



Universidade Federal de Goiás
Instituto de Física

Pós-Graduação em Física

**Dinâmica e Decaimento de sólitons
escuros em condensados de Bose-Einstein
atômicos quase-unidimensionais**

Hugo Leonardo Carvalhaes Couto

Dissertação de Mestrado

Goiânia

11 de fevereiro de 2014

Universidade Federal de Goiás
Instituto de Física

Hugo Leonardo Carvalhaes Couto

**Dinâmica e Decaimento de sólitons escuros em condensados
de Bose-Einstein atômicos quase-unidimensionais**

*Trabalho apresentado ao Programa de Pós-Graduação em
Física do Instituto de Física da Universidade Federal de
Goiás como requisito parcial para obtenção do grau de
Mestre em Física.*

Orientador: *Prof. Dr. Wesley Bueno Cardoso*

Goiânia

11 de fevereiro de 2014

Ficha catalográfica elaborada
automaticamente com os dados fornecidos pelo(a) autor(a).

Couto, Hugo Leonardo Carvalhaes
Dinâmica e Decaimento de sólitons escuros em condensados de Bose
Einstein atômicos quase-unidimensionais [manuscrito] / Hugo Leonardo
Carvalhaes Couto. - 2014.
vii, 83 f.: il.

Orientador: Prof. Dr. Wesley Bueno Cardoso.
Dissertação (Mestrado) - Universidade Federal de Goiás, Instituto de
Física (IF) , Programa de Pós-Graduação em Física, Goiânia, 2014.
Bibliografia. Apêndice.
Inclui gráfico, tabelas, lista de figuras.

1. Condensado de Bose-Einstein. 2. Sóliton. 3. Dark solitons. 4.
Interação sóliton-som. 5. Equação de Muñoz-Mateo e Delgado. I.
Cardoso, Dr. Wesley Bueno, orient. II. Título.

Agradecimentos

Agradeço a meus familiares pelo suporte que me deram, a meus amigos e colegas do Instituto de Física pelo apoio e a Gabriela pelo companheirismo. Agradeço ao Prof. Dr. Wesley Bueno Cardoso por ter me orientado e por ter acompanhado sempre de perto a realização desse trabalho, ajudando sempre que necessário. Por fim, gostaria de agradecer a CAPES e ao CNPq pelo apoio financeiro.

*Ah a frescura na face de não cumprir um dever!
Faltar é positivamente estar no campo!
Que refúgio o não se poder ter confiança em nós!
Respiro melhor agora que passaram as horas dos encontros.
Faltei a todos, com uma deliberação do desleixo,
Fiquei esperando a vontade de ir para lá, que eu sabia que não vinha.*
—FERNANDO PESSOA (heterônimo Álvaro de Campos, 17/06/1929)

Resumo

Sólitons são estruturas que se propagam em sistemas não lineares sem se dispersarem. Os sólitons escuros formam um tipo específico de sólitons caracterizados por uma depressão na densidade do campo e por uma variação repentina da fase na região da depressão. O estado de condensação de Bose-Einstein em gases atômicos fracamente interagentes obedece de maneira aproximada à equação não linear de Schrödinger conhecida por Equação de Gross-Pitaevskii (EGP). Estudos teóricos e experimentais revelam que sólitons escuros propagando em condensados de Bose-Einstein (BEC) são instáveis. Quando o BEC tem geometria quase-unidimensional, a principal fonte de instabilidade na dinâmica do sóliton é a interação sóliton-som, responsável pelo decaimento e pela eventual perda do sóliton. O modelo cúbico, dentre todas as reduções dimensionais da EGP para uma dimensão, é o modelo mais frequentemente usado para o estudo desses sistemas. Em 2008 [1], Muñoz Mateo e Delgado propuseram um modelo mais preciso que o modelo cúbico e que os principais modelos unidimensionais propostos até então. No presente trabalho comparamos a dinâmica e o decaimento de sólitons escuros em BECs segundo os modelos cúbico e de Muñoz Mateo e Delgado (MMD). Avaliamos as diferenças relevantes nas trajetórias e nos tempos de vida dos sólitons e em que condições ocorrem.

Palavras-chave: Condensado de Bose-Einstein, Sóliton escuro, Equação de Gross-Pitaevskii, Equação não linear de Schrödinger, Equação de Muñoz Mateo e Delgado, decaimento de sólitons escuros

Sumário

1	Introdução	1
2	Sólitons escuros em condensados de Bose-Einstein	7
2.1	Condensados atômicos	7
2.1.1	Interação de van der Waals	8
2.1.2	Potencial de contato	13
2.1.3	Equação de Gross-Pitaevskii	19
2.1.4	Redução dimensional: Equação de Muñoz-Mateo e Delgado	22
	Aproximação de Thomas-Fermi	26
	Formulação variacional	27
2.2	Sólitons	29
2.2.1	Sóliton livre	29
2.2.2	Sóliton aprisionado	33
3	Dinâmica e decaimento dos sólitons escuros	36
3.1	Decaimento de sólitons escuros em condensados de Bose-Einstein	47
4	Conclusão	64
A	Princípios básicos dos métodos experimentais	67
	Resfriamento óptico	67
	Armadilha magneto-óptica	69
	Armadilha magnética	70
	Resfriamento evaporativo	71
B	Métodos numéricos	72
B.1	Método de separação de operadores	72
	Esquema de Lie-Trotter	72
	Esquema de Strang	73
B.2	Método de propagação em tempo imaginário	74

Lista de Figuras

1.1	Fase e densidade de um sóliton escuro.	5
2.1	Átomos hidrogenóides.	9
2.2	Forma do potencial $V(A)$.	31
2.3	Forma das funções H (azul pontilhado) e ϕ (vermelho linha cheia).	34
3.1	Comparação entre os perfis de Thomas-Fermi dos modelos.	38
3.2	Comparação entre o perfil fundamental e a aproximação TF.	40
3.3	Distância entre perfil fundamental e aproximação TF.	41
3.4	Distância entre o sóliton MMD e o sóliton cúbico e o sóliton quadrático.	42
3.5	Transição da forma do sóliton MMD.	43
3.6	Correspondência entre velocidade e forma do sóliton. Caso harmônico.	45
3.7	Correspondência entre velocidade e forma do sóliton. Caso quártico.	46
3.8	Evolução da fase do sóliton.	47
3.9	Evolução da amplitude do sóliton com mesmo potencial químico.	48
3.10	Evolução da amplitude do sóliton com potencial químico menor.	48
3.11	Evolução da amplitude do sóliton com potencial químico maior.	49
3.12	Evolução da derivada da fase do sóliton com mesmo potencial químico.	49
3.13	Evolução da derivada da fase do sóliton com potencial químico menor.	50
3.14	Evolução da derivada da fase do sóliton com potencial químico maior.	50
3.15	Evolução do sóliton com potencial químico 1.4μ (superior), μ (centro) e 0.7μ (inferior).	51
3.16	Trajetórias dos sólitons em uma armadilha harmônica.	52
3.17	Dependência da frequência de oscilação dos sólitons em uma armadilha harmônica com o comprimento de espalhamento. ($v = 0.5v_{\text{lim}}$)	53
3.18	Evolução do sóliton $a = 0.1a_{\text{Rb}}$ em armadilha <i>dimple</i> .	55
3.19	Perfil inicial de condensado com sóliton em potencial <i>dimple</i> .	56
3.20	Densidade renormalizada do condensado na região do sóliton.	56

3.21	Evolução do sóliton no condensado $a = 0.01a_{\text{Rb}}$ em armadilha <i>dimple</i> com $V_0 = 1.2(\mu_{\text{Rb}} - \hbar\omega_{\perp})$.	57
3.22	Evolução do sóliton no condensado $a = 0.5a_{\text{Rb}}$ em armadilha <i>dimple</i> com $V_0 = 1.0(\mu_{\text{Rb}} - \hbar\omega_{\perp})$.	58
3.23	Evolução do sóliton no condensado $a = 0.1a_{\text{Rb}}$ em armadilha <i>dimple</i> com $V_0 = 1.0(\mu_{\text{Rb}} - \hbar\omega_{\perp})$.	59
3.24	Evolução do sóliton no condensado $a = 0.01a_{\text{Rb}}$ em armadilha <i>dimple</i> com $V_0 = 1.0(\mu_{\text{Rb}} - \hbar\omega_{\perp})$.	60
3.25	Evolução do sóliton no condensado $a = 1a_{\text{Rb}}$ em armadilha <i>dimple</i> com $V_0 = 0.8(\mu_{\text{Rb}} - \hbar\omega_{\perp})$.	61
3.26	Evolução do sóliton no condensado $a = 0.5a_{\text{Rb}}$ em armadilha <i>dimple</i> com $V_0 = 0.8(\mu_{\text{Rb}} - \hbar\omega_{\perp})$.	62
3.27	Evolução do sóliton no condensado $a = 0.1a_{\text{Rb}}$ em armadilha <i>dimple</i> com $V_0 = 0.8(\mu_{\text{Rb}} - \hbar\omega_{\perp})$.	63
A.1	Resfriamento óptico de um gás atômico.	68
A.2	Representação esquemática de uma armadilha magneto-óptica.	69
A.3	Desvio Zeeman em uma armadilha magnética.	70

CAPÍTULO 1

Introdução

Em 1924, Bose publicou um artigo que descrevia a estatística de um gás de fótons [2]. Em 1925, Einstein estendeu essa estatística a um gás ideal de partículas massivas com spin inteiro e previu o fenômeno que a partir de então seria conhecido por condensação de Bose-Einstein [3, 4, 5]. Einstein previu que abaixo de uma temperatura de corte, o número de ocupação do estado de partícula fundamental do gás cresceria rapidamente com a diminuição da temperatura, até que, a $T = 0$, todas as partículas se condensariam no referido estado.

A condensação de Bose-Einstein pode ser definida em termos da matriz densidade reduzida do estado de um gás de bósons, seja ele ideal ou não [6]. Essa matriz é definida pelos elementos

$$\rho_{\alpha\alpha'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) = \left\langle \psi_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{r}, t) \psi_{\alpha'}(\mathbf{r}', t) \right\rangle ,$$

em que $\psi_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{r})$ e $\psi_{\alpha'}(\mathbf{r}')$ são respectivamente o operador criação de uma partícula no estado $|\alpha\rangle$ na posição \mathbf{r} e o operador aniquilação de uma partícula no estado $|\alpha'\rangle$ na posição \mathbf{r}' . Ortogonalizando esse operador, é possível escrevê-lo na forma

$$\rho_{\alpha\alpha'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) = \sum_i n_i(t) \chi_{\alpha}^{i*}(\mathbf{r}, t) \chi_{\alpha'}^i(\mathbf{r}', t) ,$$

na qual $\{\chi_{\alpha}^i\}$ é uma base de estados de partícula e n_i é o número esperado de partículas no estado χ_{α}^i . Diz-se que o sistema apresenta condensação de Bose-Einstein se pelo menos um n_i for da ordem de grandeza do número de partículas, isto é, se um número macroscópico de partículas ocupar o estado χ_{α}^i .

O que faz dos condensados de Bose-Einstein (BEC) sistemas tão interessantes é o fato de todas as partículas condensadas se comportarem da mesma maneira, o que implica na amplificação da sua função de onda [6] a ponto de que a densidade de partículas do condensado possa ser medida diretamente. De fato, a evolução temporal do estado de um sistema quântico é determinada pelo operador hamiltoniano que, por sua vez, é determinado pelas interações do sistema. Um sistema de poucas partículas é tão pouco energético que a sua interação com um feixe (de observação) não pode ser negligenciada, uma vez que ela modifica de maneira expressiva a evolução temporal do estado. Num sistema de muitas partículas, pelo contrário, a

interação com o feixe é uma perturbação que pode ser desprezada sem maiores consequências. A interação com os fótons do feixe e a sua absorção pelos átomos do condensado não interfere, portanto, de maneira significativa na evolução da função de onda do condensado; razão porque é possível medir “diretamente” a função de onda.

Desde a sua previsão na década de 1920, até a sua observação em 1995 [7, 8], a pesquisa experimental na obtenção de BECs em gases atômicos diluídos envolveu o enfrentamento de grandes desafios, como o resfriamento de átomos neutros até temperaturas da ordem de $\mu K - nK$ e o aprisionamento desses gases a densidades suficientemente pequenas, além da escolha das espécies atômicas mais suscetíveis a condensação. Atualmente, BECs de metais alcalinos como ^{23}Na , 7Li , ^{39}K , ^{87}Rb , ^{133}Cs , dentre outros [5], são produzidos rotineiramente em diversos laboratórios ao redor do mundo [9]. Algumas das razões por que os metais alcalinos tenham sido escolhidos nessa classe de experimentos são [7]: *a*) os metais pesados dessa espécie (como o ^{87}Rb) podem ser facilmente resfriados e aprisionados com técnicas de lasers; *b*) as suas interações inter-atômicas são fracas e bem entendidas, além do que podem ser controladas por meio da densidade da amostra e da aplicação de campos externos; e *c*) é fácil excitar um átomo alcalino, de maneira que podemos usar o espalhamento da luz para determinar a densidade de partículas em diferentes pontos da amostra.

Um exemplo de procedimento experimental para obtenção de um BEC pode ser o que segue [5]:

1. Um forno emite um feixe de átomos de sódio a $\approx 600K$;
2. Esse feixe atravessa um desacelerador (*Zeeman slower*), do qual emerge a uma temperatura de $\approx 1K$;
3. O feixe é então capturado por uma armadilha magneto-óptica, onde é resfriado até $\approx 100\mu K$;
4. O laser é desligado e uma armadilha magnética é ligada;
5. Um terceiro e último resfriamento, esse evaporativo, é realizado ¹.

Do ponto de vista teórico, a descrição do condensado atômico não é um problema simples; como qualquer problema de muitos corpos em Mecânica Quântica, é necessário fazer uso de aproximações. Para começar, argumenta-se que nesses gases, o alcance do potencial de interação entre partículas é bem menor que a distância média entre elas; isso faz da interação simultânea entre três ou mais partículas um evento extremamente improvável, podendo-se desprezar

¹Uma breve discussão das interações e princípios básicos que envolvem cada uma das técnicas de resfriamento e aprisionamento envolvidas nesse procedimento é apresentada no apêndice A.

a parte correspondente do hamiltoniano. Diz-se também que, dada a energia extremamente baixa do gás, o espalhamento de uma partícula pelo potencial de outra pode ser modelado com uma boa aproximação pelo espalhamento devido a um potencial de contato [5, 10]. Como terceira consideração temos a seguinte: uma vez que nesse limite de temperatura a maior parte das partículas está no condensado, podemos desprezar as excitações. Valendo-se de tudo isso, obtemos uma equação de evolução para o condensado, chamada Equação de Gross-Pitaevskii (EGP)² [11],

$$i\hbar\partial_t\psi = \frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V(\mathbf{r})\psi + gN|\psi|^2\psi. \quad (1.1)$$

$\psi(\mathbf{r},t)$ é a função de onda do condensado; N é o número de partículas condensadas; \hbar é a constante de Planck dividida por 2π ; $V(\mathbf{r})$ é o potencial de aprisionamento do gás; e o termo não linear $gN|\psi|^2$ modela a interação interatômica. Por fim, a intensidade da não linearidade $g = 4\pi\hbar^2 a/m$ é dada em termos do comprimento de espalhamento a do orbital s e da massa atômica m . Quanto à função de onda, existe mais de uma definição para ela na literatura, a mais simples é a de que ela é a função de onda de partícula única do estado sobre o qual há condensação [6].

