

Universidade de São Paulo  
Instituto de Física

Dinâmica e estabilidade de condensados de  
Bose-Einstein em redes ópticas lineares e  
não-lineares.

Hedhio Luiz Francisco da Luz

Orientador: Prof. Dr. Lauro Tomio

*Tese de doutorado apresentada ao Instituto  
de Física da Universidade de São Paulo para  
a obtenção do título de Doutor em Ciências.*

Banca Examinadora:

Prof. Dr. Lauro Tomio (IFT-UNESP)

Prof. Dr. Marcelo Martinelli (IFUSP)

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

Prof. Dr. Kaled Dechoum (UFF)

Prof. Dr. Valery Shchesnovich (UFABC)

São Paulo

2013

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

Luz, Hedhio Luiz Francisco da

Dinâmica e estabilidade de condensados de Bose-Einstein em redes ópticas lineares e não-lineares. – São Paulo, 2013.

Tese (Doutorado) – Universidade de São Paulo.  
Instituto de Física – Depto. de Física Experimental

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

Área de Concentração: Física

Unitermos: 1. Condensado de Bose-Einstein; 2. Solitons;  
3. Física Atômica; 5. Física Computacional.

USP/IF/SBI-045/2013

*“From a certain temperature on, the molecules condense without attractive forces, that is, they accumulate at zero velocity. The theory is pretty but is there also some truth to it?”* - Albert Einstein, em uma carta a Ehrenfest em 29 de novembro de 1924.



## Resumo

Nessa tese, o objetivo principal foi verificar a estabilidade de sistemas atômicos condensados, sujeitos a diferentes combinações lineares e não-lineares de redes ópticas bi e tridimensionais, considerando algumas situações simétricas e assimétricas. Com esse objetivo, foram realizadas análises variacionais e simulações numéricas exatas da equação não-linear correspondente que descreve sistemas condensados de Bose-Einstein, tipo-Schrödinger, mais conhecida como equação de Gross-Pitaevskii. No caso bidimensional, com redes ópticas cruzadas, linear e não-linear, foi verificada a existência de estabilidade para certas regiões de parâmetros das interações. Observou-se que essa estabilidade desaparece ao se incluir uma terceira dimensão sem a presença de um potencial de confinamento. No caso tridimensional, considerando redes ópticas lineares e não-lineares cruzadas, a estabilidade só ocorre quando consideramos uma interação confinante na terceira dimensão, no caso, uma segunda rede óptica linear. Finalmente, espera-se que nossos resultados venham a ser úteis para estudos experimentais que vêm sendo feitos em laboratórios de átomos ultra-frios.

Palavras-chave: Condensação de Bose-Einstein; Equação de Gross-Pitaevskii; Sólitons; Redes Ópticas; Simulação Numérica.



# Abstract

In this thesis, the main objective was the verification of stability of condensed atomic systems, subject to different combinations of linear and nonlinear bi- and tridimensional optical lattices, considering some symmetric and asymmetric situations. With this objective, were performed variational analyzes and numerical exact simulations of the nonlinear Schrödinger-type equation that describes Bose-Einstein condensate systems, better known as Gross-Pitaevskii equation. In two-dimensional case, with a crossed linear and nonlinear optical lattice, the stability was confirmed for certain parameter regions of the interactions. It was observed that the stability disappears when including a third dimension without the presence of a confinement potential. In the three dimensional case, considering crossed linear and nonlinear optical lattices, stability occurs only when considering an interaction confining the third dimension, in this case a second linear optical lattice. Finally, it is expected that our results will be useful for experimental studies which have been done in the laboratories of ultra-cold atoms.

Keywords: Bose-Einstein Condensation; Gross-Pitaevskii Equation; Solitons; Optical Lattices; Numerical Simulation.





## Agradecimentos

Agradeço em primeiro lugar a Deus, pelo dom da vida e por me dar a capacidade para realizar este trabalho.

Agradeço também à minha família, por todo apoio, amor e carinho. Em especial à minha esposa, pelo companheirismo e compreensão pelas minhas ausências.

Agradeço, em especial, o professor Lauro Tomio, por toda paciência, dedicação, pela amizade e pelo tempo investido em minha formação.

Também tenho muito a agradecer ao professor Arnaldo Gammal, por todos os (muitos) esclarecimentos, pelo apoio e pela amizade. Ao professor Fatkhulla Abdullaev (“*thanks for everything professor*”) por todas as contribuições fundamentais dadas durante o curso do doutorado. Ao professor Mario Salerno (“*grazie mille*”) por ter me recebido e todo o suporte durante minha estadia na Itália.

Aos grandes amigos, Zé e Renatão, pelo tempo e histórias que dividimos. Aos colegas de grupo, Eduardo, Eder, Karine e Leandro, e aos amigos do IFT, Mário, Bonin e John, pelo companheirismo, amizade e contribuições valorosas durante o período em que estivemos juntos. Em especial aos amigos: EGKhamis, pelos rápidos reflexos, que tantas alegrias nos propiciaram durante as sessões vespertinas de “A.A.”; Annibale, por todo bom humor, descontração, e por sempre ver o lado positivo em tudo!

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

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



# Sumário

<b>Resumo</b>	<b>iv</b>
<b>Abstract</b>	<b>vi</b>
<b>Agradecimentos</b>	<b>viii</b>
<b>Notação e abreviações</b>	<b>xii</b>
<b>1 Introdução</b>	<b>1</b>
<b>2 Sólitons, redes ópticas e estabilidade</b>	<b>7</b>
2.1 Sólitons e a dinâmica de ondas de matéria . . . . .	7
2.1.1 Sólitons . . . . .	7
2.1.2 Sólitons brilhantes em condensados. . . . .	9
2.2 Redes ópticas . . . . .	13
2.2.1 Força do dipolo . . . . .	14
2.2.2 Potencial periódico . . . . .	15
2.3 Ressonância de Feshbach . . . . .	16
2.3.1 Colisões elásticas . . . . .	17
2.3.2 Manipulando o comprimento de espalhamento . . . . .	19
2.3.3 Ressonância de Feshbach opticamente induzida . . . . .	20
2.4 Critério VK de estabilidade . . . . .	21
<b>3 Sólitons bidimensionais</b>	<b>23</b>
3.1 Modelo analítico . . . . .	23
3.2 Análise Variacional . . . . .	25
3.2.1 Resultados variacionais . . . . .	28
3.3 Resultados numéricos . . . . .	34
3.4 Discussão dos resultados . . . . .	42
<b>4 Sólitons tridimensionais</b>	<b>43</b>
4.1 Modelo teórico . . . . .	43
4.1.1 Análise Variacional . . . . .	45
4.2 Resultados e discussões . . . . .	46

4.2.1	Sólitons 3D em OLs quase-2D . . . . .	46
4.2.2	Sólitons em uma combinação cruzada de redes ópticas 3Ds . . . .	50
<b>5</b>	<b>Conclusões</b>	<b>61</b>
	Perspectivas . . . . .	63
<b>A</b>	<b>Equação de Gross-Pitaevskii</b>	<b>65</b>
A.1	Introdução . . . . .	65
A.2	Equação de Gross-Pitaevskii independente do tempo . . . . .	66
A.2.1	Cálculo de $\langle \psi   H   \psi \rangle$ . . . . .	66
A.2.2	Equações variacionais . . . . .	66
A.2.3	O multiplicador de Lagrange $\lambda$ . . . . .	68
A.3	Estabelecimento de uma relação geral . . . . .	69
A.3.1	Expressão do potencial químico . . . . .	70
A.3.2	Teorema do virial para um potencial harmônico . . . . .	71
A.4	Equação de Gross Pitaevskii dependente do tempo . . . . .	73
<b>B</b>	<b>Métodos Numéricos</b>	<b>77</b>
B.1	Método de Crank-Nicolson . . . . .	77
B.1.1	Decomposição LU . . . . .	79
B.1.2	Solução de “potenciais” por <i>Split-Step</i> . . . . .	81
B.2	O Método de Peaceman-Rachford (ADI) . . . . .	83
B.3	Método de Relaxação . . . . .	84
B.3.1	Método da relaxação aplicada à equação de Gross-Pitaevskii . . .	85
	<b>Bibliografia</b>	<b>87</b>

## Notação e abreviações

Esta tese de doutoramento foi realizada com base em dois trabalhos distintos [1, 2] que divergem um pouco em sua notação (embora o segundo seja uma continuação do primeiro). Mantive no texto a notação original dos artigos nos capítulos 3 e 4 para facilitar a consulta em possíveis referências. Toda notação é explicitada no início de seu respectivo capítulo.

Para facilitar a consulta às referências, as abreviações seguem preferencialmente os termos originais em inglês, comuns à literatura da área. Seguem em ordem alfabética:

1D	–	unidimensional ou uma dimensão;
2D	–	bidimensional ou duas dimensões;
3D	–	tridimensional ou três dimensões;
BEC	–	condensado de Bose-Einstein;
BS	–	sólitons brilhantes;
GPE	–	equação de Gross-Pitaevskii
PDE	–	equação diferencial parcial ou referindo-se às integrações numéricas da mesma;
KdV	–	Korteweg-de Vries;
LOL	–	rede óptica linear;
NLSE	–	equação de Schrödinger não-linear;
NOL	–	rede óptica não-linear;
OL	–	rede óptica;
VA	–	análise variacional ou abordagem variacional;
VK	–	Vakhitov-Kolokolov.



# Capítulo 1

## Introdução

A história da condensação de Bose-Einstein começa em 1925 quando Einstein prevê que partículas em uma nuvem de gás, a baixas temperaturas, estariam todas em um mesmo estado quântico, exibindo fenômenos quânticos em larga escala. Inspirado pelo trabalho sobre estatística de fótons que o físico indiano Satyendra Nath Bose o havia enviado, em 1924, para ser traduzido e publicado em alemão [3], Einstein considerou um gás de bósons massivos, não-interagente e concluiu que abaixo de certa temperatura, uma fração finita dessas partículas estaria ocupando o estado de mais baixa energia de uma partícula única [4].

Nossa história dá um salto até 1995, 70 anos portanto, entre a previsão teórica e a produção em laboratório do primeiro condensado de Bose-Einstein. Isso foi possível graças às novas técnicas de vácuo e resfriamento atômico utilizando feixes a laser, que foram empregadas em armadilhas magnéticas com gases diluídos de diferentes espécies atômicas. O grupo de pesquisa da Universidade de Colorado, em Boulder, utilizou um gás de átomos de  $^{87}\text{Rb}$  [5], na Universidade de Rice, em Houston, foi obtido o condensado de átomos de  $^7\text{Li}$  [6], e no M.I.T., em Cambridge, produziu-se o condensado de átomos  $^{23}\text{Na}$  [7]. Em 2001, o prêmio Nobel de física foi dividido igualmente por E.A. Cornell, W. Ketterle e C.E. Wieman “pela obtenção da condensação de Bose-Einstein em gases de átomos alcalinos diluídos e pelos estudos iniciais fundamentais das propriedades dos condensados<sup>1</sup>”.

---

<sup>1</sup>em tradução livre. Obtido em <http://www.nobelprize.org/>.

Após a produção em laboratório do condensado de Bose-Einstein de gases diluídos, mais de quinze anos de pesquisa teórica e experimental demonstraram que o sistema, antes de ser uma conclusão não-intuitiva da estatística quântica, representa uma forma de estudar diferentes processos quânticos em várias áreas da física (atômica, óptica quântica, mecânica estatística e física da matéria condensada). Pelo fato da condensação de gases frios aprisionados ser um objeto macroscópico, ela permite a observação direta de efeitos quânticos em larga escala, podendo ser manipulada diretamente, o que a torna excepcionalmente atraente. Entre esses fenômenos, podemos citar: as oscilações de Bloch, já observadas experimentalmente, por exemplo, por *Morsch et al.* [8], tendo suas propriedades e possíveis aplicações estudadas teoricamente por *Salerno et al.* [9] e *Inguscio et al.* [10]; o desenvolvimento de um laser de átomos com a geração de pulsos atômicos coerentes [11]; estudos teóricos e desenvolvimento experimental para a obtenção do efeito de localização dinâmica. [12–14]; estudos sobre o tunelamento de Landau-Zener [15–18]; e sobre a transição superfluida de Mott [19].

Para o estudo de ondas de matéria é necessária a utilização de ferramentas que possam manipulá-las. As forças de interação entre átomos e a luz coerente de um laser podem ser usadas para esse fim. De fato, ao utilizarmos as propriedades mecânicas de ondas estacionárias de lasers, chamadas de redes ópticas, é possível a manipulação de ondas de matéria e são muito úteis para estudos de propriedades fundamentais em sistemas de átomos ultrafrios. Tais sistemas formam uma ponte entre a física atômica e a física do estado sólido na medida que fornecem potenciais periódicos ideais para átomos, sem a presença de defeitos ou fônons na rede. Além disso, estes sistemas permitem um amplo controle dos parâmetros de interação, uma vez que a amplitude das redes ópticas e também sua periodicidade são facilmente alteradas pela intensidade da luz e frequência dos lasers [20–22].

A condensação de Bose-Einstein representa assim uma excelente ferramenta para a investigação desses fenômenos, tendo em vista o “*momentum*” de pequeno alcance e seu grande comprimento de coerência. É possível assim determinar a dinâmica de um único objeto quântico em um potencial periódico ideal, o que não seria viável para elétrons movendo-se em sólidos cristalinos, onde os observáveis estão principalmente relacionados apenas às propriedades do “*ensemble*”.

As ondas de matéria são constituídas de partículas interagentes, e são estas interações que fazem surgir fenômenos como a propagação e a superfluidez nos sistemas de condensados de muitos corpos. Especificamente, a presença de um termo de interação na equação de onda que descreve o sistema é responsável pelo comportamento não-linear



(próprio) das ondas de matéria. Esta propriedade está associada especificamente à propagação solitônica [23]. No contexto das redes ópticas, a presença dessas não-linearidades conduz à observação de diferentes tipos de instabilidades [24].

Para estudar nossos sistemas usaremos a teoria de Gross-Pitaevskii, que consiste em uma abordagem de campo-médio para o parâmetro de ordem do condensado. Descrito por uma equação relativamente simples (tipo Schrödinger Não-Linear), é possível obter resultados relevantes em sistemas de condensados de Bose-Einstein. A teoria é bem adequada para descrever a maior parte dos efeitos dos dois corpos em interações dos gases diluídos à temperatura zero [25, 26].

Neste projeto visamos estudar a influência de redes ópticas na dinâmica de um sistema de muitas partículas no regime de temperaturas ultrabaixas (condensado de Bose-Einstein). Estudamos a estabilidade de um condensado em redes ópticas assimétricas. Procuramos verificar os limites para a formação de sólitons no condensado. Para tanto utilizamos técnicas numéricas para soluções de equações diferenciais não-lineares dependentes do tempo, adaptadas para análise da estabilidade de sistemas “multidimensionais”<sup>2</sup>, considerando diferentes combinações de redes ópticas.

Conforme mencionado anteriormente, vem sendo dada atenção especial ao estudo de condensados de Bose-Einstein em redes ópticas, devido ao interesse, tanto teórico quanto experimental, em diferentes fenômenos físicos como a formação de sólitons, transições de Mott, oscilações de Bloch, etc. [8, 21, 27, 28]. Do ponto de vista experimental, a manipulação periódica espacial em condensados de Bose-Einstein é possível por meio do comprimento de espalhamento de dois corpos utilizando técnicas de ressonância de Feshbach opticamente induzida [29, 30].

Em um estudo anterior de nosso grupo [31], revelou-se que um condensado de Bose-Einstein em duas dimensões (2D), submetido a um efeito oscilatório não-linear em uma de suas dimensões (rede não-linear 1D), se torna fisicamente instável. Verificou-se que uma armadilha harmônica de pequena intensidade na direção perpendicular à direção da rede é suficiente para estabilizar o condensado. Isto sugere que combinações de redes ópticas lineares e não-lineares possam resultar em estabilidade do condensado, o que é de grande interesse teórico devido às possibilidades de verificações experimentais.

O objetivo dos trabalhos realizados neste doutorado foi estudar a existência e estabilidade de sólitons de onda de matéria em redes ópticas cruzadas. Um sóliton pode ser, de uma forma simplificada, definido como a solução de um sistema (ou equação) não-linear representando uma onda localizada que possui forma permanente e mantém sua identidade

---

<sup>2</sup>Possuem 2 ou 3 dimensões espaciais, além da dimensão temporal.

após uma forte interação com outros sólitons [32].

O sistema estudado consiste em um sólito multidimensional, sujeito a diferentes tipos de redes ópticas, tanto lineares (LOL) quanto não-lineares (NOL), independentes, em uma ou mais direções. Esse sistema pode ser representado matematicamente como uma solução da equação de Gross-Pitaevskii (GPE) [26, 33]. Supomos o sólito como tendo um formato inicial (ansatz) do tipo gaussiano. O estudo dessas soluções foi feito numericamente, por meio de métodos de relaxação e integração numérica direta da GPE, e de modo analítico, por meio de uma análise variacional (VA) e pelo critério de Vakhitov-Kolokolov (VK) [34]. Apresentamos assim, as curvas existentes no espaço de parâmetros e discutimos a estabilidade dos sólitons, comparando os resultados obtidos pela análise variacional e pela integração numérica direta da GPE.

No capítulo 2 procuramos esclarecer alguns pontos principais sobre os aspectos teóricos que fundamentam a pesquisa realizada. Falaremos um pouco sobre sólitons e sobre a dinâmica de ondas de matéria em condensados de Bose-Einstein. Este capítulo explicita alguns dos conceitos utilizados para o desenvolvimento dos trabalhos nos capítulos posteriores.

O trabalho deste doutoramento tem início no capítulo 3, onde estudamos a dinâmica de sólitons de onda de matéria em redes ópticas cruzadas. Neste caso tínhamos um condensado de Bose-Einstein bidimensional (2D) em uma rede óptica também bidimensional, composta por uma LOL 1D na direção  $x$  e uma NOL 1D na direção  $y$ . De fato, mostramos que a combinação de OLs cruzadas pode estabilizar sólitons 2D para os casos de interação entre átomos do tipo atrativa e repulsiva. No final deste capítulo fazemos uma breve análise dos resultados, abrindo um parêntese para a continuação do mesmo, tendo em vista já o trabalho subsequente explorado no capítulo seguinte.

O capítulo 4 resultou em um segundo trabalho, que foi uma sequência natural daquilo que já havíamos desenvolvido no capítulo anterior. Nele, investigamos a existência e estabilidade de sólitons tridimensionais (3D) em uma combinação cruzada de redes ópticas lineares e não-lineares. Foram analisados dois casos distintos, quase-2D e 3D. Temos assim um condensado tridimensional sujeito a uma rede óptica (OL) linear na direção  $x$  e não-linear na direção  $y$ , considerando a direção  $z$  livre de potenciais externos no primeiro caso (quase-2D) ou com uma outra OL linear atuando na direção  $z$  (caso 3D). Enquanto sólitons 3D, no caso quase-2D, são sempre instáveis, com a presença de uma outra OL linear na direção  $z$  é possível obter soluções estáveis de sólitons 3D, tanto para as interações médias atrativas quanto repulsivas.

Na conclusão do trabalho, capítulo 5, fechamos uma análise mais detalhada dos re-

---

sultados dos capítulos anteriores e apresentamos algumas possibilidades de estudos futuros em torno deste tema. No apêndice, por motivos didáticos, encontram-se um capítulo com a derivação da equação de Gross-Pitaevskii, principal foco deste trabalho, e também um capítulo sobre os principais métodos numéricos utilizados neste doutorado.



## Capítulo 2

# Sólitons de ondas de matéria, redes ópticas e critérios de estabilidade

### 2.1 Sólitons e a dinâmica de ondas de matéria

Dentro desse capítulo procuraremos fazer uma breve introdução sobre sólitons e a dinâmica de ondas de matéria (solitônicas) se propagando em condensados de Bose Einstein, de modo a situar os objetivos da presente tese no contexto da motivação existente, quando da proposta do trabalho, considerando trabalhos recentes que vinham sendo realizados. Uma revisão mais completa do assunto pode ser encontrada na referência [21], de onde foram extraídas algumas discussões de interesse dentro de nossos objetivos.

#### 2.1.1 Sólitons

Sólitons são ondas localizadas que se propagam sem perder a forma, devido ao equilíbrio entre os efeitos de dispersão e efeitos não-lineares [32, 35–37]. Como exemplos da verificação de sólitons em sistemas físicos, notamos que eles podem ser observados na superfície de líquidos, em fibras ópticas e ondas de plasma. Esses movimentos ondulatórios são em geral descritos por equações não-lineares como as de Korteweg-de Vries (KdV) para sistemas com pequena dispersão, ou por uma equação de Schrödinger não-linear (NLS). A equação para a função de onda de um condensado de Bose-Einstein (BEC) tem a forma de uma equação de Schrödinger não-linear com uma armadilha. Essa equação de onda é conhecida como equação de Gross-Pitaevskii (GPE) que, em sua forma mais simples, é também chamada de equação de Schrödinger não-linear de ordem cúbica. Nesse tipo de equação para um condensado de Bose-Einstein, a não-linearidade diz-se ser de

ordem cúbica quando temos o potencial efetivo dependendo linearmente da densidade (ou seja, quando depende do quadrado da função de onda); e de ordem quártica, quando o potencial efetivo depende do quadrado da densidade.

No caso quase-unidimensional, essa dinâmica pode ser modelada por uma equação não-linear unidimensional (1D), que conduz a diferentes formas de soluções solitônicas, que podem ser classificadas como sólitons claros e sólitons escuros. Um sóliton claro se caracteriza pela propagação de um pacote de ondas que não perde sua forma durante a evolução. Esse tipo de sóliton ocorre quando temos uma não-linearidade cúbica na equação de Schrödinger não-linear, com interação atrativa entre os átomos. Um sóliton escuro, por outro lado, é representado pelo movimento de uma depressão (buraco) em um meio de fundo uniforme. Esse efeito em BEC pode ocorrer no caso em que temos uma não-linearidade cúbica com interação repulsiva entre os átomos.

A condensação de Bose-Einstein está relacionada à ocupação macroscópica de um único estado quântico, apresentando características típicas da mecânica quântica, e portanto o movimento do condensado é conhecido como uma onda de matéria. À temperatura zero, estes sistemas de condensados de átomos aprisionados podem ser descritos como uma aproximação de campo-médio pela equação de Gross-Pitaevskii, que quando descrita para a “função de onda”  $\Psi(\mathbf{r}, t)$  é igual a:

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

onde  $m$  é a massa de um único átomo, a função  $\Psi \equiv \Psi(\mathbf{r}, t)$  está normalizada ao número de átomos  $N$ ,

$$\int |\Psi|^2 d\mathbf{r} = N, \quad (2.2)$$

$V_{ext}(\mathbf{r})$  é o potencial externo de armadilhamento que normalmente pode ser aproximado pelo potencial do oscilador harmônico (assimétrico)

$$V_{ext}(\mathbf{r}) = \frac{m}{2} (\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2), \quad (2.3)$$

e

$$g \equiv \frac{4\pi\hbar^2 a_s}{m} \quad (2.4)$$

é o parâmetro de acoplamento efetivo relacionado à aproximação em primeira ordem da interação entre dois átomos, onde  $a_s$  é o comprimento de espalhamento da onda  $s$  e  $a$

interação é atrativa (repulsiva) para  $a_s < 0$  ( $a_s > 0$ )<sup>1</sup>.

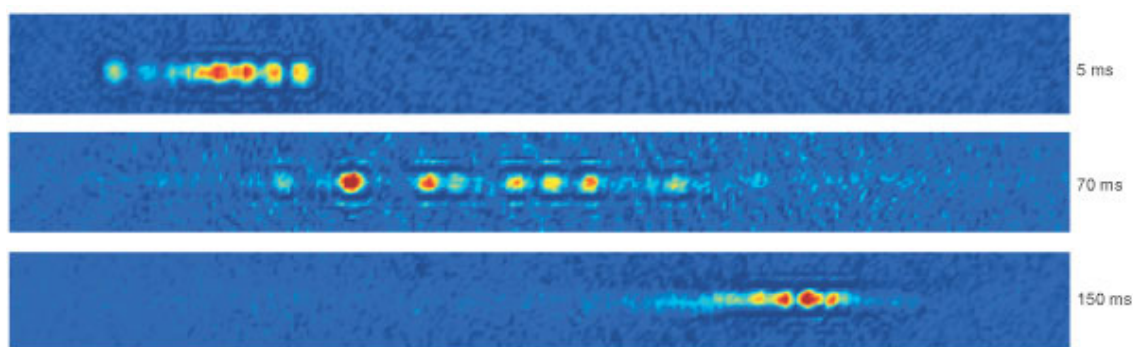
No apêndice encontra-se um capítulo com a derivação da equação de Gross-Pitaevskii, onde alguns aspectos teóricos envolvendo a mesma são melhor trabalhados.

Desde a produção experimental dos condensados de Bose Einstein, existia o desafio de se demonstrar que sólitons poderiam se propagar nesse meio. A primeira observação de sólitons escuros, em BEC com interação de dois corpos dada por um comprimento de espalhamento negativo ( $a_s > 0$ ) foi anunciada na referência [23], seguida pelas observações experimentais descritas nas referências [38] e [39]. Sólitons brilhantes (BS) podem acontecer em BEC quando  $a_s < 0$ . Esse tipo de sóliton é mais difícil de ser observado do que sólitons escuros devido ao colapso do sistema para um número de átomos suficientemente alto. No entanto, em 2002, dois grupos mostraram simultaneamente como gerar e propagar tais sólitons em condensados de lítio-7 ( ${}^7\text{Li}$ ), sendo as experiências descritas nas referências [40] e [41]. Ambas as experiências foram bastante semelhantes, exceto que na anunciada em [40] (grupo de Paris) o número de átomos era menor, gerando-se apenas um sóliton, cuja propagação foi estudada. Enquanto isso, na outra experiência, descrita em [41, 42] (Universidade de Rice, Estados Unidos), foram produzidas sequências de vários sólitons que oscilavam dentro de uma armadilha atrativa fraca. Para maiores detalhes sobre essa experiência, ver a descrição apresentada na referência [21], onde as propriedades do lítio são destacadas, assim como a técnica utilizada para o armadilhamento dos átomos, com a posterior produção dos sólitons. Na figura 2.1 temos uma imagem da sequência de sólitons que foram produzidas. Depois de serem produzidos, nessa experiência os sólitons oscilam com amplitude de  $\sim 370\mu\text{m}$  e período de 310ms. O número de átomos foi menos preciso, devido a efeitos de distorção na imagem obtida, porém com valor estimado menor que  $\sim 6000$ , em concordância com o máximo permitido pela teoria correspondente (ver referências [43–45]).

### 2.1.2 Sólitons brilhantes em condensados.

O coeficiente que acompanha o termo cúbico da equação de Gross-Pitaevskii 2.1 é proporcional ao comprimento de espalhamento, e pode ser positivo ou negativo, correspondendo a interações entre átomos repulsivas e atrativas, respectivamente (Ver **Nota 1** deste capítulo.). No caso de uma interação atrativa, um sóliton pode ser formado em um condensado 1D efetivo [40, 41]. Entretanto, nos casos 2D e 3D a atração resultaria em um

<sup>1</sup>**NOTA:** essa definição mais clássica é preterida nos trabalhos da tese em relação a notação geralmente utilizada em trabalhos matemáticos onde temos, no caso 1D por exemplo:  $i u_t = -u_x x + v_{ext} u - g|u|^2 u$ , e o parâmetro  $a_s > 0$  ( $a_s < 0$ ) para interações atrativas (repulsivas);



**Figura 2.1:** Nessa imagem, temos uma sequência de sólitons, com interação repulsiva, gerados próximos dos pontos de retorno e próximos do centro de oscilação, conforme descritos por Strecker et al. [41].

colapso do condensado (colapsos “fracos” e “fortes”, respectivamente [46] se o número de átomos ultrapassar um valor crítico.)

Variações na intensidade de um campo magnético externo podem alterar a diferença de energias entre um estado inicial e um estado intermediário. Em consequência, o comprimento de espalhamento efetivo, que descreve as colisões binárias de baixa energia, é alterado pelo campo magnético ressonante. A teoria correspondente, referente às colisões binárias que resultam na técnica de Feshbach para manipulação do comprimento de espalhamento a baixas energias, assim como os seus efeitos na física de muitos corpos de um condensado, foi detalhada por Timmermans *et al.* na referência [47]

Com algumas técnicas experimentais [48] é possível controlar efetivamente o sinal do comprimento de espalhamento usando um campo magnético externo pois a constante de interação pode ser modificada pela ressonância de Feshbach [49]. A técnica permite uma rápida mudança no sinal da interação, de repulsiva para atrativa, que leva a uma diminuição abrupta do condensado, por meio do colapso, seguido de uma explosão de átomos emitidos e a formação de um condensado residual estável [48].

Uma generalização dessa abordagem para o controle da força e sinal da interação dentre átomos e, conseqüentemente, do coeficiente relacionado ao termo cúbico, é a aplicação de um campo magnético acoplado em ressonância aos átomos. No caso geral, consiste em um termo com uma componente constante e outra variável no tempo. Sendo assim, o comportamento dinâmico de condensados 2D e 3D acaba sendo de grande interesse, pois pode ser facilmente implementado em experimentos.

É importante notar que, no caso 2D, este comportamento é similar a um problema que foi considerado em óptica não-linear para sólitons (2+1)D (auto-confinados em feixes de luz estreitos) propagando sobre um meio material não-linear com uma estrutura em



camadas, de forma que o tamanho [50] e, possivelmente, o sinal [51] do coeficiente (não-linear) de Kerr estão sujeitos a uma variação periódica ao longo da distância de propagação (que desempenha o papel da variável de evolução, no lugar do tempo, na descrição de sólitons ópticos espaciais). O mesmo modelo óptico também faz sentido no caso (3+1)D, porque se aplica à propagação de “projéteis de luz” (sólitons 3D espaço-temporais [52]) sobre o meio em camadas [51]. Anteriormente, em um modelo quase-1D, supôs-se que a estabilidade do condensado era afetada por uma modulação temporal rápida aplicada ao potencial de armadilhamento (em vez do coeficiente de não-linearidade espacialmente uniforme) [53] e a interferência quântica e ressonâncias macroscópicas foram estudadas na referência [54]. Ressonâncias em BECs 2D e 3D com comprimento de espalhamento variável periodicamente foram consideradas nas referências [54–56]. O ponto principal desse procedimento é auto-localizar o condensado sob a ação do campo variável.

### Calculando a média das equações variacionais

Partiremos da GPE de campo-médio para uma função de onda de uma única partícula, como dada pela equação (2.1), mas sem a presença da armadilha:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + g|\psi|^2 \psi. \quad (2.5)$$

Assumiremos que o comprimento de espalhamento é modulado no tempo, de forma que o coeficiente não-linear na equação (2.1) é dado por

$$g = g_0 + g_1 \text{sen}(\chi t), \quad (2.6)$$

onde  $g_0$  e  $g_1$  são as amplitude das componentes constante e variável do campo, e  $\chi$  é a frequência da última.

