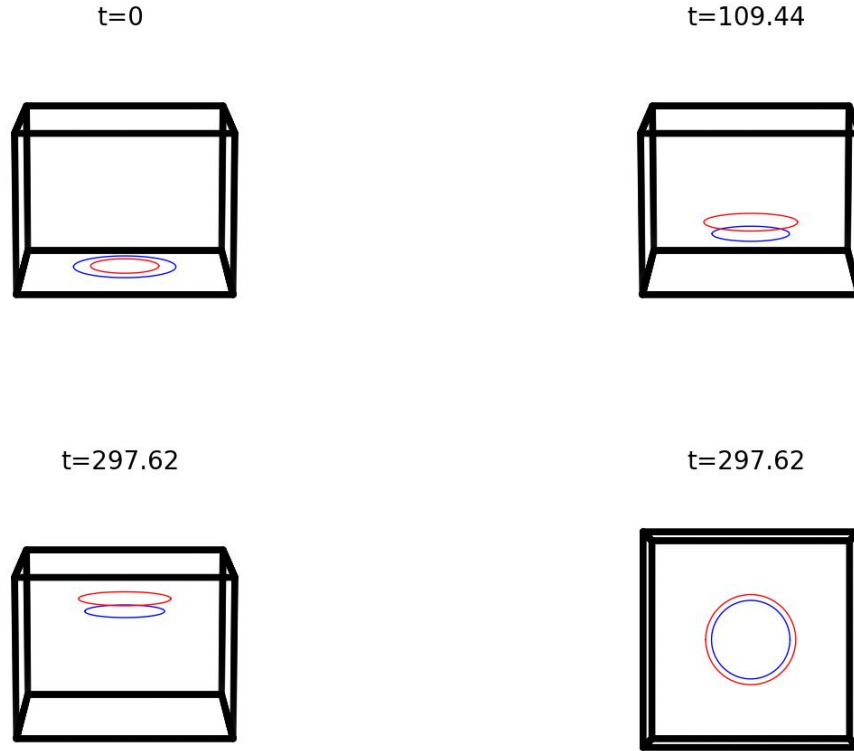


Figura 5.5: *Leapfrogging* de raios $R_1 = 15$ (azul) e $R_2 = 10$ se propagando na direção $+z$ a partir do ponto $z = -28$ sem demonstrar a quebra de simetria axial. Resultados obtidos com o VFM.

Nas simulações realizadas, o número de discretizações do anel foi $N_p = 256$ e a integração numérica foi feita com o método de Adams-Bashforth de segunda ordem com um passo temporal de $dt = 0.01$. Foi implementado um ruído aleatório de ordem de grandeza $\epsilon = 0.01$ de modo a desestabilizar a dinâmica.

Na figura 5.5 está a propagação de dois VR sem quebra de simetria, é possível perceber uma boa concordância entre o cálculo feito pelo VFM e pelo feito com a GPE, não apresentando maiores diferenças nos resultados. A única diferença significativa é o fato de que para a GPE os anéis possuem uma espessura característica do parâmetro do núcleo do vórtice, já no VFM é como se os anéis de vórtices fossem pontuais. Na figura 5.6 é possível observar a evolução de C_m em função do tempo de evolução para essa mesma dinâmica. É possível ver como todos os modos, exceto pelo $m = 6$ não crescem durante a dinâmica. O $m = 6$ cresce de maneira leve, de modo que o ruído só se tornara significativo para tempos infinitamente grandes, os modos $m > 6$ todos possuem a amplitude muito pequena de modo que não interferem na dinâmica.

Na figura 5.7 está uma dinâmica com quebra de simetria para anéis de vórtice espaçados por uma longa distância. O resultado é semelhante ao obtido pela dinâmica da