Quando o armadilhamento tem simetria cilíndrica e forma de charuto – aprisionamento radial muito mais forte que o axial – o condensado assume uma forma alongada na direção axial. Nesse limite, a dinâmica do condensado torna-se quase-unidimensional, de modo que faz sentido substituir a função de onda e sua equação de evolução tridimensionais por correspondentes unidimensionais. Algumas reduções dimensionais foram propostas nos últimos anos [12], como por exemplo a equação não linear de Schrödinger 1D [13] e a equação de Salasnich *et. al* [14].

Pressupondo que o aprisionamento radial fosse harmônico e bem mais estreito que o aprisionamento axial e que a interação interatômica fosse repulsiva, Muñoz-Mateo e Delgado [1] obtiveram a equação de evolução axial:

$$i\hbar\partial_t\psi = \frac{-\hbar^2}{2m}\partial_{zz}^2\psi + V_z(z)\psi + \hbar\omega_\perp\sqrt{1+4aN|\psi|^2}\psi, \quad (1.2)$$

que, além de ser mais simples que outras propostas, apresenta resultados mais próximos dos obtidos da evolução da EGP tridimensional [1]. $V_z(z)$ é o potencial que aprisiona o gás na direção axial, ω_\perp é a frequência angular do potencial radial harmônico e ψ é parte axial da função de onda do condensado.

Se o gás for suficientemente rarefeito e o potencial de interação for suficientemente fraco,

²No capítulo 2 detalhamos mais as considerações e aproximações envolvidas na dedução da EGP para condensados atômicos.

de maneira que $4aN|\psi|^2 = m/\pi\hbar^2 N|\psi|^2 \int d^3\mathbf{r}' V(\mathbf{r}') \ll 1$, truncamos a expansão em série de potência da raiz quadrada em (1.2) e obtemos a equação cúbica usualmente utilizada nas simulações de sistemas quase-unidimensionais [1],

$$i\hbar\partial_t\psi = \frac{-\hbar^2}{2m}\partial_{zz}^2\psi + (V_z(z) + \hbar\omega_\perp)\psi + 2\hbar\omega_\perp aN|\psi|^2\psi. \quad (1.3)$$

Se, pelo contrário, o gás é denso o bastante para que $4aN|\psi|^2 \gg 1$ (regime de Thomas-Fermi), obtemos a equação quadrática

$$i\hbar\partial_t\psi = \frac{-\hbar^2}{2m}\partial_{zz}^2\psi + V_z(z)\psi + 2\hbar\omega_\perp\sqrt{aN}|\psi|\psi. \quad (1.4)$$

As equações (1.3) e (1.4) tem regimes de validade mais estreitos que (1.2) e podem apresentar desvios de comportamento consideráveis fora de seus respectivos regimes quando comparadas com (1.2).

O termo cinético da EGP e das equações axiais (1.2), (1.3) e (1.4) dispersa as soluções, ainda assim, os condensados que elas descrevem podem apresentar certas estruturas que evoluem sem se dispersarem. Essas estruturas unidimensionais são excitações para as quais a dispersão cinética é contrabalanceada em justa medida pela não linearidade evoluindo com preservação da forma. Essas estruturas são chamadas *sólitons* [15, 5, 16] e tem despertado um interesse particular da comunidade acadêmica. Particularmente os sólitons escuros (*dark solitons*) se caracterizam por uma variação repentina na fase do campo e por uma depressão acentuada do seu módulo nessa região [17] (veja Fig. 1.1). Essa espécie de sólitons é dividida em duas classes: os *black solitons*, que são soluções estáticas nas quais o mínimo da densidade é zero, e os *gray solitons*, soluções que se propagam e cujo mínimo é diferente de zero. Os sólitons escuros foram observados em diversos sistemas físicos além dos condensados de Bose-Einstein [17, 18, 19], como em fibras ópticas [20, 21], superfícies líquidas [22], filmes magnéticos [23].

Os sólitons escuros foram sugeridos pela primeira vez em 1971 por Tsuzuki [24, 12] que obteve soluções desse tipo para a equação de Gross-Pitaevskii com potencial nulo. A primeira observação experimental só foi ocorrer em 1987 na forma de um “pulso negativo” transmitido em uma fibra ótica [12]. Quanto aos BECs, somente em 1999, Burger *et al.* os observaram em um condensado quasi-unidimensional de rubídio-87 [17, 12].

Um dos métodos usados para gerar um sóliton escuro em um BEC é o método de impressão de fase (*phase imprinting method*) [5] que consiste em iluminar somente uma parte do condensado com um laser de frequência específica durante um intervalo de tempo. Devido ao fato

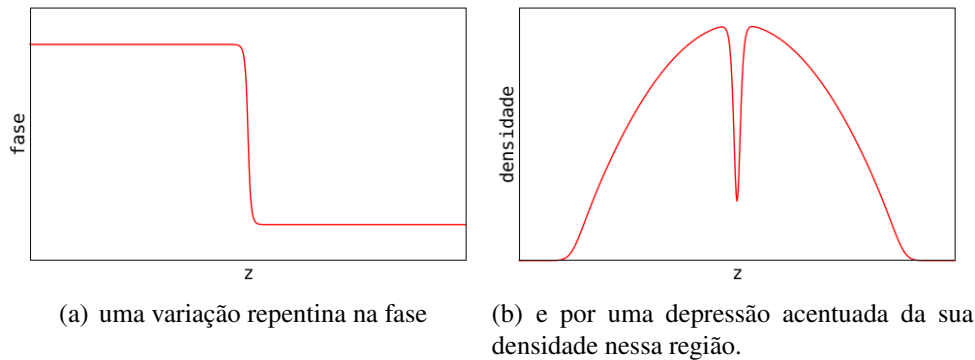


Figura 1.1 Os sólitons escuros são caracterizados por

de que a incidência de radiação sobre um átomo com frequências de transição bem distintas da frequência incidida promove um desvio na energia do átomo de maneira que a evolução temporal da sua fase muda, o procedimento gera um gradiente na fase da solução em torno da interface entre a região iluminada e a não iluminada. A radiação também perturba a densidade em torno da interface. Essa perturbação na fase e na densidade evolui para um sólito escuro, ou um conjunto deles, mais as ondas de choque [5].

Os sólitons escuros são estruturas fundamentalmente unidimensionais. Quando o confinamento radial não é suficientemente forte e a dinâmica do sistema não é mais quasi-unidimensional, o sólito escuro, uma vez criado, à medida que evolui, vai se deformando até decair em outras estruturas mais estáveis, como vórtices e ondas de som [15]. Essa fonte de instabilidade é chamada de *snake instability* e é um dos efeitos que pode abreviar o tempo de vida do sólito. Agora, quando o confinamento radial é bastante estreito, a dinâmica do condensado passa a ser genuinamente quasi-unidimensional, o sólito torna-se dinamicamente estável.

Outra fonte de instabilidade para o sólito é a sua interação com o som. De fato, quando submetido a um potencial externo, como o potencial que aprisiona o condensado, o sólito emite som, que nada mais é que um outro tipo de excitação pouco energética [5] que se propaga pelo condensado, assim como o sólito. Por outro lado, quando o sólito colide com uma onda sonora, ele pode reinteragir com ela, absorvendo-a. A taxa de emissão sonora é proporcional ao quadrado da aceleração do sólito [15, 25]. Se não houver equilíbrio entre os mecanismos de emissão e absorção, o sólito vai ganhando velocidade por anti-amortecimento (*anti-damping*), se tornando cada vez mais raso, até evanescer tornando-se indistinto da densidade de fundo, restando essa densidade e outras excitações que não o sólito.

O potencial de que se tem conhecimento onde esse equilíbrio ocorre é o potencial harmônico. Quando submetido a ele, o sólito é realimentado pelas ondas sonoras que ele mesmo emitiu, oscilando dentro da armadilha sem nunca evanescer [15, 25].

No presente trabalho comparamos a evolução do sóliton no condensado segundo os modelos cúbico, Eq. (1.3), e de Muñoz-Mateo e Delgado, Eq. (1.2), e estimamos os seus tempos de vida em cada modelo, apontando o regime em que os dois modelos se assemelham e o regime em que diferenças significativas são observadas. No capítulo 2 apresentamos uma breve exposição das condições que envolvem a derivação da equação de Gross-Pitaevskii, sua redução dimensional, bem como a construção de funções de onda com sólitons escuros. No capítulo 3 expomos os resultados obtidos das simulações e a sua discussão.

Sólitons escuros em condensados de Bose-Einstein

2.1 Condensados atômicos

No contexto da Mecânica Quântica, um gás de átomos é um sistema extremamente complicado. Elétrons, prótons e nêutrons interagem uns com os outros a todo momento, dificultando até a impossibilidade a determinação mesmo numérica dos autoestados do hamiltoniano. Em condições extremamente específicas, entretanto, alguns desses gases apresentam a formação de condensados atômicos, os quais, devido à singularidade da distribuição do número de ocupação de estados de partícula, são sistemas bem mais simples, o que possibilita o cálculo aproximado de suas propriedades.

O estado de partícula sobre o qual um gás atômico rarefeito com interações interatômicas fracas se condensa (suposto que seja único) satisfaz de maneira aproximada à equação de Gross-Pitaevskii, (2.19), que determina a sua evolução. Como, atualmente, esse estado pode ser observado diretamente através de experimentos [7] e como dele podemos extrair diversas propriedades do condensado [16], essa equação tem sido objeto de grande interesse da comunidade científica¹. Além disso, a equação de Gross-Pitaevskii aparece em outras áreas da física, como óptica não linear.

A dedução rigorosa dessa equação não é uma tarefa trivial e tem sido tema de trabalhos desde a sua descoberta em 1961 [26] até os dias de hoje [27, 28, 29, 30, 31]. As seções seguintes apresentam as principais ideias e considerações envolvidas na obtenção da equação de Gross-Pitaevskii, com o objetivo duplo de explicitar o seu regime de validade.

O problema original, a dinâmica de um sistema de muitos corpos, apresenta duas dificuldades básicas, a complicação da parte interativa do hamiltoniano e o número de graus de liberdade que determina o estado. A primeira eliminamos em dois passos: primeiramente supomos que todos os átomos ocupam um mesmo estado interno estacionário e integramos a dependência das interações com relação aos graus de liberdade internos; depois, admitimos que o alcance das interações interatômicas é bem menor que a distância média entre os átomos, o que nos

¹Uma busca simples da expressão “gross pitaveskii” no Web of Science (<http://www.webofknowledge.com>) revela que só no ano de 2013 foram publicados pelo menos 205 trabalhos científicos na área.

permite substituir um potencial de interação dependente da distância por um potencial de contato. A segunda dificuldade, o número de graus de liberdade do estado do sistema, é suprimida ao admitirmos que a maioria esmagadora dos átomos se encontra no estado de condensado.

2.1.1 Interação de van der Waals

Dentre todas as espécies atômicas, os metais alcalinos de spin inteiro talvez sejam hoje as mais adequadas para o estudo do fenômeno da condensação de Bose-Einstein. Por dois motivos: as interações interatômicas de um gás alcalino são bem conhecidas e sabidamente fracas, o que facilita a descrição teórica, e, com o aprimoramento das técnicas de resfriamento e aprisionamento de átomos neutros, as condições experimentais propícias ao aparecimento da condensação nesses gases bem como evidências da condensação já puderam ser obtidas desde 1995 [7]. Com essas considerações em mente, nesta seção vamos simplificar o potencial de interação eletrostática entre dois átomos alcalinos suprimindo a sua dependência com os graus de liberdade internos de cada átomo. Obteremos, no limite em que a distância entre os átomos é bem maior que o raio de Bohr, a interação de van der Waals, cuja dependência com a distância interatômica é muito mais simples que a interação eletrostática.

Se considerarmos que os graus de liberdade internos dos átomos do gás estejam congelados, veremos que eles não vão influenciar na dinâmica do gás senão na determinação das interações interatômicas e das interações com o potencial de aprisionamento externo, quero dizer, esses graus de liberdade não evoluirão com o tempo e podem ser ignorados na evolução do sistema. Essa simplificação nos permite tratar os átomos como partículas distintas, uma vez que cada átomo interage segundo o seu estado interno. Se, mais do que isso, os átomos ocuparem um mesmo estado interno, eles poderão ser entendidos como partículas de um mesmo tipo submetidas a um mesmo potencial de interação que é função exclusivamente dos seus graus de liberdade externos.

A distribuição eletrônica do estado fundamental de um metal alcalino é caracterizada pelo preenchimento completo das camadas menos energéticas, restando o último elétron para ocupar a camada seguinte. O modelo do átomo hidrogenóide, Fig. 2.1 – formado pelo núcleo eletrostaticamente blindado pela nuvem eletrônica das camadas interiores e pelo elétron da camada mais externa – é adequado para a descrição desse sistema. A interação eletrostática entre dois átomos nesse modelo é simplesmente a soma das interações núcleo-núcleo, núcleo-elétron,

elétron-núcleo, elétron-elétron²,

$$\hat{V} = \hat{V}_{N_1 N_2} + \hat{V}_{N_1 e_2} + \hat{V}_{e_1 N_2} + \hat{V}_{e_1 e_2} .$$

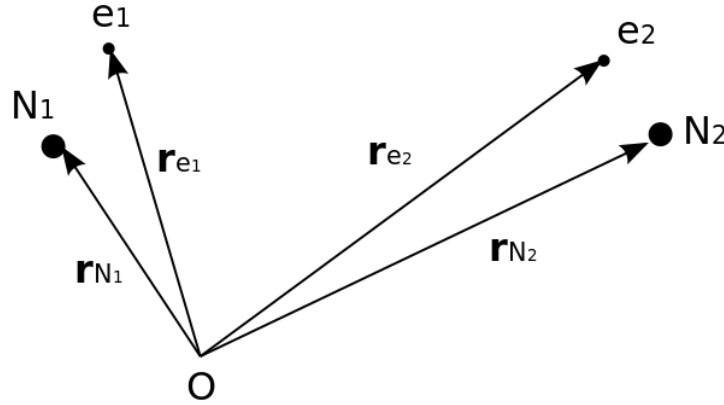


Figura 2.1 Dois átomos hidrogenóides, com núcleos N_1 e N_2 e elétrons e_1 e e_2 , respectivamente.