Podemos definir agora a equação (2.5) em uma forma normalizada ao introduzir uma frequência típica  $\Omega \sim 2gn_0/\hbar$ , onde  $n_0$  é a densidade do condensado e rescalonando, usando variáveis adimensionais, as variáveis temporal e espacial como  $t' = \Omega t$  e  $r' = r\sqrt{2m\Omega/\hbar}$ . Isto nos leva à seguinte equação onde a ( ' ) foi omitida

$$i \frac{\partial \psi}{\partial t} = - \left( \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{D-1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) \psi - [\lambda_0 + \lambda_1 \text{sen}(\omega t)] |\psi|^2 \psi, \quad (2.7)$$

na qual está implícita que  $\psi$  depende apenas de  $t$  e  $r$ ,  $D = 2$  ou  $3$  é a dimensão espacial,  $\lambda_{0,1} \equiv -g_{0,1}/(\Omega\hbar)$ ,  $\omega \equiv \chi/\Omega$ .

Note que  $\lambda_0 > 0$  e  $\lambda_1 < 0$  na equação (2.7) correspondem, respectivamente, à não-

linearidade auto-focalizante e auto-desfocalizante. Rescalonando o campo  $\psi$ , definiremos  $|\lambda_0| \equiv 1$ , de modo que  $\lambda_0$  permaneça como o parâmetro que define o sinal.

Normalmente um potencial de armadilhamento externo é incluído para estabilizar o condensado. Ele foi omitido pois não tem um papel relevante no momento. Isto também ocorre em alguns outros casos, como na formação de “*Skyrmions*” (soluções topológicas imaginadas como parte de uma teoria de campo não-linear para modelagem de mésons e bárions em física nuclear) estáveis em um condensado de dois componentes [57]. De fato, a modulação temporal do coeficiente não-linear, combinando os componentes constante e variável como na equação (2.7) podem, de certa forma, substituir o potencial de armadilhamento. Outro ponto a se observar sobre o modelo atual é que, se a frequência da componente variável entrar em ressonância com a transição entre os estados fundamental e um excitado, a descrição de campo-médio na GPE não é mais adequada.

O próximo passo é aplicar a abordagem variacional (VA) à equação (2.7). Esta aproximação foi primeiramente proposta [58] e desenvolvida para óptica não-linear, a princípio para problemas 1D e depois em modelos de maior dimensão (veja também [59]). Uma técnica similar foi elaborada para a descrição da dinâmica de BECs multidimensionais baseada na GPE [60].

Para aplicar a VA neste caso, vemos que a densidade da Lagrangeana que gera a equação (2.7) é

$$\mathcal{L}(\psi) = \frac{i}{2} \left( \frac{\partial \psi}{\partial t} \psi^* - \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \psi \right) - \left| \frac{\partial \psi}{\partial r} \right|^2 + \frac{1}{2} \lambda(t) |\psi|^4, \quad (2.8)$$

onde  $\lambda(t) \equiv \lambda_0 + \lambda_1 \sin(\omega t)$ , e o asterisco representa o complexo conjugado. O “*ansatz*” variacional para a função de onda do condensado é escolhido como sendo a função gaussiana

$$\psi_g(r, t) = A(t) \exp \left( -\frac{r^2}{2a^2(t)} + \frac{1}{2} ib(t) r^2 + i\delta(t) \right), \quad (2.9)$$

onde  $A$ ,  $a$ ,  $b$  e  $\delta$  são, respectivamente, a amplitude, a largura, o “*chirp*” (desvio da frequência instantânea em relação à frequência central), e a fase geral, que seriam funções reais do tempo. Não foi incluso o grau de liberdade relacionado à coordenada do centro do condensado, pois o potencial de armadilhamento, embora não esteja explicitamente incluído no modelo, supomos, impede o movimento do condensado como um todo.

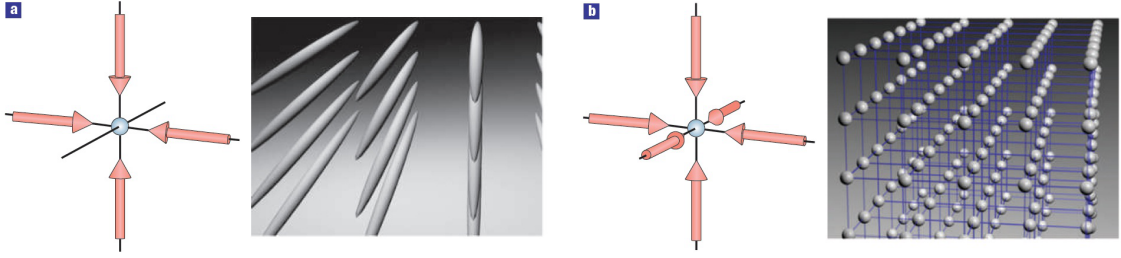
Seguindo o procedimento padrão [59], inserimos o “*ansatz*” na densidade (2.8) e calculamos o Lagrangeano efetivo,

$$L_{\text{eff}} = C_D \int_0^\infty \mathcal{L}(\psi_g) r^{D-1} dr, \quad (2.10)$$

onde  $C_D = 2\pi$  ou  $4\pi$  nos casos 2D e 3D, respectivamente. Finalmente as equações de evolução para os parâmetros dependentes do tempo do “*ansatz*”( 2.9) são derivadas de  $L_{\text{eff}}$  utilizando as equações de Euler-Lagrange correspondentes. Este é basicamente o procedimento utilizado nos diversos trabalhos do grupo (ver por exemplo [1, 2, 31]).

## 2.2 Redes ópticas

“Cristais artificiais de luz”, formados pelo conjunto de milhares de minúsculas armadilhas ópticas criadas a partir da interferência óptica de feixes de laser. Assim Bloch [61] define o que é uma rede óptica no início de seu artigo de revisão publicado em 2005. Cada uma dessas armadilhas ópticas se baseia na interação dos átomos, por meio de seus elétrons, e o campo elétrico do laser, formando um momento de dipolo e sendo também chamada de armadilha óptica de dipolo. A mais simples delas consiste em um confinamento por feixe de laser “*red-detuned*”, onde a diferença entre a frequência de oscilação do laser  $\omega$  e a ressonância do átomo  $\omega_0$ , é negativa ( $\Delta \equiv \omega - \omega_0 < 0$ ) [62]. Uma rede óptica 1D surge ao se combinar dois feixes de laser “*red-detuned*” em uma onda de luz estacionária contendo várias dessas armadilhas de dipolo. Com dois ou três conjuntos de feixes é possível formar redes ópticas 2D ou 3D, veja figura 2.2.



**Figura 2.2:** (a) Rede óptica 2D, formada por um conjunto de potenciais tubulares 1D. (b) Rede óptica 3D, formada por um conjunto de pequenos potenciais harmônicos de confinamento em cada sítio da rede. Reproduzido da referência [61].

### 2.2.1 Força do dipolo

Vamos considerar um modelo simples no qual o átomo, em um sistema de dois níveis, está sujeito a um campo de radiação clássica que oscila à frequência  $\omega$ :

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \hat{e}E(\mathbf{r})e^{-i\omega t} + \text{c.c.} \quad (2.11)$$

O campo gera um momento de dipolo atômico

$$\mathbf{p}(\mathbf{r}, t) = \hat{e}p(\mathbf{r})e^{-i\omega t} + \text{c.c.} \quad (2.12)$$

onde  $p(\mathbf{r}) = \alpha\mathbf{E}$ , sendo  $\alpha$  a polarizabilidade com componentes reais e complexas. As propriedades dispersivas da interação são comandadas pela parte real de  $\alpha$ , que oscila em fase com  $\mathbf{E}$ . Já as propriedades de absorção são comandadas pela parte imaginária de  $\alpha$ , que está fora de fase em relação ao campo [63].

O *potencial de dipolo* é definido como uma energia de interação entre o dipolo  $\mathbf{p}$  induzido e o campo elétrico  $\mathbf{E}$

$$U_{dip}(\mathbf{r}) = -\frac{1}{2} \langle \mathbf{p} \cdot \mathbf{E} \rangle = -\frac{1}{2\epsilon_0 c} \text{Re}(\alpha) I(\mathbf{r}) \quad (2.13)$$

onde  $\langle \mathbf{p} \cdot \mathbf{E} \rangle$  é uma média temporal sobre as oscilações do campo e  $I(\mathbf{r})$  é a média da intensidade do campo. Ao diferenciar a equação anterior obtemos a força de dipolo exercida sobre o átomo:

$$\mathbf{F}_{dip}(\mathbf{r}) = -\nabla U_{dip}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2\epsilon_0 c} \text{Re}(\alpha) \nabla I(\mathbf{r}) \quad (2.14)$$

Como se pode perceber, no caso de um campo uniforme, a força de dipolo é nula, pois depende do gradiente da intensidade do mesmo, que é o que ocorre com ondas planas.

É possível ainda calcular o número médio de fótons que são espalhados por unidade de tempo entre os ciclos de absorção e emissão espontânea ao se dividir a energia média absorvida pelo átomo em unidades de tempo pela energia do fóton  $\hbar\omega$ .

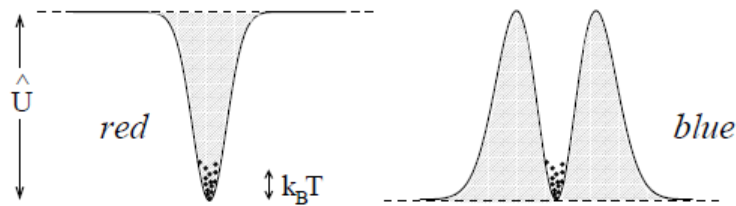
$$\Gamma_{sc}(\mathbf{r}) = \frac{\langle \dot{\mathbf{p}} \cdot \mathbf{E} \rangle}{\hbar\omega} = \frac{1}{\hbar\epsilon_0 c} \text{Im}(\alpha) I(\mathbf{r}) \quad (2.15)$$

A expressão analítica da polarizabilidade  $\alpha(\omega)$  pode ser facilmente obtida, conforme demonstrado na referência [63]. No caso do campo formado pelo laser oscilar em uma frequência  $\omega$  distante da frequência de ressonância  $\omega_0$  (“*far-detuned regime*”) e  $\Delta (= \omega - \omega_0)$  ser muito maior que a taxa de decaimento espontânea na ressonância ( $\Gamma$ ) e que a frequência de Rabi  $\Omega$ , as equações 2.13 e 2.15 podem ser reescritas como:

$$U_{dip} = \frac{3\pi c^2}{2\omega_0^3} \left( \frac{\Gamma}{\Delta} \right) I \quad (2.16)$$

$$\Gamma_{sc} = \frac{3\pi c^2}{2\hbar\omega_0^3} \left( \frac{\Gamma}{\Delta} \right)^2 I \quad (2.17)$$

As equações anteriores descrevem os efeitos mecânicos da interação entre os átomos e a luz coerente. Ao analisar a equação 2.16 vemos que o sinal do potencial de dipolo depende do sinal de  $\Delta$  (o “*detuning*”). Por isso existem dois tipos de potenciais de dipolo possíveis: o “*red-detuning*”, onde  $\Delta < 0$  e os átomos tendem a se agrupar no ponto de maior intensidade do potencial que é o ponto mínimo do mesmo; e o “*blue-detuning*” onde  $\Delta > 0$  e os átomos tendem a se agrupar no ponto de menor intensidade do potencial já que os máximos são as maiores intensidades do mesmo (ver a figura 2.3).



**Figura 2.3:** Diferença entre os potenciais de dipolo nos regimes “*red-detuning*” ( $\Delta < 0$ ) e “*blue-detuning*” ( $\Delta > 0$ ). Figura extraída da referência [63].

## 2.2.2 Potencial periódico

Um exemplo de potencial periódico simples é aquele representado por uma onda estacionária, formada pela interferência de dois feixes de laser propagados em sentidos

opostos. Este potencial simples nada mais é que uma rede óptica 1D. Consideremos duas ondas planas de frequência  $\omega$  viajando em sentidos opostos numa mesma direção  $\hat{z}$  e polarizadas linearmente no mesmo eixo  $\hat{e}$ :

$$\mathbf{E}_1(z, t) = \hat{e}E_1 \cos(kz + \omega t + \delta) \quad (2.18)$$

$$\mathbf{E}_2(z, t) = \hat{e}E_2 \cos(kz - \omega t - \delta), \quad (2.19)$$

onde  $k = \omega/c$  e  $\delta$  é uma fase relativa arbitrária. A intensidade instantânea é dada pelo módulo quadrático do campo total:

$$I(z, t) = \epsilon_0 c |\mathbf{E}_1(z, t) + \mathbf{E}_2(z, t)|^2. \quad (2.20)$$

calculando uma média sobre as oscilações em  $\omega$  obtemos a intensidade média

$$I(z, t) = \frac{1}{2} \epsilon_0 c [(\mathbf{E}_1 - \mathbf{E}_2)^2 + 4\mathbf{E}_1 \mathbf{E}_2 \cos^2(kz)]. \quad (2.21)$$

Fazendo então  $E_0 = E_1 = E_2$ , a expressão da intensidade fica  $I(z) = I_0 \cos^2(kz)$ , com um pico de intensidade em  $I_0 = 2\epsilon c E_0^2$ . Utilizando essa expressão na equação 2.16, descobrimos qual o potencial de dipolo que um átomo experimenta quando está posicionado em um campo de onda estacionária de laser. Este potencial é:

$$U_{dip}(z) = \frac{3\pi c^2}{2\omega_0^3} \left( \frac{\Gamma}{\Delta} \right) I_0 \cos^2(kz), \quad (2.22)$$

que facilmente é identificado como um potencial periódico 1D com espaçamento  $\lambda/2$  que oscila em uma frequência única  $k$ . Reescrevendo de um modo mais simples:

$$V(z) = V_0 \cos^2(kz), \quad (2.23)$$

que é um potencial tipo rede óptica unidimensional.

## 2.3 Ressonância de Feshbach

O fenômeno físico conhecido como ressonância de Feshbach foi descrito teoricamente por Herman Feshbach [64] no campo de reações nucleares. Em átomos ultrafrios, a ressonância aplicada ao comprimento de espalhamento da onda- $s$  em gases diluídos de átomos ultrafrios foi predita por Tiesinga *et al.* [65] e vem sendo utilizada desde então

em diversos experimentos e estudos teóricos. Maiores detalhes podem ser obtidos nas referências [47, 66, 67].

### 2.3.1 Colisões elásticas

Na maioria dos experimentos envolvendo gases de átomos ultrafrios, temos gases diluídos onde as interações ocorrem apenas por colisões de dois corpos. A densidade de partícula no centro de um condensado de Bose-Einstein formado por uma nuvem de átomos é da ordem de  $10^{13} - 10^{15} \text{cm}^{-3}$ . Para medida de comparação, a densidade atômica do ar à temperatura ambiente e pressão atmosférica normal é da ordem de  $10^{19} \text{cm}^{-3}$ . Nos líquidos e sólidos temos aproximadamente  $10^{22} \text{cm}^{-3}$  e em nucleons dentro dos núcleos atômicos  $10^{38} \text{cm}^{-3}$  [68].

Para descrever a colisão elástica entre duas partículas de massa  $m$  e momentos  $p_1$  e  $p_2$  temos a seguinte equação de Schrödinger:

$$\left( \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m_r} + V(\mathbf{r}) \right) \psi_k(\mathbf{r}) = E_k \psi_k(\mathbf{r}), \quad (2.24)$$

onde  $\hat{\mathbf{p}} = (\hat{\mathbf{p}}_1 - \hat{\mathbf{p}}_2)$  é o momento relativo,  $m_r = m/2$  a massa reduzida,  $V(\mathbf{r})$  o potencial de interação de longo alcance (que tende a zero para longas distâncias),  $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$  a posição relativa e  $E_k = \hbar^2 k^2 / (2m_r)$  a energia da colisão.

Deste modo, uma onda plana incidente, a solução da equação pode ser escrita como uma superposição entre a onda incidente e a onda esférica espalhada:

$$\psi_k(\mathbf{r}) \sim e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + f(k, \phi, \theta) \frac{e^{ikr}}{r}, \quad (2.25)$$

onde  $\phi$  é o ângulo azimutal em torno da direção incidente  $\mathbf{k}/k$  e  $\theta$  é o ângulo entre  $\mathbf{k}/k$  e  $\mathbf{r}/r$ . A amplitude de espalhamento  $f(k, \phi, \theta)$  depende do potencial  $V$  e ao integrá-la sobre o ângulo sólido  $\Omega$  obtemos a seção de choque do espalhamento  $\sigma$ :

$$\sigma(k) = \int |f(k, \phi, \theta)|^2 d\Omega \quad (2.26)$$

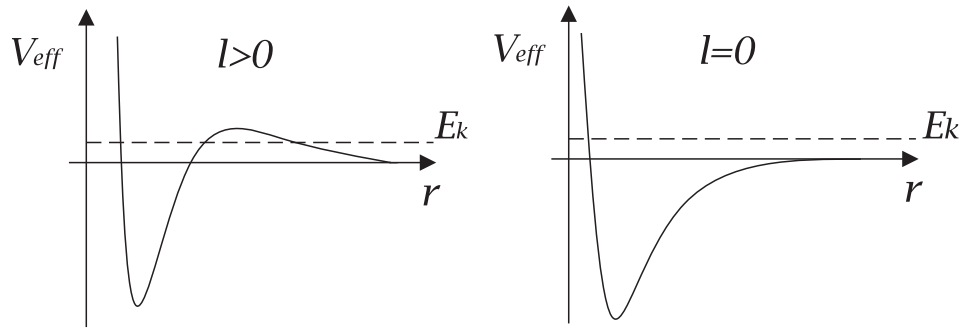
Em um potencial de espalhamento esférico simétrico  $V(\mathbf{r}) = V(r)$ , temos a conservação do momento angular relativo e é possível expandir a função de onda em termos autofunções do momento angular:

$$\psi_k(\mathbf{r}) = \sum_{l=0}^{\infty} P_l(\cos \theta) \frac{u_{k,l}(r)}{r}, \quad (2.27)$$

onde  $P_l(\cos \theta)$  são os polinômios de Legendre e  $u_{k,l}(r)$  são as funções de onda radiais, sendo que a solução independe de  $\phi$  devido à simetria. Substituindo na equação 2.24 obtemos:

$$\frac{\hbar^2}{2m_r} \frac{\partial^2 u_{k,l}(r)}{\partial r^2} + \left( E_k - V(r) - \frac{\hbar^2}{2m_r r^2} l(l+1) \right) u_{k,l}(r) = 0 \quad (2.28)$$

onde o potencial efetivo ( $V_{eff}$ ) é expresso por  $V(r) + \hbar^2 l(l+1)/(2m_r r^2)$ . Para  $l > 0$ , a barreira centrífuga adicionada a  $V$  cria uma barreira intransponível para as ondas parciais quando temos uma pequena energia de colisão  $E_k$ . Deste modo, apenas as ondas- $s$  ( $l = 0$ ) contribuem para o espalhamento em átomos frios (ver figura 2.3.1)



**Figura 2.4:** Potencial efetivo ( $V_{eff}$ ) das ondas parciais na direção radial. A figura da esquerda mostra que ondas parciais com  $l > 0$  sentem uma barreira centrífuga que inibe colisões para baixas energias de colisão  $E_k$ . No lado direito temos o  $V_{eff}$  para a onda- $s$  ( $l = 0$ ) onde colisões ainda são permitidas.

Como consequência da simetria e da conservação do fluxo de ondas por ser uma colisão elástica, as ondas parciais podem ser escritas como a soma das ondas incidentes e espalhadas, que diferem por uma mudança de fase  $\delta_l(k)$ . É essa diferença de fase que define a seção de choque do espalhamento:

$$\sigma(k) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \sin^2(\delta_l(k)). \quad (2.29)$$

Para as baixíssimas temperaturas de um condensado, o comprimento de de Broglie  $\lambda$  (da ordem de  $20000a_0$ ) é muito maior que os comprimentos associados às ligações químicas e essa deslocalização da função de onda de colisão leva a um comportamento característico onde as propriedades da colisão aumentam em função do momento  $k = \sqrt{2m_r E} = 2\pi/\lambda$  quando  $k \rightarrow 0$ , dependendo do inverso da potência  $n$  do potencial de longo alcance ( $V(r)$ ) que varia com  $r^{-n}$ . A fase  $\delta_l$  tem a seguinte propriedade no limite de  $k \rightarrow 0$ : se  $2l < n - 3$ ,



$$\lim_{k \rightarrow 0} k^{2l+1} \cot \delta_l = -\frac{1}{a_l}, \quad (2.30)$$

de outro modo, se  $2l > n - 3$ ,

$$\lim_{k \rightarrow 0} k^{n-2} \cot \delta_l = \text{const.} \quad (2.31)$$

Para átomos neutros no estado fundamental, isso assegura que a diferença de fase tende a ir a zero com uma potência de no mínimo  $k^3$  quando  $l \geq 1$ . Então, quanto menor o valor de  $k$  a única contribuição realmente relevante é a da onda- $s$ ,  $l = 0$ . A diferença de fase da onda- $s$  varia com  $-ka_0$  quando  $k \rightarrow 0$ , a seção de choque do espalhamento para partículas idênticas fica:

$$\sigma \rightarrow 8\pi a_0^2, \quad (2.32)$$

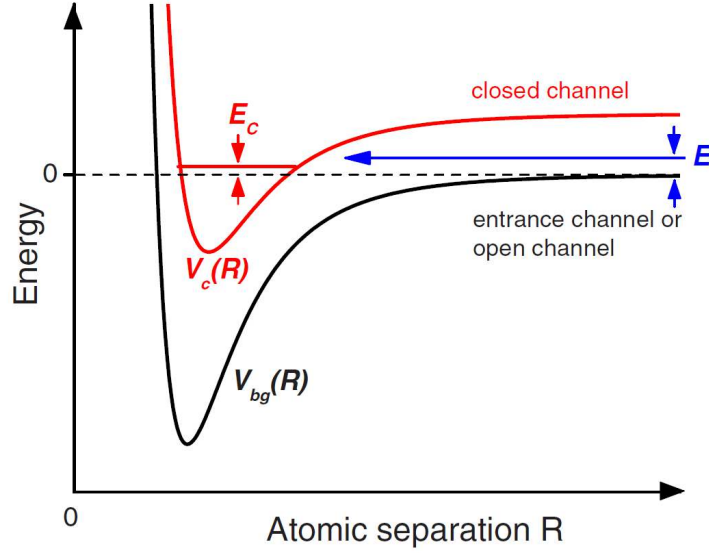
onde o fator 8 surge devido a simetria de partículas idênticas (dois espalhamentos possíveis por colisão). Assim, a seção de choque do espalhamento elástico é constante no limite de baixas energias e  $a_0$  é o comprimento de espalhamento da onda- $s$ , um importante parâmetro no contexto da condensação de Bose-Einstein [67].

Até agora, analisamos apenas as interações elásticas. Já as interações inelásticas levam a uma mudança no estado interno dos átomos que colidem, liberando sua energia em forma de energia cinética, levando a uma perda no número de átomos, que acabam obtendo energia cinética suficiente para vencer o potencial de armadilhamento. Apesar dos processos inelásticos serem muito importantes do ponto de vista experimental, não os abordaremos em detalhes aqui.

### 2.3.2 Manipulando o comprimento de espalhamento

A ressonância de Feshbach em átomos ultrafrios ocorre quando um par de átomos que colidem são acoplados a um estado ligado de um potencial superior. Na figura 2.5 vemos o  $V_{bg}$  conhecido como canal aberto ou canal de colisão. O segundo potencial  $V_c$  representa o canal fechado se a energia dos átomos incidentes  $E_k$  ( $E$  na figura) está no limiar da energia do estado ligado  $E_c$ . Se há um acoplamento entre os canais, o potencial efetivo da colisão  $V_{eff}$  passa a ser uma mistura dos potenciais  $V_{bg}$  e  $V_c$ . Em regimes ultrafrios, as colisões ocorrem próximos a  $E \rightarrow 0$ , e o acoplamento ocorre a partir de uma modulação magnética de  $E_c$  próxima a 0.

A expressão relacionada à ressonância de Feshbach magneticamente induzida é:



**Figura 2.5:** Modelo de dois canais para ressonância de Feshbach.  $E$  é a energia de colisão dos átomos,  $E_c$  é a energia do estado ligado e  $V_c$  e  $V_{bg}$  são os potenciais dos canais fechados e abertos, respectivamente. Figura extraída da referência [66].

$$a = a_{bg} \left( 1 - \frac{\Delta}{B - B_0} \right), \quad (2.33)$$

onde  $a_{bg}$  é o comprimento de espalhamento de fundo, associado ao potencial  $V_{bg}$ , em uma situação sem ressonância.  $B_0$  é a posição da ressonância, onde o comprimento de espalhamento diverge ( $a \rightarrow \pm\infty$ ) e  $\Delta$  é a largura da ressonância. Próximo a essa posição  $B_0$ , temos grandes valores para  $a$  e a energia de ligação é dada pela expressão  $E_b = \hbar^2/2m_r a^2$ , onde  $m_r$  é a massa reduzida e  $E_b$  depende do quadrado da demodulação magnética ( $B - B_0$ ).

### 2.3.3 Ressonância de Feshbach opticamente induzida

Foi Fedichev [69] quem primeiro propôs que ressonâncias do comprimento de espalhamento poderiam ser induzidas com a luz de lasers, onde as colisões em um campo de luz estão relacionadas à foto-associação. Com ela uma transição (“*free-bound*”) dirigida opticamente pode acoplar um par de átomos que estão colidindo a um estado ligado de um potencial excitado. Isso ocorre no ponto de Condon ( $R_C$ ), que é a separação entre os núcleos onde a frequência do laser  $\omega_l$  coincide com a diferença entre os potenciais do

estado fundamental  $V_G(r)$  e do estado excitado  $V_E(r)$ :  $\hbar\omega_l = V_E(R_C) - V_G(R_C)$ . Dado um estado colisional descrito pela função de onda  $\psi_G(r, k)$  e o estado excitado molecular  $\psi_E(r)$ , a intensidade do acoplamento óptico é descrita por:

$$\Gamma_{stim} = \frac{4\pi^2 I_{laser} d_E^2}{c} |\langle \psi_E(r) | \psi_G(r, k) \rangle|^2, \quad (2.34)$$

onde  $I_{laser}$  é a intensidade do laser,  $d_E$  é o elemento da transição de dipolo molecular, e  $\Gamma_{stim}$  é proporcional ao vetor de colisão  $k$  pela normalização de  $\psi_G(r, k)$  (que acrescenta à função um fator  $\sqrt{mk/(\pi\hbar^2)}$ ).

Um par de átomos ultrafrios no estado de espalhamento  $|0\rangle$  colidem em um potencial de estado fundamental. A energia de colisão do estado contínuo  $|0\rangle$  é  $E = \hbar^2 k^2 / (2m_r)$  devido às baixas temperaturas e está muito próxima do potencial do canal aberto, de um modo similar ao que ocorre na ressonância de Feshbach magnética. A luz do laser com intensidade  $I_1$  e frequência  $\omega_1$ , acopla este par de átomos ao estado molecular excitado  $|1\rangle$ . Este acoplamento é representado pela taxa de ressonância estimulada  $\Gamma_{stim}$ , que pode ser controlada experimentalmente pela intensidade do laser e sua demodulação  $\Delta_1 = E_1/\hbar - \omega_1$ . Ao considerar  $\Gamma_{stim} \ll \Gamma_{spon}$  e que os átomos pertencem a um BEC temos

$$a = a_{bg} - \frac{1}{2k} \frac{\Gamma_{stim} \Delta_1}{\Delta_1^2 + (\Gamma_{spon}/2)^2}; \quad (2.35)$$

$$K_{inel} = \frac{2\pi\hbar}{m} \frac{1}{k} \frac{\Gamma_{stim} \Gamma_{spon}}{\Delta_1^2 + (\Gamma_{spon}/2)^2}. \quad (2.36)$$

onde  $a_{bg}$  é o valor do comprimento de espalhamento na ausência de ressonância, sem a ocorrência de acoplamento óptico e  $\Gamma_{spon}$  é a taxa de decaimento espontâneo do estado molecular excitado. Como  $\Gamma_{stim}$  é proporcional a  $k$ ,  $a$  e  $K_{inel}$  possuem valores independentes do momento de colisão.

## 2.4 Critério VK de estabilidade

Os cientistas russos Vakhitov e Kolokolov foram os primeiros a deduzir um critério de estabilidade para soluções solitônicas em uma NLSE 1D sem a presença de armadilhas [34], que ficou conhecido como “*critério VK*”. Em tal sistema específico, foi comprovada a relação  $dN/d\lambda^2 > 0$ , com  $-\lambda^2$  sendo a energia do sóliton de estado ligado. Se adicionarmos uma partícula ao sistema e a energia deste estado ligado diminuir temos então uma solução estável. Essa condição é necessária e suficiente para a existência de

sólitons [46]. No nosso caso, identificamos  $-\lambda^2$  com o potencial químico  $\mu$ , resultando em:

$$d\mu/dN < 0 \quad (2.37)$$

O critério VK é um critério orbital de estabilidade, o que significa que ao introduzir uma perturbação em uma solução estacionária estável, esta permanecerá próxima à “órbita circular” do seu estado fundamental por todo o tempo, caso a perturbação não seja muito grande [46].

Aqui cabe notar, que embora o critério tenha sido provado suficiente para o sistema específico, no caso 3D sem armadilha ele indica sempre uma instabilidade [46]. Só que isto passa a não ser verdade quando adicionado algum potencial externo, ou mesmo na presença de diferentes tipos de interações. Na referência [70] discute-se algumas exceções já encontradas, onde mesmo em sistemas bi- ou tridimensionais, o critério VK aparenta ser válido.

Mais recentemente [71], foi discutida a existência de um critério “anti-VK” que valeria para alguns sistemas 3D com interação repulsiva, o que não se confirmou para o caso estudado em nosso trabalho.

# Capítulo 3

## Sólitons bidimensionais

Neste capítulo discutiremos o caso bidimensional (2D), onde estudamos a estabilidade de sólitons de onda de matéria sob a influência de uma rede óptica linear (LOL) na direção  $x$  e uma rede óptica não-linear (NOL) na direção  $y$ , considerando interações interatômicas atrativas e repulsivas.

Levando em consideração a anisotropia da rede óptica aplicada a nosso sistema, era esperado que os sólitons apresentassem seções elípticas no plano  $x$ - $y$ . Portanto, nossa análise variacional leva em consideração essa característica ao adotar diferentes parâmetros em cada direção espacial no seu “*ansatz*” tipo gaussiano.