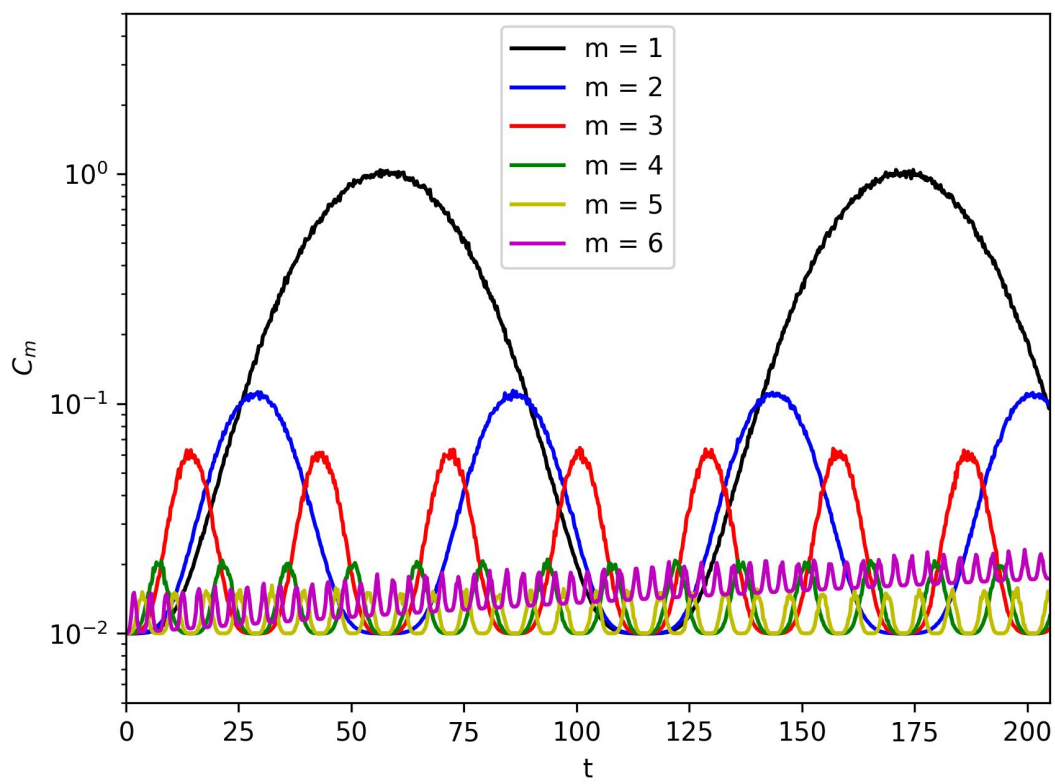


Figura 5.6: Gráfico de C_m em função do tempo para a dinâmica da figura 5.5.

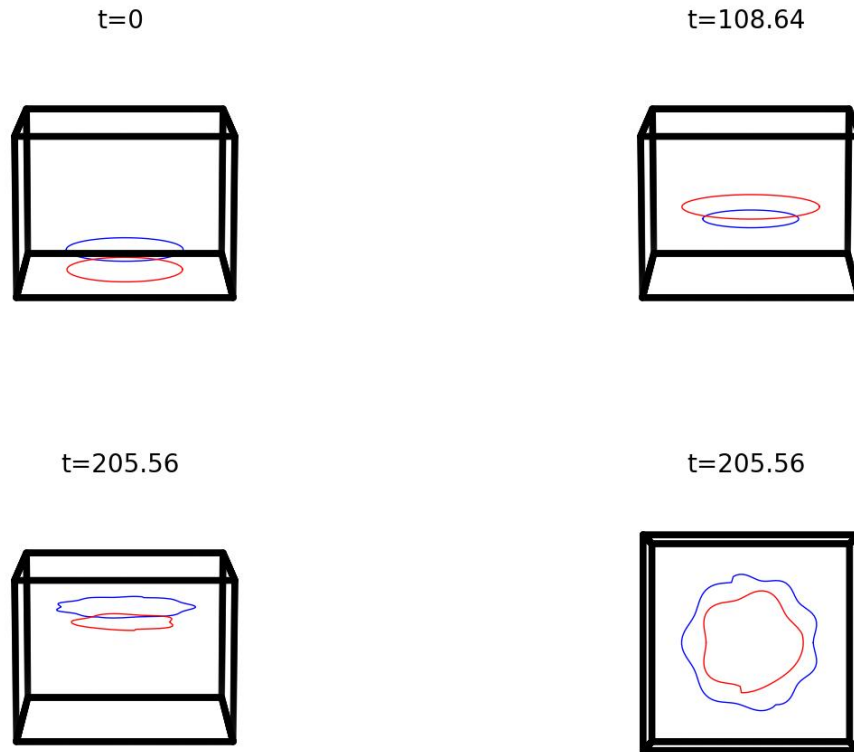


Figura 5.7: Dinâmica com quebra de simetria para axial para anéis de mesmo raio $R = 17$ espaçados por uma distância de $\Delta = 8$. Resultados obtidos com o VFM.