Uma vez que a interação eletrostática entre duas partículas,

$$\hat{V}_{uv} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q_u q_v}{|\hat{\mathbf{r}}_u - \hat{\mathbf{r}}_v|} ,$$

é uma função da distância entre elas,³

$$\hat{V}_{uv} = \frac{q_u q_v}{4\pi\epsilon_0} \int d^3\mathbf{r} d^3\mathbf{r}' |\mathbf{r}\mathbf{r}'\rangle_{uv} \langle\mathbf{r}'\mathbf{r}| \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} ,$$

o potencial da interação eletrostática entre dois átomos,

$$\hat{V} = \int d^3\mathbf{r}_a \int d^3\mathbf{r}_b \int d^3\mathbf{r}_c \int d^3\mathbf{r}_d |\mathbf{r}_a \mathbf{r}_b \mathbf{r}_c \mathbf{r}_d\rangle_{N_1 N_2 e_1 e_2} V(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b, \mathbf{r}_c, \mathbf{r}_d) {}_{e_2 e_1 N_2 N_1} \langle\mathbf{r}_d \mathbf{r}_c \mathbf{r}_b \mathbf{r}_a| ,$$

²Todo observável físico, isto é, todo operador, será representado por uma letra com um acento circunflexo, \hat{x} .

³O índice nos kets (bras), $|\rangle_u, u \langle|$, indicam a partícula a que o estado se refere. Quando aparecer mais de um índice, temos o produto de kets (bras) de partícula.

$$|a_1 a_2 \dots\rangle_{u_1 u_2 \dots} := |a_1\rangle_{u_1} |a_2\rangle_{u_2} \dots$$

$${}_{u_1 u_2 \dots} \langle a_1 a_2 \dots| := {}_{u_1} \langle a_1| {}_{u_2} \langle a_2| \dots$$

será função das distâncias entre as partículas atômicas,

$$V(\mathbf{r}_{N_1}, \mathbf{r}_{N_2}, \mathbf{r}_{e_1}, \mathbf{r}_{e_2}) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{|\mathbf{r}_{N_1} - \mathbf{r}_{N_2}|} - \frac{1}{|\mathbf{r}_{N_1} - \mathbf{r}_{e_2}|} - \frac{1}{|\mathbf{r}_{e_1} - \mathbf{r}_{N_2}|} + \frac{1}{|\mathbf{r}_{e_1} - \mathbf{r}_{e_2}|} \right).$$

Na maior parte do tempo de interação, senão durante todo ele, a distância entre os núcleos atômicos, $\mathbf{r}_{12} := \mathbf{r}_{N_1} - \mathbf{r}_{N_2}$, é bem maior que a escala atômica de distâncias a_0 (raio de Bohr), de modo que as distâncias que definem as contribuições de cada uma das interações não se desviam muito da distância entre os núcleos⁴,

$$\frac{r_{12}}{|\mathbf{r}_u - \mathbf{r}_v|} \approx 1 \quad (\forall u \in \{N_1, e_1\}, \forall v \in \{N_2, e_2\}). \quad (2.1)$$

Em primeira ordem, a expansão do potencial eletrostático em $1/r_{12}$ resulta nula. Duas ordens acima, uma vez que

$$\frac{1}{|\mathbf{r}_u - \mathbf{r}_v|} = \frac{1}{r_{12}} \left(1 + \frac{|\mathbf{r}_u - \mathbf{r}_v|^2 - r_{12}^2}{r_{12}^2} \right)^{-1/2} \quad (u \in \{N_1, e_1\} \text{ e } v \in \{N_2, e_2\}),$$

que (2.1) e que

$$(1+x)^{-1/2} \approx 1 - \frac{x}{2} + \frac{3}{8}x^2 \quad (x \rightarrow 0),$$

a expansão

$$\hat{V} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\hat{\mathbf{r}}_{12}|^3} \left[\hat{\mathbf{r}}_1 \cdot \hat{\mathbf{r}}_2 - 3 \left(\hat{\mathbf{r}}_1 \cdot \frac{\hat{\mathbf{r}}_{12}}{|\hat{\mathbf{r}}_{12}|} \right) \left(\hat{\mathbf{r}}_2 \cdot \frac{\hat{\mathbf{r}}_{12}}{|\hat{\mathbf{r}}_{12}|} \right) \right] \quad (2.2)$$

é não nula, decai com a terceira potência da distância interatômica e apresenta tal dependência com os momentos de dipolo elétrico dos átomos, $e\mathbf{r}_1 := e\mathbf{r}_{e_1} - e\mathbf{r}_{N_1}$ e $e\mathbf{r}_2 := e\mathbf{r}_{e_2} - e\mathbf{r}_{N_2}$, que configura o potencial de interação entre os dipolos atômicos.

A energia total do sistema é dada pela soma das energias cinéticas das partículas, \hat{T}_i , das energias de interação delas com o potencial externo que as aprisiona, \hat{V}_i^{ext} , e das energias de interação entre elas, \hat{V} ,

$$\hat{H} = \sum_{i \in \{N_1, \dots, e_2\}} \hat{T}_i + \hat{V}_i^{\text{ext}} + \hat{V}.$$

Dado que a interação eletrostática entre elétron e núcleo de um mesmo átomo é da ordem de $1/a_0$ e que a interação dipolo-dipolo é da ordem de a_0^2/r_{12}^3 , a interação dipolo-dipolo é somente uma perturbação da energia do sistema não interagente, $\hat{H}_0 = \sum_{i \in \{N_1, \dots, e_2\}} \hat{T}_i + \hat{V}$.

Façamos uma estimativa dos autoestados do sistema não interagente e apliquemos a teoria

⁴Para todo vetor \mathbf{v} , a variável v indica o seu módulo.

de perturbação [32, 33, 34] para estimar a energia do sistema com interação. Para tanto, convém substituímos a representação das partículas atômicas pela representação equivalente da partícula de centro de massa e da partícula relativa.

$$\begin{cases} c_i : & M := m_N + m_e, \quad \hat{\mathbf{R}}_i := \frac{m_N \hat{\mathbf{r}}_{N_i} + m_e \hat{\mathbf{r}}_{e_i}}{M}, \quad \hat{\mathbf{P}}_i := \frac{d\hat{\mathbf{R}}_i}{dt} \\ r_i : & \frac{1}{\mu} := \frac{1}{m_N} + \frac{1}{m_e}, \quad \hat{\mathbf{r}}_i := \hat{\mathbf{r}}_{e_i} - \hat{\mathbf{r}}_{N_i}, \quad \hat{\mathbf{p}}_i := \frac{d\hat{\mathbf{r}}_i}{dt}. \end{cases} \quad (i = 1 \text{ e } i = 2)$$

A energia cinética de um átomo é a soma da energia cinética da partícula de centro de massa, $\hat{T}_{c_i} = \hat{\mathbf{P}}_i/2M$, com a energia cinética da partícula relativa, $\hat{T}_{r_i} = \hat{\mathbf{p}}_i/2\mu$. Em situações experimentais usuais, o gradiente do potencial de interação externo tem escala muito maior que a dimensão do átomo, o que significa que o potencial é aproximadamente constante em toda a região do átomo. Como o valor dessa constante vai depender fundamentalmente da posição do átomo, o potencial externo pode ser aproximado a um operador do centro de massa atômico,

$$\hat{V}_{N_i}^{\text{ext}} + \hat{V}_{e_i}^{\text{ext}} \approx \hat{U}_{c_i} \quad (i = 1 \text{ e } i = 2).$$

Com isso, o hamiltoniano não perturbado é a soma entre operadores unicamente de centro de massa e operadores unicamente de partícula relativa⁵

$$\hat{H}_0 = \hat{T}_{c_1} + \hat{U}_{c_1} + \hat{T}_{c_2} + \hat{U}_{c_2} + \hat{T}_{r_1} + \hat{V}_{r_1} + \hat{T}_{r_2} + \hat{V}_{r_2},$$

efetivamente o hamiltoniano de um sistema de quatro partículas não interagentes cujos autoestados são os produtos dos autoestados de partícula,

$$\begin{aligned} (\hat{T}_{c_i} + \hat{U}_{c_i}) |\alpha\rangle_{c_i} &= E_\alpha |\alpha\rangle_{c_i}, \\ (\hat{T}_{r_i} + \hat{V}_{r_i}) |n\rangle_{r_i} &= E_n |n\rangle_{r_i}. \end{aligned}$$

As partículas relativas são partículas se movendo em um potencial central de Coulomb, seus autoestados, $\langle \mathbf{r} | 0 \rangle = \psi_0(\mathbf{r}) e^{-iE_0 t/\hbar}$, são idênticos ao estado fundamental do átomo de hidrogênio

$$\psi_0(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{a_0^{3/2}} e^{-r/a_0},$$

uma função par em cada uma das coordenadas cartesianas, $\mathbf{r} = x\mathbf{i} + y\mathbf{j} + z\mathbf{k}$, da posição. Em decorrência da grande diferença entre as massas do núcleo e do elétron, os centros de massa

⁵Defina-se $\hat{V}_{r_i} := \hat{V}_{N_i e_i}$.

atômicos estarão sempre muito próximos dos seus respectivos núcleos,

$$\hat{\mathbf{R}}_1 = \hat{\mathbf{r}}_{N_1} + \frac{m_e}{M} \hat{\mathbf{r}}_1 \approx \hat{\mathbf{r}}_{N_1}, \quad \hat{\mathbf{R}}_2 = \hat{\mathbf{r}}_{N_2} - \frac{m_e}{M} \hat{\mathbf{r}}_2 \approx \hat{\mathbf{r}}_{N_2},$$

o que, por sua vez, faz do potencial de dipolo (até então uma função ímpar das coordenadas cartesianas da distância entre os núcleos atômicos e das coordenadas relativas, Eq. (2.2)) uma função ímpar das coordenadas cartesianas dos centros de massa e das coordenadas relativas,

$$\hat{V} \approx \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\hat{\mathbf{R}}_1 - \hat{\mathbf{R}}_2|^3} \left[\hat{\mathbf{r}}_1 \cdot \hat{\mathbf{r}}_2 - 3 \left(\hat{\mathbf{r}}_1 \cdot \frac{\hat{\mathbf{R}}_1 - \hat{\mathbf{R}}_2}{|\hat{\mathbf{R}}_1 - \hat{\mathbf{R}}_2|} \right) \left(\hat{\mathbf{r}}_2 \cdot \frac{\hat{\mathbf{R}}_1 - \hat{\mathbf{R}}_2}{|\hat{\mathbf{R}}_1 - \hat{\mathbf{R}}_2|} \right) \right].$$

Essas relações de paridade implicam na nulidade da energia de perturbação de primeira ordem da interação de dipolo de um autoestado $|\alpha\beta 00\rangle_{c_1 c_2 r_1 r_2}$ qualquer,

$$V^{(1)} = {}_{c_2 c_1 r_2 r_1} \langle \beta \alpha 00 | \hat{V} | 00 \alpha \beta \rangle_{r_1 r_2 c_1 c_2}.$$

Desse modo, faz-se necessário o cálculo da energia de perturbação de segunda ordem,

$$V^{(2)} = \sum'_{(\gamma, \delta, n, m)} \frac{| {}_{c_2 c_1 r_2 r_1} \langle \beta \alpha 00 | \hat{V} | mn \gamma \delta \rangle_{r_1 r_2 c_1 c_2} |^2}{E_{\alpha\beta 00} - E_{\gamma\delta mn}},$$

na qual $E_{\gamma\delta mn} = E_\gamma + E_\delta + E_m + E_n$ e \sum' é a soma sobre todos os autoestados exceto $(\gamma, \delta, n, m) = \{(\alpha, \beta, 0, 0), (\beta, \alpha, 0, 0)\}$. Como as interações dentro do núcleo são muitas ordens de grandeza mais fortes que a interação núcleo-elétron, esta última é uma perturbação desprezível na determinação dos autoestados nucleares e, por isso, não deve influenciar significativamente na dinâmica do núcleo. Assim, do ponto de vista do elétron o núcleo é quasi-estático, as autofunções eletrônicas quase coincidem com as autofunções da partícula relativa e as autofunções do centro de massa quase coincidem com as autofunções nucleares. Como as autofunções nucleares são bastante localizadas, as autofunções do centro de massa são quase autofunções de $\hat{\mathbf{R}}_i$. Fazendo uso dessa consideração no cálculo da energia de perturbação

$$V^{(2)} = \int d^3 \hat{\mathbf{R}}_3 \int d^3 \hat{\mathbf{R}}_4 \sum'_{(n, m)} \frac{| {}_{c_2 c_1 r_2 r_1} \langle \hat{\mathbf{R}}_2 \hat{\mathbf{R}}_1 00 | \hat{V} | mn \hat{\mathbf{R}}_3 \hat{\mathbf{R}}_4 \rangle_{r_1 r_2 c_1 c_2} |^2}{E_{\hat{\mathbf{R}}_1 \hat{\mathbf{R}}_2 00} - E_{\hat{\mathbf{R}}_3 \hat{\mathbf{R}}_4 mn}},$$

(onde $(\hat{\mathbf{R}}_3, \hat{\mathbf{R}}_4, n, m) \neq \{(\hat{\mathbf{R}}_1, \hat{\mathbf{R}}_2, 0, 0), (\hat{\mathbf{R}}_2, \hat{\mathbf{R}}_1, 0, 0)\}$) e da ortonormalidade dos estados na base

de \mathbf{R} , calculamos a energia de perturbação do estado $|\hat{\mathbf{R}}_1 \hat{\mathbf{R}}_2 00\rangle_{r_2}$,

$$V^{(2)} = -\frac{C}{|\mathbf{R}_2 - \mathbf{R}_1|}, \quad (2.3)$$

$$C := \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\right)^2 \sum_{(m,n) \neq (0,0)} \frac{1}{E_m + E_n - 2E_0} \left| {}_{r_1 r_2} \langle 00 | \hat{\mathbf{r}}_1 \cdot \hat{\mathbf{r}}_2 - 3 \left(\hat{\mathbf{r}}_1 \cdot \frac{\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2}{|\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2|} \right) \left(\hat{\mathbf{r}}_2 \cdot \frac{\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2}{|\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2|} \right) | \alpha \beta \rangle_{r_1 r_2} \right|^2.$$

Como os estados $|\alpha\rangle_{r_1} |\beta\rangle_{r_2}$ do sistema não perturbado independem de $\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2$ e como o estado fundamental $|0\rangle_{r_1} |0\rangle_{r_2}$ é esfericamente simétrico, a soma na definição de C deve independe dessa direção. Logo, a única dependência da energia de perturbação com a distância entre os átomos é aquela explícita na Eq. (2.3).

Uma vez que todos os átomos do gás estão no estado fundamental e que não devem evoluir para nenhum outro, podemos substituir no hamiltoniano do gás a energia da interação de dipolo-dipolo dependente do estado interno dos átomos, Eq. (2.2), pela energia da interação de van der Waals

$$\hat{V}^{(2)} = -\frac{C}{|\hat{\mathbf{R}}_2 - \hat{\mathbf{R}}_1|} \quad (2.4)$$

que depende exclusivamente da distância entre eles.