Os resultados e a análise de estabilidade dos sólitons bidimensionais foram obtidas para diversos parâmetros variacionais, considerando o critério de Vakhitov-Kolokolov (VK), e são apresentados em potenciais químicos e as energias totais em termos do número de partículas, sempre em comparação direta com os resultados inteiramente numéricos.

### 3.1 Modelo analítico

Assim como já mencionado, é possível descrever os condensados de Bose-Einstein (BEC) bidimensionais em potenciais do tipo redes ópticas linear e não-linear, com a seguinte equação de Gross-Pitaevskii:

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi - \Lambda\cos(2kx)\psi - g(y)|\psi|^2\psi \quad (3.1)$$

onde  $\psi \equiv \psi(\mathbf{r}, t)$  é normalizada ao número de átomos,  $\nabla^2$  neste caso seria o Laplaciano em duas dimensões, massa atômica  $m$ , e  $\Lambda\cos(2kx)$  uma LOL na direção  $x$ , com amplitude  $\Lambda$  e constante de rede  $\pi/k$ . Na direção  $y$  temos uma NOL representada por  $g(y)$ . A

rede óptica não linear é representada por

$$g(y) = g_0 + g_1 \cos(2\kappa y), \quad (3.2)$$

onde  $g_0$  é a não-linearidade média relacionada ao comprimento de espalhamento médio  $a_{s0}$  da onda- $s$ , e  $g_1$  é a amplitude de uma modulação periódica da rede óptica na direção  $y$ , com período  $\pi/\kappa$ .

Em um caso presente na literatura [72, 73], de um sistema quase-2D confinado em uma direção com um comprimento de espalhamento efetivo 2D sendo definido em termos de um comprimento de espalhamento 3D e uma escala na direção de confinamento, os parâmetros  $g_0$  e  $g_1$  são expressos em unidades de energia multiplicadas por alguma distância quadrática. Podemos obter a modulação espacial manipulando o comprimento de espalhamento com um campo de laser modulado próximo a uma transição, ou seja, próximo à ressonância de um nível  $p$  das moléculas excitadas. Estas transições relacionadas a um par de átomos interagentes são capazes de mudar o valor ou até inverter o sinal do comprimento de espalhamento.

É possível demonstrar que uma variação periódica da intensidade do campo de laser aplicada a uma direção  $y$  na forma de  $I(y) = I_0 \cos^2(\kappa y)$ , produz uma variação periódica do comprimento de espalhamento do tipo  $a_s(y) = a_{s0}[1 + \alpha I/(\delta + I)]$ , onde  $a_{s0}$  é o comprimento de espalhamento na ausência de luz,  $\delta$  é a demodulação da ressonância, podendo ser positivo ou negativo, e  $\alpha$  é um fator constante [69, 74]. Para intensidades fracas, quando  $I_0 \ll |\delta|$ , a parte real do comprimento de espalhamento é aproximadamente  $a_s = a_{s0} + a_{s1} \cos(\kappa y)$ , levando a uma não-linearidade modulada essencialmente igual aquela descrita na equação (3.2).

Temos que ter em mente que, ao se criar uma NOL em um BEC, manipulando o comprimento de espalhamento desta forma, teremos uma perda via emissão espontânea inerente à técnica de Ressonância de Feshbach [30, 75, 76]. Esses efeitos dissipativos podem ser minimizados ao se utilizar um campo de laser suficientemente intenso [77]. O controle de uma ressonância de Feshbach magnética por meio de um campo de laser também reduz a perda em relação à ressonância opticamente induzida. No experimento citado em [77], é demonstrado que a luz próxima à ressonância com uma transição molecular no  $^{87}\text{Rb}$  pode ser usada para mudar o valor do campo magnético aonde a ressonância de Feshbach ocorre. Deste modo é possível mudar o comprimento de espalhamento na escala do comprimento de onda óptico sem muitas perdas (duas ordens de magnitude menores que nos experimentos de ressonância opticamente induzida)

A partir deste ponto descreveremos as equações adotando unidades adimensionais rescalonando as variáveis temporais e espaciais. As variáveis descritas em (3.1) são redefinidas como  $t \rightarrow (\hbar/E_r)t$ ,  $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r}/k$ , com  $E_r \equiv \hbar^2 k^2/2m$  sendo a energia de recuo e  $\mathbf{r} \equiv x, y, z$ . A função de onda é rescalonada para  $\psi(\mathbf{r}, t) \rightarrow ku(\mathbf{r}, t)$ , de forma que a equação (3.1) será expressa como

$$i\frac{\partial u}{\partial t} = - \left[ \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right] - V_l(x)u - \Gamma(y)|u|^2u \quad (3.3)$$

onde

$$V_l(x) = \varepsilon \cos(2x), \quad \Gamma(y) = \chi + \gamma \cos(\lambda y), \quad (3.4)$$

são respectivamente potenciais oriundos das redes ópticas linear e não-linear, e  $\varepsilon = \Lambda/E_r$ ,  $\chi = g_0 k^2/E_r = 8\pi a_{s0}k$ ,  $\lambda = 2\kappa/k$ ,  $\gamma = g_1 k^2/E_r$ , com  $g_1$  sendo assumido como um parâmetro livre.

## 3.2 Análise Variacional

Consideramos soluções localizadas da equação (3.3) nas LOL e NOL descritas pela equação (3.4) com não-linearidade média negativa e positiva, correspondendo respectivamente às interações atrativas e repulsivas.

Para obter as estimativas analíticas para a existência e estabilidade de sólitons utilizamos uma análise variacional (VA) e procuramos soluções do tipo:

$$u(x, y, t) = U(x, y) \exp(-i\mu t),$$

com potencial químico  $\mu$  e  $U(x, y)$  sendo uma função real do perfil do sólito. Devido à anisotropia da rede óptica cruzada, tendo diferentes naturezas e amplitudes nas duas direções, esperamos que os sólitons tenham uma seção transversal do tipo elíptica nos seus perfis. Levamos este fato em consideração ao adotar em nossa análise o seguinte “*ansatz*” para  $U(x, y)$

$$U(x, y) = A e^{-\frac{1}{2}(ax^2 + by^2)} \quad (3.5)$$

com os parâmetros  $a$  e  $b$  controlando a largura da gaussiana nas duas direções. Utilizando este “*ansatz*”, a equação de Gross-Pitaevskii estacionária pode ser escrita como

$$\mu U + U_{xx} + U_{yy} + \varepsilon \cos(2x)U + [\chi + \gamma \cos(\lambda y)]U^3 = 0 \quad (3.6)$$

com o potencial químico sendo obtido diretamente por

$$\mu N = \int \{ |\nabla U|^2 - \varepsilon \cos(2x)U^2 - [\chi + \gamma \cos(\lambda y)]U^4 \} dx dy,$$

com sua energia total sendo dada por

$$E = \int \left\{ |\nabla U|^2 - \varepsilon \cos(2x)U^2 - \frac{\chi + \gamma \cos(\lambda y)}{2} U^4 \right\} dx dy.$$

A partir do “*ansatz*” (3.5) o número de átomos normalizados é expresso em termos dos parâmetros variacionais  $\{A, a, b\}$  como

$$N = \int U^2 dx dy = \frac{A^2 \pi}{\sqrt{ab}}. \quad (3.7)$$

É possível derivar a equação de Gross-Pitaevskii estacionária da Lagrangeana de campo

$$\begin{aligned} L = & \frac{1}{2} \int \{ |\nabla U|^2 - [\mu + \varepsilon \cos(2x)]U^2 \\ & - \frac{1}{2} [\chi + \gamma \cos(\lambda y)] U^4 \} dx dy. \end{aligned} \quad (3.8)$$

Ao inserir nosso “*ansatz*” na Lagrangeana, após efetuar as integrações, obtemos a seguinte Lagrangeana efetiva ( $L_{eff}$ ) para os parâmetros variacionais  $\{a, b, A\}$ :

$$\begin{aligned} L_{eff} = & \frac{A^2 \pi}{4\sqrt{ab}} \left\{ a + b - \frac{A^2}{2} [\chi + \gamma e^{-\lambda^2/(8b)}] - \right. \\ & \left. 2 [\mu + \varepsilon e^{-1/a}] \right\}. \end{aligned} \quad (3.9)$$

A energia total ( $E$ ), em função dos mesmos parâmetros, é dada por

$$E = N \left\{ \frac{a + b}{2} - \frac{A^2}{4} [\chi + \gamma e^{-\lambda^2/(8b)}] - \varepsilon e^{-1/a} \right\}. \quad (3.10)$$

Das equações de Euler-Lagrange para os parâmetros  $\{a, b, A\}$ , podemos obter uma relação implícita entre o potencial químico e o número de átomos derivada de  $L_{eff}$ . As



equações podem ser expressas como

$$\mu = \frac{b-3a}{2} - \varepsilon \left(1 - \frac{4}{a}\right) e^{-\frac{1}{a}}, \quad (3.11)$$

$$N = \frac{4\pi}{a\sqrt{ab}} \frac{a^2 - 2\varepsilon e^{-\frac{1}{a}}}{\chi + \gamma e^{-\frac{\lambda^2}{8b}}}, \quad (3.12)$$

$$\frac{E}{N} = \frac{b-a}{2} - \varepsilon \left(1 - \frac{2}{a}\right) e^{-\frac{1}{a}}, \quad (3.13)$$

sendo  $a, b$  soluções da equação transcendental

$$\frac{1}{b} + \gamma \frac{\lambda^2}{4b^2} \frac{e^{-\frac{\lambda^2}{8b}}}{\chi + \gamma e^{-\frac{\lambda^2}{8b}}} = F(a) \quad (3.14)$$

com

$$F(a) = \frac{a}{a^2 - 2\varepsilon e^{-\frac{1}{a}}}. \quad (3.15)$$

Soluções analíticas exatas da equação (3.14) podem ser encontradas para os casos limites descritos à seguir:

**i)** Caso  $\gamma = 0$ , onde temos uma OL quase-1D na direção  $x$ . Neste caso, obtemos  $b = 1/F(a)$  da equação (3.14). Substituindo este valor de  $b$  nas equações (3.11) e (3.12), obtemos os seguintes parâmetros para a curva de existência de sólitons no espaço de fase  $\mu - N$ :

$$\mu = -a - \varepsilon \left(1 - \frac{3}{a}\right) e^{-\frac{1}{a}}, \quad (3.16)$$

$$N = \frac{4\pi}{\chi} \sqrt{1 - \varepsilon \frac{2}{a^2} e^{-\frac{1}{a}}}. \quad (3.17)$$

Este caso é equivalente ao caso em que  $\lambda = 0$ ,  $\gamma \neq 0$ , redefinindo  $\chi$  em (3.17) para  $\chi + \gamma$ .

As equações acima coincidem com as de um caso de potencial 1D da referência [78] [compare as equações acima com as equações (8) e (9) da referência], onde os autores demonstraram que o sistema pode suportar soluções localizadas 2D apenas no caso de interações atrativas. A ausência de um potencial de confinamento na direção  $y$ , faz com que a solução seja uniforme nesta direção. No entanto a solução é estável se utilizada uma condição de contorno periódica na direção  $y$ .

**ii)** Caso  $\chi = 0$ , onde a NOL e a LOL estão presentes mas a não-linearidade média é demodulada para zero. Neste caso, a equação (3.14) fica reduzida a  $4b + \lambda^2 = 4b^2 F(a)$  e

$b$  pode ser expresso em função do parâmetro  $a$  como

$$b = \frac{1 + \sqrt{1 + \lambda^2 F(a)}}{2F(a)}. \quad (3.18)$$

iii) Caso  $\varepsilon = 0$ , onde temos a NOL na direção  $y$ , porém sem um potencial de confinamento na direção  $x$ . Neste caso,  $F(a) = 1/a$ , e as soluções para  $\mu$  e  $N$  podem ser convenientemente expressas em função do parâmetro  $b$ :

$$\frac{a}{b} = \left[ 1 + \frac{\lambda^2}{4b} \left( 1 - \frac{\chi}{\chi + \gamma e^{-\frac{\lambda^2}{8b}}} \right) \right]^{-1}. \quad (3.19)$$

$$\mu = \frac{b}{2} \left( 1 - 3\frac{a}{b} \right) \quad (3.20)$$

$$N = 4\pi \sqrt{\frac{a}{b}} \frac{1}{\chi + \gamma e^{-\frac{\lambda^2}{8b}}}. \quad (3.21)$$

Na ausência de confinamentos nas direções  $x$  e  $y$  (i.e.  $\varepsilon = 0$ ,  $\gamma = 0$ ) as equações acima reproduzem resultados conhecidos de sólitons 2D. Em particular, para interações atrativas,  $\chi > 0$ , as larguras do sólito nas duas direções se tornam idênticas,  $a = b$ , e o número de átomos multiplicado pela não-linearidade fica reduzido a uma constante que coincide com a norma de sólitons de Townes 2D [79] determinando o limite crítico para o colapso do sólito 2D em  $N_{cr} = 4\pi/\chi$ .

Para o caso geral as soluções exatas devem ser encontradas numericamente a partir da equação (3.14).

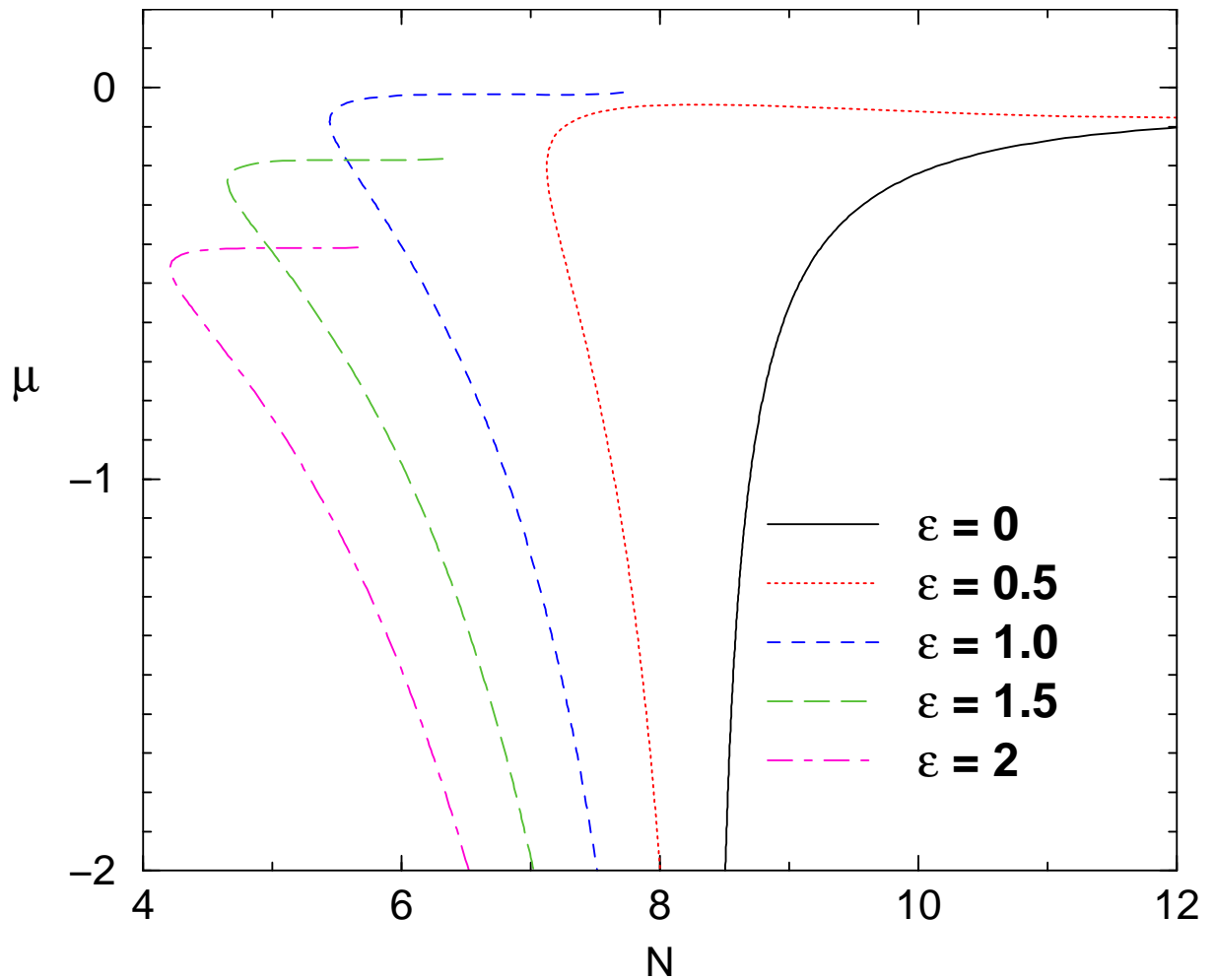
### 3.2.1 Resultados variacionais

Nas figuras 3.1 e 3.3, mostramos as curvas variacionais  $\mu - N$  obtidas pelas equações (3.11) à (3.15) para os casos atrativo e repulsivo respectivamente. Note o comportamento monótono com o surgimento de um mínimo (ponto de desvio) em  $N$ , o que sugere um limite no número de átomos para a existência de um sólito. Isto é uma característica inerente aos sólitons de equações de Schrödinger não-lineares com termo cúbico e está associada a uma transição à não-localidade [80], ou seja, para valores de  $N$  menores que o valor crítico (mínimo das curvas em  $N$ ) a solução decai rapidamente em um fundo uniforme e se torna totalmente não-localizável. Nas figuras 3.2 e 3.4 também apresentamos os gráficos no plano  $E - N$ . Note que, da definição geral  $\mu = \frac{dE}{dN}$ , o potencial químico

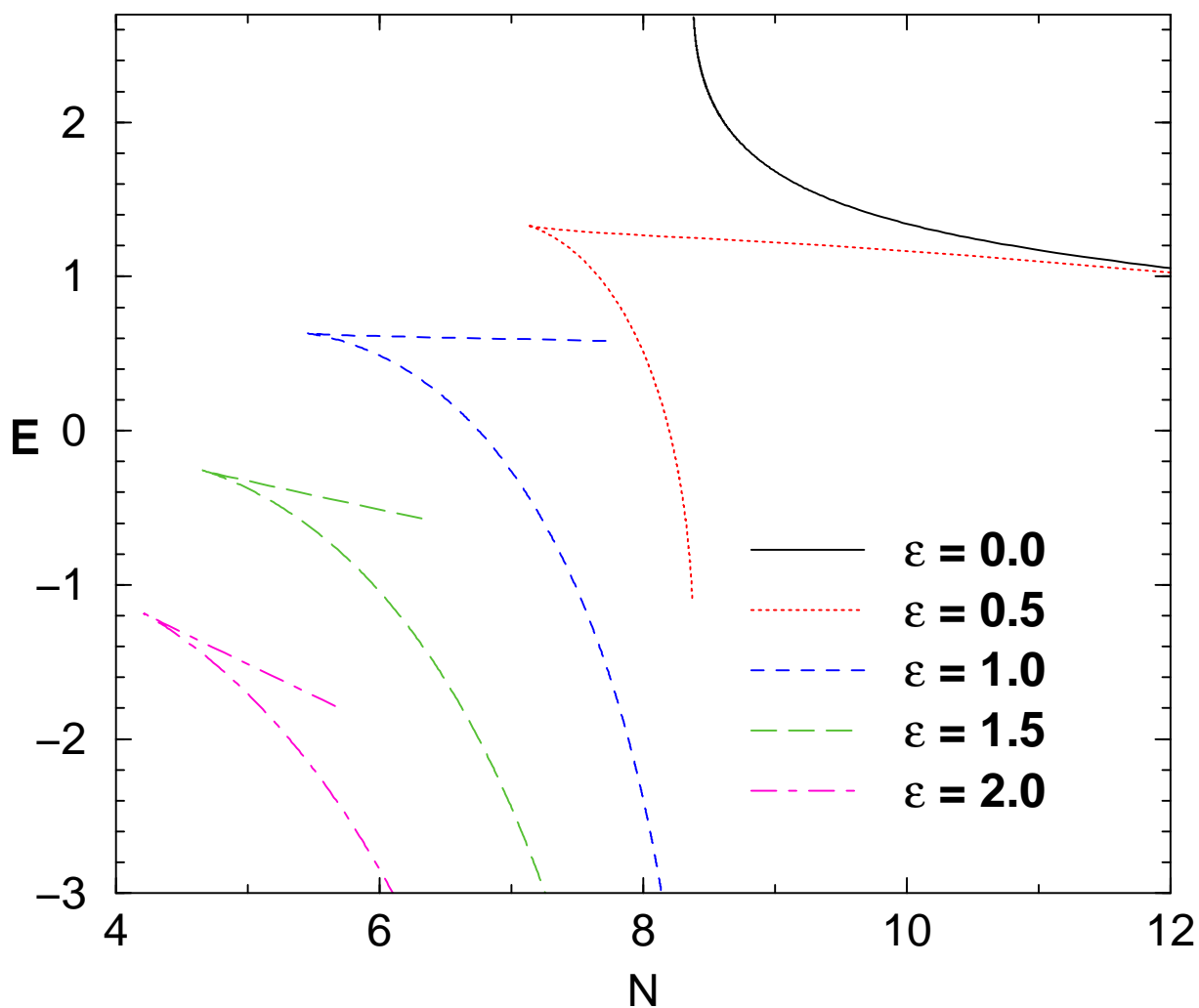
corresponde as inclinações das curvas para um dado  $N$ . Também perceba que as curvas  $E - N$  demonstram “extremos” nos pontos de desvio correspondentes das curvas  $\mu - N$ .

A estabilidade das soluções solitônicas pode ser deduzida das curvas no plano  $\mu - N$  por meio do critério necessário de Vakhitov-Kolokolov [34], que diz que soluções estáveis sempre se encontram em trechos nos quais  $d\mu/dN < 0$ . Vemos que nenhuma solução pode ser estável, quer a interação média seja atrativa quer repulsiva, na presença apenas de uma NOL (ou seja, com  $\varepsilon = 0$ ). Contudo, ao aumentarmos a amplitude da LOL, a inclinação das curvas muda de positiva para negativa (em alguns trechos). Portanto, nosso estudo analítico prediz a existência de sólitons estáveis em um conjunto de uma LOL e uma NOL cruzadas, não apenas para o caso de interações atrativas, o que é esperado mesmo na ausência de uma NOL na direção  $y$  [78], como também para o caso de interações repulsivas (na ausência da NOL isto seria impossível).

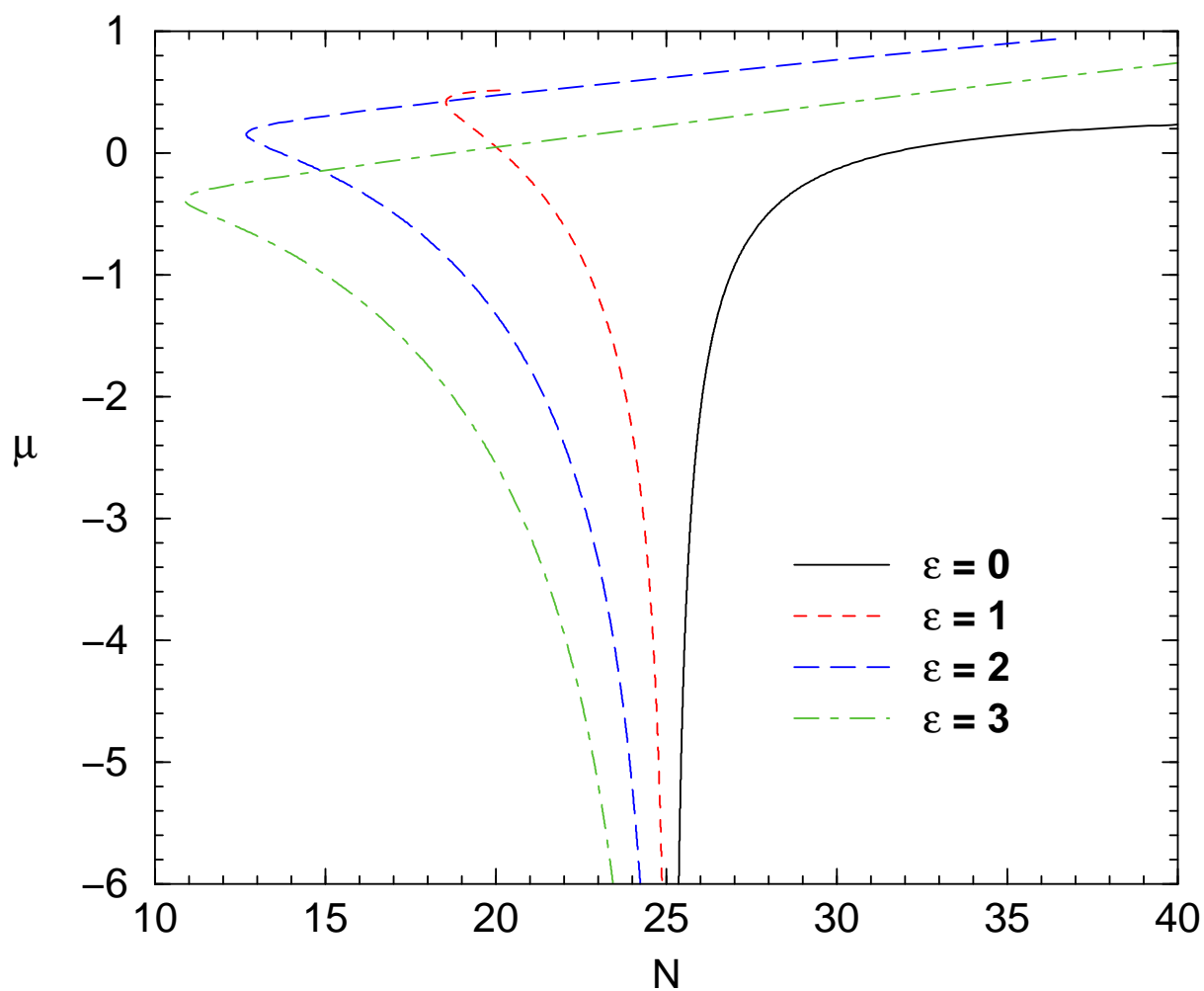
Na próxima seção demonstramos que estas predições estão de acordo com os resultados obtidos com as integrações numéricas da equação de Gross-Pitaevskii (GPE).



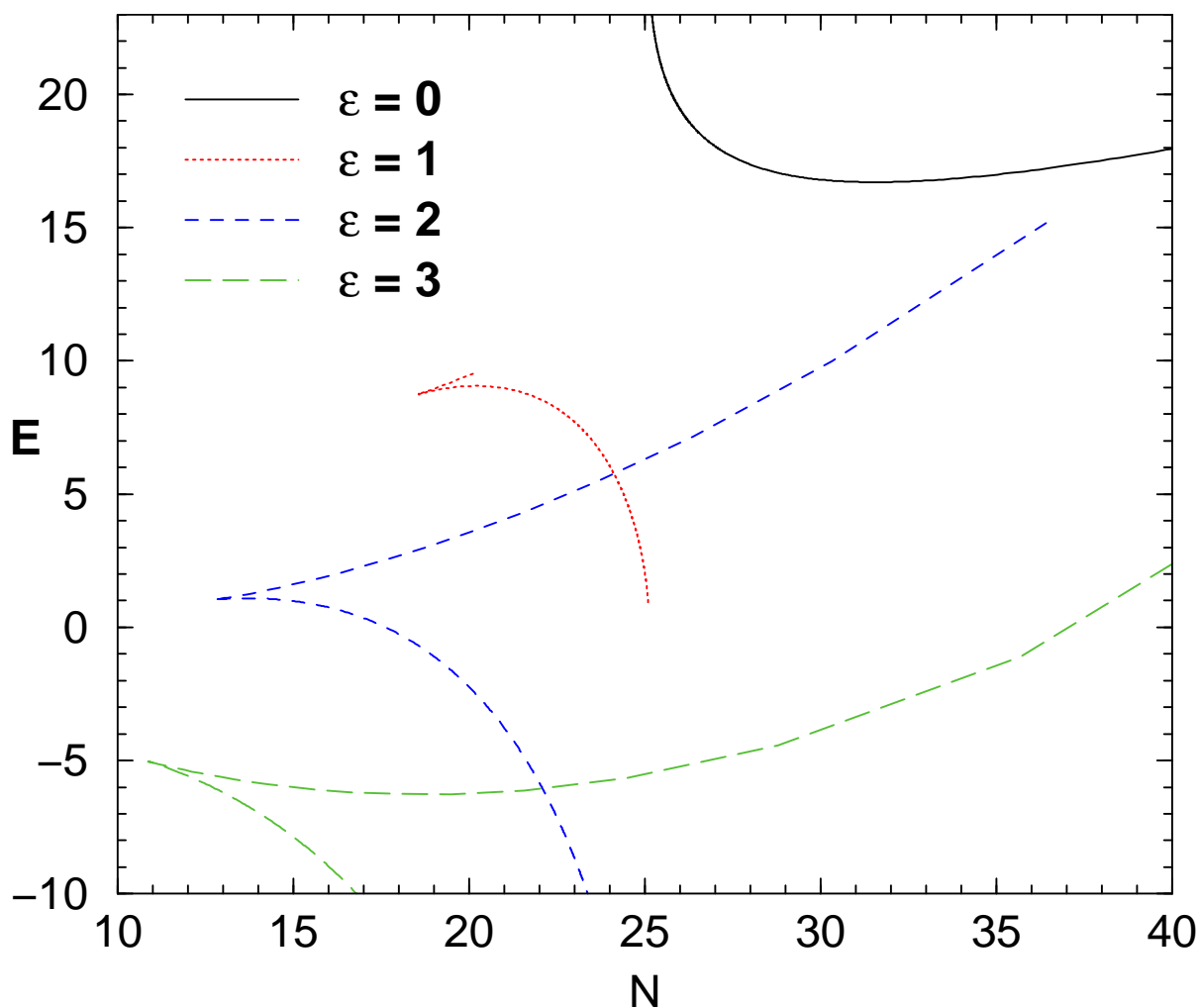
**Figura 3.1:** Resultados da análise variacional para sólitons 2D, com não-linearidade média atrativa (com  $\chi = 0,5$ ). O potencial químico  $\mu$  é mostrado em função de  $N$  para diferentes amplitudes  $\varepsilon$  (da LOL) indicadas no interior das figuras. Os demais parâmetros são fixados em  $\lambda = 2$ ,  $\gamma = 1$ . Todas as quantidades são apresentadas em unidades adimensionais.



**Figura 3.2:** Resultados da análise variacional para sólitons 2D, com não-linearidade média atrativa (com  $\chi = 0,5$ ). A energia total  $E$  é mostrada em função de  $N$  para diferentes amplitudes  $\varepsilon$  (da LOL) indicadas no interior das figuras. Os demais parâmetros são fixados em  $\lambda = 2$ ,  $\gamma = 1$ . Todas as quantidades são apresentadas em unidades adimensionais.