GPE, porém no caso do VFM, a reconexão não acontece de forma natural. Para haver reconexão pelo VFM é necessário implementar manualmente um critério que verifique em todo passo a distância daquele filamento por todos os outros e caso estejam uma distância arbitrária, os dois filamentos se juntam. Na figura 5.8 está o gráfico de C_m em função do tempo de propagação para essa mesma geometria para m 's de 1 até 6. É possível observar como todos os modos de oscilação crescem rapidamente, fazendo com que a intensidade do ruído chegue próxima de 10^2 para o modo $m = 6$. O crescimento do ruído começa a aparecer por volta do tempo $t = 100$. Dessa forma o ruído está grande o suficiente para instabilizar toda a dinâmica de *leapfrogging* por volta do tempo $t = 200$.

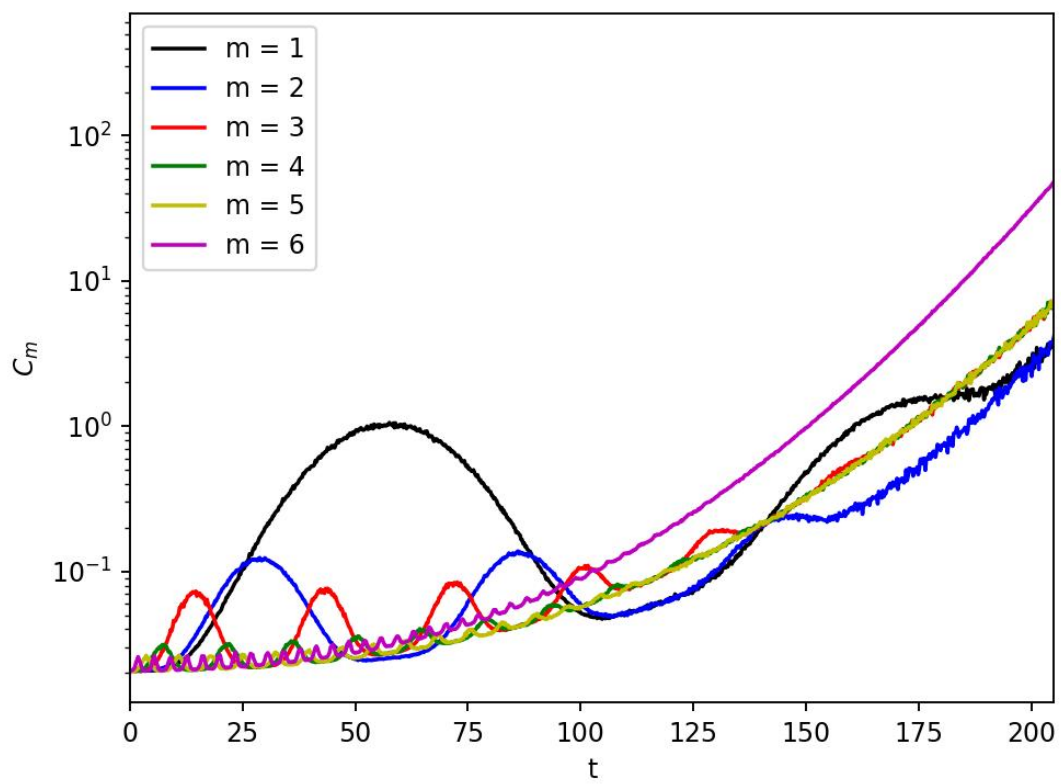


Figura 5.8: Gráfico de C_m em função do tempo para a dinâmica da figura 5.7.

6 Conclusão e perspectivas

Foram estudadas as dinâmicas de *leapfrogging* nos casos com duas e três dimensões. O caso bidimensional teve como objetivo comparar o movimento com vórtices quânticos com o movimento com vórtices clássicos. Foi possível então estabelecer uma região de estabilidade e realização do movimento e concluir que o regime quântico se comporta de modo parecido com o clássico enquanto o comprimento de cura ξ puder ser desprezado na dinâmica descrita pela GPE, portanto para grades numéricas e núcleos de vórtice grandes o suficiente.