2.1.2 Potencial de contato

Se o gás for rarefeito ao ponto de o raio de ação do potencial de interação interatômico ser bem menor que a distância média entre os átomos, as interações entre três ou mais átomos serão praticamente suprimidas. Com isso, os átomos do gás serão espalhados uns pelos outros dois-a-dois. Uma vez que suprimimos a dependência do hamiltoniano do sistema de dois átomos com os graus de liberdade internos, podemos tratar esse problema como o espalhamento de duas partículas. Se desconsiderarmos a formação de moléculas, poderemos estimar o comportamento assintótico dessas partículas a cada interação e, desse comportamento, definir uma interação de contato que espalhe os átomos como a interação de van der Waals.

O hamiltoniano de duas dessas partículas é composto pelos termos cinéticos, \hat{T}_i , os termos de interação com o potencial externo, $\hat{U}_i = U(\hat{\mathbf{R}}_i)$, que é função da posição da partícula, e o termo da interação de van der Waals, $\hat{V}^{(2)} = V^{(2)}(\hat{\mathbf{R}}_1 - \hat{\mathbf{R}}_2)$, que é função da distância entre elas. Se o comprimento característico das variações do potencial externo for muito maior que o alcance da interação entre as partículas, como é usual, então, durante a interação – quando elas estão próximas o suficiente para que $\hat{V}^{(2)}$ não seja desprezível – o potencial externo, tanto na

posição de uma partícula, quanto na posição da outra, ou ainda no centro de massa do sistema⁶, terá um mesmo valor. O hamiltoniano, então, pode ser escrito como uma soma entre operadores de centro de massa e operadores da partícula relativa,

$$\hat{H} = \hat{T}_{cm} + U(\hat{\mathbf{R}}) + \hat{T}_{rel} + V^{(2)}(\hat{\mathbf{r}}) ,$$

e os autoestados do sistema são produtos entre autoestados do centro de massa e autoestados da partícula relativa,

$$\begin{aligned} (\hat{T}_{cm} + U(\hat{\mathbf{R}})) |\alpha\rangle_{cm} &= E_\alpha |\alpha\rangle_{cm} , \\ (\hat{T}_{rel} + V^{(2)}(\hat{\mathbf{r}})) |n\rangle_{rel} &= E_n |n\rangle_{rel} . \end{aligned}$$

Uma vez que a equação diferencial da evolução para um estado $|\psi, t\rangle$ da partícula relativa⁷,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi, t\rangle = \hat{H} |\psi, t\rangle \quad (\hat{H} := \hat{T} + V^{(2)}(\hat{\mathbf{r}})) ,$$

é uma equação de primeira ordem no tempo e que \hat{H} não tem dependência explícita com o tempo, formalmente a sua solução pode ser escrita como a evolução de um estado em um instante arbitrário t_0 ,

$$|\psi, t\rangle = \exp[-i\hat{H}(t - t_0)/\hbar] |\psi, t_0\rangle .$$

Para nos certificarmos de que esta solução seja uma evolução à partir de um instante anterior ($t_0 < t$), a multiplicaremos pela função degrau $\Theta(t - t_0)$,

$$\Theta(\tau) = \begin{cases} 0 & , \quad \tau < 0 \\ 1 & , \quad \tau \geq 0 \end{cases} .$$

Projetando-a sobre um vetor da base de posição, $\langle \mathbf{r} |$, obtemos uma equação para a função de onda

$$\Theta(t - t_0) \psi(\mathbf{r}, t) = \int d^3 \mathbf{r}' K(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t_0) \psi(\mathbf{r}', t_0) \quad (2.5)$$

⁶Definimos o centro de massa e a partícula relativa respectivamente por

$$\begin{cases} cm : & M_2 := 2M, \quad \hat{\mathbf{R}} := \frac{\hat{\mathbf{R}}_1 + \hat{\mathbf{R}}_2}{2}, \quad \hat{\mathbf{P}} := M_2 \frac{d\hat{\mathbf{R}}}{dt} \\ rel : & 1/\mu_2 := 2/M, \quad \hat{\mathbf{r}} := \hat{\mathbf{R}}_1 - \hat{\mathbf{R}}_2 \quad \hat{\mathbf{p}} := \mu_2 \frac{d\hat{\mathbf{r}}}{dt} . \end{cases}$$

⁷A partir deste ponto até o final da seção suprimiremos o índice indicativo da partícula, “rel”, nos operadores e estados, considerando, até que se diga o contrário, que se referem à partícula relativa.

em termos do propagador

$$K(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t_0) := \Theta(t - t_0) \langle \mathbf{r} | \exp[-i\hat{H}(t - t_0)/\hbar] | \mathbf{r}' \rangle,$$

que é a projeção da evolução de um autoestado da base de posição $|\mathbf{r}'\rangle$ sobre outro autoestado $\langle \mathbf{r} |$. Atuando a evolução temporal $\exp[-i\hat{H}(t - t_0)/\hbar]$ sobre a expansão de $|\mathbf{r}'\rangle$ em termos da base $\{|n\rangle\}$ de autoestados de energia e considerando a forma integral da função Θ ,

$$\Theta(\tau) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \frac{-1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-iE\tau/\hbar}}{E + i\varepsilon} dE,$$

escrevemos o propagador em termos da sua transformada de Fourier,

$$K(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t_0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} K_E(\mathbf{r}, \mathbf{r}') e^{-iE(t-t_0)/\hbar} dE, \quad (2.6)$$

cuja forma é dada por

$$K_E(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{i}{\sqrt{2\pi}} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \sum_n \frac{\langle \mathbf{r} | n \rangle \langle n | \mathbf{r}' \rangle}{E - E_n + i\varepsilon} = \frac{i}{\sqrt{2\pi}} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \langle \mathbf{r} | \frac{1}{E - \hat{H} + i\varepsilon} | \mathbf{r}' \rangle. \quad (2.7)$$

As relações de comutação canônicas entre as posições e momentos nucleares e eletrônicos implicam nas mesmas relações canônicas para as posições e momentos da partícula de centro de massa e da partícula relativa do sistema, estas relações, por sua vez, implicam em $\langle \mathbf{r} | \hat{\mathbf{p}} | \psi \rangle = -i\hbar \nabla_{\mathbf{r}} \langle \mathbf{r} | \psi \rangle$, expressão que nos permite escrever a equação de Schrödinger para a partícula relativa

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t) = H^r \psi(\mathbf{r}, t), \quad \left(H^r := \frac{-\hbar^2}{2\mu_2} \nabla_{\mathbf{r}}^2 + V^{(2)}(\mathbf{r}) \right). \quad (2.8)$$

Derivando (2.5) por t e tomando (2.8) em consideração, obtemos a equação de evolução do propagador⁸

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} K(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t_0) = H^r K(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t_0) + i\hbar \delta^3(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(t - t_0). \quad (2.9)$$

Substituindo (2.6) em (2.9), obtemos a equação de autovalor para a transformação $K_E(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ do propagador⁹

$$H^r K_E(\mathbf{r}, \mathbf{r}') + \frac{i\hbar}{\sqrt{2\pi}} \delta^3(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = E K_E(\mathbf{r}, \mathbf{r}'). \quad (2.10)$$

Da mesma forma como definimos o propagador associado a \hat{H} , definimos a sua transfor-

⁸Fazendo o uso de $d\Theta/dt = \delta(t)$.

⁹Fazendo o uso de $\int_{-\infty}^{\infty} e^{iqx} dq = 2\pi\delta(x)$.

mada e encontramos equações que essas funções devam satisfazer, podemos definir o propagador $K^0(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t_0)$ associado ao hamiltoniano não interagente $\hat{H}^0 := \hat{T}$, calcular a sua transformada $K_E^0(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ e encontrar equações semelhantes àquelas que obtemos anteriormente,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} K^0(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t_0) = H^{0r} K^0(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t_0) + i\hbar \delta^3(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(t - t_0), \quad (2.11)$$

$$H^{0r} K_E^0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') + \frac{i\hbar}{\sqrt{2\pi}} \delta^3(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = E K_E^0(\mathbf{r}, \mathbf{r}'). \quad (2.12)$$

Esta última equação, à exceção do fator $i\hbar/\sqrt{2\pi}$, é a equação que define a função de Green $G_E^0(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ associada ao problema de autovalor de \hat{H}^0 ,

$$H^{0r} \phi_n^0(\mathbf{r}) = E_n \phi_n^0(\mathbf{r}), \quad (2.13)$$

o que significa que $K_E^0 = i\hbar/\sqrt{2\pi} G_E^0$. As funções de Green do problema não interagente (2.13) são importantes porque com elas podemos construir soluções

$$\phi_n(\mathbf{r}) = C_1 \phi_n^0(\mathbf{r}) + \frac{\sqrt{2\pi}}{i\hbar} \int d^3 \mathbf{r}' K_{E_n}^0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') V^{(2)}(\mathbf{r}') \phi_n(\mathbf{r}') \quad (2.14)$$

do problema interagente,

$$H^r \phi_n(\mathbf{r}) = E_n \phi_n(\mathbf{r}). \quad (2.15)$$

As funções de onda dos átomos são pacotes de onda limitados espacialmente, se com a interação não há formação de molécula, então a interação entre eles se restringe a um intervalo finito de tempo (T_1, T_2) . Em qualquer instante $t \ll T_1$ os átomos estão tão afastados que efetivamente não interagem, suas autofunções de energia $\psi_n(\mathbf{r}, t \ll T_1)$ coincidindo com as autofunções do problema não interagente $H^{0r} \psi_n^0(\mathbf{r}, t) = E_n \psi_n^0(\mathbf{r}, t)$. Já durante a interação as autofunções $\psi_n(\mathbf{r}, t > T_1) = \phi_n(\mathbf{r}) e^{-iE_n t/\hbar}$ são espalhadas, satisfazendo a expressão (2.14), na qual o segundo termo corresponde a uma onda esférica se afastando do centro espalhador. Como este segundo termo tem norma finita, ele não contribui para a norma infinita da função. A conservação da norma durante o espalhamento implica portanto $C_1 = 1$.

As autofunções $\phi_n^0(\mathbf{r})$ são autofunções do momento. Escrevendo (2.14) em termos dos autoestados de momento normalizados $\langle \mathbf{p}' | \mathbf{p} \rangle = \delta^3(\mathbf{p}' - \mathbf{p})$ e substituindo (2.7), obtemos

$$\langle \mathbf{r} | n \rangle = \langle \mathbf{r} | \mathbf{p}_n \rangle + \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \int d^3 \mathbf{r}' \int \frac{d^3 \mathbf{p}'}{(2\pi\hbar)^3} \frac{e^{i\mathbf{p}' \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')/\hbar}}{E_n - p'^2/2\mu + i\varepsilon} V^{(2)}(\mathbf{r}') \langle \mathbf{r}' | n \rangle.$$

Podemos resolver a integral em \mathbf{p}' com o método dos resíduos e expressá-la em termos de

k_n ¹⁰,

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \int \frac{d^3 \mathbf{p}'}{(2\pi\hbar)^3} \frac{e^{i\mathbf{p}' \cdot (\mathbf{r}-\mathbf{r}')/\hbar}}{E_n - p'^2/2\mu_2 + i\varepsilon} = \frac{-2\mu_2}{\hbar^2} \frac{e^{ik_n|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{4\pi|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|},$$

o que nos conduz a

$$\langle \mathbf{r}|n \rangle = \langle \mathbf{r}|\mathbf{p}_n \rangle + \int d^3 \mathbf{r}' \left(-\frac{e^{ik_n|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{4\pi|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \right) \left(\frac{2\mu_2}{\hbar^2} V^{(2)}(r') \right) \langle \mathbf{r}'|n \rangle.$$

Aplicando essa equação sobre si mesma

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r}|n \rangle = \langle \mathbf{r}|\mathbf{p}_n \rangle &+ \int d^3 \mathbf{r}' \left(-\frac{e^{ik_n|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{4\pi|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \right) \left(\frac{2\mu_2}{\hbar^2} V^{(2)}(r') \right) \times \\ &\times \left[\langle \mathbf{r}'|\mathbf{p}_n \rangle + \int d^3 \mathbf{r}'' \left(-\frac{e^{ik_n|\mathbf{r}'-\mathbf{r}''|}}{4\pi|\mathbf{r}'-\mathbf{r}''|} \right) \left(\frac{2\mu_2}{\hbar^2} V^{(2)}(r'') \right) \langle \mathbf{r}''|n \rangle \right] \end{aligned}$$

recursivamente obtemos a expansão de Born para o espalhamento.

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r}|n \rangle = \langle \mathbf{r}|\mathbf{p}_n \rangle &+ \int d^3 \mathbf{r}' \left(-\frac{e^{ik_n|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{4\pi|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \right) \left(\frac{2\mu_2}{\hbar^2} V^{(2)}(r') \right) \langle \mathbf{r}'|\mathbf{p}_n \rangle + \\ &+ \int d^3 \mathbf{r}' \left(-\frac{e^{ik_n|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{4\pi|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \right) \left(\frac{2\mu_2}{\hbar^2} V^{(2)}(r') \right) \int d^3 \mathbf{r}'' \left(-\frac{e^{ik_n|\mathbf{r}'-\mathbf{r}''|}}{4\pi|\mathbf{r}'-\mathbf{r}''|} \right) \left(\frac{2\mu_2}{\hbar^2} V^{(2)}(r'') \right) \langle \mathbf{r}''|\mathbf{p}_n \rangle + \dots \end{aligned}$$

O primeiro termo da expansão não depende do potencial, o segundo tem dependência de 1^a ordem, o terceiro tem dependência de 2^a ordem e assim por diante. Como o potencial é fraco, o espalhamento será efetuado principalmente pelo termo de primeira ordem (*aproximação de Born*), isto é,

$$\langle \mathbf{r}|n \rangle \approx \langle \mathbf{r}|\mathbf{p}_n \rangle - \frac{1}{4\pi} \frac{2\mu_2}{\hbar^2} \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3 \mathbf{r}' \frac{e^{ik_n|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} V^{(2)}(r') e^{i\mathbf{p}_n \cdot \mathbf{r}'/\hbar}.$$

Quando $t \gg T_2$, a partícula relativa se encontra já muito distante do centro espalhador e o termo espalhado só tem valores apreciáveis em pontos muito distantes do centro espalhador, $r \gg r'$, tais que

$$|\mathbf{r}-\mathbf{r}'| = \sqrt{r^2 - 2\mathbf{r} \cdot \mathbf{r}' + r'^2} \approx r - \frac{\mathbf{r}}{r} \cdot \mathbf{r}',$$

$$\langle \mathbf{r}|n \rangle \approx \langle \mathbf{r}|\mathbf{p}_n \rangle - \frac{1}{4\pi} \frac{2\mu_2}{\hbar^2} \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \frac{e^{ik_n r}}{r} \int d^3 \mathbf{r}' e^{i(\mathbf{p}_n/\hbar - k_n \mathbf{r}/r) \cdot \mathbf{r}'} V^{(2)}(\mathbf{r}').$$

¹⁰Defina-se o módulo do vetor de onda do estado $|n\rangle$, $k_n \equiv \sqrt{2\mu_2 E_n}/\hbar$.