**Figura 3.3:** Resultados da análise variacional para sólitons 2D, com não-linearidade média repulsiva (com  $\chi = -0,5$ ). O potencial químico  $\mu$  é mostrado em função de  $N$  para diferentes amplitudes  $\varepsilon$  (da LOL) indicadas no interior das figuras. Os demais parâmetros são fixados em  $\lambda = 2$ ,  $\gamma = 1,0$ . Todas as quantidades são apresentadas em unidades adimensionais.



**Figura 3.4:** Resultados da análise variacional para sólitons 2D, com não-linearidade média repulsiva (com  $\chi = -0,5$ ). A energia total  $E$  é mostrada em função de  $N$  para diferentes amplitudes  $\varepsilon$  (da LOL) indicadas no interior das figuras. Os demais parâmetros são fixados em  $\lambda = 2$ ,  $\gamma = 1$ . Todas as quantidades são apresentadas em unidades adimensionais.

### 3.3 Resultados numéricos

Para confirmar os resultados das predições analíticas foram feitas integrações numéricas da equação de Gross-Pitaevskii 2D (3.3) com uma combinação de redes ópticas, linear na direção  $x$  e não-linear na direção  $y$ . Para encontrar as soluções localizadas foi utilizado um algoritmo básico de relaxação no tempo imaginário com uma renormalização que nos permite fixar o potencial químico  $\mu$  e determinar o número de átomos  $N$  correspondente [81]. Os resultados completos, análogos aos resultados variacionais das figuras 3.1 a 3.4, são dados nas figuras 3.5 a 3.8.

Usando a propagação no tempo imaginário para obter sólitons estáveis para diferentes valores de  $\mu$  foi possível traçar curvas no plano  $N - \mu$  (ver exemplos de soluções nos painéis esquerdos da figura 3.9). O algoritmo em questão nos permite seguir as soluções mesmo em regiões onde elas se tornam instáveis (chamados estados hiperbólicos [81]). Isto nos permite determinar exatamente a existência do limite do número de átomos (pontos de desvio). Curvas para sólitons 2D obtidas com esse método estão representadas nas figuras 3.5 à 3.8 para interações atrativas (3.5 e 3.6) e repulsivas (3.7 e 3.8). Para facilitar a comparação com os resultados variacionais é considerado o mesmo conjunto de parâmetros das figuras 3.1 à 3.4.

Vemos que, no caso atrativo, a concordância é muito boa, e não apenas qualitativamente, como também do ponto de vista quantitativo. Desconsiderando o pequeno salto de valor nas curvas, o VA corretamente prevê a existência de um ponto de desvio e a mudança na estabilidade das soluções. Observe que a concordância melhora com o aumento de amplitude da LOL, sendo esta uma consequência do fato de que em uma rede óptica mais profunda, o sólito torna-se mais localizado e melhor descrito pelo “*ansatz*” gaussiano utilizado em nossa análise variacional.

Por outro lado, no caso repulsivo a concordância é mais qualitativa, com um grande salto entre as curvas numéricas e variacionais, pois estas últimas não são afetadas pelo aumento na amplitude da LOL. Esta discrepância pode ser atribuída ao fato de que para interações repulsivas, o “*ansatz*” gaussiano utilizado no VA torna-se menos preciso devido ao tunelamento de matéria entre poços potenciais adjacentes (a função de onda do condensado não pode mais ser localizada em um único poço potencial e desenvolve satélites em poços adjacentes da rede óptica).

Na figura 3.9 comparamos seções dos perfis de densidade de sólitons correspondentes aos pontos indicados nas curvas com  $\varepsilon = 1,0$  nas figuras 3.5 à 3.8. Os painéis direitos da figura 3.9 se referem as soluções VA para o caso atrativo (superior) e repulsivo (inferior).

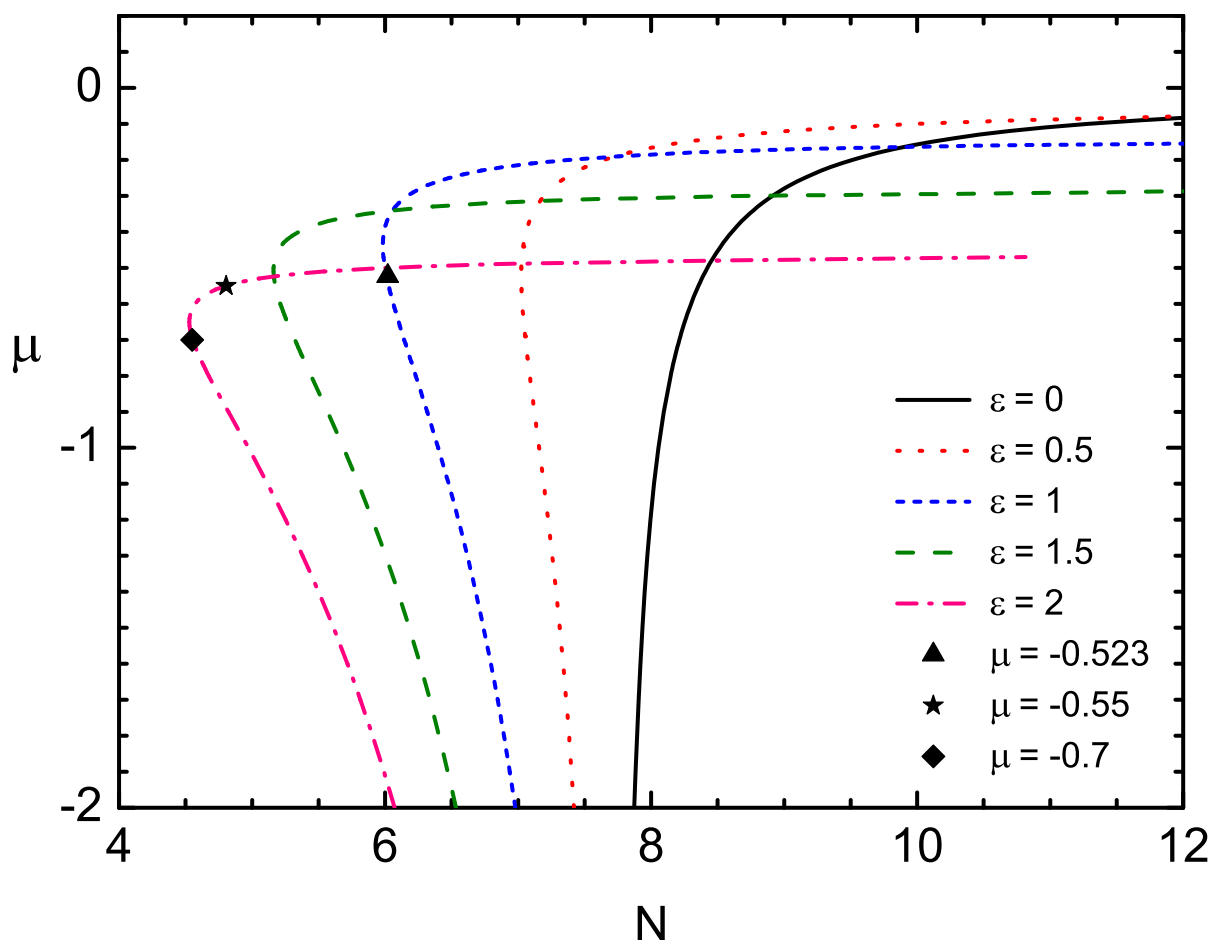


rior), enquanto os perfis análogos obtidos pelas integrações numéricas da GPE no tempo imaginário estão indicados nos painéis esquerdos.

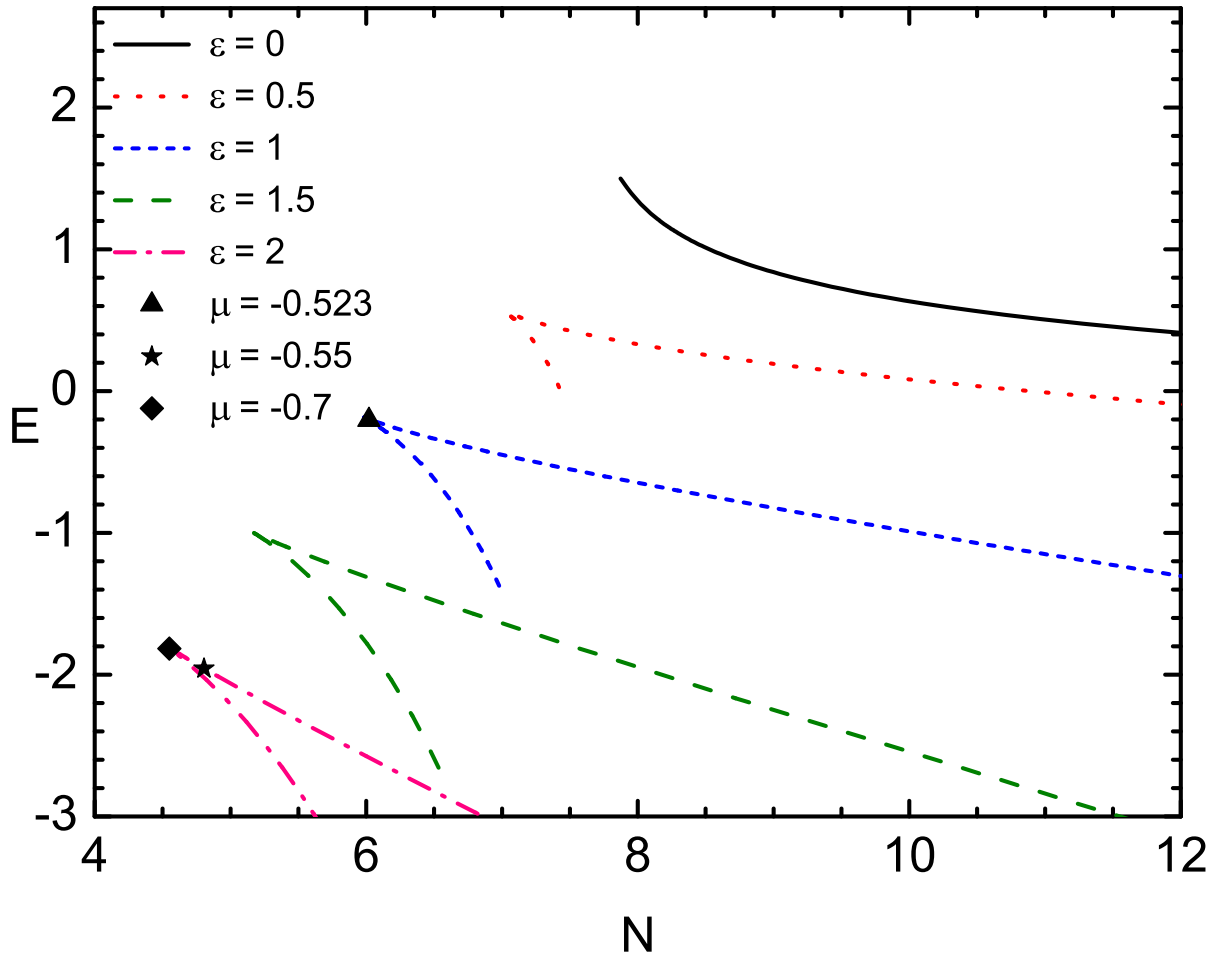
Observamos que, para os parâmetros escolhidos, há uma boa concordância com as predições analíticas. Também notamos que, para o caso atrativo (não-linearidade média positiva), a localização induzida pela LOL na direção  $x$  é maior que a induzida pela NOL na direção  $y$ . Contudo, ao trocar-se o sinal da não-linearidade média, mantendo os outros parâmetros idênticos, ocorre exatamente o oposto.

A estabilidade dessas soluções foi verificada por meio de uma propagação da GPE no tempo real utilizando um método de Crank-Nicolson com um “*split-step*” e tendo como função inicial um sóliton levemente deslocado nas duas dimensões. Nas figuras 3.5 e 3.7, selecionamos quatro específicas soluções solitônicas, em trechos das curvas com  $\varepsilon=2$  com diferentes inclinações e próximas aos pontos de desvio, a fim de checar a estabilidade, sendo  $\mu = -0,7$  (losango) e  $\mu = -0,55$  (asterisco) no caso atrativo (figuras 3.5 e 3.6);  $\mu = -1,0$  (círculo) e  $\mu = -0,55$  (triângulo) no caso repulsivo (figuras 3.7 e 3.8).

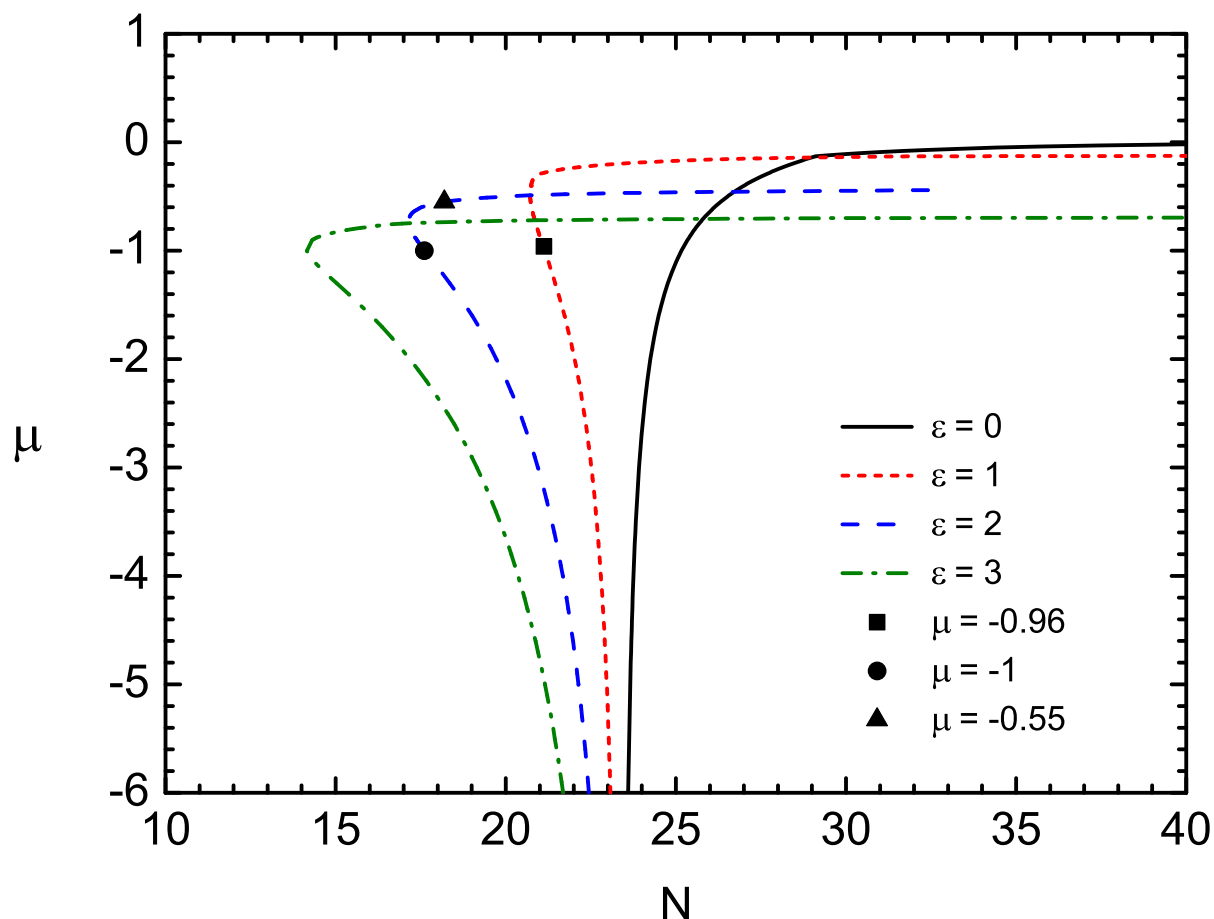
Na figura 3.10 mostramos a dinâmica obtida das integrações numéricas da GPE com condição inicial de um sóliton levemente deslocado. Vemos que enquanto os sólitons que se encontram nos trechos das curvas com inclinação negativa são estáveis durante a evolução temporal, aqueles situados nos trechos com inclinação positiva são instáveis e rapidamente decaem em um fundo uniforme.



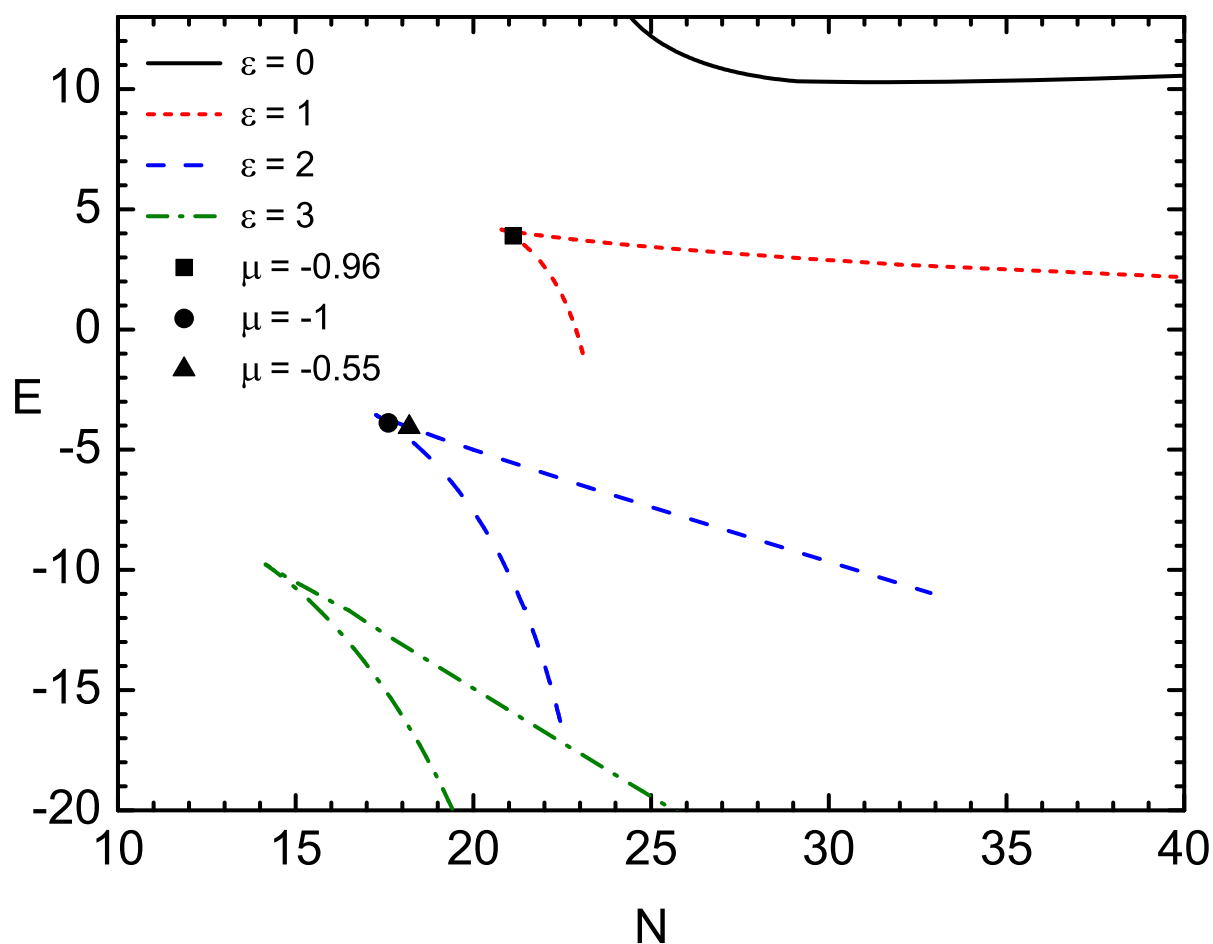
**Figura 3.5:** Curvas de existência dos sólitons 2D no plano  $\mu - N$  obtidas pelas integrações numéricas da equação (3.3) com não-linearidade média atrativa ( $\chi = 0,5$ ), para diferentes amplitudes  $\varepsilon$  (da LOL) indicadas no interior das figuras. Os demais parâmetros são fixados como na figura 3.1. Os símbolos nas curvas correspondem a soluções utilizadas na comparação de perfis de densidade com os resultados variacionais (figura 3.9) e na confirmação da estabilidade com propagações no tempo (figura 3.10). Todas as quantidades são apresentadas em unidades adimensionais.



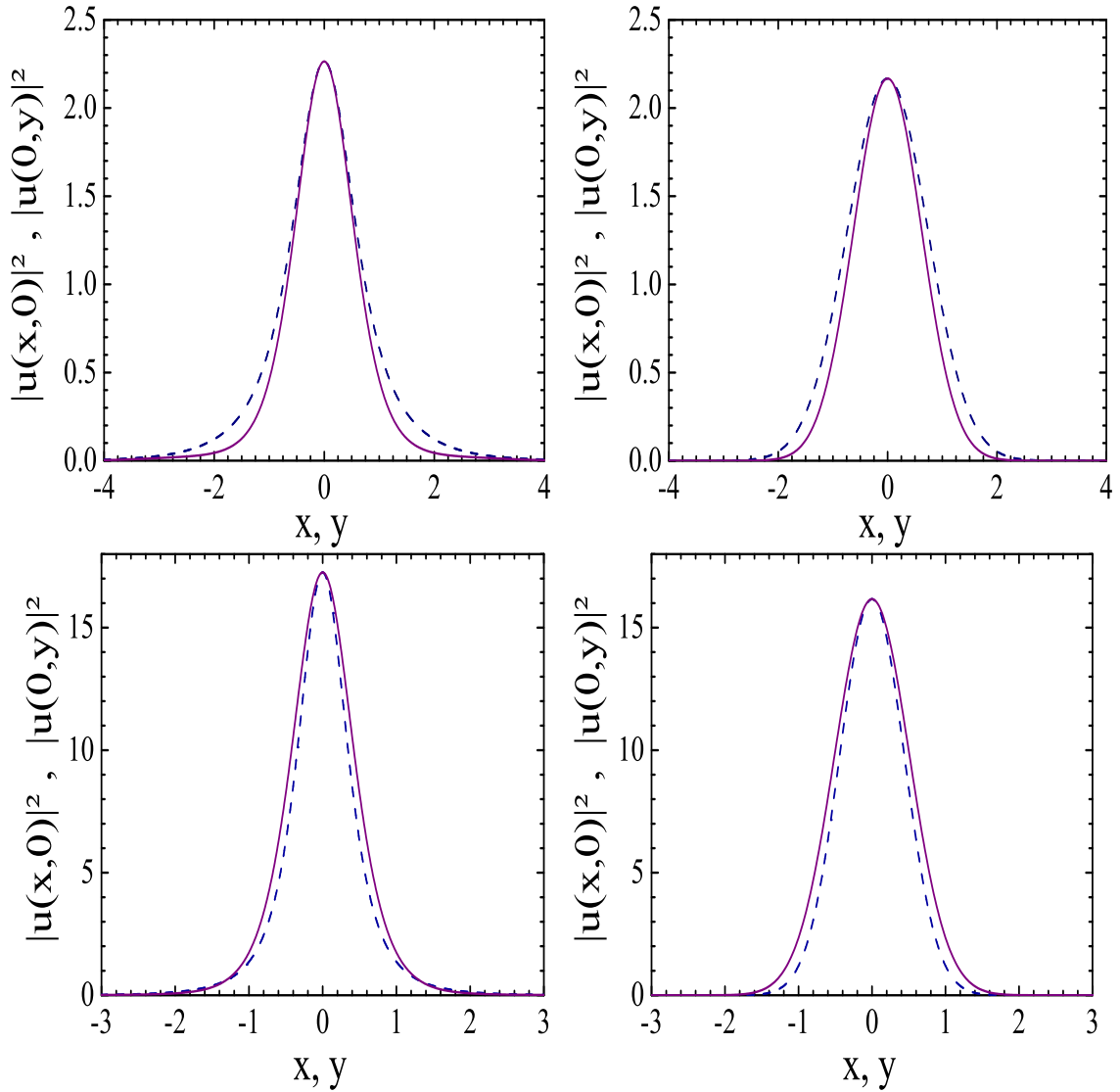
**Figura 3.6:** Curvas de existência dos síttons 2D no plano  $E - N$  obtidas pelas integrações numéricas da equação (3.3) com não-linearidade média atrativa ( $\chi = 0,5$ ), para diferentes amplitudes  $\varepsilon$  (da LOL) indicadas no interior das figuras. Os demais parâmetros são fixados como na figura 3.2. Os símbolos nas curvas correspondem a soluções utilizadas na comparação de perfis de densidade com os resultados variacionais (figura 3.9) e na confirmação da estabilidade com propagações no tempo (figura 3.10). Todas as quantidades são apresentadas em unidades adimensionais.



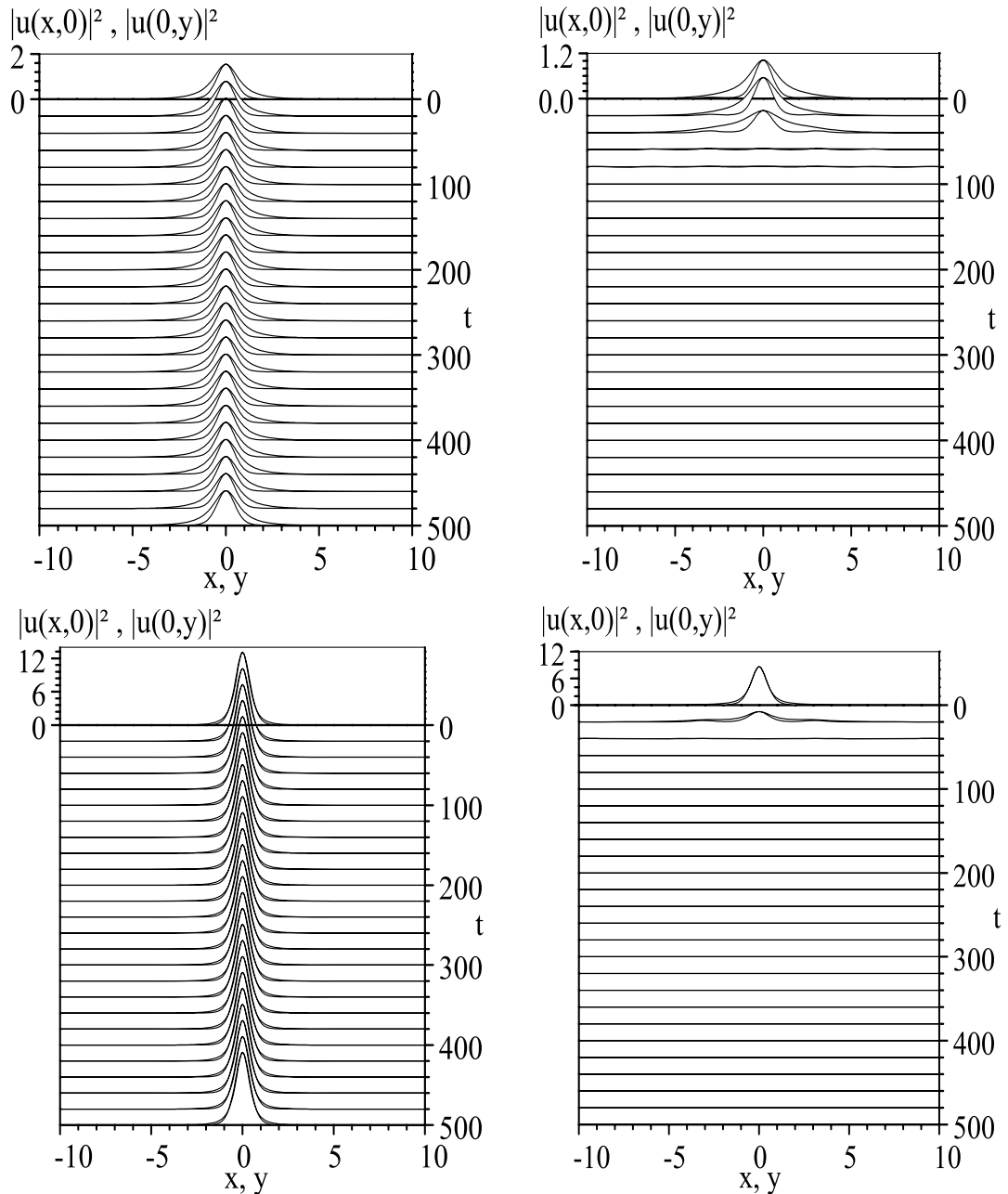
**Figura 3.7:** Curvas de existência dos sólitons 2D no plano  $\mu - N$  obtidas pelas integrações numéricas da equação (3.3) com não-linearidade média negativa ( $\chi = -0,5$ ), para diferentes amplitudes  $\varepsilon$  (da LOL) indicadas no interior das figuras. Os demais parâmetros são fixados como na figura 3.3. Os símbolos nas curvas correspondem a soluções utilizadas na comparação de perfis de densidade com os resultados variacionais (figura 3.9) e na confirmação da estabilidade com propagações no tempo (figura 3.10). Todas as quantidades são apresentadas em unidades adimensionais.



**Figura 3.8:** Curvas de existência dos sítions 2D no plano  $E - N$  obtidas pelas integrações numéricas da equação (3.3) com não-linearidade média negativa ( $\chi = -0,5$ ), para diferentes amplitudes  $\varepsilon$  (da LOL) indicadas no interior das figuras. Os demais parâmetros são fixados como na figura 3.4. Os símbolos nas curvas correspondem a soluções utilizadas na comparação de perfis de densidade com os resultados variacionais (figura 3.9) e na confirmação da estabilidade com propagações no tempo (figura 3.10). Todas as quantidades são apresentadas em unidades adimensionais.



**Figura 3.9:** Perfis de densidade do sóliton nas direções  $x = 0$  (linhas tracejadas) e  $y = 0$  (linhas contínuas) para o caso atrativo  $\chi = 0,5$  (painéis superiores) e repulsivo  $\chi = -0,5$  (painéis inferiores). Nos painéis esquerdos estão os resultados do método numérico de relaxação da GPE no tempo imaginário e correspondem aos pontos indicados nas curvas  $\varepsilon = 1,0$ , em  $N = 6,02$  ( $\mu = -0,523$ ), na figura 3.1, e  $N = 21,12$  ( $\mu = -0,96$ ), na figura 3.3. Nos painéis direitos estão os resultados preditos pela VA para os mesmos potenciais químicos dos painéis esquerdos. Neste caso, para  $\mu = -0,523$ , temos  $N = 6,2$  (caso atrativo); e para  $\mu = -0,96$ , temos  $N = 22,69$  (caso repulsivo). Os demais parâmetros são fixos como nas figuras 3.1 à 3.1. Todas as quantidades são apresentadas em unidades adimensionais.