O caso tridimensional visou estudar a estabilidade dos anéis de vórtice considerando a quebra de simetria. No caso bidimensional quando há instabilidade é possível que os pares de vórtice-antivórtice se aniquilem, fazendo com que a simetria axial se quebre e não seja mais possível compreender o fenômeno do ponto de vista de três dimensões a partir da redução dimensional. No caso tridimensional portanto foi observada a quebra da simetria axial e a forma que os anéis assumiam durante essa instabilização. No modelo descrito pela GPE foram observadas reconexões entre os pares de anéis de vórtice, de modo que o movimento de *leapfrogging* fosse logo quebrado. Para entender melhor o crescimento das instabilidades foi utilizado o VFM com uma aproximação de linhas retas para o anel. A instabilidade foi medida por meio de uma transformada de Fourier das componentes espaciais dos VR, cuja evolução temporal dos modos de oscilação foram acompanhadas. Foi possível observar o crescimento de diversos modos, fazendo com que a simetria axial fosse quebrada.

Ainda existem muitos trabalhos a serem desenvolvidos envolvendo anéis de vórtice e principalmente a dinâmica de *leapfrogging* para vórtices quânticos. É possível realizar diagramas de estabilidade e analisar os modos de oscilação para mais do que um par de anéis, tanto bidimensionalmente quanto tridimensionalmente. Também pode ser estudado o movimento de *leapfrogging* com anéis de vórtice ou pares de vórtice-antivórtice criados a partir da propagação de um condensado no obstáculo, controlando os parâmetros do obstáculo de forma a criar os vórtices com as características desejadas. Essas ideias podem ser entendidas para diferentes geometrias, sendo uma delas, que é alvo de muitas atenções nos dias de hoje, a geometria de *bubble trap* [71, 72] onde o condensado é aprisionado em uma superfície esférica. A dinâmica de filamentos de vórtice pode ser estudada também sob a perspectiva de turbulência quântica. Todos esses temas são um grande interesse de estudo do autor, que se pretende abordar um ou mais deles durante o doutorado.

A Split-Step

Algorithm 1 Split-Step com o método Pseudo-Espectral para a GPE adimensional

```
1: procedure SPLIT
2:    $\psi_0 \leftarrow$  função de onda inicial
3:    $V \leftarrow$  Potencial desejado
4:    $k \leftarrow$  espaço de fourier discretizado
5:    $g \leftarrow$  intensidade da interação
6:   for  $t <$  tempo final do
7:      $\psi = \psi * \exp[-i * (V + g * |\psi_0|^2) * 0.5 * dt]$ 
8:      $\psi_k = \text{fft}(\psi)$ 
9:      $\psi_k = \psi_k * \exp[-i * 0.5 * k^2 * dt]$ 
10:     $\psi = \text{ifft}(\psi_k)$ 
11:     $\psi = \psi * \exp[-i * (V + g * |\psi_0|^2) * 0.5 * dt]$ 
12:     $t = t + dt$ 
13:     $\psi_0 = \psi$ 
14:  end for
15: end procedure
```

B Método do Gradiente Conjugado

Algorithm 2 Método do gradiente conjugado para uma função do tipo $Ax = b$

```
1: procedure SPLIT
2:    $i = 0 \leftarrow$  número da iteração
3:    $d = b - Ax \leftarrow$  termo de minimização
4:    $\epsilon \leftarrow$  erro da iteração
5:   while  $|r_i| > \epsilon$  do
6:      $\alpha_i = |r_i|^2 / d_i^T A d_i$ 
7:      $r_{i+1} = r_i - \alpha_i A d_i$ 
8:      $x_{i+1} = x_i + \alpha_i d$ 
9:      $\beta_{i+1} = |r_{i+1}|^2 / |r_i|^2$ 
10:     $d_{i+1} = r_{i+1} + \beta_{i+1} d_i$ 
11:     $i = i + 1$ 
12:   end while
13: end procedure
```