Logo se vê que o termo espalhado é proporcional à transformada de Fourier do potencial,

$$\langle \mathbf{r}|n\rangle \approx \langle \mathbf{r}|\mathbf{p}_n\rangle - \frac{1}{4\pi} \frac{2\mu_2}{\hbar^2} \frac{1}{\hbar^{3/2}} \frac{e^{ik_n r}}{r} \mathcal{V}(\mathbf{p}_n/\hbar - k_n \mathbf{r}/r),$$

definida por

$$\mathcal{V}(\mathbf{q}) := \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int V^{(2)}(r) e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} d^3\mathbf{r}.$$

Em um gás a baixa temperatura, as partículas são pouco energéticas, o pacote de onda incidente em uma colisão é formado por uma combinação linear de ondas planas de baixa energia, o que significa que $p_n/\hbar = k_n = \sqrt{2\mu E_n}/\hbar$ é sempre pequeno. Por conseqüência, os termos da transformada \mathcal{V} que determinarão a evolução temporal do pacote de ondas são aqueles cujos q 's estão próximos da origem. A fase $e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}$ nesse limite varia muito lentamente e, uma vez que o alcance do potencial é limitado, a transformada para pequenos valores de q é aproximadamente constante.

$$\mathcal{V}(\mathbf{q} \rightarrow 0) \approx \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int V^{(2)}(r) d^3\mathbf{r}.$$

Temos, portanto,

$$\langle \mathbf{r}|n\rangle \approx \langle \mathbf{r}|\mathbf{p}_n\rangle - \frac{a}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \frac{e^{ik_n r}}{r},$$

na qual o *comprimento de espalhamento* a é dado por

$$a = \frac{M}{4\pi\hbar^2} \int d^3\mathbf{r}' V^{(2)}(\mathbf{r}').$$

Como somente a transformada para pequenos q 's determinará o espalhamento, o espalhamento não deve se alterar se substituirmos o potencial por um outro que conserve o valor da transformada nessa região. Introduzimos uma transformada aproximada, cujo valor, constante no espectro dos q 's, definimos por

$$\tilde{\mathcal{V}}(\mathbf{q}) := \mathcal{V}(\mathbf{0}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \frac{4\pi\hbar^2 a}{m}.$$

O potencial efetivo é a transformada inversa de $\tilde{\mathcal{V}}$:

$$\tilde{V}(\mathbf{r}) := \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int \tilde{\mathcal{V}}(\mathbf{q}) e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} d^3\mathbf{q} = \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{4\pi\hbar^2 a}{m} \int e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} d^3\mathbf{q}.$$

Desde que

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{iqx} dq = 2\pi\delta(x) ,$$

o potencial efetivo tem a forma

$$\tilde{V}(\mathbf{r}) = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m} \delta^3(\mathbf{r}) . \quad (2.16)$$

2.1.3 Equação de Gross-Pitaevskii

Na seção anterior vimos que o hamiltoniano de um sistema de dois átomos (em condições bastante específicas) é dado pela soma das suas energias cinéticas, com as energias de interação com o potencial externo (dependente das suas respectivas posições) e com a energia da interação efetiva de contato entre os átomos. Estendendo esses termos a todo um gás de N átomos, obtemos efetivamente um hamiltoniano de N partículas aprisionadas e interagentes¹¹:

$$\hat{H} = \sum_j^N \hat{T}_j + V_j^{\text{ext}}(\hat{\mathbf{r}}_j) + g \sum_{j<k}^N \delta^3(\hat{\mathbf{r}}_j - \hat{\mathbf{r}}_k) ,$$

com $g := 4\pi\hbar^2 a/m$.

Considere uma base de estados de partícula única $\{|i\rangle\}$ tal que $|0\rangle$ é o estado sobre o qual o sistema se condensa. Para qualquer estado $|\alpha\rangle$ podemos escrever um operador de aniquilação em termos de combinações lineares de aniquilações da base,

$$\hat{a}_\alpha = \sum_i \langle \alpha | i \rangle \hat{a}_i ,$$

$$\hat{a}_i | \dots, N_{i-1}, N_i, N_{i+1}, \dots \rangle = \sqrt{N_i} | \dots, N_{i-1}, N_i - 1, N_{i+1}, \dots \rangle .$$

Em um sistema com condensação, o número de partículas do estado fundamental é da ordem do número de partículas do sistema, $N_0 \sim N$, de modo que o estado resultante da aplicação de \hat{a}_0 , tendo $N_0 - 1$ partículas condensadas, tem propriedades semelhantes ao estado original. Esse é o argumento-chave que nos permite fazer a substituição $a_0 \rightarrow \sqrt{N_0}$, conhecida por aproximação de Bogoliubov [11], na expressão anterior:

$$\hat{a}_\alpha \approx \sqrt{N_0} \langle \alpha | 0 \rangle + \sum_{i \neq 0} \langle \alpha | i \rangle \hat{a}_i .$$

A temperaturas muito próximas de zero, efetivamente quase todas as partículas estão no es-

¹¹Achamos conveniente fazer a mudança de notação: $\hat{\mathbf{R}}_j \rightarrow \hat{\mathbf{r}}_j$ e $U_j \rightarrow V_j^{\text{ext}}$.

tado de condensação, o que significa que a ocupação de outros estados são pequenas excitações que podemos ignorar sem maiores consequências nesse limite de temperatura,

$$\hat{a}_\alpha \approx \sqrt{N_0} \langle \alpha | 0 \rangle .$$

Podemos tirar proveito da proporcionalidade então obtida entre a projeção do condensado sobre um outro estado e a aniquilação desse estado. De fato, se escrevermos esse operador de aniquilação na representação de Heisenberg e obtermos a sua equação de evolução, teremos uma equação para a evolução da projeção do estado condensado.

No formalismo de segunda quantização, a soma de operadores de partícula de primeira quantização (os quais conservam número), como a soma das energias cinéticas, são combinações lineares da aplicação sucessiva de uma aniquilação por uma criação:

$$\hat{T}_{TOT} = \sum_{ij} \langle j | \hat{T} | i \rangle \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_i . \quad (2.17)$$

A soma de operadores de interação, por sua vez, são combinações lineares da aplicação sucessiva de duas aniquilações por duas criações:

$$\hat{V}_{TOT} = \frac{1}{2} \sum_{ijkl} \langle l | \langle k | V(\hat{\mathbf{r}} | j) | i \rangle \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_j \hat{a}_i . \quad (2.18)$$

A dependência do hamiltoniano com as posições do átomos sugere fortemente que utilizemos essa base. Em termos da aniquilação (e da criação) de autoestados de posição,

$$\hat{\psi}(\mathbf{r}, t) := \hat{a}_\mathbf{r}(t) \approx \sqrt{N_0} \langle \mathbf{r} | 0, t \rangle ,$$

operador também chamado de operador de campo, o hamiltoniano do gás tem a forma¹²

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \int d^3\mathbf{r} \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}, t) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V^{ext}(\mathbf{r}) \right) \hat{\psi}(\mathbf{r}, t) + \\ & + \frac{g}{2} \int d^3\mathbf{r} \int d^3\mathbf{r}' \delta^3(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}, t) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}', t) \hat{\psi}(\mathbf{r}', t) \hat{\psi}(\mathbf{r}, t) . \end{aligned}$$

A equação de evolução temporal para o operador de campo

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\psi}(t) = [\hat{\psi}(t), \hat{H}] ,$$

¹²Como $\{|\mathbf{r}\rangle\}$ é uma base contínua, as somas em (2.17) e (2.18) são substituídas por integrais.

dadas as suas relações de comutação [32]:

$$[\hat{\psi}(\mathbf{r})\hat{\psi}(\mathbf{r}')] = 0 \quad [\hat{\psi}(\mathbf{r}), \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}')] = \delta^3(\mathbf{r} - \mathbf{r}') ,$$

pode ser escrita como

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi_0(\mathbf{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi_0(\mathbf{r}, t) + V^{ext}(\mathbf{r}) \Psi_0(\mathbf{r}, t) + gN_0 |\Psi_0(\mathbf{r}, t)|^2 \Psi_0(\mathbf{r}, t) , \quad (2.19)$$

na qual $\Psi_0(\mathbf{r}, t) := \langle \mathbf{r} | 0, t \rangle$ é a função de onda do estado de condensação.

Esta equação, que tem a forma de uma equação de Schrödinger para a função de onda do condensado, é chamada de *equação de Gross-Pitaevskii* [11], foi apresentada independentemente por Gross [26] e por Pitaevskii [35] em 1961 e determina a evolução temporal do condensado de Bose-Einstein de partículas fracamente interagentes no regime em que quase não há depleção do condensado. Soluções do tipo $\Psi(\mathbf{r}, t) = \Psi(\mathbf{r})e^{-i\mu t/\hbar}$ estão associadas à equação de autovalor correspondente,

$$\mu \Psi_0(\mathbf{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi_0(\mathbf{r}) + V^{ext}(\mathbf{r}) \Psi_0(\mathbf{r}) + gN_0 |\Psi_0(\mathbf{r})|^2 \Psi_0(\mathbf{r}) , \quad (2.20)$$

chamada *equação de Gross-Pitaevskii independente do tempo*. A interpretação física do autovalor μ fica evidente ao considerarmos autoestados da energia completamente condensados,

$$|N, 0, \dots; t\rangle = |N, 0, \dots\rangle e^{-iE_N t/\hbar} .$$

Uma vez que os elementos de matriz do operador de campo independem da representação que utilizamos (se a de Schrödinger, ou a de Heisenberg),

$$\langle \dots, 0, N-1 | \hat{\psi}(t) | N, 0, \dots \rangle = \langle \dots, 0, N-1; t | \hat{\psi} | N, 0, \dots; t \rangle ,$$

e que a atuação de \hat{a}_0 independe de t , substituindo $\hat{\psi}(\mathbf{r}) = \sum \Psi_i(\mathbf{r}) \hat{a}_i$ e $\hat{\psi}(\mathbf{r}, t) = \sum \Psi_i(\mathbf{r}, t) \hat{a}_i$ na equação anterior, obtemos que $\Psi(\mathbf{r}, t)$ tem uma dependência temporal do tipo $\exp(-i(E_N - E_{N-1})t/\hbar)$. Se assumirmos que o número de partículas é suficientemente grande, o autovalor μ se reduzirá ao potencial químico do sistema[5],

$$\mu = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{E_N - E_{N-1}}{N - (N-1)} = \frac{\partial E}{\partial N} .$$

2.1.4 Redução dimensional: Equação de Muñoz-Mateo e Delgado

A equação de Gross-Pitaevskii, uma equação diferencial parcial não linear, não dispõe de uma solução analítica geral. Para estudar as propriedades e evolução do condensado temos que recorrer a cálculos numéricos. O custo de tempo de processamento dessas operações é quase sempre muito alto, uma vez que temos um problema tridimensional que demanda o uso de “grids” espaciais com muitos pontos. Em algumas situações particulares, no entanto, quando o potencial de aprisionamento é altamente assimétrico, a dinâmica do condensado é praticamente uni ou bidimensional. Diversos autores, ao longo dos anos, tem se dedicado ao estudo das propriedades dos condensados e obtido equações de dimensão reduzida que descrevem apropriadamente a sua dinâmica nessas condições.

O aprisionamento com simetria cilíndrica, $V^{\text{ext}}(\mathbf{r}) = V_{\perp}(r_{\perp}) + V_z(z)$, é bastante relevante do ponto de vista experimental, sendo fácil e comumente implementado em armadilhas magneto-ópticas. Frequentemente as duas partes do potencial podem ser ajustadas de maneira que todo o intervalo entre um aprisionamento em forma de charuto – no qual o potencial transversal V_{\perp} é bem mais estreito que o potencial longitudinal V_z – e um aprisionamento em forma de panqueca pode ser varrido. O aprisionamento em forma de charuto, a cujo estudo nos restringimos nesta dissertação, se suficientemente estreito, confina o condensado a uma dinâmica quase-unidimensional[1]. A equação cúbica, Eq. (2.25), é a equação com dimensão reduzida adequada a esse regime que mais frequentemente se encontra na literatura. A despeito disso, Muñoz-Mateo e Delgado publicaram em 2008 [1] um trabalho em que deduzem uma outra equação de dimensão reduzida, Eq. (2.29), que se provou uma aproximação melhor ao problema tridimensional original do condensado de partículas repulsivas. Nesta seção, apresentaremos a sua demonstração em acordo com o exposto na literatura original [36, 37, 1].

Considere a equação de Schrödinger unidimensional,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_a = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi_a + aV(x) \psi_a ,$$

em que a é uma constante positiva e $V(x)$ é um potencial confinante. Valores de a maiores do que 1 correspondem a um estreitamento do potencial, valores menores do que 1, a um alargamento. Fazendo as reescalas do tempo $t \rightarrow t/a$ e do espaço $x \rightarrow x/\sqrt{a}$ é fácil provar a relação $\psi_a(x, t) = \psi_1(\sqrt{ax}, at)$ entre as soluções do problema com potencial alterado e as soluções do problema com potencial $V(x)$. Isto é, quanto mais estreito ($a > 1$) um potencial, mais rapidamente a função de onda vai evoluir, mais rápida será a sua dinâmica¹³.

¹³Desde que não se altere a forma do potencial.

Se submetemos um condensado a um potencial em forma de charuto bem excêntrico, devemos esperar, portanto, que a escala de tempo da parte transversal da função de onda seja bem menor que a escala de tempo da parte longitudinal. Com vistas nesta última escala, podemos dizer que a parte transversal se adequa quase que instantaneamente à configuração da parte longitudinal da função de onda, de modo que, para a dinâmica desta parte, a outra está quase sempre em equilíbrio, não havendo trocas entre as duas partes durante quase todo o tempo. Desconsiderando essas trocas (*aproximação adiabática*), podemos propor uma solução da equação de Gross-Pitaevskii (2.19) da forma

$$\Psi_0(\mathbf{r}, t) = \varphi(\mathbf{r}_\perp, n_l(z, t))\phi(z, t), \quad (2.21)$$

sendo φ e ϕ normalizadas para 1 e φ tendo dependência local com a densidade linear de partículas $n_l(z, t) := N_0 \int d^2\mathbf{r}_\perp |\Psi_0|^2$. A substituição dessa expressão em (2.19) leva a¹⁴

$$-\left(i\hbar\phi_t - \frac{\hbar^2}{2m}\phi_{zz} - V_z\phi\right)\varphi = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_\perp^2\varphi + V_\perp\varphi + gn_l|\varphi|^2\varphi\right)\phi - \left(i\hbar\varphi_t\phi + \frac{\hbar^2}{2m}\varphi_{zz}\phi + \frac{\hbar^2}{m}\varphi_z\phi_z\right). \quad (2.22)$$

Considerando que, na escala de tempo longitudinal, φ tenha dependência temporal direta nula (*aproximação adiabática*), $\varphi_t \approx 0$, e que a densidade linear varie muito lentamente com z , $\varphi_z = \varphi_{n_l}(n_l)_z \approx 0$ e $\varphi_{zz} = \varphi_{n_l n_l}(n_l)_z^2 + \varphi_{n_l}(n_l)_{zz}$, o último parêntese de (2.22) é praticamente nulo.