**Figura 3.10:** Evolução temporal das seções de  $x$  e  $y$  da densidade dos sólitons para interação atrativa (painéis superiores) e repulsiva (painéis inferiores) correspondentes aos pontos nos trechos estáveis (painéis esquerdos) e instáveis (painéis direitos), das curvas com  $\varepsilon = 2$ , indicados nas figuras 3.5 e 3.7. O potencial químico dos sólitons estáveis e instáveis são  $\mu = -0,7$ ,  $\mu = -0,55$  para o caso atrativo e  $\mu = -1,0$ ,  $\mu = -0,55$  para o caso repulsivo, respectivamente. No lado esquerdo dos painéis está indicada a escala da densidade, com a evolução temporal do lado direito. Os perfis mais largos correspondem as seções na direção  $y$ . Todas as quantidades são apresentadas em unidades adimensionais.

### 3.4 Discussão dos resultados

Pelos resultados apresentados é possível demonstrar a existência de sólitons em condensados de Bose-Einstein ao se cruzar duas redes ópticas diferentes, uma linear em uma direção e uma não-linear na direção ortogonal. Os resultados numéricos estão em acordo com o esperado da análise variacional utilizando o critério VK. Concluímos assim ser possível criar sólitons 2D estáveis em BECs utilizando uma rede óptica linear na direção  $x$  e uma rede óptica não-linear na direção  $y$  (com a modulação periódica do comprimento de espalhamento), para os casos de interações de fundo do tipo atrativa e repulsiva.

Ao se comparar, por exemplo, as figuras 3.1 e 3.5, que mostram as curvas de existência no plano  $N - \mu$  para o caso atrativo, vemos uma boa concordância quantitativa entre os cálculos variacionais e numéricos. No caso repulsivo, como é possível observar nas figuras equivalentes 3.3 e 3.7, temos uma leve dificuldade de estabelecer uma equivalência no comportamento das mesmas após o ponto de virada na curva de existência, quando o fator repulsivo começa a dominar o sistema e ele rapidamente deixa o equilíbrio necessário para manter a estabilidade das ondas de matéria. Isto é visto claramente nos comportamentos dos perfis de densidade da função de onda, nos cálculos de dinâmica mostrados na figura 3.10, onde um sóliton no caso repulsivo se desfaz em um tempo, ao menos, duas vezes maior. Esse comportamento também é sentido ao se realizar os cálculos numéricos, onde é necessário uma precisão, e portanto um tempo de máquina, cada vez maior para se obter cada um dos pontos calculados, ao se aproximar do ponto de virada, e quanto maior o valor subsequente de  $\mu$ , aumentando a velocidade com qual o sóliton deixa o equilíbrio.



# Capítulo 4

## Sólitons tridimensionais

Após a publicação [1] dos resultados do capítulo 3, tendo em vista também nosso trabalho de 2007 [31], começamos a nos perguntar se essa mesma rede óptica (bidimensional) seria suficiente para estabilizar sólitons caso fosse aplicada a um sistema tridimensional. Até então, a maioria dos estudos realizados (tanto teóricos quanto experimentais) se dedicaram a estudar sistemas de condensados de Bose-Einstein em uma ou duas dimensões [22, 27, 78, 82]. Um pouco mais recentemente, alguns trabalhos voltados à óptica não-linear discutiram sólitons tridimensionais [83–85], mas pouco havia sido feito em relação à sistemas de condensados de Bose-Einstein (com alguma exceção [86]).

Portanto, dando continuidade ao estudo de sólitons em redes ópticas, partimos para o caso tridimensional, no qual acrescentamos uma terceira dimensão ( $z$ ) livre de potenciais externos (caso quase-2D). Mantivemos a mesma abordagem do capítulo anterior, efetuando um tratamento analítico por meio da análise variacional de um “*ansatz*” gaussiano para a função de onda solitônica, e também numericamente por métodos de relaxação e integração direta da equação de Gross-Pitaevskii (GPE) correspondente. Após vários cálculos numéricos, concluímos que os sólitons 3D presentes nessa rede quase-2D eram sempre instáveis, nos levando a uma mudança na rede óptica aplicada ao sistema. Optamos então por acrescentar uma rede óptica linear na direção  $z$  e obtivemos sólitons estáveis em ambos os casos atrativo e repulsivo.

### 4.1 Modelo teórico

O BEC 3D, com duas LOLs nas direções  $x$  e  $z$ , e uma NOL na direção  $y$ , é descrito pela seguinte equação de Gross-Pitaevskii:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi - \sum_{\zeta=x,z} \Lambda_{\zeta} \cos(2k \zeta) \psi + g(y) |\psi|^2 \psi \quad (4.1)$$

onde  $\psi \equiv \psi(\mathbf{r}, t)$  está normalizado ao número de átomos,  $\nabla^2$  é o Laplaciano tridimensional,  $m$  é a massa atômica e  $\Lambda_{\zeta} \cos(2k \zeta)$  é a LOL na direção  $\zeta$  ( $\zeta \equiv x, z$ ), com amplitude  $\Lambda_{\zeta}$  e constante de rede  $\pi/k$  (idênticas nas duas direções  $\zeta$ ). O  $g(y)$  representa a NOL na direção  $y$ , e é descrito como:

$$g(y) = g_0 + g_1 \cos(2\kappa y), \quad (4.2)$$

onde  $g_0$  é a não-linearidade média relacionada ao comprimento de espalhamento  $a_{s0}$  (da onda  $s$ ), dado por  $g_0 = 4\pi\hbar^2 a_{s0}/m$  para o caso 3D, e  $g_1$  é a magnitude da modulação periódica da não-linearidade na direção  $y$ , com período  $\pi/\kappa$ .

Adotamos novamente unidades adimensionais ao escalonar as variáveis de espaço e de tempo, substituindo as variáveis em (4.1),  $t \rightarrow (\hbar/E_r) t$ ,  $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r}/k$ , com  $E_r \equiv \hbar^2 k^2/2m$  sendo a energia de recuo e  $\mathbf{r} \equiv x, y, z$ . É possível então reescalonar a função de onda para  $\psi(\mathbf{r}, t) \rightarrow k^{3/2} u(\mathbf{r}, t)$ , com a Eq. (4.1) sendo transformada em:

$$i \frac{\partial u}{\partial t} = -\nabla^2 u - V u - \Gamma |u|^2 u \quad (4.3)$$

onde

$$V \equiv V(x, z) = \varepsilon_x \cos(2x) + \varepsilon_z \cos(2z), \quad (4.4)$$

$$\Gamma \equiv \Gamma(y) = \chi + \gamma \cos(\lambda y), \quad (4.5)$$

são as LOLs e NOLs, respectivamente.

Considerando as equações (4.1) a (4.3), definimos então:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{\zeta} &\equiv \Lambda_{\zeta}/E_r, & \chi &\equiv g_0 k^3/E_r = -8\pi a_{s0} k, \\ \lambda &\equiv 2\kappa/k, & \gamma &\equiv -g_1 k^3/E_r, \end{aligned} \quad (4.6)$$

com  $g_1$  tendo sido assumido como um parâmetro livre.

Obtemos novamente as curvas de existência para a solução estacionária

$$u(\mathbf{r}, t) = U(x, y, z) \exp(i\mu t),$$

com potencial químico  $\mu$  e  $U(x, y, z)$  sendo uma função real do perfil do sóliton, um “*ansatz*” do tipo gaussiano em 3D. Substituindo na Eq. 4.3 obtemos a equação estacionária

$$\mu U = -\nabla^2 U - VU - \Gamma|U|^2 U, \quad (4.7)$$

com potencial químico e energia total dados respectivamente por:

$$\mu N = \int \{|\nabla U|^2 - V(x, z)U^2 - \Gamma(y)U^4\} dx dy dz, \quad (4.8)$$

$$E = \frac{1}{2} \int \left\{ |\nabla U|^2 - V(x, z)U^2 - \frac{\Gamma(y)}{2}U^4 \right\} dx dy dz. \quad (4.9)$$

O espaço de fase 3D nas integrações das expressões anteriores vão de  $-\infty$  à  $+\infty$ .

### 4.1.1 Análise Variacional

Para fazer a análise das equações (4.7) a (4.9) pelo método variacional, utilizamos o “*ansatz*” tipo Gaussiana:

$$U(x, y, z) = A e^{-\frac{1}{2}(ax^2+by^2+cz^2)}, \quad (4.10)$$

onde  $a$ ,  $b$  e  $c$  controlam a largura da função em cada uma das três dimensões.

Observando que o “*ansatz*” assume que a função densidade do condensado fique centrada na origem, com isso temos uma situação favorável quando os sinais da LOL  $\varepsilon$  e da NOL  $\gamma$  são positivos. Por outro lado, caso tenha sinais opostos, como por exemplo  $\varepsilon > 0$  e  $\gamma < 0$ , devido às diferentes posições dos mínimos das LOs nas direções  $x$  e  $y$ . É possível entender isto da seguinte forma: embora na direção  $x$  os átomos tendem a ficar localizados ao redor da origem em  $x = 0$  (devido ao mínimo do LOL estar centrado neste ponto), na direção  $y$  a NOL possui um máximo centrado em  $y = 0$  (com a interação local repulsiva) e os átomos tendem a deslocalizar-se neste ponto. Por isso é esperada uma distorção (no que se refere ao caráter Gaussiano da mesma) da densidade no plano  $x-y$ , que não é prevista pelo simplificado “*ansatz*” (4.10) proposto. A partir de simulações PDE, descobrimos que essas soluções distorcidas podem existir, mas são sempre instáveis. Portanto, restringiremos a análise variacional ao caso  $\varepsilon > 0$  e  $\gamma < 0$ , para o qual o “*ansatz*” (4.10) é mais apropriado.

A partir da equação (4.10), o número átomos normalizado é expresso em termos dos

parâmetros variacionais  $A, a, b, c$ :

$$N = \int U^2 dx dy dz = \frac{A^2 \pi^{3/2}}{\sqrt{abc}}. \quad (4.11)$$

A equação de Gross-Pitaevskii estacionária em (4.7) pode ser derivada da Lagrangeana de campo  $L$ , que é dada por:

$$2L = \int \left\{ |\nabla U|^2 - [\mu + V(x, z)]U^2 - \frac{\Gamma(y)}{2} U^4 \right\} dx dy dz. \quad (4.12)$$

Ao substituir o “*ansatz*” (4.10) na equação acima e executando as integrações, novamente em termos dos parâmetros variacionais  $a, b, c$  e  $A$ , obtemos o Lagrangeano efetivo:

$$L_{eff} = \frac{A^2 \pi^{3/2}}{4\sqrt{abc}} \left\{ a + b + c - \frac{A^2}{2\sqrt{2}} \left[ \chi + \gamma e^{-\frac{\lambda^2}{8b}} \right] - 2(\mu + \varepsilon_x e^{-\frac{1}{a}} + \varepsilon_z e^{-\frac{1}{c}}) \right\}, \quad (4.13)$$

onde  $A^2$  está relacionado ao número de átomos pela relação (4.11).

O formalismo descrito até agora pode ser aplicado de uma forma mais geral em diferentes sistemas de redes ópticas cruzadas compostas de LOLs e NOLs. Ao considerarmos os parâmetros,  $\varepsilon_x$  e  $\varepsilon_z$ , das LOLs, podemos chegar à dois casos específicos: (i)  $\varepsilon_x \equiv \varepsilon$  com  $\varepsilon_z = 0$ , o caso quase-2D, com uma LOL 1D e uma NOL 1D; e (ii)  $\varepsilon_x \equiv \varepsilon_z \equiv \varepsilon$ , o caso 3D, com uma LOL 2D e uma NOL 1D.

## 4.2 Resultados e discussões

### 4.2.1 Sólitons 3D em OLs quase-2D

Nesta seção encontram-se os resultados do primeiro caso estudado, onde temos a direção  $z$  livre de potenciais aplicados ( $\Lambda_z = 0$  na equação (4.1) ou  $\varepsilon_z = 0$  na equação (4.4)). Investigamos o caso atrativo, único que poderia (em teoria) apresentar estabilidade, já que os átomos podem se mover livremente em uma das direções.

Ao considerar  $\varepsilon_z = 0$  e  $\varepsilon_x \equiv \varepsilon$  na equação (4.13), é possível obter uma relação entre o potencial químico e o número de átomos com os parâmetros variacionais,  $a, b, c$  e  $A$ , a partir das equações de Euler-Lagrange. Assim temos respectivamente as expressões para

o potencial químico  $\mu$  e número de átomos  $N$ :

$$\mu = \frac{b}{2} - a - \varepsilon \left(1 - \frac{3}{a}\right) e^{-\frac{1}{a}}, \quad (4.14)$$

$$N = 4\pi \sqrt{\frac{2\pi}{abc}} \frac{a - 2\varepsilon(e^{-\frac{1}{a}})/a}{\chi + \gamma e^{-\frac{\lambda^2}{8b}}}, \quad (4.15)$$

onde  $a, b, c$  são obtidos a partir da equação transcendental:

$$\frac{1}{b} + \frac{\lambda^2}{4b^2} \frac{\gamma e^{-\frac{\lambda^2}{8b}}}{\chi + \gamma e^{-\frac{\lambda^2}{8b}}} = \frac{1}{c}, \quad (4.16)$$

com parâmetro  $c$  dado por:

$$c = \left(a - \frac{2\varepsilon}{a} e^{-1/a}\right). \quad (4.17)$$

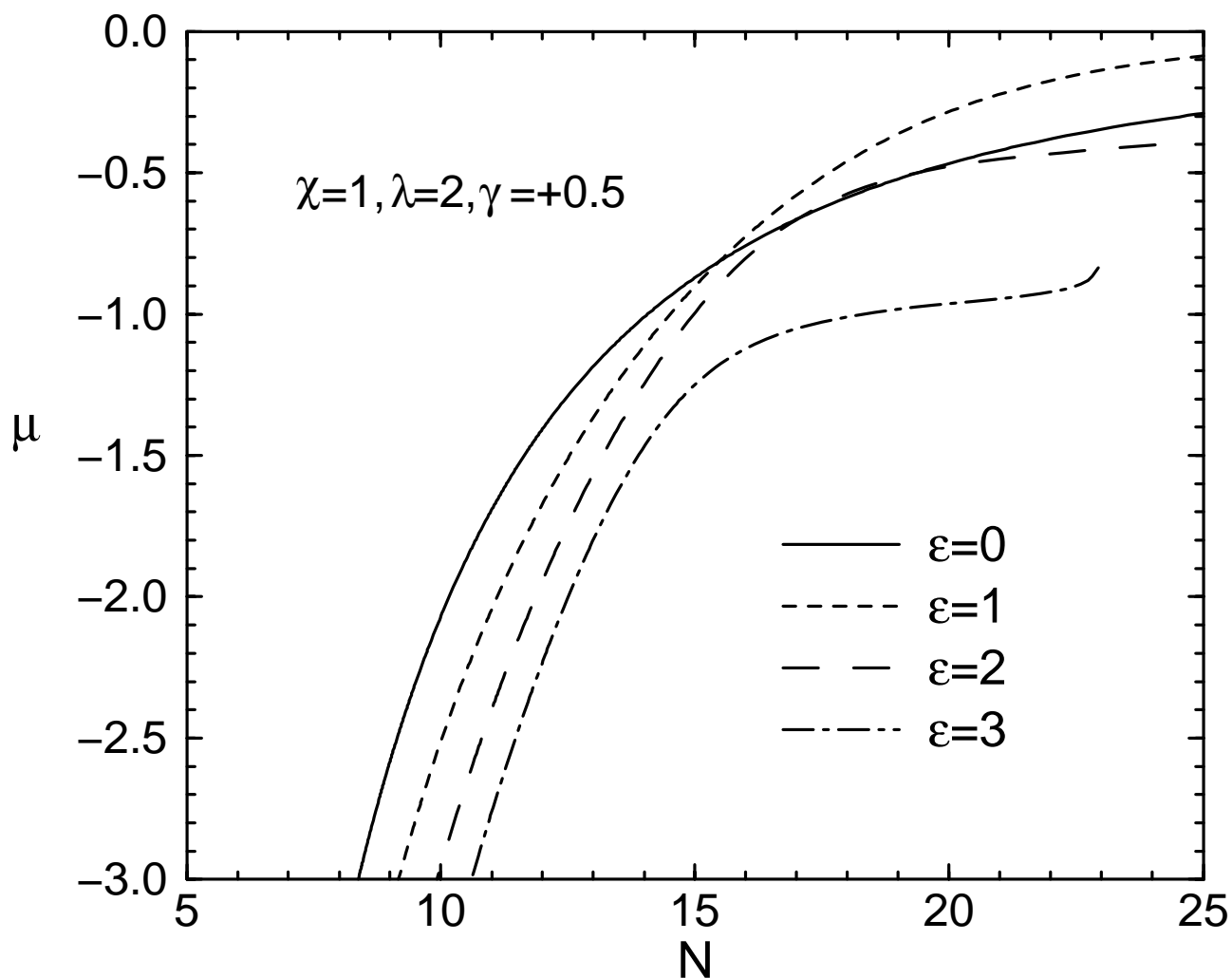
Assim, é possível reescrever a equação (4.15) para o número de partículas como:

$$N = 4\pi \sqrt{\frac{2\pi c}{ab}} \frac{1}{\chi + \gamma e^{-\frac{\lambda^2}{8b}}}. \quad (4.18)$$

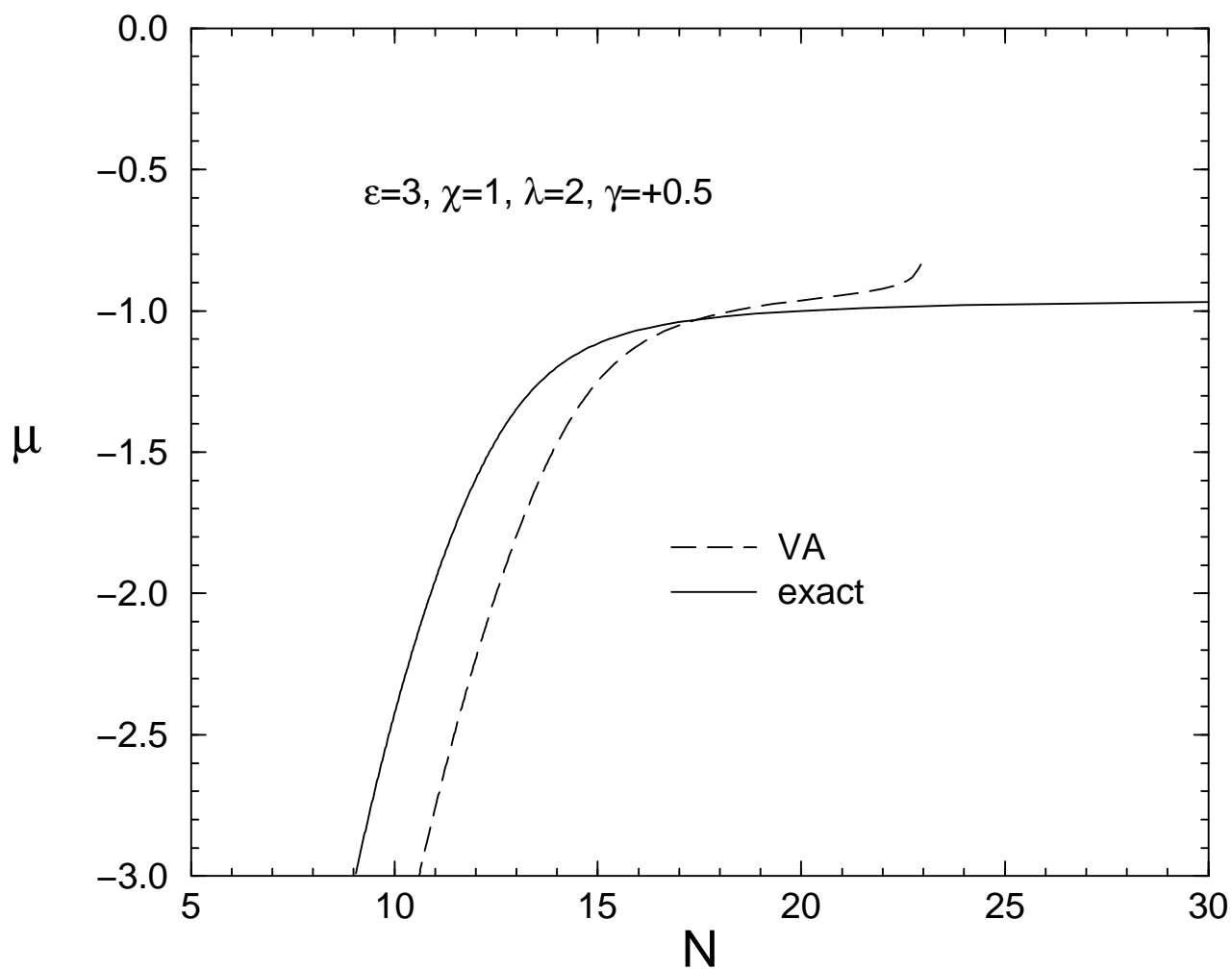
Obtidos a partir das equações acima, para os diferentes valores da LOL na direção  $x$  (como indicado no interior da figura), com a direção  $z$  livre de potenciais ( $\varepsilon_z = 0$ ), na figura 4.1 temos as curvas resultantes de sólitons 3D no plano  $\mu - N$ . Conforme verificado, nenhum sóliton 3D estável pode existir, de acordo com o critério de VK (o qual se prevê estabilidade para  $d\mu/dN < 0$ ) no caso atrativo.

No figura 4.2 comparamos uma das curvas de existência do resultado VA (no caso a com  $\varepsilon_x = 3$ ) com a curva correspondente obtida a partir de simulações numéricas (PDE) da equação GP, de onde observa-se uma boa concordância quantitativa entre os resultados numéricos e analíticos. As simulações de PDE também confirmam a previsão do critério VK sobre a instabilidade de sólitons 3D neste caso.

Na próxima seção analisarei o segundo caso tratado, com uma LOL 2D, em ambas as direções  $x$  e  $z$  e uma NOL 1D na direção  $y$ .



**Figura 4.1:** O potencial químico  $\mu$  em função do número de átomos  $N$  para sólitons 3D, em uma combinação cruzada de uma LOL 1D (direção  $x$ ) com uma NOL 1D (direção  $y$ ) e a terceira direção  $z$  livre de potenciais ( $\varepsilon_z = 0$ ), no caso de uma interação média de dois corpos atrativa ( $\chi = 1$ ). Resultados VA para diferentes valores da LOL  $\varepsilon_x = \varepsilon$ , com os outros parâmetros fixos como indicado.



**Figura 4.2:** O potencial químico  $\mu$  em função do número de átomos  $N$  para sólitons 3D, em uma combinação cruzada de uma LOL 1D (direção  $x$ ) com uma NOL 1D (direção  $y$ ) e a terceira direção  $z$  livre de potenciais ( $\varepsilon_z = 0$ ), no caso de uma interação média de dois corpos atrativa ( $\chi = 1$ ). Verificação entre os resultados VA para  $\varepsilon = 3$  (linha tracejada) com os resultados PDE (linha sólida).

### 4.2.2 Sólitons em uma combinação cruzada de redes ópticas 3Ds

O resultado da seção anterior, obviamente, não pode ser válido para comprimentos de espalhamento repulsivos, pois a direção  $z$  é totalmente livre de potenciais externos. No entanto, até para o caso repulsivo, é possível estabilizar sólitons, ao adicionar uma LOL na direção  $z$ . Assim, a partir das equações já derivadas, que levaram à Lagrangeana variacional efetiva 4.13), seguiremos a análise considerando o caso específico de uma LOL simétrica com  $\varepsilon_x = \varepsilon_z \equiv \varepsilon$ . Ao analisar esse caso, por razões de simetria, deduz-se que as soluções solitônicas estacionárias terão larguras iguais nas direções  $x$  e  $z$ , no “*ansatz*”  $U$  tendo  $c = a$ . Mostraremos também, por meio de resultados das simulações numéricas, o comportamento dinâmico na transição entre as regiões de estabilidade e instabilidade, com relação à força da LOL na direção  $z$ .

Seguindo a mesma discussão na seção anterior sobre a validade do “*ansatz*” gaussiano para sólitons 3D em uma combinação cruzada de OLs, foram também restringidos aqui os sinais das duas LOLs e da NOL, todas positivos. O Lagrangeano eficaz fica então definido como:

$$L_{eff} = \frac{\pi^{3/2} A^2}{4a\sqrt{b}} \{2a + b - 2(\mu + 2\varepsilon e^{-1/a}) - \frac{A^2}{2\sqrt{2}}(\chi + \gamma e^{-\lambda^2/8b})\} \quad (4.19)$$

com  $A^2$  relacionado ao número de átomos pela expressão:

$$N = \frac{A^2 \pi^{3/2}}{a\sqrt{b}}.$$

Neste caso, obtemos as seguintes relações para o potencial químico e número de átomos, em função dos parâmetros variacionais:

$$\mu = \frac{b}{2} - a - 2\varepsilon \left(1 - \frac{2}{a}\right) e^{-1/a}, \quad (4.20)$$

$$N = 4\pi \sqrt{\frac{2\pi}{b} \frac{1 - 2\varepsilon(e^{-1/a})/a^2}{\chi + \gamma e^{-\lambda^2/8b}}}. \quad (4.21)$$

Assim como nas equações (4.16) e (4.17), os parâmetros  $a$  e  $b$  estão relacionados pela equação transcendental:



$$\frac{1}{b} + \frac{\lambda^2}{4b^2} \frac{\gamma e^{-\frac{\lambda^2}{8b}}}{\chi + \gamma e^{-\frac{\lambda^2}{8b}}} = \frac{1}{a - (2\varepsilon/a)e^{-1/a}}. \quad (4.22)$$

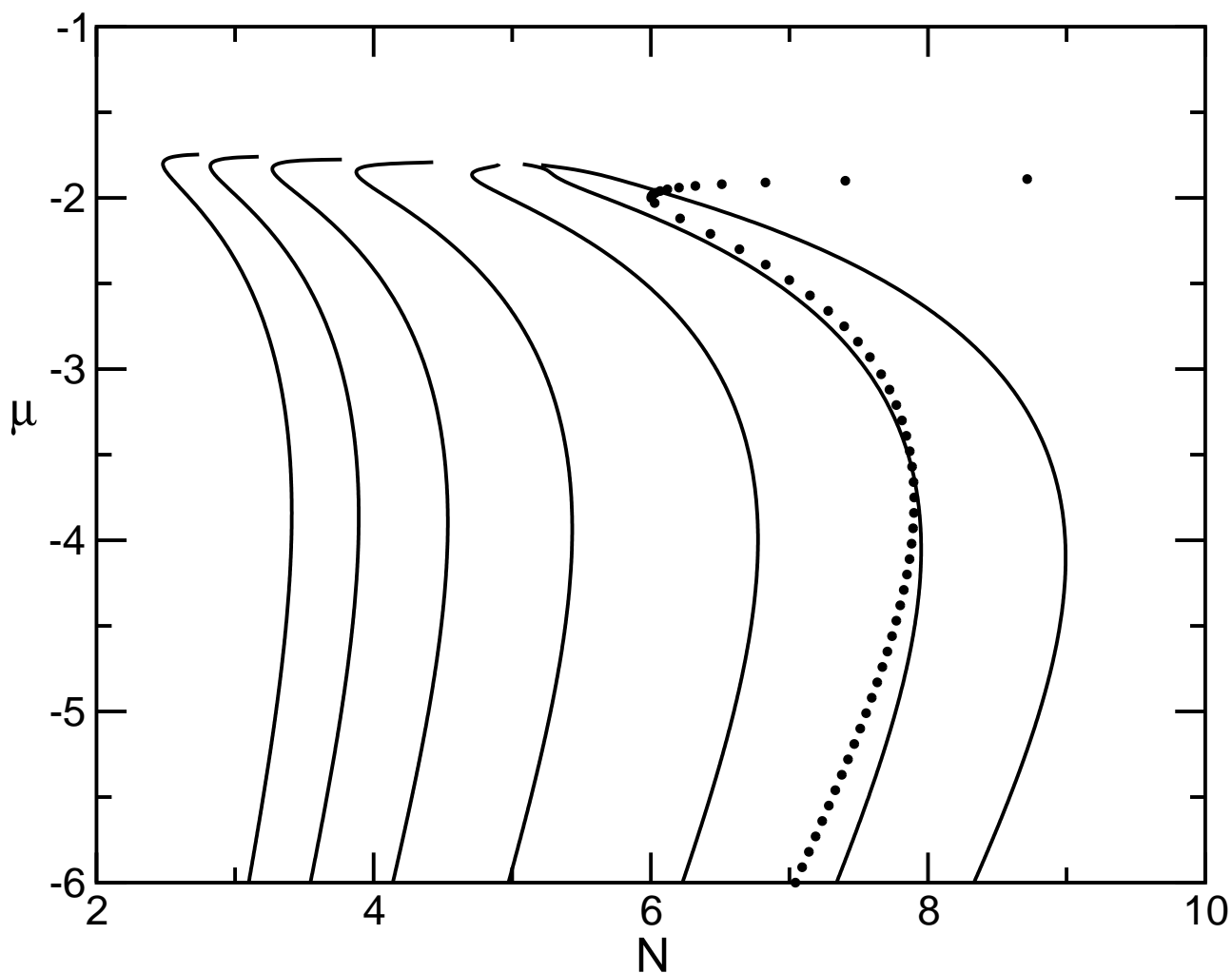
Nas figuras 4.3 e 4.4 estão as curvas VA (linhas contínuas) no plano  $(\mu - N)$ , que examinam a existência de sólitons 3D estáveis em uma combinação cruzada de uma LOL 2D e uma NOL 1D para interações atômicas positivas e negativas. Como observado, em ambos os casos há a possibilidade de existência dos sólitons 3D em acordo com o critério de VK ( $d\mu/dN < 0$ ). Para fins de comparação, junto com os resultados VA (linhas sólidas), temos em cada uma das figuras 4.3 e 4.4, resultados das integrações numéricas da PDE (linhas pontilhadas) que corroboram os os resultados VA para parâmetros específicos indicados nas legendas dos gráficos.

Lembrando que, apesar de que para interações repulsivas o critério VK pode não ser indicativo de estabilidade de sólitons (a estabilidade pode ser verificada por meio de um critério “anti-VK”  $d\mu/dN > 0$  [71]), para os casos investigados temos sempre uma boa concordância entre as previsões do critério VK e os resultados numéricos.