Referências Bibliográficas

- [1] A. E. H. Love. On the motion of paired vortices with a common axis. *Proc. Lond. Math. Soc.*, s1-25:185–194, 1894.
- [2] M. Ikuta, Y. Sugano, and H. Saito. Symmetry-breaking instability of leapfrogging vortex rings in a Bose-Einstein condensate. *Phys. Rev. A*, 99:043610, 2019.
- [3] S. N. Bose. Plancks Gesetz und Lichtquantenhypothese. *Zeitschrift für Physik*, 26:178–181, 1924.
- [4] A. Einstein. Quantentheorie des einatomigen idealen Gases. *Sitzungsberichte der Preussischen Akademie der Wissenschaften, Math. Phys.*, 22:261–267, 1924.
- [5] A. Einstein. Quantentheorie des einatomigen idealen Gases (Zweite Abhandlung). *Sitzungsberichte der Preussischen Akademie der Wissenschaften, Math. Phys.*, 1:3–14, 1925.
- [6] P. Kapitza. Viscosity of Liquid Helium below the λ -Point. *Nature*, 141:74, 1938.
- [7] J. F. Allen and A. D. Misener. Flow of Liquid Helium II. *Nature*, 141:75, 1938.
- [8] F. London. On the Bose-Einstein Condensation. *Phys. Rev.*, 54:947–954, 1938.
- [9] L. D. Landau. The theory of superfluidity of helium II. *J. Phys. (USSR)*, 71:70, 1941.
- [10] L. D. Landau. On the theory of superfluidity of helium II. *J. Phys. (USSR)*, 11:91, 1947.
- [11] N. Bogoliubov. On the theory of superfluidity. *J. Phys. (USSR)*, 11:23, 1947.
- [12] O. Penrose and L. Onsager. Bose-Einstein condensation and liquid helium. *Phys. Rev.*, 104:576–584, 1956.
- [13] R. P. Feynman. Chapter II Application of Quantum Mechanics to Liquid Helium. *Prog. Low Temp. Phys.*, 1:17–53, 1955.
- [14] L. Onsager. Statistical hydrodynamics. *Suppl. Nuovo Cimento*, 6:249, 1949.
- [15] H. E. Hall and W. F. Vinen. The rotation of liquid helium II. II. The theory of mutual friction in uniformly rotating helium II. *Proc. R. Soc. London A*, 238:204, 1956.

- [16] M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Mathews, C. E. Wieman and E. A. Cornell, Observation of Bose-Einstein condensation in a dilute atomic vapor, *Science* 269:198, (1995).
- [17] L. Pitaevskii and S. Stringari, *Bose-Einstein Condensation and Superfluidity*, Clarendon, Oxford (2016).
- [18] E. K. U. Gross, E. Runge, and O. Heinonen, *Many-Particle Theory*, Adam Hilger, Bristol (1991).
- [19] C. Barenghi and N. Parker. *A Primer on Quantum Fluids*. Springer Cham, 2016.
- [20] A. Gammal, L. Tomio, and T. Frederico. Critical number of atoms for attractive Bose-Einstein condensates with cylindrically symmetrical traps. *Phys. Rev. A*, 64:055602, 2001.
- [21] A. Gammal, L. Tomio, and T. Frederico. Critical numbers of attractive Bose-Einstein condensed atoms in asymmetric traps. *Physical Review A*, 66:043619, 2002.
- [22] J. L. Roberts, N. R. Claussen, S. L. Cornish, E. A. Donley, E. A. Cornell, and C. E. Wieman. Controlled collapse of a Bose-Einstein condensate. *Phys. Rev. Lett.*, 86:4211, 2001.
- [23] E. A. Donley, N. R. Claussen, S. L. Cornish, J. L. Roberts, E. A. Cornell, and C. E. Wieman. Dynamics of collapsing and exploding Bose-Einstein condensates. *Nature (London)*, 412:295, 2001.
- [24] P. Constantin and C. Foias. *Navier-Stokes equations*. University of Chicago Press, 2020.
- [25] M. J. Ablowitz and H. Segur, *Solitons and the inverse Scattering Transform*, SIAM. (2003).
- [26] S. Russell, Report on waves, Fourteenth Meeting of the British Association for the Advancement of Science, pp. 311-390 (1844).
- [27] P. Emplit, J.P. Hamaide, F. Reynaud, C. Froehly, and A. Barthelemy. Picosecond steps and dark pulses through nonlinear single mode fibers. *Optics Communications*, 62(6):374–379, 1987.
- [28] D. Krökel, N. J. Halas, G. Giuliani, and D. Grischkowsky. Dark-pulse propagation in optical fibers. *Phys. Rev. Lett.*, 60:29–32, 1988.
- [29] T. Tsuzuki. Nonlinear waves in the Pitaevskii-Gross equation. *Journal of Low Temperature Physics*, 4:441–457, 1971.
- [30] R. G. Scott, A. M. Martin, T. M. Fromhold, S. Bujkiewicz, F. W. Sheard, and M. Leadbeater. Creation of solitons and vortices by bragg reflection of bose-einstein condensates in an optical lattice. *Phys. Rev. Lett.*, 90:110404, 2003.