Aplicando $\int d^2\mathbf{r}_\perp \varphi^*$ sobre (2.22), obtemos

$$i\hbar\phi_t = -\frac{\hbar^2}{2m}\phi_{zz} + V_z\phi + \mu_\perp(n_l)\phi, \quad (2.23)$$

em que μ_\perp é o potencial químico transversal,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_\perp^2\varphi + V_\perp\varphi + gn_l|\varphi|^2\varphi = \mu_\perp\varphi,$$

cujo cálculo deve determinar a equação unidimensional que procuramos.

Uma vez que toda evolução temporal da função de onda está concentrada em ϕ , Eq. (2.21), o autovalor associado a (2.23) para um ϕ estacionário é o potencial químico μ . A questão agora é obter uma expressão analítica para o potencial químico que independa da parte transversal da função de onda. Não podemos fazer isso, senão de maneira aproximada para dois regimes específicos: o regime perturbativo e o regime de Thomas-Fermi.

¹⁴O índices $_z$ e $_t$ indicam uma diferenciação parcial com relação a estas variáveis.

Considere primeiramente um condensado com um número de partículas suficientemente pequeno tal que a energia de interação quase não contribua para o potencial químico. Rearranjando os termos na equação de Gross-Pitaevskii independente do tempo, Eq. (2.20), obtemos

$$\mu_{\perp} \varphi \phi = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{\perp}^2 \varphi + V_{\perp} \varphi \right) \phi + g N_0 |\varphi|^2 \phi |\phi|^2 \phi .$$

Em primeira aproximação, φ é o autoestado de menor energia do problema sem interação

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{\perp}^2 \varphi_0 + V_{\perp} \varphi_0 = \mu_{\perp}^0 \varphi_0 . \quad (2.24)$$

Tomando essa aproximação, multiplicando por φ^* e integrando no espaço transversal, obtemos uma expressão analítica independente para μ_{\perp} das coordenadas transversais. Substituindo essa expressão em (2.23), obtemos a equação de evolução para ϕ no *regime perturbativo*,

$$i\hbar \phi_t = -\frac{\hbar^2}{2m} \phi_{zz} + V_z \phi + \mu_{\perp}^0 \phi + g_1 N_0 |\phi|^2 \phi , \quad (2.25)$$

uma equação de Schrödinger unidimensional com não linearidade cúbica. A contribuição da parte transversal da função de onda fica por conta da energia μ_{\perp}^0 do estado fundamental de (2.24) e da integral da autofunção correspondente, φ_0 , presente na definição de g_1 ,

$$g_1 := g \int d^2 \mathbf{r}_{\perp} |\varphi_0|^4 .$$

Se o aprisionamento transversal for harmônico, $V_{\perp}(r_{\perp}) = \frac{1}{2} m \omega_{\perp}^2 r_{\perp}^2$, então $\mu_{\perp}^0 = \hbar \omega_{\perp}$ e $g_1 = m \omega_{\perp} / 2\pi \hbar g$, e (2.25) se reduz à equação cúbica comumente encontrada na literatura.

Por outro lado, no limite oposto, o condensado tem um número tão grande de partículas que o termo de interação da equação de Gross-Pitaevskii, (2.20), é muito maior que o termo cinético para os autoestados de menor energia. Neste caso, podemos desprezar este último termo (*aproximação de Thomas-Fermi*) e obter uma expressão aproximada para a densidade do estado fundamental do condensado,

$$|\Psi_0|^2 = \frac{\mu - V_z - V_{\perp}}{g N_0} , \quad (2.26)$$

definida na região circunscrita pela superfície $V_z(z) + V_{\perp}(r_{\perp}) = \mu$. O potencial químico é um parâmetro livre cujo ajuste normaliza Ψ_0 e define as dimensões do condensado. Se V_{\perp} é monotonicamente crescente e se V_z é par e monotonicamente crescente na parte positiva do seu

domínio ($z > 0$), então o condensado tem meio-comprimento¹⁵ $Z = V_z^{-1}(\mu)$ e meia-largura $R = V_\perp^{-1}(\mu)$. Do cálculo da densidade linear de partículas obtemos sua dependência com μ_\perp ,

$$4an_l = \frac{m}{\hbar^2} \left\{ \mu_\perp [V_\perp^{-1}(\mu_\perp)]^2 - 2\mathcal{V}^{(1)}(V_\perp^{-1}(\mu_\perp))V_\perp^{-1}(\mu_\perp) + 2\mathcal{V}^{(2)}(V_\perp^{-1}(\mu_\perp)) \right\}, \quad (2.27)$$

na qual $\mathcal{V}^{(1)} = \int_0^r dr' V_\perp(r')$ é a primeira primitiva de V_\perp e $\mathcal{V}^{(2)} = \int_0^r dr' \mathcal{V}^{(1)}(r')$ é a segunda.

Não é possível escrever $\mu_\perp(n_l)$ sem especificar o potencial transversal. A cada potencial corresponderá uma expressão diferente e, conseqüentemente, a uma equação de evolução diferente para ϕ . Enquanto que o potencial harmônico resultará numa equação de evolução com não linearidade quadrática,

$$i\hbar\phi_t = -\frac{\hbar^2}{2m}\phi_{zz} + V_z\phi + 2\hbar\omega_\perp\sqrt{aN}\phi|\phi|, \quad (2.28)$$

um potencial quártico, $V_\perp = 1/2V_0 (m\omega_\perp^2 r_\perp^2/2)^2$, por exemplo, resultará em uma equação com não linearidade de ordem fracionária,

$$i\hbar\phi_t = -\frac{\hbar^2}{2m}\phi_{zz} + V_z\phi + \left(\frac{3aN_0\hbar^2\omega_\perp^2}{\sqrt{2V_0}} \right)^{2/3} |\phi|^{4/3}\phi.$$

No intervalo entre o regime perturbativo e o regime de Thomas-Fermi, nem (2.25) é uma boa aproximação para a dinâmica de ϕ , nem (2.27) é uma boa expressão para o potencial químico transversal. A primeira porque, à medida que saímos do regime perturbativo, a interação vai se tornando cada vez mais significativa e φ_0 uma aproximação cada vez pior de ϕ . A segunda porque, com a diminuição do número de partículas, a região em que a contribuição de V_\perp para o potencial químico na aproximação de Thomas-Fermi, (2.26), é menor que a energia do estado fundamental em (2.24), $V_\perp < \mu_\perp^0$, se torna cada vez mais significativa, o que acaba por incrementar o erro no cálculo de μ ,

$$\mu = \int d^3\mathbf{r} (V_z + V_\perp + gN_0|\Psi_0|^2).$$

Esse vácuo no cálculo aproximado das propriedades do condensado motivou Muñoz-Mateo e Delgado a estender a aproximação de Thomas-Fermi [36] a condensados de tamanho intermediário tomando o cuidado necessário para que se contabilizasse corretamente a contribuição energética do aprisionamento transversal em toda região do condensado. Eles admitiram a validade da aproximação de Thomas-Fermi na região em que V_\perp fosse maior que μ_\perp^0 , definindo

¹⁵Escolhemos a inversa de V_z que retorna valores positivos.

um raio $r_{\perp}^0 := V_{\perp}^{-1}(\mu_{\perp}^0)$ de corte. Dentro do cone $r_{\perp} < r_{\perp}^0$ substituíram a contribuição de V_{\perp} e de ϕ em (2.26) pela que ϕ_0 faria, de maneira que, no limite perturbativo, a aproximação de Thomas-Fermi se reduzisse à aproximação perturbativa,

$$\mu = \begin{cases} V_{\perp}(r_{\perp}) + V_z(z) + gN_0|\Psi_0|^2 & (V_{\perp}^{-1}(\mu - V_z(z)) \geq r_{\perp} \geq V_{\perp}^{-1}(\mu_{\perp}^0)) , \\ \mu_{\perp}^0 + V_z(z) + g_1N_0|\phi|^2 & (V_{\perp}^{-1}(\mu_{\perp}^0) > r_{\perp}) . \end{cases}$$

O cálculo da densidade linear de partículas¹⁶ no intervalo em que $V_{\perp}^{-1}(\mu - V_z(z)) \geq V_{\perp}^{-1}(\mu_{\perp}^0)$ leva a uma relação com μ_{\perp}^0 ,

$$4an_l = \frac{m}{\hbar^2} \left\{ \mu_{\perp} [V_{\perp}^{-1}(\mu_{\perp})]^2 - 2\mathcal{V}^{(1)}(V_{\perp}^{-1}(\mu_{\perp}))V_{\perp}^{-1}(\mu_{\perp}) + 2\mathcal{V}^{(2)}(V_{\perp}^{-1}(\mu_{\perp})) \right\} - \\ - \frac{m}{\hbar^2} \left\{ \mu_{\perp}^0 [V_{\perp}^{-1}(\mu_{\perp}^0)]^2 - 2\mathcal{V}^{(1)}(V_{\perp}^{-1}(\mu_{\perp}^0))V_{\perp}^{-1}(\mu_{\perp}^0) + 2\mathcal{V}^{(2)}(V_{\perp}^{-1}(\mu_{\perp}^0)) \right\} ,$$

semelhante àquela obtida na aproximação de Thomas-Fermi usual. Como então, não é possível escrever $\mu_{\perp}(n_l)$ senão para cada potencial V_{\perp} específico. Quando $V_{\perp}^{-1}(\mu - V_z(z)) = V_{\perp}^{-1}(\mu_{\perp}^0)$, $\mu_{\perp} = \mu_{\perp}^0$ e $n_l = 0$. Isto é, o condensado tem meio-comprimento $Z = V_z^{-1}(\mu - \mu_{\perp}^0)$.

Se V_{\perp} é o potencial harmônico, então $\mu_{\perp}(n_l) = \hbar\omega_{\perp}\sqrt{1 + 4an_l}$ [37] e a equação de evolução para o condensado unidimensional, *equação de Muñoz-Mateo e Delgado* [1], é

$$i\hbar\phi_t = -\frac{\hbar^2}{2m}\phi_{zz} + V_z\phi + \hbar\omega_{\perp}\sqrt{1 + 4aN_0|\phi|^2}\phi . \quad (2.29)$$

Equação que se reduz à equação cúbica (2.25) no regime perturbativo ($4N_0|\phi|^2 \ll 1$), se reduz à equação quadrática (2.28) no regime de Thomas-Fermi ($4N_0|\phi|^2 \gg 1$) e que descreve melhor que uma e outra a dinâmica do condensado no intermédio dos dois regimes [1].

Aproximação de Thomas-Fermi

Para cada uma das equações com dimensão reduzida, podemos obter uma expressão aproximada para a densidade axial de partículas se desprezarmos o termo cinético da equação (*aproximação de Thomas-Fermi*). No regime de Thomas-Fermi, é claro que essa aproximação será muito boa, exceto nas bordas do condensado, onde o termo cinético torna-se significativo.

No caso da equação de Mateo-Delgado, Eq. (2.29), a densidade de Thomas-Fermi é dada

¹⁶Não dispomos de uma aproximação para $|\Psi_0|^2$ dentro do cone de corte, $V_{\perp}^{-1}(\mu_{\perp}^0) > r_{\perp}$, tão só de um valor médio $|\Psi_0|^2 = (\mu - \mu_{\perp}^0 - V_z)/gN_0$ que usamos no cálculo de $n_l(z)$.

por

$$n_l(z) = \frac{1}{4a} \left[\left(\frac{\mu - V_z}{\hbar\omega_\perp} \right)^2 - 1 \right], \quad (\mu > V_z + \hbar\omega_\perp),$$

no caso quadrático, Eq. (2.28), por

$$n_l(z) = \frac{1}{4a} \left(\frac{\mu - V_z}{\hbar\omega_\perp} \right)^2, \quad (\mu > V_z),$$

e finalmente no caso cúbico, (2.25), por

$$n_l(z) = \frac{1}{2a} \left(\frac{\mu - V_z}{\hbar\omega_\perp} - 1 \right), \quad (\mu > V_z + \hbar\omega_\perp).$$

Formulação variacional

Um sistema regido por uma equação não linear de Schrödinger do tipo

$$i\hbar\partial_t\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\partial_{zz}^2\psi + V\psi + F(|\psi|^2)\psi, \quad (2.30)$$

tal como as Eqs. (2.29), (2.25) e (2.28), pode ser entendido como um sistema dinâmico clássico com infinitas coordenadas generalizadas independentes, a saber, as partes real, ψ_1 , e imaginária, ψ_2 , de $\psi = 1/\sqrt{2}[\psi_1 + i\psi_2]$ em cada um dos pontos do espaço. Podemos definir uma lagrangiana para o sistema, $L = L[\psi_1(t), \psi_2(t); t]$, que é um funcional-integral das coordenadas em um determinado instante,

$$L[\psi_1(t), \psi_2(t); t] = \int dz \mathcal{L}(\psi_1(z, t), \psi_2(z, t), \partial_z\psi_1(z, t), \partial_z\psi_2(z, t), \partial_t\psi_1(z, t), \partial_t\psi_2(z, t)),$$

e define a ação $S = \int Ldt$, cuja extremização¹⁷,

$$\delta S = \int dz \left(\frac{\delta S}{\delta\psi_1(z)} d\psi_1(z) + \frac{\delta S}{\delta\psi_2(z)} d\psi_2(z) \right) = 0,$$

¹⁷ $\delta S/\delta\psi_1(z, t)$ é a derivada funcional do funcional $S[\psi_1, \psi_2]$ com relação à variação de ψ_1 no ponto (z, t) .

resulta nas equações de Euler-Lagrange para cada uma das coordenadas generalizadas,

$$\begin{cases} \frac{\delta S}{\delta \psi_1(z,t)} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi_1} - \frac{\partial}{\partial z} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_z \psi_1)} - \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_t \psi_1)} = 0 \\ \frac{\delta S}{\delta \psi_2(z,t)} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi_2} - \frac{\partial}{\partial z} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_z \psi_2)} - \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_t \psi_2)} = 0 \end{cases} .$$