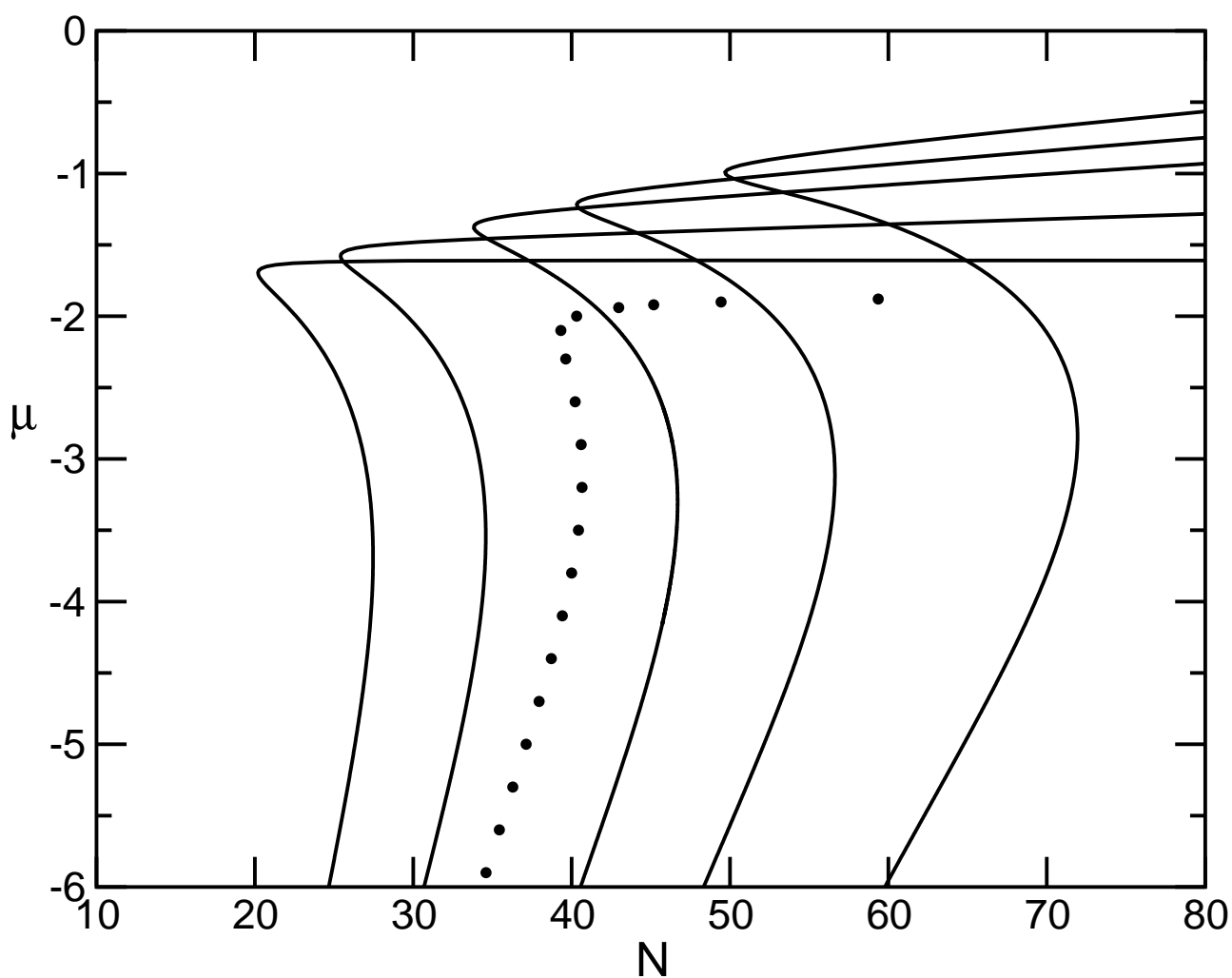
Na figura 4.5, são mostrados seções dos perfis solitônicos previstos nos cálculos VA (quadros à esquerda) e seus resultados correspondentes obtidos pelo método de relaxação (quadros à direita), para interações médias atrativas [quadros (a) e (b)] e repulsivas [quadros (c) e (d)], respectivamente.

É possível observar que no caso atrativo os resultados VA e PDE possuem uma boa concordância qualitativa (ver também a figura 4.3). O mesmo não ocorre com a interação média repulsiva para os parâmetros utilizados nas OLs. Essa diferença pode ser explicada pela imprecisão do “*ansatz*” gaussiano ao descrever a função de onda do condensado para valores grandes na amplitude da LOL. No caso de interações médias repulsivas e OLs de grandes amplitudes temos uma divisão do condensado pelos sítios vizinhos da rede. Esta divisão gera agrupamentos satélites das partículas, como os vistos na figura 4.9. Para que esse efeito seja minimizado e a concordância com nosso “*ansatz*” seja ampliada, é necessária uma redução na intensidade da LOL e também na não-linearidade média.

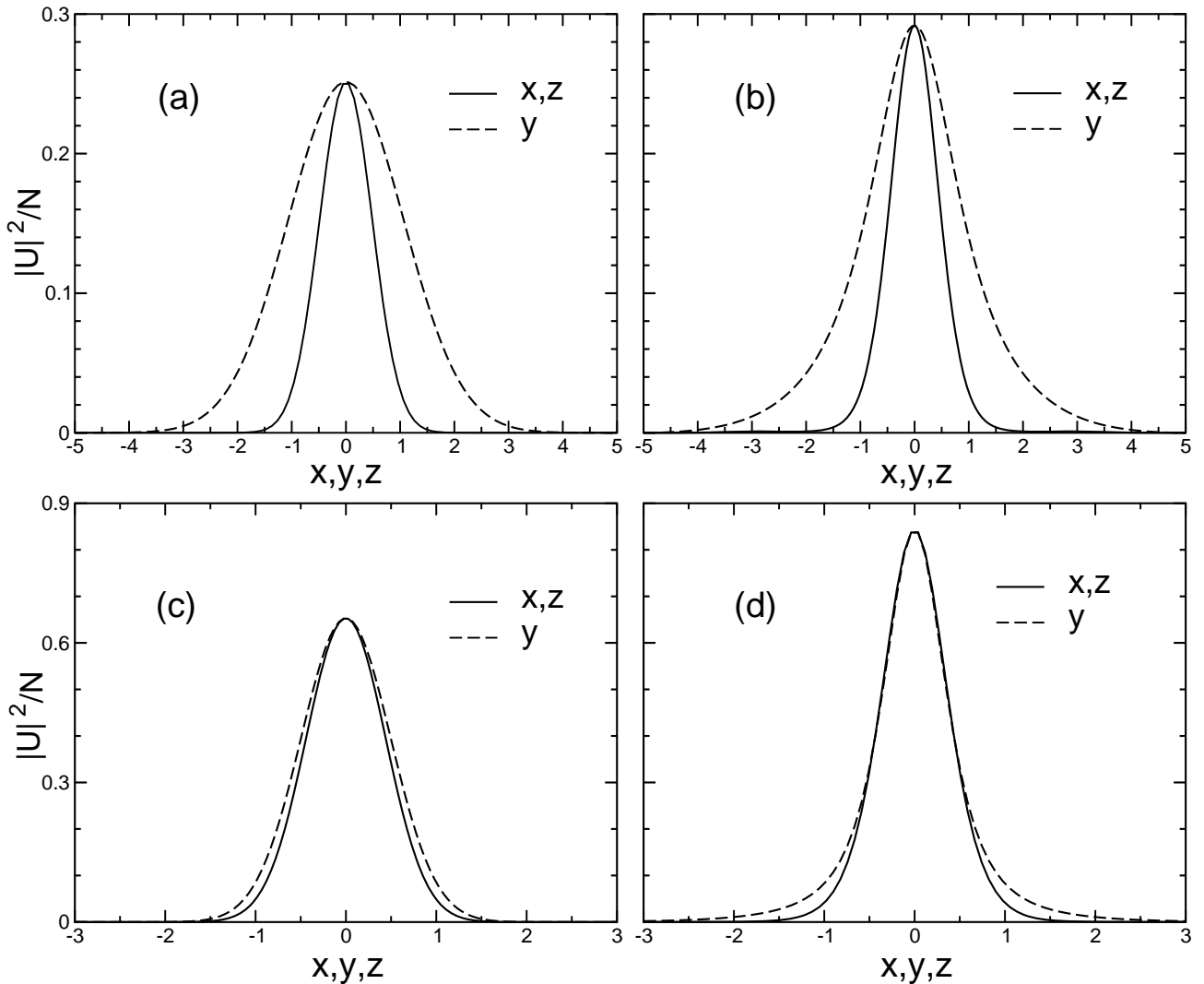
Nas figuras 4.6 e 4.7 estão os resultados da integração direta no tempo da GPE para os pontos  $\mu = -2,5$  e  $\mu = -3,5$ , respectivamente, presentes na curva numérica da figura 4.4 próximos ao limite entre as regiões de estabilidade/instabilidade conforme o critério VK. Essas simulações confirmam a estabilidade (instabilidade) da solução no ponto  $\mu = -2,5$  ( $\mu = -3,5$ ). Na figura 4.7, é possível ver que logo no início da propagação no tempo,



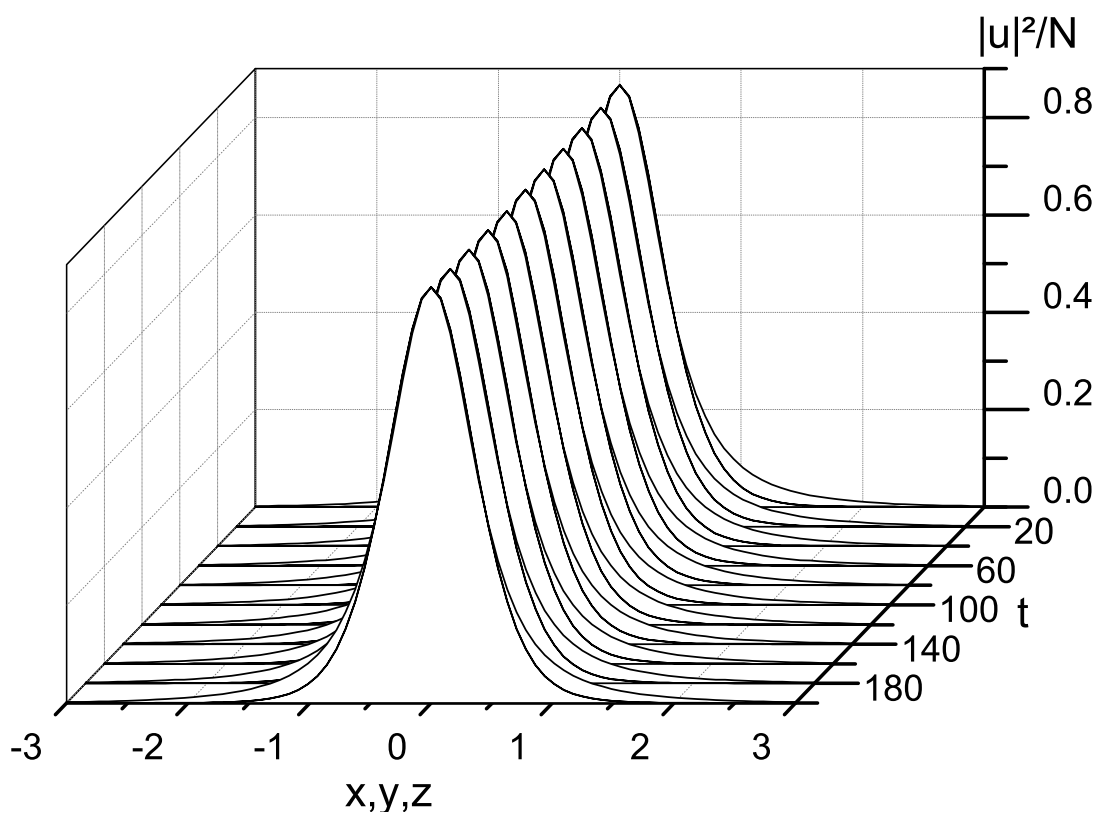
**Figura 4.3:** Resultados VA (linhas sólidas) do potencial químico  $\mu$  em função do número de átomos  $N$ , para sólitons 3D em uma combinação cruzada de uma LOL 2D e uma NOL 1D. Fixando  $\varepsilon = 3$  e a interação atrativa  $\chi = 1$ , variando a força da NOL, tendo, da esquerda para direita,  $\gamma = 3.0, 2.5, 2.0, 1.5, 1.0, 0.7, 0.5$ , respectivamente. A linha pontilhada representa os resultados numéricos PDE para  $\gamma = 0.5$  (os demais parâmetros permanecem idênticos ao caso VA).



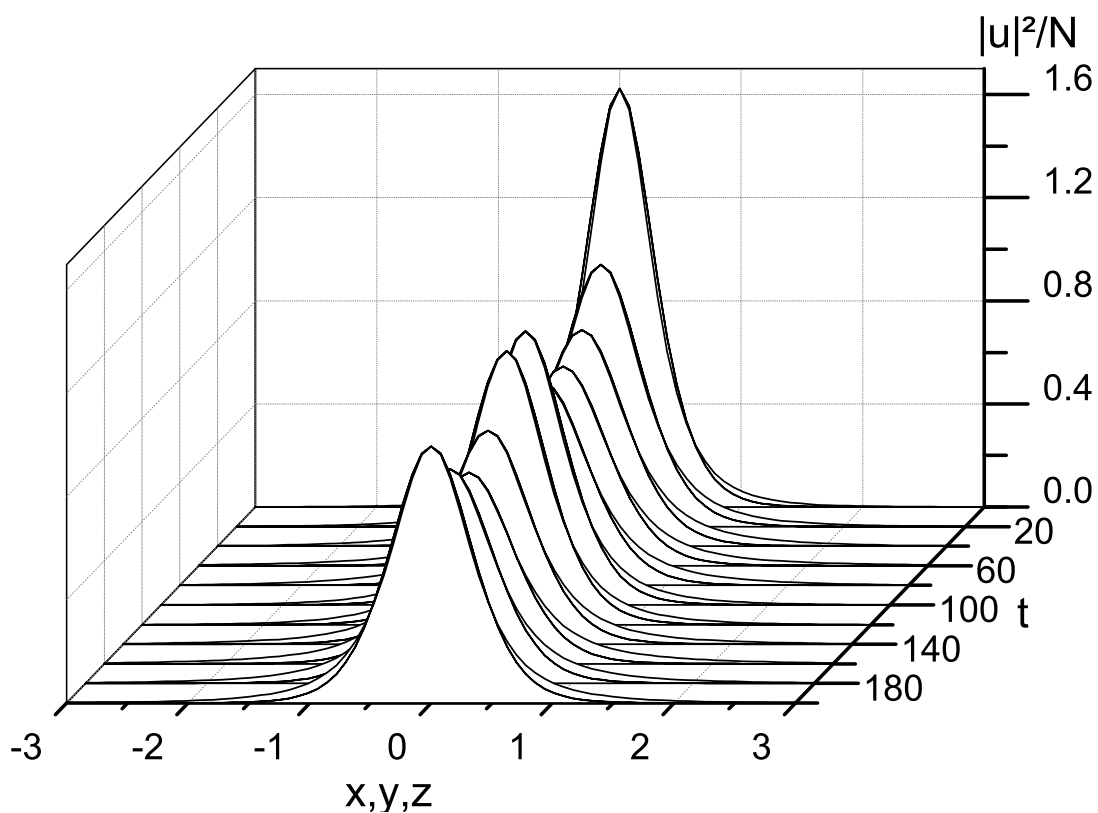
**Figura 4.4:** Resultados VA (linhas sólidas) do potencial químico  $\mu$  em função do número de átomos  $N$ , para sólitons 3D em uma combinação cruzada de uma LOL 2D e uma NOL 1D. Fixando  $\varepsilon = 3$  e  $\gamma = 0.5$ , variando a não-linearidade média repulsiva das interações, tendo, da esquerda para direita,  $\chi = 0.0, -0.1, -0.2, -0.25, -0.3$ , respectivamente. A linha pontilhada representa os resultados numéricos PDE para  $\chi = -0.2$  (os demais parâmetros permanecem idênticos ao caso VA).



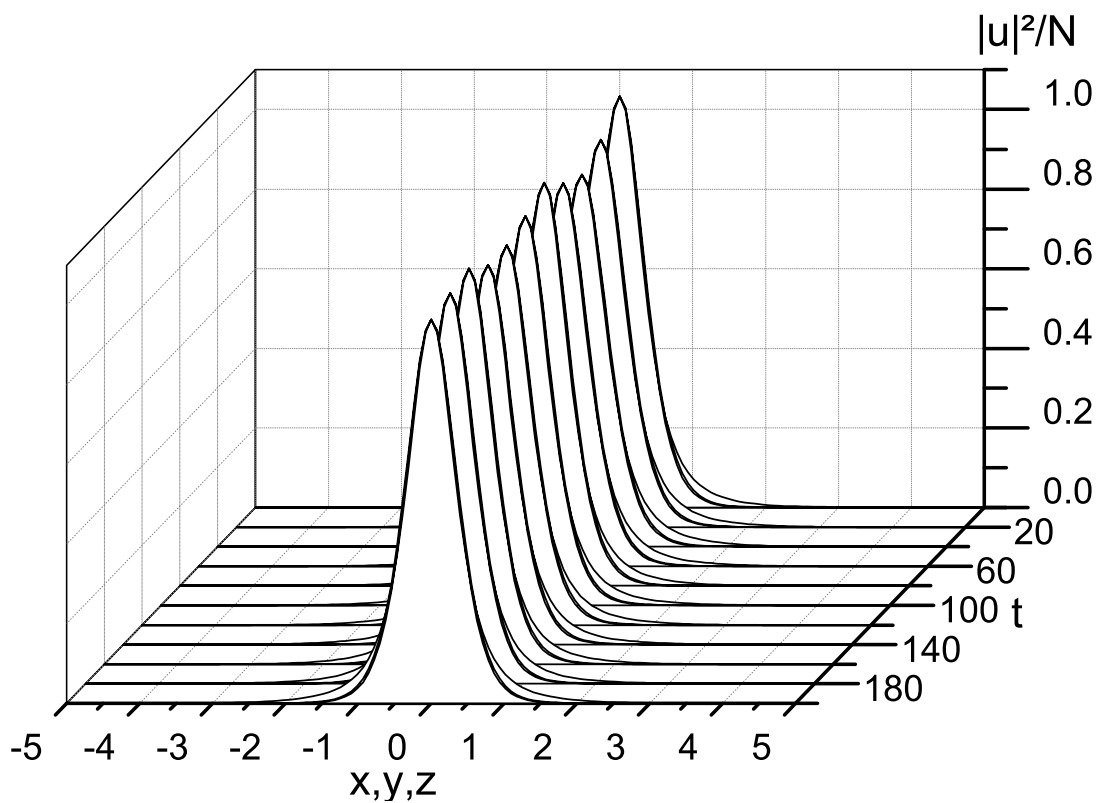
**Figura 4.5:** Quadros superiores: Seções do perfil do sóliton em função de uma das dimensões (com as outras duas centradas em zero) do cálculo VA [quadro (a)] e das simulações de PDE [quadro (b)], para não-linearidade média atrativa  $\chi = 1$ . A NOL é definida pelo  $\gamma = 0,5$ . Os parâmetros para os perfis VA são  $a = c = 2,11$ ,  $b = 0,44$ , que correspondem ao  $N = 6,5$  e  $\mu = -2,07$ . Os valores de  $N$ ,  $\mu$  para os perfis PDE são  $N = 5,84$ ,  $\mu = -2,07$ . Os demais parâmetros são idênticos aos das figuras 4.3 e 4.4. Quadros inferiores: Idem aos quadros superiores, mas para uma não-linearidade média repulsiva com  $\chi = -0,2$ . Os parâmetros dos perfis VA [quadro (c)] são  $a = c = 2,589$ ,  $b = 2,035$ , correspondente ao  $\mu = -2,5$ . Os valores de  $N$  e  $\mu$  para os perfis PDE [quadro (d)] são  $N = 40$  e  $\mu = -2,5$ .



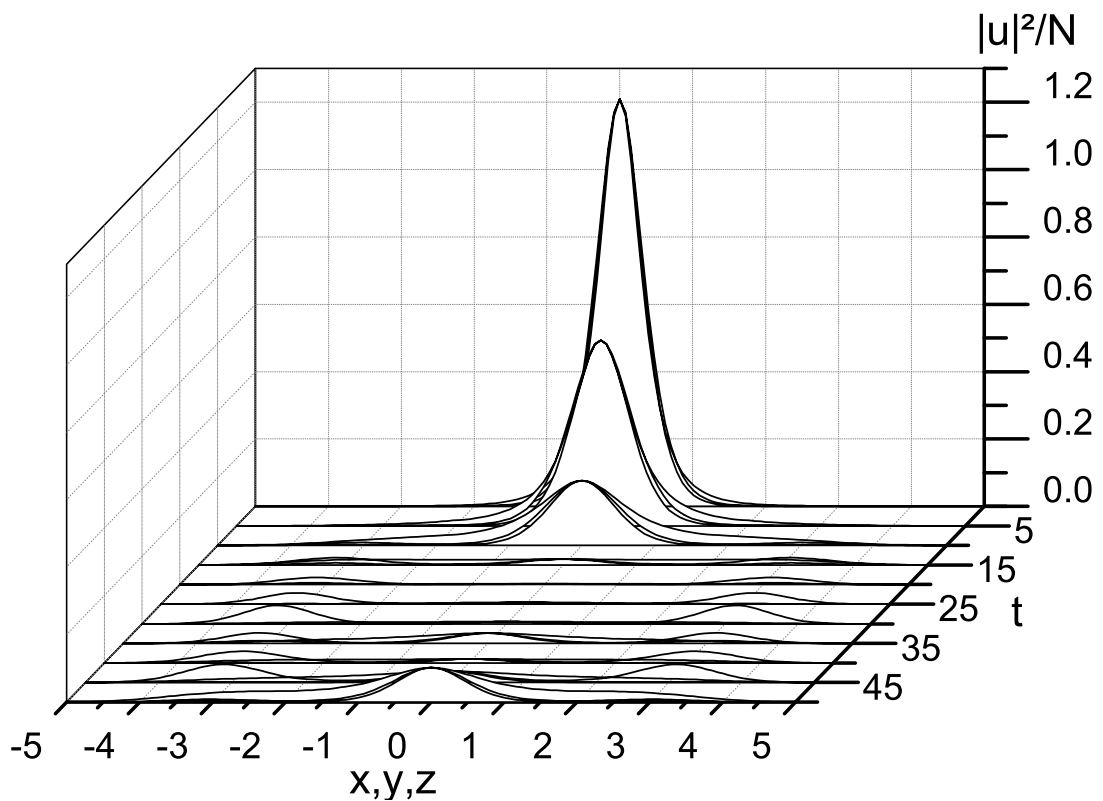
**Figura 4.6:** A dinâmica de um sóliton presente na região de estabilidade na figura 4.4 (caso repulsivo), com  $\mu = -2,5$ , demonstra a estabilidade do mesmo. Temos  $\varepsilon = 3,0$ ,  $\gamma = 0,5$  e  $\chi = -0,2$ . O perfil na direção  $y$  é ligeiramente mais aberto e os resultados estão em unidades adimensionais.



**Figura 4.7:** A dinâmica de um sóliton presente na região de instabilidade na figura 4.4 (caso repulsivo), com  $\mu = -3,5$ , demonstra a instabilidade do mesmo. Temos  $\varepsilon=3,0$ ,  $\gamma = 0,5$  e  $\chi = -0,2$ . O perfil na direção  $y$  é ligeiramente mais aberto e os resultados estão em unidades adimensionais.



**Figura 4.8:** Perda de estabilidade devido à redução da amplitude de uma das LOLs (na direção  $z$ ), de  $\varepsilon_z = 3,0$  (resultado da figura 4.6) para  $\varepsilon_z = 2,5$ . Temos  $\varepsilon_x = 3,0$ ,  $\mu = -2,5$ ,  $\gamma = 0,5$  e  $\chi = -0,2$ . O perfil na direção  $y$  é ligeiramente mais aberto e os resultados estão em unidades adimensionais.



**Figura 4.9:** Perda de estabilidade acentuada em um curto espaço de tempo conforme ampliada a redução da amplitude na LOL da direção  $z$ , de  $\varepsilon_z = 2,5$  (resultado da figura 4.8) para  $\varepsilon_z = 2,0$ . Continuamos com  $\varepsilon_x = 3,0$ ,  $\mu = -2,5$ ,  $\gamma = 0,5$  e  $\chi = -0,2$ . O perfil na direção  $y$  é ligeiramente mais aberto e os resultados estão em unidades adimensionais.



a função de onda começa a oscilar fortemente, ao contrário do que ocorre na solução estável da figura 4.6, que permanece constante mesmo para grandes valores de tempo. Nessas figuras, cada perfil de sóliton dado a um tempo específico nada mais é que uma superposição dos perfis em cada uma das três direções centradas na origem (por exemplo, direção  $x$  onde  $y = z = 0$ ). Os perfis nas direções  $x$  e  $z$  (onde atuam as LOLs), como esperado, são idênticos. Já o perfil na direção  $y$  (afetado pela NOL) é ligeiramente mais amplo (é possível constatar isso ao observar os perfis próximos à posição  $\pm 1,5$ ). Temos  $\varepsilon = 3,0$ ,  $\gamma = 0,5$  e uma não-linearidade média repulsiva  $\chi = -0,2$ . Todos os dados estão em unidade adimensionais.

Agora, nas figuras 4.8 e 4.9, é possível verificar a importância de uma segunda LOL (no caso, a da direção  $z$ ) para obter a estabilidade do sóliton 3D, para isso elas possuem os mesmos parâmetros da figura 4.6, à exceção da amplitude da LOL na direção  $z$ , que foi reduzida de  $\varepsilon_z = 3,0$  para  $\varepsilon_z = 2,5$  na figura 4.8 e para  $\varepsilon_z = 2,0$  na figura 4.9. Como pode ser visto a estabilidade começa a desaparecer com  $\varepsilon_z = 2,5$ , mas some completamente  $\varepsilon_z = 2,0$ . Demostramos assim, no caso  $\varepsilon_x = \varepsilon_z = 3,0$  descrito na figura 4.4 (potilhado), que diminuir a amplitude de apenas uma das LOLs é o suficiente para eliminar a estabilidade. Por outro lado, mesmo para casos mais estáveis, se eliminarmos uma das LOLs completamente ( $\varepsilon_z = 0$ ) não é obtida estabilidade pelas simulações numéricas exatas.



# Capítulo 5

## Conclusões

Este trabalho consistiu no estudo da dinâmica e estabilidade de sólitons de onda de matéria em condensados de Bose-Einstein sujeitos a diferentes combinações de redes ópticas, lineares e não-lineares, por meio de duas abordagens distintas: uma analítica, através de uma abordagem variacional, e por integração direta da equação de Gross-Pitaevskii. A estabilidade das soluções foi verificada usando o critério de Vakhitov-Kolokolov e por meio da análise dinâmica direta, com a evolução temporal numérica dos perfis dos sólitons. No geral, obtivemos uma boa concordância entre os resultados obtidos com a abordagem variacional e os cálculos diretos (resolução numérica exata) das equações diferenciais parciais associadas aos problemas.

A utilização de redes ópticas na análise de sólitons de onda de matéria é justificada pela utilização da modulação periódica do comprimento de espalhamento por meio da técnica de ressonância de Feshbach, conforme brevemente discutido no capítulo 2. Em cada caso estudado, derivamos as curvas de existência para as soluções no espaço de parâmetros utilizando uma abordagem variacional, comparando os resultados da nossa análise com resultados numéricos completos. Estes resultados abrem a possibilidade de observar ondas de matéria localizadas na presença de uma combinação de redes ópticas lineares e não-lineares cruzadas em um experimento real, utilizando, por exemplo, a técnica aplicada em [77].

No que concerne à abordagem variacional (VA) e o critério de estabilidade (critério VK), nos estudos puramente numéricos em geral e nesse em específico, cabe ressaltar que frequentemente nos deparamos com situações em que, embora seja possível obter soluções numéricas de problemas físicos, não é possível dizer com certeza, em um estágio inicial do trabalho ao menos, se estas soluções são reais ou puramente matemáticas (ou mesmo erros de cálculo!), ou seja, se é possível obter empiricamente tais resultados. Para tanto, é

necessário a contínua análise de observáveis e contraprovas numéricas para auxiliar nessa tarefa. Nesse sentido o critério VK, em conjunto com a abordagem variacional, embora para alguns casos ele não possa ser considerado uma condição necessária e suficiente, ele pode balizar muito bem a obtenção de soluções numéricas exatas, que em última instância, tem a primazia sobre os métodos aproximados. Quando encontramos, com a ajuda da VA e do critério VK, soluções estáveis, e portanto, possíveis experimentalmente, a análise variacional já demonstrou seu valor.

Concluindo, este trabalho começou como uma continuação do trabalho de mestrado publicado em 2007 [31], onde estudamos sólitons 2D em BECs sujeitos a uma rede óptica não-linear 1D em uma das direções, com a outra direção livre de potenciais, e concluímos que era necessária a adição de uma armadilha harmônica, mesmo que pequena, para obter resultados estáveis em tal sistema. Com esse resultado em mente, propomos adicionar uma rede óptica linear no lugar do potencial harmônico, formando assim uma rede óptica 2D cruzada (linear e não-linear), e confirmar se a estabilidade de sólitons 2D de onda de matéria continuava a existir, e em caso afirmativo, se essa rede óptica 2D seria suficiente para manter a estabilidade de um sistema de BECs 3D. Devido à alta complexidade técnica em obter resultados numéricos confiáveis, principalmente para 3D (embora os códigos utilizados sejam relativamente simples), acabamos por dividir o trabalho em duas partes distintas, que neste texto são representados pelos capítulos 3 e 4.

No capítulo 3, demonstramos que é possível a estabilização de sólitons 2D em BECs ao combinar-se uma rede óptica não-linear (NOL) na direção  $x$  com uma rede óptica linear (LOL) na direção  $y$ . Em particular, demonstramos que uma família de sólitons 2D, em uma combinação de redes linear e não-linear cruzadas, pode existir e é estável tanto no caso de uma interação média positiva quanto negativa. Os resultados deste trabalho foram publicados na referência [1].

No capítulo 4 do presente trabalho, investigamos a existência de sólitons 3D estáveis em redes ópticas cruzadas, sendo uma LOL e uma NOL ao longo das direções  $x$  e  $y$ , respectivamente, com a direção  $z$  sem restrições (caso quase-2D) ou com outra LOL nesta direção (caso inteiramente 3D). Foi demonstrada uma boa concordância entre os resultados obtidos com a VA e os cálculos diretos da PDE. Em particular, a concordância é maior para o caso inteiramente 3D, quando as forças das LOLs são suficientemente relevantes. Resumidamente, como principal resultado de nossa análise, demonstramos que, enquanto no caso quase-2D os sólitons 3D são sempre instáveis, no caso inteiramente 3D as famílias de sólitons 3D podem existir e são estáveis para interações tanto atrativas quanto repulsivas. Pensando em aplicações potenciais, devemos lembrar que, além de proporcionar

uma forma alternativa de criar sólitons estáveis em três dimensões, com redes ópticas lineares e não-lineares cruzadas (tanto em condensados de Bose-Einstein quanto em óptica não-linear), estes resultados também podem ser úteis em aplicações, abrindo a possibilidade de manipular sólitons 3D estáveis, através de modulações espaciais do comprimento de espalhamento variáveis no tempo, em uma das direções da rede óptica. Os resultados deste trabalho foram publicados na referência [2].