- [31] M. Tsubota, K. Kasamatsu, and M Ueda. Vortex lattice formation in a rotating Bose-Einstein condensate. *Phys. Rev. A*, 65:21–22, 2002.
- [32] A. L. Fetter. Rotating trapped Bose-Einstein condensates. *Rev. Mod. Phys.*, 81:647–691, 2009.
- [33] A. L. Fetter and A. A. Svidzinsky. Vortices in a trapped dilute Bose-Einstein condensate. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 13:R135, 2001.
- [34] W. Thomson (Lord Kelvin). XXIV. Vibrations of a columnar vortex. *Philos. Mag.*, 10:155, 1880.
- [35] T. P. Simula, T. Mizushima, and K. Machida. Kelvin waves of quantized vortex lines in trapped bose-einstein condensates. *Phys. Rev. Lett.*, 101:020402, 2008.
- [36] J. Peinado, J. Ibáñez, E. Arias, and V. Hernández. Adams–bashforth and adams–moulton methods for solving differential riccati equations. *Computers & Mathematics with Applications*, 60:3032–3045, 2010.
- [37] P. L. DeVries. *A First Course in Computational Physics*. John Wiley & Sons, 1994.
- [38] N. Mendes, M. Chhay, J. Berger, and D. Dutykh. Spectral methods. In *Numerical Methods for Diffusion Phenomena in Building Physics*, pages 167–209. Springer International Publishing, 2019.
- [39] A. Minguzzi, S. Succi, F. Toschi, M.P. Tosi, and P. Vignolo. Numerical methods for atomic quantum gases with applications to bose–einstein condensates and to ultracold fermions. *Physics Reports*, 395:223–355, 2004.
- [40] M. H. Holmes, *Introduction to Numerical Methods in Differential Equations*, Springer, 2007.
- [41] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, and B. P. Flannery, *Numerical Recipes*, 3rd ed. (Cambridge University Press, Cambridge, 2007).
- [42] Y. Suzuki and K. Varga. *Stochastic Variational Approach to Quantum-Mechanical Few-Body Problems*. Springer, 1998.
- [43] J. Yang. Newton-conjugate-gradient methods for solitary wave computations. *Journal of Computational Physics*, 228:7007–7024, 2009.
- [44] H. Helmholtz. Über Integrale der hydrodynamischen Gleichungen welche den Wirbelbewegungen entsprechen. *J. Reine Angew. Math.*, 55:25, 1858.
- [45] H. Helmholtz. LXIII. On Integrals of the Hydrodynamical Equations, which express Vortex-motion. *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*, 33(226):485–512, 1867.