Se escrevermos ψ_1 , ψ_2 , L e \mathcal{L} em termos de ψ e do seu complexo conjugado ψ^* , obteremos equações semelhantes para estas variáveis,

$$\begin{cases} \frac{\delta S}{\delta \psi(z,t)} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi} - \frac{\partial}{\partial z} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_z \psi)} - \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_t \psi)} = 0 \\ \frac{\delta S}{\delta \psi^*(z,t)} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi^*} - \frac{\partial}{\partial z} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_z \psi^*)} - \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_t \psi^*)} = 0 \end{cases} .$$

Se definimos a lagrangiana corretamente, então essas equações não são nada mais do que o complexo conjugado da Eq. (2.30) e a própria Eq. (2.30), respectivamente. A equação do movimento (2.30) não define univocamente a lagrangiana. Uma das densidades lagrangianas compatíveis com a Eq. (2.30) é dada por

$$\frac{\mathcal{L}}{N} = \frac{i\hbar}{2} (\psi \psi_t^* - \psi_t \psi^*) + \frac{\hbar^2}{2m} \psi_z \psi_z^* + V \psi \psi^* + \int \frac{F(x)}{N} dx \Big|_{|N|\psi^2} .$$

A transformada de Legendre

$$E = L - \int dz (\pi \partial_t \psi + \pi^* \partial_t \psi^*) \quad \left(\pi := \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi_t} \text{ e } \pi^* := \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi_t^*} \right)$$

com relação às velocidades generalizadas, $\partial_t \psi$ e $\partial_t \psi^*$, define a energia do sistema, em termos da qual podemos escrever a equação do movimento para ψ ,

$$i\hbar \psi_t(z,t) = \frac{\delta E}{\delta \psi^*(z,t)} . \quad (2.31)$$

O funcional energia correspondente à Eq. (2.30) é dado pela soma do termo cinético, o termo de aprisionamento e o termo de interação,

$$\frac{E}{N} = \int dz \left(\frac{\hbar^2}{2m} \psi_z \psi_z^* + V \psi \psi^* + \int \frac{F(x)}{N} dx \Big|_{|N|\psi^2} \right) . \quad (2.32)$$

2.2 Sólitos

2.2.1 Sóliton livre

A equação de evolução homogênea não linear

$$i\hbar\psi_t = -\frac{\hbar^2}{2m}\psi_{zz} + F(|\psi|^2)\psi$$

apresenta soluções solitônicas que, livres de um potencial confinante, se propagam indefinidamente com velocidade constante.

$$\psi(z, t) = A(\xi)e^{i\theta(\xi)}e^{-i\mu t/\hbar} \quad (\xi := z - vt) \quad (2.33)$$

A amplitude A e a fase θ evoluem segundo um sistema de duas equações acopladas

$$\begin{cases} \mu A + \hbar v A \theta' = -\frac{\hbar^2}{2m}A'' + \frac{\hbar^2}{2m}A(\theta')^2 + F(A^2)A \\ vA' = \frac{\hbar}{m}A'\theta' + \frac{\hbar}{2m}A\theta'' \end{cases}$$

correspondentes à parte real e à parte imaginária da equação de evolução originária. Uma vez que o sóliton é uma estrutura localizada, tanto a amplitude quanto a fase da função de onda devem tender a valores limites à medida que nos afastamos da região do sóliton,

$$\lim_{\xi \rightarrow \pm\infty} A = A_\infty \quad \lim_{\xi \rightarrow \pm\infty} \theta' = 0, \quad (2.34)$$

condição de contorno suficiente para integrarmos uma vez a segunda das equações acopladas e obtermos uma expressão para $\theta'(A)$,

$$\theta' = \frac{mv}{\hbar} \left(1 - \frac{A_\infty^2}{A^2} \right). \quad (2.35)$$

A substituição dessa expressão na outra equação resulta em uma equação para A independente de θ ,

$$\frac{\hbar^2}{2m}A'' + \left(\mu + \frac{mv^2}{2} \right) A - \frac{mv^2}{2} \frac{A_\infty^4}{A^3} = F(A^2)A, \quad (2.36)$$

que é uma equação diferencial ordinária de segunda ordem análoga a equação do movimento de Newton

$$\frac{\hbar^2}{m}A'' = -\frac{dV}{dA}$$

para uma partícula sujeita a um potencial

$$V = \left(\mu + \frac{mv^2}{2} \right) A^2 + \frac{mv^2}{2} \frac{A_\infty^4}{A^2} - 2\mathcal{F}(A) \quad \left(\mathcal{F}(A) := \int F(A^2) A dA \right) \quad (2.37)$$

dado pela competição entre um potencial harmônico confinante ($\propto A^2$), um potencial repulsivo de curto alcance ($\propto 1/A^2$) e um potencial repulsivo de longa distância¹⁸ ($-2\mathcal{F}$).

Tal como naquele caso, a “equação do movimento” de A pode ser reduzida a uma “equação da energia” de primeira ordem,

$$\frac{\hbar^2}{2m} (A')^2 + V = E_m . \quad (2.38)$$

Considerando uma outra vez a localidade do sólito,

$$A' \Big|_{\xi \rightarrow \infty} = 0 , \quad (2.39)$$

obtemos uma expressão para a “energia mecânica” em termos do valor limite da amplitude,

$$E_m = \left(\mu + mv^2 \right) A_\infty^2 - 2\mathcal{F}(A_\infty) .$$

Mais ainda, a localidade do sólito implica que em um “instante” $\xi \rightarrow -\infty$ a “partícula” está parada ($A' \Big|_{-\infty} = 0$) e que, à medida que o “tempo” passa, ela vai ganhando velocidade aos poucos e depois a perdendo até parar uma outra vez em $\xi \rightarrow \infty$. Isto só será possível se $A_{-\infty}$ for um ponto de equilíbrio instável,

$$\frac{dV}{dA} \Big|_{A_{-\infty}} = 0 \quad \frac{d^2V}{dA^2} \Big|_{A_{-\infty}} < 0 . \quad (2.40)$$

A composição de V , Eq. (2.37), conforme ilustrado na Fig. 2.2, sugere que haja um único ponto assim, o que significa que a partícula tem que sair e voltar a um mesmo ponto $A_{-\infty} = A_\infty$, passando por pontos A mais próximos da origem que A_∞ , o que bem lembra a forma da densidade de um sólito escuro – a derivada da fase, aliás, monotônica e nula nas bordas, também implica em uma fase que salta de um patamar a outro como a fase de um sólito escuro. Tudo indica, portanto, que a solução que descrevemos seja sim um sólito escuro.

Da primeira condição em (2.40) é possível determinar o valor-limite A_∞ em termos do parâmetro arbitrário μ ,

$$A_\infty = [F^{-1}(\mu)]^{1/2} . \quad (2.41)$$

¹⁸Supondo F monotonicamente crescente.

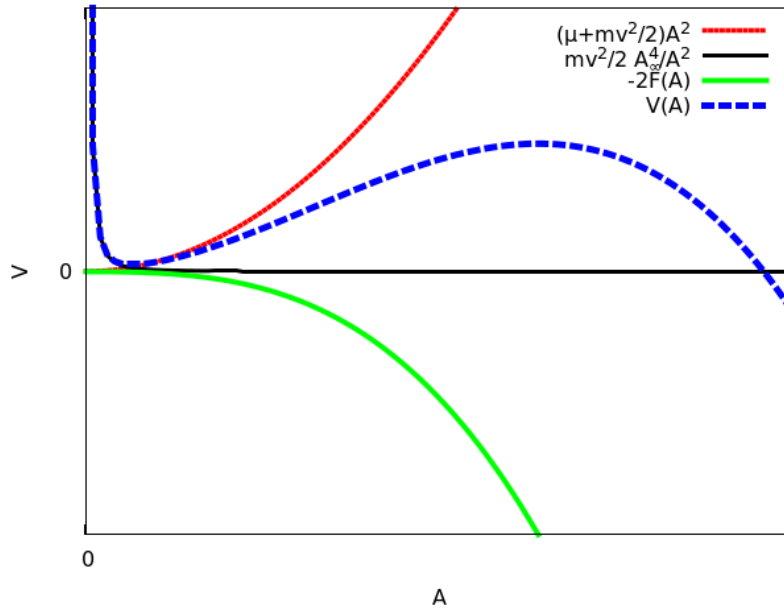


Figura 2.2 Forma do potencial $V(A)$ (azul) e dos termos que o compõem: termo harmônico confinante (vermelho), termo repulsivo de curto alcance (preto) e termo repulsivo devido à não linearidade (verde).

Da segunda condição estimamos um valor-limite para a velocidade de propagação do sóliton suportado pelo meio,

$$mv^2 < F'(A_\infty^2) A_\infty^2. \quad (2.42)$$

Ainda que tenhamos as condições iniciais (2.34) e (2.39), suficientes para definir completamente a função que satisfaz (2.36) (ou (2.38)), não podemos integrar esse problema numericamente à partir de um ponto infinitamente distante da região de interesse. São necessárias condições de contorno em um ponto próximo dessa região, como no ponto $A(0) = A_0$, ponto de mínima amplitude, no qual a “partícula” inverte sua velocidade. Nesse caso, a constância da “energia mecânica” implica em $V(A_0) = V(A_\infty)$ e conseqüentemente na condição

$$2\mathcal{F}(A_0)A_0^2 - \left[F(A_\infty^2) + \frac{mv^2}{2} \right] A_0^4 - \left[2\mathcal{F}(A_\infty) - F(A_\infty^2)A_\infty^2 - mv^2 A_\infty^2 \right] A_0^2 - \frac{mv^2}{2} A_\infty^4 = 0 \quad (2.43)$$

que define o valor A_0 .

1º Caso: não linearidade de Muñoz-Mateo e Delgado No caso da não linearidade de Muñoz-Mateo e Delgado, (2.29), o valor-limite da amplitude é dado por

$$A_\infty = \sqrt{\frac{1}{4aN_0} \left(\frac{\mu^2}{\hbar^2 \omega_\perp^2} - 1 \right)}$$

e a velocidade máxima do sóliton por

$$v_{\text{lim}} = \sqrt{\frac{\mu^2 - \hbar^2 \omega_\perp^2}{2m\mu}}.$$

A amplitude da depressão (amplitude mínima) corresponde à única raiz real positiva¹⁹ de

$$\frac{2}{3} \hbar \omega_\perp X_0^3 - \left(\frac{1}{2} m v^2 - \frac{1}{3} \hbar \omega_\perp X_\infty \right) X_0^2 - \left(m v^2 X_\infty + \frac{2}{3} \hbar \omega_\perp \right) X_0 - \left(\frac{1}{2} m v^2 X_\infty^2 + \frac{1}{3} \hbar \omega_\perp X_\infty \right) = 0,$$

na qual $X^2 := 1 + 4aN_0A^2$.

2º Caso: Não linearidade cúbica No caso cúbico, (2.25), temos

$$A_\infty = \sqrt{\frac{\mu - \hbar \omega_\perp}{2a\hbar \omega_\perp N_0}} \quad v_{\text{lim}} := \sqrt{\frac{\mu - \hbar \omega_\perp}{m}}$$

e

$$A_0 = \sqrt{\frac{m v^2}{2a\hbar \omega_\perp N_0}}.$$

Mais do que isso, conhecemos a expressão analítica para o sóliton homogêneo dessa não linearidade,

$$\phi = A_\infty \left[i \frac{v}{v_{\text{lim}}} + \sqrt{1 - \frac{v^2}{v_{\text{lim}}^2}} \tanh \left(\frac{z - vt}{\sqrt{2} \varepsilon_v} \right) \right] e^{-i\mu t/\hbar}$$

na qual $\varepsilon_v := \varepsilon / \sqrt{1 - v^2/v_{\text{lim}}^2}$ e $\varepsilon := \hbar / \sqrt{2m(\mu - \hbar \omega_\perp)}$.

¹⁹Dado um polinômio de coeficientes reais $a_0x^n + a_1x^{n-1} + \dots + a_n$ e o número m de mudanças de sinal de coeficientes adjacentes não nulos, então o número de raízes reais positivas será igual a $m - 2k$ para algum inteiro positivo $k \leq m/2$ (*Regra dos sinais de Descartes*)[38]. No nosso caso, $a_0 > 0$, $a_2 < 0$ e $a_3 < 0$, o que significa que só há uma mudança de sinal: entre a_0 e $a_1 < 0$, ou entre $a_1 > 0$ e a_2 ou ainda entre a_0 e a_2 , se $a_1 = 0$.

3º Caso: Não linearidade quadrática No caso quadrático, (2.28), temos

$$A_\infty = \frac{\mu}{2\hbar\omega_\perp\sqrt{aN_0}} \quad v_{\text{lim}} := \sqrt{\frac{\mu}{2m}}$$

e A_0 é a única raiz real positiva do polinômio

$$\frac{4}{3}\hbar\omega_\perp\sqrt{aN_0}A_0^3 + \left(\frac{2}{3}\hbar\omega_\perp\sqrt{aN_0}A_\infty - \frac{1}{2}mv^2\right)A_0^2 - mv^2A_\infty A_0 - \frac{1}{2}mv^2A_\infty^2 = 0.$$

2.2.2 Sóliton aprisionado

Quando o potencial é não nulo, fica difícil propor uma solução-tentativa como (2.33) uma vez que a dinâmica do sóliton, longe de ser simples como no caso homogêneo, é desconhecida *a priori*. Pior do que isso, desconhecemos quais sejam os perfis iniciais da função de onda que tem comportamento solitônico. Em outras palavras, rigorosamente não podemos estimar as propriedades dos sólitons aprisionados sequer *a posteriori*, uma vez que simplesmente não sabemos “construir” sólitons.

Sabemos, entretanto, construir soluções que se comportam como sólitons homogêneos nos primeiros instantes da sua evolução e que, em tempos de evolução maiores, mesmo que não saibamos exatamente porquê, parecem conservar de maneira aproximada sua forma. Nesta seção vamos nos basear no trabalho de Brazhnyi e Konotop [39] para construir e justificar parcialmente o caráter solitônico dessas soluções.