## Perspectivas

O estudo de sólitons de onda de matéria é um campo onde existem várias possibilidades de se aplicar os mesmos códigos computacionais utilizados neste trabalho, com pouca necessidade de adaptação, aplicando em diferentes tipos de problemas. Uma possibilidade é a de estender o estudo atual, adicionando mais sólitons à rede utilizada e estudando sua interação, com ou sem a presença de um momento inicial nos mesmos.

Outra possibilidade que vem recentemente atraindo a atenção é o estudo de BEC dipolares, onde o potencial dipolar de longo alcance tenha uma anisotropia na sua interação, adicionando, ao potencial efetivo do sistema, um termo de interação não-local modulado espacialmente pela variação nos ângulos entre os dipolos, o que pode ser feito experimentalmente, por exemplo, pela variação espacial do campo magnético externo.



# Apêndice A

## Equação de Gross-Pitaevskii

### A.1 Introdução

Neste capítulo, vamos apresentar a dedução das equações de Gross-Pitaevskii independente e dependente do tempo. O desenvolvimento deste capítulo é baseado nas notas de aula de Cohen-Tannoudji [87].

Vamos considerando  $N$  bósons idênticos confinados em um potencial externo  $V_{ext}(\vec{r})$ , em equilíbrio à temperatura  $T = 0$  K. Caso não aja interação, todos os bósons ocupam o mesmo estado fundamental do potencial. Porém, na presença de interação, a estrutura do condensado é modificada. Primeiro vamos calcular o estado fundamental do hamiltoniano  $H$ :

$$H = \sum_{i=1}^N \left[ \frac{\vec{P}_i^2}{2m} + V_{ext}(\vec{r}_i) \right] + \frac{1}{2} \sum_i \sum_{j \neq i} V(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|), \quad (\text{A.1})$$

o último termo de A.1 representa interação entre partículas. O fator  $1/2$  é adicionado para evitar a contagem dupla da interação entre as partículas  $i$  e  $j$ .

Obter a solução exata do estado fundamental de A.1 nem sempre é possível. Então, faremos uma aproximação da tentativa de obter um estado fundamental, considerando uma família variacional de estados, minimizando  $\langle \psi | H | \psi \rangle / \langle \psi | \psi \rangle$  no interior dessa família.

Considerando o estado

$$|\psi\rangle = |\varphi(1)\rangle |\varphi(2)\rangle \dots |\varphi(i)\rangle \dots |\varphi(N)\rangle, \quad (\text{A.2})$$

correspondente a uma situação onde todos os bósons ocupam o mesmo estado  $|\varphi\rangle$ . O ket A.2 é completamente simétrico e pode ser usado para descrever bósons idênticos.

Considerando agora o subespaço formado pelos estados A.2 correspondentes a todos os  $|\varphi\rangle$  possíveis. Dentro desse subespaço, o estado que se aproxima melhor do estado fundamental  $H$  é obtido através do  $|\varphi\rangle$  que minimiza a quantidade

$$E[\varphi] = \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}, \quad (\text{A.3})$$

$E[\varphi]$  é um funcional de  $\varphi$  que, a cada  $\varphi$ , assume um número  $E[\varphi]$ .

O estado A.2 é um produto tensorial e não pode descrever as correlações entre todas partículas. Porém, a equação obtida para  $\varphi$  que minimiza A.3 descreverá o movimento de cada partícula dentro do campo-médio das  $N - 1$  outras.

## A.2 Equação de Gross-Pitaevskii independente do tempo

### A.2.1 Cálculo de $\langle \psi | H | \psi \rangle$

*Contribuição dos termos de energia cinética e de energia de confinamento.*

$$N \int d^3r \left[ \varphi^*(\vec{r}) \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \right) \Delta \varphi(\vec{r}) + \varphi^*(\vec{r}) V_{ext}(\vec{r}) \varphi(\vec{r}) \right]. \quad (\text{A.4})$$

Escrevendo que a integral de  $\vec{\nabla} \cdot [\varphi^* \vec{\nabla} \varphi] = \varphi^* \Delta \varphi + (\vec{\nabla} \varphi)^2$  é nula se  $\varphi$  se anula no infinito (teorema da divergência), podemos transformar o primeiro termo de A.4 em

$$N \int d^3r \frac{\hbar^2}{2m} \left[ \vec{\nabla} \varphi(\vec{r}) \right]^2. \quad (\text{A.5})$$

*Contribuição do termo de interação.*

$$\frac{N(N-1)}{2} \iint d^3r d^3r' \varphi^*(\vec{r}) \varphi^*(\vec{r}') V(|\vec{r} - \vec{r}'|) \varphi(\vec{r}) \varphi(\vec{r}'). \quad (\text{A.6})$$

### A.2.2 Equações variacionais

Ao invés de minimizar A.3, é mais fácil minimizar o  $\langle \psi | H | \psi \rangle$  com a restrição  $\langle \psi | \psi \rangle = 1$ . Utilizando os multiplicadores de Lagrange obtemos a relação

$$\delta \langle \psi | H | \psi \rangle - \lambda \delta \langle \psi | \psi \rangle = 0. \quad (\text{A.7})$$



Os cálculos de  $\delta \langle \psi | H | \psi \rangle$  e  $\delta \langle \psi | \psi \rangle$  envolvem integrais contendo  $\delta\varphi$  e  $\delta\varphi^*$ . Como podemos variar independentemente  $\text{Re}(\delta\varphi)$  e  $\text{Im}(\delta\varphi)$ , é possível considerar  $\delta\varphi$  e  $\delta\varphi^*$  como variações independentes. A equação A.7 se torna

$$N \int d^3r \delta\varphi^*(\vec{r}) \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta\varphi(\vec{r}) + V_{ext}(\vec{r})\varphi(\vec{r}) + \right. \\ \left. + (N-1) \left[ \int d^3r' V(|\vec{r} - \vec{r}'|) |\varphi(\vec{r}')|^2 \right] \varphi(\vec{r}) - \lambda\varphi(\vec{r}) \right\} + \text{c.c.} = 0. \quad (\text{A.8})$$

Note que o fator  $1/2$  que apareceu em A.6 sumiu do termo de  $V(|\vec{r} - \vec{r}'|)$  de A.8. Há de fato dois  $\varphi^*$  em A.6. A variação de  $\varphi^*$  resulta, portanto, em dois termos que se revelam iguais por permutação das variáveis mudas  $\vec{r}$  e  $\vec{r}'$ .

Como  $\delta\varphi^*$  pode ser qualquer, a solução de A.7 deve ser escrita

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta\varphi(\vec{r}) + V_{ext}(\vec{r})\varphi(\vec{r}) + (N-1) \left[ \int d^3r' V(\vec{r} - \vec{r}') |\varphi(\vec{r}')|^2 \right] \varphi(\vec{r}) = \lambda\varphi(\vec{r}). \quad (\text{A.9})$$

O último termo do membro da esquerda representa o potencial médio exercido sobre uma partícula pelas  $(N-1)$  outras. A equação A.9 tem a estrutura de uma equação de Schrödinger, cada partícula de massa  $m$  evolui dentro da soma do potencial exterior e do potencial médio criado pelas outras.

Se  $N \gg 1$ , podemos substituir  $N-1$  por  $N$  em A.9.

Com normalização

$$\langle \psi | \psi \rangle = 1 \quad \longrightarrow \quad \langle \varphi | \varphi \rangle = 1. \quad (\text{A.10})$$

O método variacional utilizado aqui ignora as correlações de curta distância entre átomos. Como se supõem um gás diluído, os átomos estão na maior parte do tempo longe uns dos outros e portanto é o comportamento assintótico da função de onda que é importante para descrever suas interações. Podemos utilizar  $V_{pseudo}$  no lugar de  $V(r)$ , quando  $kr_e \ll 1$ , sendo  $r_e$  o alcance efetivo do potencial.

O elemento de matriz de  $V$  que intervém aqui é escrito em A.6. Substituindo  $V$  por  $V_{pseudo}$  dentro desse elemento de matriz, as funções de onda  $\varphi(\vec{r})$  não possuirão nenhuma singularidades de  $\varphi(\vec{r})\varphi(\vec{r}')$  em  $\vec{r}=\vec{r}'$ . Os elementos de matriz A.6 de  $V_{pseudo}$  são iguais aqueles de  $V_\delta$ , i.e.

$$V_\delta = g\delta(\vec{r} - \vec{r}') = \frac{4\pi\hbar^2}{m} a \delta(\vec{r} - \vec{r}'). \quad (\text{A.11})$$

Se substituirmos A.11 dentro de A.9, e supondo  $N \gg 1$ , obtemos

$$\left\{ \begin{array}{l} -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \varphi(\vec{r}) + V_{ext}(\vec{r}) \varphi(\vec{r}) + Ng |\varphi(\vec{r})|^2 \varphi(\vec{r}) = \lambda \varphi(\vec{r}) \\ \int d^3r |\varphi(\vec{r})|^2 = 1 \end{array} \right. \quad (\text{A.12})$$

$$\int d^3r |\varphi(\vec{r})|^2 = 1 \quad (\text{A.13})$$

Podemos escolher para  $\varphi(\vec{r})$  uma normalização diferente de A.13:

$$\int d^3r |\varphi(\vec{r})|^2 = N, \quad (\text{A.14})$$

onde  $|\varphi(\vec{r})|^2$  representa então a densidade de partículas  $n(\vec{r})$  no ponto  $\vec{r}$ .

$$|\varphi(\vec{r})|^2 = n(\vec{r}). \quad (\text{A.15})$$

A equação A.12 torna-se (se  $N \gg 1$ )

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \varphi(\vec{r}) + V_{ext}(\vec{r}) \varphi(\vec{r}) + gn(\vec{r}) \varphi(\vec{r}) = \lambda \varphi(\vec{r}). \quad (\text{A.16})$$

### A.2.3 O multiplicador de Lagrange $\lambda$

Se escolhermos a normalização A.13,  $\langle \psi | \psi \rangle = 1$ , e o funcional  $E[\varphi]$  escrito em A.3, que representa o valor médio de  $H$ , é descrito, tendo em vista as equações A.4 e A.6 (onde  $V$  é substituído por  $V_\delta$ ), como

$$\begin{aligned} E[\varphi] &= N \int d^3r \left[ \varphi^*(\vec{r}) \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \right) \Delta \varphi(\vec{r}) + \varphi^*(\vec{r}) V_{ext}(\vec{r}) \varphi(\vec{r}) \right] + \\ &+ \frac{N(N-1)}{2} g \int d^3r |\varphi(\vec{r})|^4. \end{aligned} \quad (\text{A.17})$$

Neste caso,  $E[\varphi]$  depende de  $N$ , explicitamente pelos coeficientes  $N$  e  $\frac{N(N-1)}{2}$  que aparecem em A.17, implicitamente através de  $\varphi$ , já que pela equação A.12  $\varphi$  também

dependente de  $N$ . Deduzimos

$$\begin{aligned} \frac{\partial E[\varphi]}{\partial N} &= \int d^3r \left[ \varphi^*(\vec{r}) \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \right) \Delta\varphi(\vec{r}) + \varphi^*(\vec{r}) V_{ext}(\vec{r}) \varphi(\vec{r}) \right] + \\ &+ \left( N - \frac{1}{2} \right) g \int d^3r |\varphi(\vec{r})|^4 + \\ &+ \frac{\delta E}{\delta\varphi} \frac{\partial\varphi}{\partial N}. \end{aligned} \quad (\text{A.18})$$

Na última linha de A.18,  $\partial\varphi/\partial N$  é a variação  $\delta\varphi$  de  $\varphi$  quando fazemos  $N$  variar de uma unidade. A derivada funcional de  $\delta E/\delta\varphi$  é a variação de  $E[\varphi]$  quando fazemos  $\varphi$  variar de  $\delta\varphi$ . Mas  $\varphi$  é obtido precisamente quando escrevemos que  $E[\varphi]$  é estacionário, portanto, variação  $\delta\varphi$  de  $\varphi$ . Nós temos então, para a solução de  $\varphi$  de A.12,  $\delta E/\delta\varphi = 0$ , e a terceira linha de A.18 acaba se anulando.

Por outro lado, multiplicando os dois membros de A.12 por  $\varphi^*(\vec{r})$  e integrando sobre  $\vec{r}$ , obtemos, como dado em A.13

$$\lambda = \int d^3r \left[ \varphi^*(\vec{r}) \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \right) \Delta\varphi(\vec{r}) + \varphi^*(\vec{r}) V_{ext}(\vec{r}) \varphi(\vec{r}) + (N - 1) g |\varphi(\vec{r})|^4 \right]. \quad (\text{A.19})$$

Comparando A.19 a A.18 (onde a terceira linha é substituída por 0), constatamos que  $\lambda = \partial E[\varphi]/\partial N$ , no limite  $N \gg 1$  onde  $N - 1/2 \simeq N - 1 \simeq N$ .

O multiplicador  $\lambda$  dá a variação da energia média do sistema quando nós adicionamos uma partícula. Como essa transformação se faz à entropia  $S$  constante (nconsiderando  $T=0$  de modo que  $S=0$ ),  $\partial E[\varphi]/\partial N$  não é outro senão o potencial químico  $\mu$ .

$$\lambda = \frac{\partial E[\varphi]}{\partial N} = \text{Potencial químico } \mu. \quad (\text{A.20})$$

Substituindo  $\lambda$  por  $\mu$  dentro de A.12 ou A.16, obtemos a equação de Gross-Pitaevskii.

### A.3 Estabelecimento de uma relação geral

Os três termos que aparecem em A.17 correspondem respectivamente à energia cinética, energia de confinamento e energia de interação.

*Energia Cinética* ( $E_{cin}$ )

$$E_{cin} = N \int d^3r \varphi^*(\vec{r}) \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \right) \Delta\varphi(\vec{r}) = N \frac{\hbar^2}{2m} \int d^3r \left| \vec{\nabla}\varphi(\vec{r}) \right|^2. \quad (\text{A.21})$$

usando o mesmo princípio utilizado em A.5.

Geralmente  $\varphi(\vec{r})$  é uma função real. A normalização A.13 fica  $\varphi^2(\vec{r}) = \frac{1}{N}n(\vec{r})$  onde  $n(\vec{r})$  é a densidade de partículas em  $\vec{r}$  diremos agora que  $\varphi(\vec{r}) = \sqrt{n(\vec{r})}/N$ . Então temos

$$E_{cin} = \frac{\hbar^2}{2m} \int d^3r \left( \vec{\nabla} \sqrt{n(\vec{r})} \right)^2. \quad (\text{A.22})$$

Esse termo, proporcional à  $\hbar^2$ , é chamado às vezes de “pressão quântica”, já que ele representa a energia cinética de confinamento.

*Energia de confinamento ( $E_{conf}$ )*

$$E_{conf} = N \int d^3r |\varphi(\vec{r})|^2 V_{ext}(\vec{r}) = \int d^3r n(\vec{r}) V_{ext}(\vec{r}). \quad (\text{A.23})$$

para  $n(\vec{r}) = N|\varphi(\vec{r})|^2$ .

*Energia de interação ( $E_{int}$ )*

$$E_{int} = \frac{N(N-1)}{2} g \int d^3r |\varphi(\vec{r})|^4 \simeq \frac{N^2}{2} g \int d^3r |\varphi(\vec{r})|^4 = \frac{1}{2} g \int d^3r n^2(\vec{r}). \quad (\text{A.24})$$

### A.3.1 Expressão do potencial químico

Substituindo em A.19,  $\lambda$  por  $\mu$  e  $N-1$  por  $N$ , e utilizando as contribuições das energias dadas por A.21, A.23 e A.24, obtemos

$$\mu = \frac{1}{N} (E_{cin} + E_{conf} + 2E_{int}), \quad (\text{A.25})$$

Com energia total  $E$

$$E = E_{cin} + E_{conf} + E_{int}. \quad (\text{A.26})$$

Observe o fator **2** que aparece com  $E_{int}$  em A.25, embora não apareça junto de  $E_{int}$  em A.26. Em um sistema de  $N$  bósons, temos  $N(N-1)/2$  pares distintos de partículas sendo esperado que  $E_{int}$  dentro de A.24 contenha um fator  $N(N-1)/2$  na frente da energia de interação por pares.

Supondo que quiséssemos adicionar uma nova partícula nesse sistema de  $N$  pré-existentes, deveremos fornecer uma energia igual a  $N$  vezes a energia de interação por pares. Se  $E_{int}$  é energia de interação por par, é esperado que em  $E$  exista um termo  $E_{int}N(N-1)/2 \simeq N^2 E_{int}/2$ , de onde o fator 2 de diferença vêm.

### A.3.2 Teorema do virial para um potencial harmônico

Consideraremos uma transformação que consiste em dilatar  $\varphi$  ao longo de cada eixo,  $0_x, 0_y, 0_z$ , depois calcular as variações de  $E_{cin}, E_{conf}, E_{int}$  durante essa transformação. Em seguida, faremos uma transformação infinitesimal e, levando em conta que  $E[\varphi]$  não muda durante essa transformação (já que  $E[\varphi]$  é estacionário), deduziremos uma nova relação entre  $E_{cin}, E_{conf}$  e  $E_{int}$ .

À função  $\varphi(x, y, z)$  solução da equação Gross-Pitaevskii, se associa uma outra função  $\tilde{\varphi}(x, y, z)$

$$\varphi(x, y, z) \rightarrow \tilde{\varphi}(x, y, z) = (1 + \nu)^{1/2} \varphi[(1 + \nu)x, y, z], \quad (\text{A.27})$$

onde  $\nu$  é um número real. A transformação A.27 é uma dilatação infinitesimal ao longo de  $0_x$ . Notar que se  $\varphi(x, y, z)$  é normalizado, o mesmo ocorrerá para  $\tilde{\varphi}(x, y, z)$ . De fato,

$$\begin{aligned} \int dx dy dz |\tilde{\varphi}(x, y, z)|^2 &= (1 + \nu) \int dx dy dz |\varphi[(1 + \nu)x, y, z]|^2 \\ &= (1 + \nu) \frac{1}{1 + \nu} \int dx' dy dz |\varphi(x', y, z)|^2 = 1. \end{aligned} \quad (\text{A.28})$$

Calculando o novo valor de  $\tilde{E}_{cin}$  de  $E_{cin}$  em  $\tilde{\varphi}$  apenas a componente  $\tilde{E}_{cin}^x$  de  $\tilde{E}_{cin}$  ao longo de  $0_x$  muda.

$$\frac{\partial \tilde{\varphi}}{\partial x} = (1 + \nu)^{1/2} \frac{\partial \varphi[(1 + \nu)x, y, z]}{\partial x} = (1 + \nu)^{3/2} \frac{\partial \varphi(x', y, z)}{\partial x'}, \quad (\text{A.29})$$

onde escreveremos  $x' = x$ . Deduzimos

$$\begin{aligned} \tilde{E}_{cin}^x &= N \frac{\hbar^2}{2m} \int dx dy dz \left| \frac{\partial \tilde{\varphi}}{\partial x} \right|^2 = N \frac{\hbar^2}{2m} (1 + \nu)^3 \int dx dy dz \left| \frac{\partial \varphi(x', y, z)}{\partial x'} \right|^2 \\ &= N \frac{\hbar^2}{2m} (1 + \nu)^2 \int dx' dy dz \left| \frac{\partial \varphi(x', y, z)}{\partial x'} \right|^2 = (1 + \nu)^2 E_{cin}^x. \end{aligned} \quad (\text{A.30})$$

Supondo o potencial harmônico de confinamento

$$V_{ext}(x, y, z) = \frac{1}{2} m (\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2), \quad (\text{A.31})$$

a nova energia de confinamento ao longo de  $0_x$ ,  $\tilde{E}_{conf}^x$ , pode ser calculada em função da

anterior

$$\begin{aligned}
\tilde{E}_{conf}^x &= N \frac{m\omega_x^2}{2} \int dx dy dz \ x^2 |\tilde{\varphi}(x, y, z)|^2 \\
&= N \frac{m\omega_x^2}{2} (1 + \nu) \int dx dy dz \ x^2 |\varphi(x', y, z)|^2 \\
&= N \frac{m\omega_x^2}{2} (1 + \nu) \frac{1}{(1 + \nu)^3} \int dx' dy dz \ x'^2 |\varphi(x', y, z)|^2 \\
&= \frac{1}{(1 + \nu)^2} E_{conf}^x .
\end{aligned} \tag{A.32}$$

Enfim, para a nova energia de interação  $\tilde{E}_{int}$ , obtemos

$$\begin{aligned}
\tilde{E}_{int} &= \frac{N}{2} g \int dx dy dz \ |\tilde{\varphi}(x, y, z)|^4 \\
&= \frac{N}{2} g (1 + \nu)^2 \int dx dy dz \ |\varphi(x', y, z)|^2 \\
&= \frac{N}{2} g (1 + \nu)^2 \frac{1}{1 + \nu} \int dx' dy dz \ |\varphi(x', y, z)|^2 \\
&= (1 + \nu) E_{int} .
\end{aligned} \tag{A.33}$$

Reagrupando A.30, A.32 e A.33, obtemos

$$E[\tilde{\varphi}] - E[\varphi] = [(1 + \nu)^2 - 1] E_{cin}^x + \left[ \frac{1}{(1 + \nu)^2} - 1 \right] E_{conf}^x + [(1 + \nu) - 1] E_{int} . \tag{A.34}$$

Considerando então uma variação infinitesimal  $d\nu$  de  $\nu$  entorno de  $\nu=0$ , a equação A.34 torna-se a menor ordem em  $\delta\nu$

$$\delta E[\varphi] = E[\tilde{\varphi}] - E[\varphi] = d\nu [2E_{cin}^x - 2E_{conf}^x + E_{int}] . \tag{A.35}$$

Como  $E[\varphi]$  é estacionário entorno de  $\varphi$  e que  $\tilde{\varphi} - \varphi$  é infinitesimal se  $d\nu$  também o for, deduzimos que o coeficiente de  $d\nu$  deve ser nulo, dando

$$2E_{cin}^x - 2E_{conf}^x + E_{int} = 0 . \tag{A.36}$$

Podemos fazer as dilatações análogas ao longo de  $O_y$  e  $O_z$  e obter duas outras equações semelhantes à A.36,  $x$  sendo substituído por  $y$  e  $z$ . Somando essas três equações, obtemos finalmente

$$2E_{cin} - 2E_{conf} + 3E_{int} = 0 . \tag{A.37}$$

## A.4 Equação de Gross Pitaevskii dependente do tempo

Para o estudo de dinâmica em condensados de Bose-Einstein devemos utilizar a equação de Gross-Pitaevskii dependente do tempo, uma vez que a equação dependente do tempo só pode nos fornecer informações sobre o estado fundamental e sua energia. Utilizando o princípio de mínima ação, escrevemos o funcional de ação,  $S[\Psi]$  em função de  $N$  bósons, como

$$S[\Psi] = \int dt \int d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_N \Psi^* \left( i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \hat{H} \right) \Psi. \quad (\text{A.38})$$

Ou ainda para uma única partícula, temos

$$S[\phi] = \int_{t_1}^{t_2} dt \int d\mathbf{r} \mathcal{L}(\phi, \phi^*, \dot{\phi}, \dot{\phi}^*, \nabla\phi, \nabla\phi^*), \quad (\text{A.39})$$

onde  $\dot{\phi} = \partial\phi/\partial t$ . A função  $\phi \rightarrow 0$  para  $\mathbf{r} \rightarrow \infty$  ao integrarmos o Lagrangeano ( $\mathcal{L}$ ), e obedecendo ainda a relação  $\delta\phi(t_1, r) = \delta\phi(t_2, r)$  para qualquer ponto  $\mathbf{r}$  no espaço, chegamos à equação de Lagrange:

$$-\frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\phi}^*} + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi^*} - \nabla \cdot \left( \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \nabla \phi^*} \right) = 0, \quad (\text{A.40})$$

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

$$\mathcal{L} = i\frac{\hbar}{2}(\phi^* \dot{\phi} - \dot{\phi}^* \phi) - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla \phi^* \nabla \phi - \phi^* V_{ext}(\mathbf{r}, t) \phi. \quad (\text{A.41})$$

Substituindo a equação A.41 em A.40 temos as seguintes soluções para os termos da equação A.40:

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\phi}^*} = -i\frac{\hbar}{2}\phi, \quad (\text{A.42})$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi^*} = i\frac{\hbar}{2}\dot{\phi} - V_{ext}\phi, \quad (\text{A.43})$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \nabla \phi^*} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla \phi. \quad (\text{A.44})$$

Substituindo as soluções anteriores nos termos da equação A.40, obtemos a equação de Schrödinger:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \phi = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \phi + V_{ext} \phi. \quad (\text{A.45})$$

Para  $N$  partículas temos a seguinte equação de Lagrange:

$$-\frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\phi}^*} + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi^*} - \sum_{i=1}^N \nabla_{\mathbf{r}_i} \cdot \left( \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \nabla_{\mathbf{r}_i} \phi^*} \right) = 0, \quad (\text{A.46})$$

onde  $\mathbf{r}_i$  é a posição da  $i$ -ésima partícula com a integração sendo calculada por todas as posições das  $N$  partículas,  $\int d\mathbf{r}_1 \dots \mathbf{r}_N$ , para a função de muitos corpos  $\phi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, t)$ .

Já a Lagrangeana, para as  $N$  partículas sob um potencial externo  $V_{ext}$ , fica:

$$\begin{aligned} \mathcal{L} = & i\frac{\hbar}{2} (\phi^* \dot{\phi} - \dot{\phi}^* \phi) - \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^N \nabla_{\mathbf{r}_i} \phi^* \nabla_{\mathbf{r}_i} \phi \\ & - \sum_{i=1}^N \phi^* V_{ext}(\mathbf{r}_i, t) \phi - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i}^N \phi^* U(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \phi. \end{aligned} \quad (\text{A.47})$$

Novamente, substituindo a Lagrangeana A.47 na equação A.46, obtemos a equação de Schrödinger dependente do tempo para muitos corpos:

$$i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^N \nabla_{\mathbf{r}_i}^2 \phi + \sum_{i=1}^N V_{ext}(\mathbf{r}_i, t) \phi + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i}^N U(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \phi. \quad (\text{A.48})$$

Escolhendo agora “*ansatz*”  $\phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N, t) = \varphi(\mathbf{r}_1, t) \varphi(\mathbf{r}_2, t) \dots \varphi(\mathbf{r}_N, t)$ , temos:

$$\varphi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N, t) = \sum_{i=1}^N \varphi(\mathbf{r}_1, t) \dots \frac{\partial \varphi(\mathbf{r}_i, t)}{\partial t} \dots \varphi(\mathbf{r}_N, t). \quad (\text{A.49})$$

Agora é só multiplicar os dois lados da equação anterior por  $\int \prod_{j=1}^N d\mathbf{r}_j \phi^*(\mathbf{r}_j, t)$ . Usando a restrição  $\int d\mathbf{r}_j |\varphi^*(\mathbf{r}_j, t)|^2 = 1$  e substituindo o potencial  $U(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|)$  pelo potencial aproximado  $g\delta(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|)$ , com  $g = 4\pi\hbar^2 a/m$ , temos a ação total  $S[\phi]$  generalizada para  $N$  partículas:



$$S[\phi] = N \int_{t_1}^{t_2} dt \int d\mathbf{r} \left[ i\frac{\hbar}{2} \left( \phi^* \frac{\partial \phi}{\partial t} - \frac{\partial \phi^*}{\partial t} \phi \right) - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla \phi^*(\mathbf{r}, t) \nabla \phi(\mathbf{r}, t) - V_{ext}(\mathbf{r}, t) |\phi(\mathbf{r}, t)|^2 - \frac{1}{2} (N-1) g |\phi(\mathbf{r}, t)|^4 \right] \quad (\text{A.50})$$

Percebemos que essa ação de  $N$  partículas é representada por um conjunto de  $N$  ações de uma partícula, como é próprio da teoria de campo-médio. Considerando a ação  $S[\phi]$  e as equações de Lagrange anteriores obtemos a equação de Gross-Pitaevskii dependente do tempo:

$$i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \phi(\mathbf{r}, t) + V_{ext}(\mathbf{r}, t) \phi(\mathbf{r}, t) + Ng |\phi(\mathbf{r}, t)|^2 \phi(\mathbf{r}, t). \quad (\text{A.51})$$

Substituindo  $\Psi(\mathbf{r}, t) = \sqrt{N} \phi(\mathbf{r}, t)$ , obtemos finalmente:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{ext} + g |\Psi|^2 \right] \Psi. \quad (\text{A.52})$$



# Apêndice B

## Métodos Numéricos

Neste capítulo vamos explicitar os principais métodos numéricos utilizados durante este doutorado.

### B.1 Método de Crank-Nicolson

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

$$\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} = \sigma \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} . \quad (\text{B.1})$$

Vamos resolver a equação (B.1) para as condições de contorno e condição inicial:

$$u(x, 0) = \phi(x) \quad , \quad 0 \leq x \leq 1 ; \quad (\text{B.2})$$

$$u(0, t) = u(1, t) = 0 \quad , \quad t \geq 0 . \quad (\text{B.3})$$

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

A equação (B.1) pode ser representada por:

$$u'(x, t) = f(u(x, t)) . \quad (\text{B.4})$$

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

$$u(x, t + k) - u(x, t) = \int_t^{t+k} f(u(x, t)) dt . \quad (\text{B.5})$$

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

$$u(x, t + k) - u(x, t) = k \frac{f(u(x, t + k)) + f(u(x, t))}{2} . \quad (\text{B.6})$$

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

$$U_m^{n+1} - U_m^n = \frac{k\sigma}{2} [D_{xx}U_m^{n+1} + D_{xx}U_m^n] , \quad (\text{B.7})$$

onde  $D_{xx}U_m^n$  representa o operador  $\frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2}$  já discretizado.  $\frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2}$  pode ser substituído por  $[u(x+h, t) - 2u(x, t) + u(x-h, t)]/h^2$ . Utilizando a discretização da malha neste último, tomando  $r = k\sigma/h^2$  e introduzindo na equação (B.7), temos:

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

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

$$U_m^{n+1} - 0.5r [U_{m+1}^{n+1} - 2U_m^{n+1} + U_{m-1}^{n+1}] = U_m^n + 0.5r [U_{m+1}^n - 2U_m^n + U_{m-1}^n] , \quad (\text{B.8})$$

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

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

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

Como as matrizes são tridiagonais, é possível encontrar a solução do sistema pelo método de decomposição de matrizes LU [88].