- [46] N. Riley and D P Stevens. A note on leapfrogging vortex rings. *Fluid Dynamics Research*, 11:235, 1993.
- [47] A Pentek, T. Tel, and T. Toroczkai. Chaotic advection in the velocity field of leapfrogging vortex pairs. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 28:2191, 1995.
- [48] A. Pentek, T. Tel, and Z. Torockai. Fractal tracer patterns in open hydrodynamical flows: The case of leapfrogging vortex pairs. *Fractals*, 03:33–53, 1995.
- [49] J. D. Eldredge. The dynamics and acoustics of viscous two-dimensional leapfrogging vortices. *Journal of Sound and Vibration*, 301:74–92, 2007.
- [50] J. Davila, M. del Pino, M. Musso, and J. Wei. Leapfrogging vortex rings for the 3-dimensional incompressible euler equations, arXiv 2207.03263v3. 2022.
- [51] A. J. Niemi. Exotic statistics of leapfrogging vortex rings. *Phys. Rev. Lett.*, 94:124502, 2005.
- [52] B. N. Shashikanth and J. E. Marsden. Leapfrogging vortex rings: Hamiltonian structure, geometric phases and discrete reduction. *Fluid Dynamics Research*, 33:333, 2003.
- [53] S. Boatto and D. Crowdy. Point-vortex dynamics. In J.-P. Francoise, G. L. Naber, and T. S. Tsun, editors, *Encyclopedia of Mathematical Physics*, pages 66–79. Academic Press, Oxford, 2006.
- [54] E. Rickinson. *Numerical Simulations of Inhomogeneous Quantum Turbulence*. PhD thesis, New Castle University, New Castle, UK, 2020. Advisor: C. F. Barenghi.
- [55] S . Levy I. Shomroni, E . Lahoud and J. Steinhauer. Evidence for an oscillating soliton/vortex ring by density engineering of a Bose–Einstein condensate. *Nature Physics*, 5:193–197, 2009.
- [56] C. H. Hsueh, S. C. Gou, T. L Horng, and Y. M. Kao. Vortex-ring solutions of the gross–pitaevskii equation for an axisymmetrically trapped bose–einstein condensate. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 40:4561, 2007.
- [57] A. I. Yakimenko, Yu. M. Bidasyuk, O. O. Prikhodko, S. I. Vilchinskii, E. A. Ostrovskaya, and Yu. S. Kivshar. Optical tweezers for vortex rings in Bose-Einstein condensates. *Phys. Rev. A*, 88:043637, 2013.
- [58] S. Dutta, K. R. Dastidar, and C. Chaudhuri. Investigation into 3D-quantized ring vortices in rotating coupled atomic–molecular BEC. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 53:065303, 2020.
- [59] J. Ruostekoski and Z. Dutton. Engineering vortex rings and systems for controlled studies of vortex interactions in Bose-Einstein condensates. *Phys. Rev. A*, 72:063626, 2005.

- [60] W. K. Bai, J. C. Xing, T. Yang, W. L. Yang, and W. M. Liu. Nonlinear dynamics of a Bose-Einstein condensate excited by a vortex ring phase imprinting. *Results in Physics*, 22:103828, 2021.
- [61] T. L. Horng, C. H. Hsueh, and S. C. Gou. Transition to quantum turbulence in a bose-einstein condensate through the bending-wave instability of a single-vortex ring. *Phys. Rev. A*, 77:063625, 2008.
- [62] J. Ruostekoski and J. R. Anglin. Creating vortex rings and three-dimensional skyrmions in Bose-Einstein condensates. *Phys. Rev. Lett.*, 86:3934–3937, 2001.
- [63] 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.*, 86:2926–2929, 2001.
- [64] H. A. Becker and T. A. Massaro. Vortex evolution in a round jet. *Journal of Fluid Mechanics*, 31:435–448, 1968.
- [65] N. S. Ginsberg, J. Brand, and L. V. Hau. Observation of hybrid soliton vortex-ring structures in Bose-Einstein condensates. *Phys. Rev. Lett.*, 94:435–448, 2005.
- [66] R. L. Jerrard and D. Smets. Leapfrogging Vortex Rings for the Three Dimensional Gross-Pitaevskii Equation. *Ann. PDE*, 4:4, 2017.
- [67] R. M. Caplan, J. D. Talley, R. Carretero-González, and P. G. Kevrekidis. Scattering and leapfrogging of vortex rings in a superfluid. *Physics of Fluids*, 26:097101, 2014.
- [68] D. J. Acheson. Instability of vortex leapfrogging. *European Journal of Physics*, 21:269, 2000.
- [69] S. Serafini, L. Galantucci, E. Iseni, T. Bienaimé, R. N. Bisset, C. F. Barenghi, F. Dalfovo, G. Lamporesi, and G. Ferrari. Vortex reconnections and rebounds in trapped atomic bose-einstein condensates. *Phys. Rev. X*, 7:021031, 2017.
- [70] K. W. Schwarz. Three-dimensional vortex dynamics in superfluid ^4He : Line-line and line-boundary interactions. *Phys. Rev. B*, 31:5782, 1985.
- [71] A. Tononi and L. Salasnich. Bose-Einstein Condensation on the Surface of a Sphere. *Phys. Rev. Lett.*, 123:160403, 2019.
- [72] A. Tononi, F. Cinti, and L. Salasnich. Quantum bubbles in microgravity. *Phys. Rev. Lett.*, 125:010402, 2020.