### B.1.1 Decomposição LU

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

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

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

é possível reescrevê-la como o produto das matrizes:

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

onde os elementos das matrizes  $\mathbf{L}$  e  $\mathbf{U}$  podem ser obtidos pelas seguintes relações de recorrência:

$$\begin{aligned} u_1 &= b_1, & v_i &= c_i, & i &= 1, 2, 3, \dots, M-1; \\ l_j &= a_j/u_{j-1}, & u_j &= b_j - l_j c_{j-1}, & j &= 2, 3, \dots, M-1. \end{aligned} \quad (\text{B.9})$$

Temos então o seguinte sistema representando a equação (B.8):

$$\mathbf{A}.U_m^{n+1} = \mathbf{B}.U_m^n. \quad (\text{B.10})$$

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

Decompondo a matriz  $\mathbf{A}$ :

$$\mathbf{A}.U_m^{n+1} = \mathbf{L}.(\mathbf{U}.U_m^{n+1}) = \mathbf{L}.X_m = C_m, \quad (\text{B.11})$$

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

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

É fácil perceber que  $X_1 = C_1$ . Usando esse resultado, é possível determinarmos  $X_2 = C_2 - X_1.l_2$  e assim sucessivamente até encontrarmos  $X_{M-1}$ . Agora basta lembrar que  $\mathbf{U}.U_m^{n+1} = X_m$ , e encontrar a matriz coluna  $U_m^{n+1}$ , executando uma interação para trás:

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

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

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

O método de Crank-Nicolson é um método poderoso para a solução de equações do tipo difusão. Ele é considerado um método implícito pois um ponto  $m$  da malha no instante  $n + 1$  não depende somente dos pontos da malha no instante anterior ( $n$ ), mas também dos pontos  $m + 1$  e  $m - 1$  do instante  $n + 1$ , ainda não computados, ao contrário do que ocorre com o método explícito, por exemplo, onde os pontos do instante  $n + 1$  só dependem dos pontos do instante  $n$  (já conhecidos). A vantagem do método está no fato de ele ser incondicionalmente estável. Ao contrário do que ocorre no método explícito, onde temos a condição de que  $r \leq 0,5$  para que ocorra a convergência do mesmo. O erro do método de Crank-Nicolson é  $\mathcal{O}(h^2 + k^2)$ . No método explícito o erro de truncamento é  $\mathcal{O}(h^2 + k)$  [88].

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

### B.1.2 Solução de “potenciais” por *Split-Step*

Este método numérico complementa o método de Crank-Nicolson, permitindo a solução de uma equação diferencial de segunda ordem sujeita a um potencial (como o harmônico, por exemplo). Além disso, partindo do mesmo princípio, podemos tratar um termo não-linear como um “potencial” e, utilizando o mesmo procedimento, encontrar soluções de equações não-lineares (como a equação de Gross-Pitaevskii e suas extensões, que é nosso objetivo principal).

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

$$(\mathbf{T} + \mathbf{V})\psi(x, t) \equiv -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} + V(x)\psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t}, \quad (\text{B.12})$$

cuja solução é:

$$\psi(x, t) = e^{-i(\mathbf{T}+\mathbf{V})\frac{t-t_0}{\hbar}} \psi(x, t_0) = e^{-i(\mathbf{T}+\mathbf{V})\frac{\Delta t}{\hbar}} \psi(x, t_0). \quad (\text{B.13})$$

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

$$e^{\lambda(A+B)} = 1 + \lambda(A+B) + \frac{\lambda^2}{2!}(A+B)^2 \dots, \quad (\text{B.14})$$

$$e^{\lambda A} e^{\lambda B} = \left[ 1 + \lambda A + \frac{\lambda^2}{2!} A^2 \dots \right] \left[ 1 + \lambda B + \frac{\lambda^2}{2!} B^2 \dots \right]. \quad (\text{B.15})$$

Comparando as expressões anteriores, é possível verificar que:

$$e^{\lambda(A+B)} = e^{\lambda A} e^{\lambda B} - \frac{\lambda^2}{2!} [A, B] + \mathcal{O}(\lambda^3), \quad (\text{B.16})$$

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

$$e^{\lambda \frac{A}{2}} e^{\lambda B} e^{\lambda \frac{A}{2}} = \left[ 1 + \lambda \frac{A}{2} + \frac{\lambda^2}{2!} \left( \frac{A}{2} \right)^2 \dots \right] \left[ 1 + \lambda B + \frac{\lambda^2}{2!} B^2 \dots \right] \left[ 1 + \lambda \frac{A}{2} + \frac{\lambda^2}{2!} \left( \frac{A}{2} \right)^2 \dots \right]. \quad (\text{B.17})$$

Comparando as equações (B.14) e (B.17) teremos um erro da ordem de  $\lambda^3$  na aproximação. Fazendo  $A = \mathbf{V}$ ,  $B = \mathbf{T}$  e  $\lambda = -i\Delta t/\hbar$  temos:

$$e^{-i(\mathbf{T}+\mathbf{V})\frac{\Delta t}{\hbar}} = e^{-i\frac{\mathbf{V}}{2}\frac{\Delta t}{\hbar}} e^{-i\mathbf{T}\frac{\Delta t}{\hbar}} e^{-i\frac{\mathbf{V}}{2}\frac{\Delta t}{\hbar}} + \mathcal{O}(\Delta t^3), \quad (\text{B.18})$$

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

$$\psi(x, t) = e^{-i\frac{\mathbf{V}}{2}\frac{\Delta t}{\hbar}} e^{-i\mathbf{T}\frac{\Delta t}{\hbar}} e^{-i\frac{\mathbf{V}}{2}\frac{\Delta t}{\hbar}} \psi(x, t_0), \quad (\text{B.19})$$

é calculada numericamente em três etapas, sendo  $\psi(x, t) = \psi(x, t_0 + \Delta t)$  a solução após



uma evolução de um instante de tempo ( $\Delta t$ ).

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

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

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

## B.2 O Método de Peaceman-Rachford (ADI)

Para se resolver a equação de Schrödinger em duas dimensões, utilizamos o método de Peaceman-Rachford, que é um método de alternância de sentido implícito (“*Alternating Direction Implicit method*”). É possível resolver equações em duas dimensões utilizando métodos inteiramente implícitos, como por exemplo o próprio método de Crank-Nicolson. Porém, seria necessário resolver  $(M - 1)^2$  equações lineares a cada passo no tempo. Ao invés disso, utilizamos um método ADI que, onde o próprio nome já diz, é composto de passos implícitos alternados nas duas direções. Neste método temos que resolver apenas  $2(M - 1)$  equações lineares a cada passo no tempo, utilizando um método implícito na direção  $x$  com um explícito na direção  $y$  para termos uma solução intermediária, e finalmente um implícito na direção  $y$  com um explícito na direção  $x$  [88].

O método de Peaceman-Rachford é dado por:

$$(i) \quad V_{m,l}^{n+1/2} = U_{m,l}^n + 0.5r[D_{xx}V_{m,l}^{n+1/2} + D_{yy}U_{m,l}^n], \quad (B.20)$$

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

Ou podemos reescrevê-lo como:

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

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

onde  $m$  e  $l$  correspondem a passos nas direções espaciais,  $n$  corresponde a passos na direção temporal,  $D_{ii}$ ,  $i = x, y$ , é a derivada segunda na direção correspondente e  $r = ik/h_x h_y$ . A solução  $V_{m,l}^{n+1/2}$  é uma solução intermediária, e sem significado físico, entre as soluções reais  $U_{m,l}^n$  e  $U_{m,l}^{n+1}$  nos instantes de tempo  $n$  e  $n+1$ , respectivamente. O método de Peaceman-Rachford possui erro de truncagem  $\mathcal{O}(h_x^2 + h_y^2 + k^2)$ , sendo incondicionalmente estável [89].

### B.3 Método de Relaxação

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

$$\mathcal{L}u = \rho, \quad (\text{B.21})$$

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

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \mathcal{L}u - \rho. \quad (\text{B.22})$$

Conforme evolui no tempo, a solução da equação (B.22) “relaxa” para (B.21). Ou seja, quando  $t \rightarrow \infty$  a derivada no tempo tende a desaparecer, com o sistema chegando no equilíbrio [90].

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

$$i \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H\Psi, \quad (\text{B.23})$$

com  $\hbar = 1$  e  $H$  um hamiltoniano independente do tempo. Sendo  $\Psi(x, t)$  a solução da equação (B.23), é possível desenvolvê-la na forma de auto-estados:

$$\Psi = \sum_{i=0}^{\infty} a_i \Phi_i. \quad (\text{B.24})$$

Substituímos  $t$  por  $-i\alpha$  e reescrevendo a equação (B.23), obtemos:

$$\frac{\partial \Psi(\alpha)}{\partial \alpha} = -H\Psi(\alpha). \quad (\text{B.25})$$

Com isso, a solução da equação anterior é:

$$\Psi(\alpha) = e^{-H\alpha}\Psi(0) . \quad (\text{B.26})$$

Para encontrarmos o estado fundamental  $\Phi_0$ , basta evoluir no tempo imaginário ( $\alpha \rightarrow \infty$ ). Fazendo isso, temos a expressão:

$$\frac{a_0}{|a_0|}\Phi_0 = \lim_{\alpha \rightarrow \infty} \frac{\Psi(\alpha)}{\langle \Psi(\alpha) | \Psi(\alpha) \rangle^{1/2}} . \quad (\text{B.27})$$

Se tivermos uma solução não-nula para o estado fundamental  $\Phi_0$  ( $a_0 \neq 0$ ), podemos escrever a energia média como:

$$E(\alpha) \equiv \frac{\langle \Psi(\alpha) | H | \Psi(\alpha) \rangle}{\langle \Psi(\alpha) | \Psi(\alpha) \rangle} , \quad (\text{B.28a})$$

$$= \frac{E_0 + \sum_{i=1}^{\infty} E_i e^{-2\alpha(E_i - E_0)} |a_i/a_0|^2}{1 + \sum_{i=1}^{\infty} e^{-2\alpha(E_i - E_0)} |a_i/a_0|^2} , \quad (\text{B.28b})$$

$$= E_0 + \frac{\sum_{i=1}^{\infty} (E_i - E_0) e^{-2\alpha(E_i - E_0)} |a_i/a_0|^2}{1 + \sum_{i=1}^{\infty} e^{-2\alpha(E_i - E_0)} |a_i/a_0|^2} , \quad (\text{B.28c})$$

$$E(\alpha) \geq E_0 , \quad (\text{B.28d})$$

com  $E(\alpha)$  tendendo a  $E_0$  quando  $\alpha \rightarrow \infty$  [91].

### B.3.1 Método da relaxação aplicada à equação de Gross-Pitaevskii

Queremos aplicar o método de relaxação para a obtenção de estados fundamentais da equação de Gross-Pitaevskii. Existem procedimentos diferentes para a relaxação. No presente trabalho utilizamos o esquema C descrito na referência [81].

O termo cúbico da equação de Gross-Pitaevskii pode fazer com que ocorram duas soluções estacionárias diferentes para um mesmo valor negativo de comprimento de espalhamento ( $\eta < 0$ ). A primeira, em um mínimo de energia, e a segunda em um máximo, conhecida como solução hiperbólica [81].

Partimos da equação não-linear:

$$-\frac{\partial \psi(x, \tau)}{\partial \tau} = [-\nabla^2 + V + 8\pi\eta|\psi(x, \tau)|^2 - 2\mu]\psi(x, \tau) , \quad (\text{B.29})$$

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

Os passos necessários do esquema de relaxação utilizado são:

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

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

## Referências Bibliográficas

- [1] H. L. F. da Luz, F. Kh. Abdullaev, A. Gammal, M. Salerno e L. Tomio, *Matter-wave two-dimensional solitons in crossed linear and nonlinear optical lattices*, Phys. Rev. A **82**, 043618 (2010).
- [2] F. Kh. Abdullaev, A. Gammal, H. L. F. da Luz, M. Salerno e L. Tomio, *Three-dimensional solitons in cross-combined linear and nonlinear optical lattices*, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **45**, 115302 (2012).
- [3] S. N. Bose, Zeitschrift für Physik **26**, 178 (1924).  
Traduzido para o português por Caruso, F. e Oguri, V. em Rev. Bras. Ens. Fis. **27**(3), 463 (2005).
- [4] A. Einstein, Sitzungsberichte der Preussischen Akademie der Wissenschaften **I**, 261 (1924); **I**, 3 (1925).  
Traduzido para o português por S. R. Dahmen em Rev. Bras. Ens. Fis. **27**(1), 113 (2005).
- [5] M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthews, C. E. Wieman e E. A. Cornell, *Observation of Bose-Einstein Condensation in a Dilute Atomic Vapor*, Science **269**, 198 (1995).
- [6] C. C. Bradley, C. A. Sackett, J. J. Tollet e R. G. Hulet, *Evidence of Bose-Einstein Condensation in an Atomic Gas with Attractive Interactions*, Phys. Rev. Lett. **75**, 1687 (1995).
- [7] K. B. Davis *et al.*, *Bose-Einstein Condensation in a Gas of Sodium Atoms*, Phys. Rev. Lett. **75**, 3969 (1995).
- [8] O. Morsch, J. H. Müller, M. Cristiani, D. Ciampini e E. Arimondo, *Bloch Oscillations and Mean-Field Effects of Bose-Einstein Condensates in 1D Optical Lattices* Phys. Rev. Lett. **87**, 140402 (2001).

- [9] M. Salerno, V.V. Konotop e Y.V. Bludov, *Long-Living Bloch Oscillations of Matter Waves in Periodic Potentials*, Phys. Rev. Lett. **101**, 030405 (2008).
- [10] I. Carusotto, L. Pitaevskii, S. Stringari, G. Modugno e M. Inguscio, *Sensitive Measurement of Forces at the Micron Scale Using Bloch Oscillations of Ultracold Atoms*, Phys. Rev. Lett. **95**, 093202 (2005).
- [11] B. P. Anderson e M. A. Kasevich, *Macroscopic Quantum Interference from Atomic Tunnel Arrays*, Science **282**, 1686 (1998).
- [12] Yu. V. Bludov, V. V. Konotop e M. Salerno, *Dynamical localization of gap-solitons by time periodic forces*, Europhys. Lett. **87**, 20004 (2009).
- [13] H. Lignier *et al.*, *Dynamical Control of Matter-Wave Tunneling in Periodic Potentials*, Phys. Rev. Lett. **99**, 220403 (2007).
- [14] A. Zenesini, H. Lignier, D. Ciampini, O. Morsch e E. Arimondo, *Coherent Control of Dressed MatterWaves*, Phys. Rev. Lett. **102**, 100403 (2009).
- [15] M. Jona-Lasinio *et al.*, *Asymmetric Landau-Zener Tunneling in a Periodic Potential*, Phys. Rev. Lett. **91**, 230406 (2003).
- [16] S. Wimberger *et al.*, *Nonlinearity-induced destruction of resonant tunneling in the Wannier-Stark problem*, Phys. Rev. A **72**, 063610 (2005).
- [17] V. V. Konotop, P. G. Kevrekidis e M. Salerno, *Landau-Zener tunneling of Bose-Einstein condensates in an optical lattice*, Phys. Rev. A **72**, 023611 (2005).
- [18] A. Zenesini *et al.*, *Time-Resolved Measurement of Landau-Zener Tunneling in Periodic Potentials*, Phys. Rev. Lett. **103**, 090403 (2009).
- [19] M. Greiner, O. Mandel, T. Esslinger, T.W. Hänsch e I. Bloch, *Quantum phase transition from a superfluid to a Mott insulator in a gas of ultracold atoms*, Nature **415**, 39 (2002).
- [20] M. Lewenstein *et al.*, *Ultracold atomic gases in optical lattices: mimicking condensed matter physics and beyond*, Adv. Phys. **56**(2), 243-379 (2007).
- [21] F. Kh. Abdullaev, A. Gammal, A. M. Kamchatnov e L. Tomio, *Dynamics of bright matter wave solitons in a Bose-Einstein Condensate*, Int. J. of Mod. Phys. B **19**(22), 3415 (2005).

- [22] O. Morsch e M. Oberthaler, *Dynamics of Bose-Einstein condensates in optical lattices*, Rev. Mod. Phys. **78**, 179 (2006).
- [23] S. Burger *et al.*, *Dark Solitons in Bose-Einstein Condensates*. Phys. Rev. Lett. **83**, 5198 (1999).
- [24] B. Wu e Q. Niu, *Landau and dynamical instabilities of the superflow of Bose-Einstein condensates in optical lattices*, Phys. Rev. A **64**, 061603R (2001).
- [25] F. Dalfovo, S. Giorgini, L. P. Pitaevskii e S. Stringari, *Theory of Bose-Einstein condensation in trapped gases*, Rev. Mod. Phys. **71**, 463 (1999).
- [26] L. Pitaevskii e S. Stringari, *Bose-Einstein Condensation*, 1<sup>st</sup> ed., Oxford University Press, New York, 2003.
- [27] V. A. Brazhnyi e V. V. Konotop, *Theory of nonlinear matter waves in optical lattices*, Mod. Phys. Lett. B **18**(14), 627 (2004);  
arXiv: cond-mat/0405334.
- [28] F. Kh. Abdullaev, B. B. Baizakov, S. A. Darmanyan, V. V. Konotop e M. Salerno, *Nonlinear excitations in arrays of Bose-Einstein condensates*, Phys. Rev. A **64**, 043606 (2001).
- [29] F. Kh. Abdullaev, A. Gammal e L. Tomio, *Dynamics of bright matter-wave solitons in a Bose-Einstein condensate with inhomogeneous scattering length*, J. Phys. B **37**, 635 (2004).
- [30] M. Theis *et al.*, *Tuning the Scattering Length with an Optically Induced Feshbach Resonance*, Phys. Rev. Lett. **93**, 123001 (2004).
- [31] F. Kh. Abdullaev, A. Gammal, H. L. F. da Luz e L. Tomio, *Dissipative dynamics of matter-wave solitons in a nonlinear optical lattice*, Phys. Rev. A **76**, 043611 (2007).
- [32] P. G. Drazin e R. S. Johnson, *Solitons: An Introduction*, Cambridge University Press, England, 1989.
- [33] E. P. Gross, *Structure of a Quantized Vortex in Boson Systems*, Il Nuovo Cim. **20**(3), 454 (1961).  
L. P. Pitaevskii, *Vortex lines in an imperfect Bose gas*, Sov. Phys. JETP **13**, 451 (1961).

- [34] N. G. Vakhitov e A. A. Kolokolov, *Stationary solutions of the wave equation in a medium with nonlinearity saturation*, Radiophys. Quantum Electron. **16**, 783 (1973).
- [35] A. Scott, *Nonlinear Science*. Oxford University Press, Oxford, (1999).
- [36] M. Remoissenet, *Waves Called Solitons: Concepts and Experiments*. Springer-Verlag, 3rd rev. ed., (1999).
- [37] G. Eilenberger, *Solitons: Mathematical Methods for Physicists*. Springer-Verlag, rev. ed., (1983).
- [38] J. Denschlag *et al.*, *Generating Solitons by Phase Engineering of a Bose-Einstein Condensate*. Science **287**, 97 (2000).
- [39] B. P. Anderson *et al.*, *Watching Dark Solitons Decay into Vortex Rings in a Bose-Einstein Condensate*. Phys. Rev. Lett. **86**, 2926 (2001).
- [40] L. Khaykovich *et al.*, *Formation of a Matter-Wave Bright Soliton*. Science **296**, 1290 (2002).
- [41] K. E. Strecker, G. B. Partridge, A. G. Truscott e R. G. Hulet, *Formation and propagation of matter-wave soliton trains*. Nature **417**, 150 (2002).
- [42] K. E. Strecker, G. B. Partridge, A. G. Truscott e R. G. Hulet, *Bright matter wave solitons in Bose-Einstein condensates*. New J. Phys. **5**, 73.1-73.8 (2003).
- [43] V. M. Pérez-García, H. Michinel e H. Herrero, *Bose-Einstein solitons in highly asymmetric traps* Phys. Rev. A **57**, 3837 (1998).
- [44] L. D. Carr, M. A. Leung e W. P. Reinhardt, *Dynamics of the Bose-Einstein condensate: quasi-one-dimension and beyond* J. Phys. B **33**, 3983 (2000).
- [45] A. Gammal, T. Frederico, L. Tomio, *Critical number of atoms for attractive Bose-Einstein condensates with cylindrically symmetrical traps* Phys. Rev. A **64**, 055602 (2001);  
*ibid.*, *Critical numbers of attractive Bose-Einstein condensed atoms in asymmetric traps*. **66**, 043619 (2002).
- [46] L. Bergé, *Wave collapse in physics: principles and applications to light and plasma waves*. Phys. Rep. **303**, 259 (1998).



- [47] E. Timmermans, P. Tommasini, M. Hussein e A. Kerman, *Feshbach resonances in atomic Bose-Einstein condensates*. Phys. Rep. **315**, 199 (1999).
- [48] S. L. Cornish, N. R. Claussen, J. L. Roberts, E. A. Cornell e C.E. Wieman, *Stable  $^{85}\text{Rb}$  Bose-Einstein Condensates with Widely Tunable Interactions*. Phys. Rev. Lett. **85**, 1795 (2000).
- [49] Y. Kagan, E. L. Surkov, and G. V. Shlyapnikov, *Evolution and Global Collapse of Trapped Bose Condensates under Variations of the Scattering Length*. Phys. Rev. Lett. **79**, 2604 (1997).
- [50] L. Bergé, V. K. Mezentsev, J. Juul Rasmussen, P.L. Christiansen e Yu. B. Gaididei, *Self-guiding light in layered nonlinear media*. Opt. Lett. **25**, 1037 (2000).
- [51] I. Towers e B. A. Malomed, *Stable (2+1)-dimensional solitons in a layered medium with sign-alternating Kerr nonlinearity* J. Opt. Soc. Am. B **19**, 537 (2002).
- [52] Y. Silberberg, *Collapse of optical pulses*. Opt. Lett. **15**, 1282 (1990);  
B. A. Malomed *et al.*, *Spatiotemporal solitons in multidimensional optical media with a quadratic nonlinearity*. Phys. Rev. E **56**, 4725 (1997).
- [53] R. Dum *et al.*, *Wave Packet Dynamics with Bose-Einstein Condensates*. Phys. Rev. Lett. **80**, 3899 (1998).
- [54] F. Kh. Abdullaev e R. A. Kraenkel, *Macroscopic quantum tunneling and resonances in coupled Bose-Einstein condensates with oscillating atomic scattering length*. Phys. Lett. A **272**, 395 (2000).
- [55] F. Kh. Abdullaev, J. Bronski e R. Galimzyanov, *Dynamics of a trapped 2D Bose-Einstein condensate with periodically and randomly varying atomic scattering length*. Physica D **184**, 319 (2003).
- [56] S. K. Adhikari e P. Muruganandam, *Bose-Einstein condensation dynamics from the numerical solution of the Gross-Pitaevskii equation*. J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **35**, 2831 (2002);  
S. K. Adhikari, *Resonance in Bose-Einstein condensate oscillation from a periodic variation in scattering length*. J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **36**, 1109 (2003).
- [57] R. A. Batty, N. R. Cooper e P. M. Sutcliffe, *Stable Skyrmions in Two-Component Bose-Einstein Condensates*. Phys. Rev. Lett. **88**, 080401 (2002);

- L. S. Leslie, A. Hansen, K. C. Wright, B. M. Deutsch e N. P. Bigelow, *Creation and Detection of Skyrmions in a Bose-Einstein Condensate*. Phys. Rev. Lett. **103**, 250401 (2009).
- [58] D. Anderson e M. Lisak, *Nonlinear asymmetric self-phase modulation and self-steepening of pulses in long optical waveguides*. Phys. Rev. A **27**, 1393 (1983).
- [59] B. A. Malomed, *Variational methods in nonlinear fiber optics and related fields*. Progress in Optics **43**, 71 (2002).
- [60] V. M. Pérez-García, H. Michinel, J. I. Cirac, M. Lewenstein e P. Zoller, *Dynamics of Bose-Einstein condensates: Variational solutions of the Gross-Pitaevskii equations*. Phys. Rev. A **56**, 1424 (1997).
- [61] I. Bloch, *Ultracold quantum gases in optical lattices*. Nature Physics **1**, 23 (2005).
- [62] Ph. W. Courteille, V. S. Bagnato e V. I. Yukalov, *Bose-Einstein Condensation of Trapped Atomic Gases*, Laser Phys. **11**(6), 659 (2001).  
arXiv: cond-mat/0109421.
- [63] R. Grimm, M. Weidemüller e Y. B. Ovchinnikov, *Optical dipole traps for neutral atoms*. Adv. At. Mol. Opt. Phys. **42**, 95 (2000).
- [64] H. Feshbach, *A Unified Theory of Nuclear Reactions*. Ann. Phys. **5**, 337 (1958);  
*ibid.*, *A Unified Theory of Nuclear Reactions II*. **19**, 287 (1962).
- [65] E. Tiesinga, A. J. Moerdijk, B. J. Verhaar e H. T. C. Stoof, *Conditions for Bose-Einstein condensation in magnetically trapped atomic cesium*. Phys. Rev. A **46**, 1167 (1992);  
E. Tiesinga, B. J. Verhaar e H. T. C. Stoof, *Threshold and resonance phenomena in ultracold ground-state collisions*. Phys. Rev. A **47**, 4114 (1993).
- [66] C. Chin, R. Grimm, P. Julienne e E. Tiesinga, *Feshbach resonance in ultracold gases*. Rev. Mod. Phys. **82**, 1225 (2010).
- [67] J. Weiner, V. S. Bagnato, S. Zilio e P. S. Julienne, *Experiments and theory in cold and ultracold collisions*. Rev. Mod. Phys. **71**, 1 (1999).
- [68] C. J. Pethick e H. Smith, *Bose-Einstein Condensation in Dilute Gases*. Cambridge University Press; 2nd ed. (2008).

- [69] P. O. Fedichev, Yu. Kagan, G. V. Shlyapnikov e J. T. M. Walraven, *Influence of Nearly Resonant Light on the Scattering Length in Low-Temperature Atomic Gases*, Phys. Rev. Lett. **77**, 2913 (1996).
- [70] F. kh. Abdullaev, A. Gammal, L. Tomio e T. Frederico, *Stability of trapped Bose-Einstein condensates*. Phys. Rev. A **63**, 043604 (2001).
- [71] H. Sakaguchi e B. A. Malomed, *Solitons in combined linear and nonlinear lattice potentials*. Phys. Rev. A **81**, 013624 (2010).
- [72] D. S. Petrov e G. V. Shlyapnikov, *Interatomic collisions in a tightly confined Bose gas*, Phys. Rev. A **64**, 012706 (2001).
- [73] M. D. Lee, S. A. Morgan, M. J. Davis e K. Burnett, *Energy-dependent scattering and the Gross-Pitaevskii equation in two-dimensional Bose-Einstein condensates*, Phys. Rev. A **65**, 043617 (2002).
- [74] H. Sakaguchi e B.A. Malomed, *Matter-wave solitons in nonlinear optical lattices*, Phys. Rev. E **72**, 046610 (2005);  
*Two-dimensional solitons in the Gross-Pitaevskii equation with spatially modulated nonlinearity*, Phys.Rev. E **73**, 026601 (2006).
- [75] F. K. Fatemi, K. M. Jones e P. D. Lett, *Observation of Optically Induced Feshbach Resonances in Collisions of Cold Atoms*, Phys.Rev.Lett. **85**, 4462 (2000).
- [76] G. Thalhammer, M. Theis, K. Winkler, R. Grimm e J. H. Denschlag, *Inducing an optical Feshbach resonance via stimulated Raman coupling*, Phys.Rev. A **71**, 033403 (2005).
- [77] D. M. Bauer, M. Lettner, C. Vo, G. Rempe e S. Dürr, *Control of a magnetic Feshbach resonance with laser light*, Nature Physics **5**, 339 (2009); *Combination of a magnetic Feshbach resonance and an optical bound-to-bound transition*, Phys. Rev. A **79**, 062713 (2009).
- [78] B. B. Baizakov, B. A. Malomed e M. Salerno, *Multidimensional solitons in a low-dimensional periodic potential*, Phys. Rev. A **70**, 053613 (2004).
- [79] L. Bergé, *Wave collapse in physics: principles and applications to light and plasma waves*, Phys. Rep. **303**, 259 (1998).

- [80] B. B. Baizakov e M. Salerno, *Delocalizing transition of multidimensional solitons in Bose-Einstein condensates*, Phys. Rev. A **69**, 013602 (2004).
- [81] M. Brtko, A. Gammal e L. Tomio, *Relaxation algorithm to hyperbolic states in Gross-Pitaevskii equation*, Phys. Lett. A **359**, 339 (2006).
- [82] B. Eiermann *et al.*, *Bright Bose-Einstein Gap Solitons of Atoms with Repulsive Interaction*. Phys. Rev. Lett. **92**, 230401 (2004).
- [83] D. Mihalache *et al.*, *Stable three-dimensional spatiotemporal solitons in a two-dimensional photonic lattice*. Phys. Rev. E **70**, 055603 (2004).
- [84] L. Torner e Y. V. Kartashov, *Light bullets in optical tandems*. Opt. Lett. **34**, 1129-1131 (2009).
- [85] F. Ye, Y. V. Kartashov, B. Hu e L. Torner, *Light bullets in Bessel optical lattices with spatially modulated nonlinearity*. Opt. Express **17**, 11328-11334 (2009).
- [86] H. Leblond, B. A. Malomed e D. Mihalache, *Interactions of spatiotemporal solitons and vortices in fiber bundles*. Phys. Rev. A **79**, 033841 (2009).
- [87] C. Cohen-Tannoudji, *Equation de Gross-Pitaevskii*. Leçons du Collège de France, (1998-1999);  
*Ibid.*, *Equation de Gross-Pitaevskii dépendant du temps*.  
Disponíveis em [www.phys.ens.fr/cours/college-de-france/1998-99/1998-99.htm](http://www.phys.ens.fr/cours/college-de-france/1998-99/1998-99.htm)
- [88] D. Quinney, *An Introduction to the Numerical Solution of Differential Equations*. Revised ed., Research Studies Press, England, 1987.
- [89] P. DuChateau e D. Zachmann, *Applied Partial Differential Equations*. Dover ed., Dover Publications, Inc., New York, 2002.
- [90] W. H. Press, S. A. Teukolsky, T. V. William e B. P. Flannery, *Numerical Recipes in FORTRAN: The Art of Science Computing*. 2<sup>nd</sup> ed., Cambridge University Press, Cambridge, 1992.
- [91] Y. Suzuki e K. Varga, *Stochastic Variational Approach to Quantum-Mechanical Few-Body Problems*. 1<sup>st</sup> ed., Springer Press, Cambridge, 1996.