Considere os primeiros instantes da evolução de ψ segundo a equação inhomogênea não linear

$$i\hbar\psi_t = -\frac{\hbar^2}{2m}\psi_{zz} + V\psi + F(|\psi|^2)\psi. \quad (2.44)$$

Escrevamos, nesse intervalo de tempo, ψ como o produto de duas funções localizadas,

$$\psi(z, t) = H(z, t)\phi(z, t),$$

uma função de fundo (*background*), H , solução de uma equação de evolução semelhante a (2.44),

$$i\hbar H_t = -\frac{\hbar^2}{2m}H_{zz} + VH + F(|H|^2|\phi_\infty|^2)H, \quad (2.45)$$

com $|\phi_\infty| := |\phi(z \rightarrow \infty, t)| = |\phi(z \rightarrow \infty)|$, e uma função ϕ com forma do tipo sóliton escuro

(Fig. 2.3), cuja equação de evolução,

$$i\hbar\phi_t = -\frac{\hbar^2}{2m}\phi_{zz} + F(|H|^2|\phi|^2)\phi - F(|H|^2|\phi_\infty|^2)\phi - \frac{\hbar^2}{m}\frac{H_z}{H}\phi_z,$$

tem dependência com H . Essa dependência se cancela no limite $z \rightarrow \infty$, onde H é nulo e ϕ é

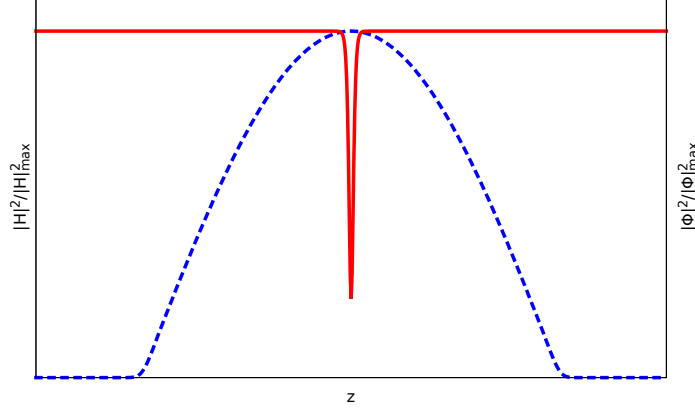


Figura 2.3 Forma das funções H (azul pontilhado) e ϕ (vermelho linha cheia).

constante. Se o centro da depressão de ϕ estiver na região do pico de H , suposto em $z = 0$, então essa dependência também deve se anular nessa região, o que pode ser evidenciado se somarmos e subtrairmos o termo $[F(|H_0|^2|\phi|^2)\phi - F(|H_0|^2|\phi_\infty|^2)\phi]$, onde $|H_0| := |H(0, t)|$. De fato, a equação de ϕ assume a forma

$$\mu'\phi + i\hbar\phi_t = -\frac{\hbar^2}{2m}\phi_{zz} + F(|H_0|^2|\phi|^2)\phi + R, \quad (2.46)$$

onde $\mu' := F(|H_0|^2|\phi_\infty|^2)$ e R , definido por

$$R := \{ [F(|H|^2|\phi|^2) + F(|H_0|^2|\phi_\infty|^2)] - [F(|H_0|^2|\phi|^2) + F(|H|^2|\phi_\infty|^2)] \} \phi - \frac{\hbar^2}{m}\frac{H_z}{H}\phi_z,$$

se cancela nos dois limites, $z \rightarrow \infty$ e $z \rightarrow 0$. No intervalo entre essas duas regiões, R não é identicamente zero e a dependência ainda se manifesta. Se ϕ for suficientemente estreito ou H suficientemente largo de modo que o intervalo em que ϕ varie esteja contido no intervalo central em que H praticamente é constante, então $R \approx 0$ em todo o eixo z e a equação de evolução para ϕ , (2.46), é uma equação homogênea. Nesse regime, as dinâmicas de uma e outra função só se correlacionam através de H_0 e ϕ_∞ .

Se a função de fundo for estacionária, $H(z, t) = H(z)e^{-i\mu t/\hbar}$, então a amplitude do pico

H_0 deve ser uma constante temporal. Escrevendo as equações (2.45) e (2.46) em termos das reescalas

$$h := |\phi_\infty|H \quad \varphi := |H_0|\phi ,$$

obtemos equações completamente independentes

$$\begin{cases} \mu h = -\frac{\hbar^2}{2m}h_{zz} + Vh + F(|h|^2)h \\ \mu' \varphi + i\hbar\varphi_t = -\frac{\hbar^2}{2m}\varphi_{zz} + F(|\varphi|^2)\varphi \end{cases} ,$$

uma determinando a forma do background, a outra determinando a dinâmica de sóliton homogêneo de ϕ nos primeiros instantes.

Em termos dessas reescalas, o perfil inicial da função de onda tem a forma

$$\psi = \frac{h\varphi}{\sqrt{F^{-1}(\mu')}} .$$

Nos instantes iniciais esse perfil comporta-se como um sóliton se movendo sobre um background estacionário.

Dinâmica e decaimento dos sólitons escuros

(In)variância da forma do perfil aproximado de Thomas-Fermi Seja P a não linearidade de qualquer um dos três modelos, V um potencial (par) de aprisionamento monotonicamente crescente no semi-eixo positivo do seu domínio e V^{-1} a inversa correspondente a esse semi-eixo. A aproximação de Thomas-Fermi estabelece que o número de partículas satisfaça a relação

$$N = \int_{-Z}^Z dz P^{-1}(V(Z) - V(z) + P(0)) , \quad (3.1)$$

com

$$Z = V^{-1}(\mu - P(0)) . \quad (3.2)$$

Em cada um dos três modelos a dependência da não linearidade $P(|\psi|^2)$ com o comprimento de espalhamento a e com $|\psi|^2$ é na forma de um produto $a|\psi|^2$. Isso implica que a forma funcional de F , definida por $F(a|\psi|^2) = P(|\psi|^2)$, independe de a . A cada par ordenado $(x, y) \in F$ corresponderá um par $(x/a, y) \in P$ e a cada par $(y, x) \in F^{-1}$ corresponderá um par $(y, x/a) \in P^{-1}$. Escrevendo a Eq. (3.1) em termos de F^{-1} , obtemos

$$aN = \int_{-Z}^Z dz F^{-1}(V(Z) - V(z) + P(0)) .$$

Uma vez que os limites da integração, a função F^{-1} e o seu argumento independem de a – observe que $P(0)$ independe de a –, o aumento de a , fixando o valor de N , implica no aumento de Z . Isto é, quanto maior a repulsão entre as partículas, maior a largura do condensado, o que, por sinal, é bastante compreensível de um ponto de vista lógico.

Considere a aproximação de Thomas-Fermi para dois comprimentos de espalhamento diferentes

$$\begin{cases} V(Z_1) = V(z_1) + \bar{F}(a_1|\psi_1|^2) \\ V(Z_2) = V(z_2) + \bar{F}(a_2|\psi_2|^2) \end{cases} ,$$

sendo $\bar{F}(a|\psi|^2) = P(|\psi|^2) - P(0)$. Queremos descobrir em que condições uma função de onda

é somente uma reescala da outra, por isso impomos

$$z_2 = \beta z_1 \quad , \quad |\psi_2|^2 = \frac{|\psi_1|^2}{\beta} .$$

Substituindo na aproximação de Thomas-Fermi para $|\psi_2|$, obtemos

$$V(\beta Z_1) = V(\beta z_1) + \bar{F}(a_2 |\psi_1|^2 / \beta) .$$

Se o potencial satisfizer

$$V(\beta z) = \gamma V(z) \tag{3.3}$$

então a não linearidade deverá satisfazer

$$\bar{F}(a_2 |\psi_1|^2 / \beta) = \gamma \bar{F}(a_1 |\psi_1|^2) = \bar{F}(\delta a_1 |\psi_1|^2) . \tag{3.4}$$

Os potenciais harmônico e quártico são tais que $\gamma = \beta^2$ e $\gamma = \beta^4$, respectivamente. As não linearidades cúbica e quadrática tem $\delta = \gamma$ e $\delta = \gamma^2$, respectivamente, enquanto que a não linearidade de Muñoz-Mateo e Delgado não satisfaz a Eq. (3.4). A forma da aproximação de Thomas-Fermi (TF) de $|\psi|$ para os modelos cúbico e quártico com potencial harmônico ou quártico independe do valor do comprimento de espalhamento, enquanto que a forma da aproximação TF para o modelo de Muñoz-Mateo e Delgado transita da aproximação TF do modelo cúbico para a aproximação TF do modelo quártico à medida que aumentamos a (Fig. 3.1).

Comportamento do perfil do estado fundamental com a variação do comprimento de espalhamento Do aumento do comprimento de espalhamento esperamos um alargamento, uma desconcentração, da função de onda do estado fundamental, uma vez que a concentração do estado é energeticamente desfavorecida. Para tornar essa ideia mais clara considere um condensado com um número

$$N = \int dz |\psi|^2 \tag{3.5}$$

fixo de partículas. A energia não linear de interação entre as partículas sempre pode ser escrita na forma

$$\int dz f(|\psi|) |\psi|^2 .$$

Se f for uma constante, então, a despeito da forma do estado, a energia de interação sempre terá um mesmo valor. No caso geral, a forma de f determinará qual perfil minimizará essa energia.

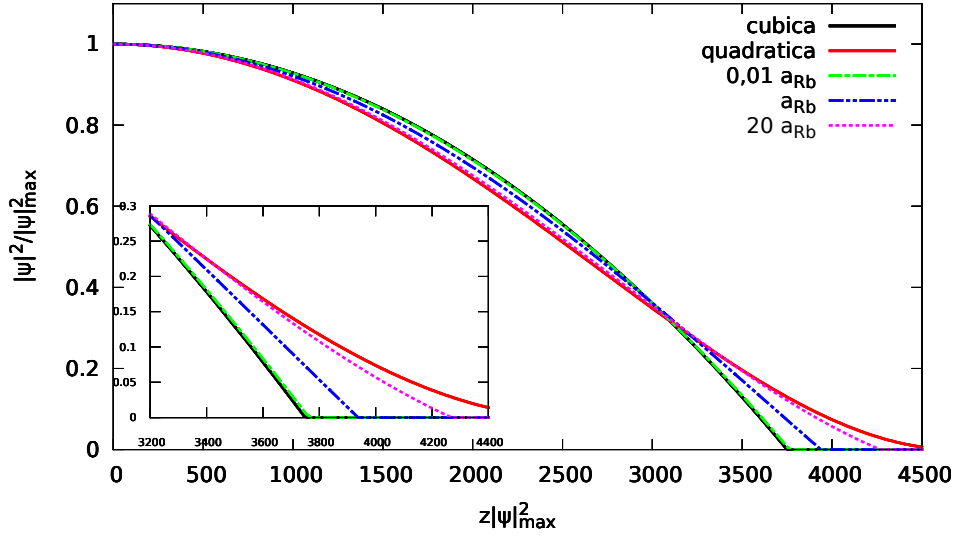


Figura 3.1 Quando o comprimento de espalhamento é igual $0,01a_{Rb}$ (verde), o perfil TF de MMD é bem próximo do perfil TF cúbico (preto); quando é igual a $20a_{Rb}$ (rosa), é bem próximo do perfil TF quadrático (vermelho); quando é igual a a_{Rb} (azul), é intermediário. (Potencial harmônico. a_{Rb} é o comprimento de espalhamento do estado tripleto do ^{85}Rb)

Mais especificamente, será o perfil de uma função que admitirá tão-somente dois valores: zero e $|\psi|_{\min} \neq 0$, definido como o valor para o qual f é mínimo. A distribuição de f por esse dois valores é tal que satisfaça condição de normalização, Eq. (3.5).

Nos casos dos modelos cúbico e quadrático $|\psi|_{\min} \rightarrow 0$, de modo que, quanto mais espalhado for o perfil, menor será sua energia de interação. Dada a dependência monotonicamente crescente de f com a , o estado fundamental – não sendo mais do que o resultado da competição entre o termo de energia de interação e os demais – será tão mais largo quanto maior for o comprimento de espalhamento.

Já no modelo de Muñoz-Mateo e Delgado, f assume a forma

$$f(|\psi|) = \left(\frac{1}{|\psi|^{4/3}} + 4a|\psi|^{2/3} \right)^{3/2},$$

cujo mínimo se encontra em $|\psi|_{\min} = 1/\sqrt{2a}$. Esse mínimo, atrelado à Eq. (3.5), estabelece a meia-largura $Z = Na$ ótima para o condensado, resultado esse que prevê o alargamento esperado. Uma inspeção rápida das meias-larguras obtidas para o estado fundamental (ver Tabela

¹ $l_z = \sqrt{\hbar/m\omega_z}$ é o comprimento característico do oscilador harmônico. Calculamos a meia-largura como o ponto a partir do qual a densidade $|\psi|^2$ é menor que a milésima parte do seu valor máximo.

a/a_{Rb}	meia-larg/ l_z^1	Na/l_z
0.003	3.04	0.0174
0.006	3.38	0.0349
0.01	3.69	0.0581
0.05	5.21	0.2907
0.1	6.20	0.5815
0.5	9.59	2.9071
1	11.61	5.8142
5	17.79	29.0714
10	21.18	58.1427
20	25.05	116.2854

Tabela 3.1 Comparação entre a meia-largura do estado fundamental e a meia-largura do perfil que minimiza o termo não linear da energia do perfil no modelo de Muñoz-Mateo e Delgado.

3.1) deixa evidente esse alargamento, ainda que, vale notar, de maneira bem mais discreta do que Na . De fato, valores muito grandes de a resultam em meias-larguras bem menores que Na , o que pode ser bem entendido como efeito do potencial de aprisionamento. Do lado oposto, valores muito pequenos de a resultam em meias-larguras bem maiores que Na , o que, por sua vez, pode ser entendido como efeito do termo cinético da energia: o condensado se concentra no centro da armadilha, diminuindo a energia de aprisionamento e aumentando a energia cinética, que é repulsiva como a interação² e acaba por enlargar o condensado além do que gostaria o termo de interação.

Comportamento da forma do perfil do estado fundamental com a variação do comprimento de espalhamento Quanto maior o comprimento de espalhamento a , mais significativo o termo não linear de interação na minimização da energia que define o perfil do estado

²A tendência repulsiva da energia cinética fica evidente ao compararmos as energias E_1 e $E_2 = \gamma^2 E_1$ de dois perfis ψ_1 e $\psi_2(z) = \sqrt{\gamma}\psi_1(\gamma z)$ semelhantes. Se ψ_2 é uma reescala que desconcentra ψ_1 ($\gamma < 1$), então $E_2 < E_1$; se, pelo contrário, ψ_2 concentra ψ_1 ($\gamma > 1$), então $E_2 > E_1$.

A função de onda com norma N que minimiza a energia cinética, minimizando o funcional

$$\int dz (|\psi_z|^2 + \lambda |\psi|^2),$$

onde λ é um multiplicador de Lagrange, é dada por $|\psi| = \sqrt{N\sqrt{\lambda}}e^{-\sqrt{\lambda}|z|}$. Não havendo condições de contorno que determinem λ , o determinamos via comparação das energias cinéticas

$$\int dz |\psi_z|^2 = N\lambda$$

e encontramos $\lambda \rightarrow 0$. Isto é, a função que minimiza a energia cinética é uma exponencial negativa com amplitude praticamente nula e que leva um tempo praticamente infinito para atingir o zero, em outras palavras, uma função altamente desconcentrada.

fundamental do condensado. O termo de energia de aprisionamento também torna-se mais significativo com o aumento do comprimento de espalhamento, uma vez que o perfil da função de onda atinge regiões com potenciais maiores. Proporcionalmente o termo cinético da energia perde significância e pode, no limite dos grandes a 's, ser desconsiderado. O perfil resultante é a aproximação de Thomas-Fermi.

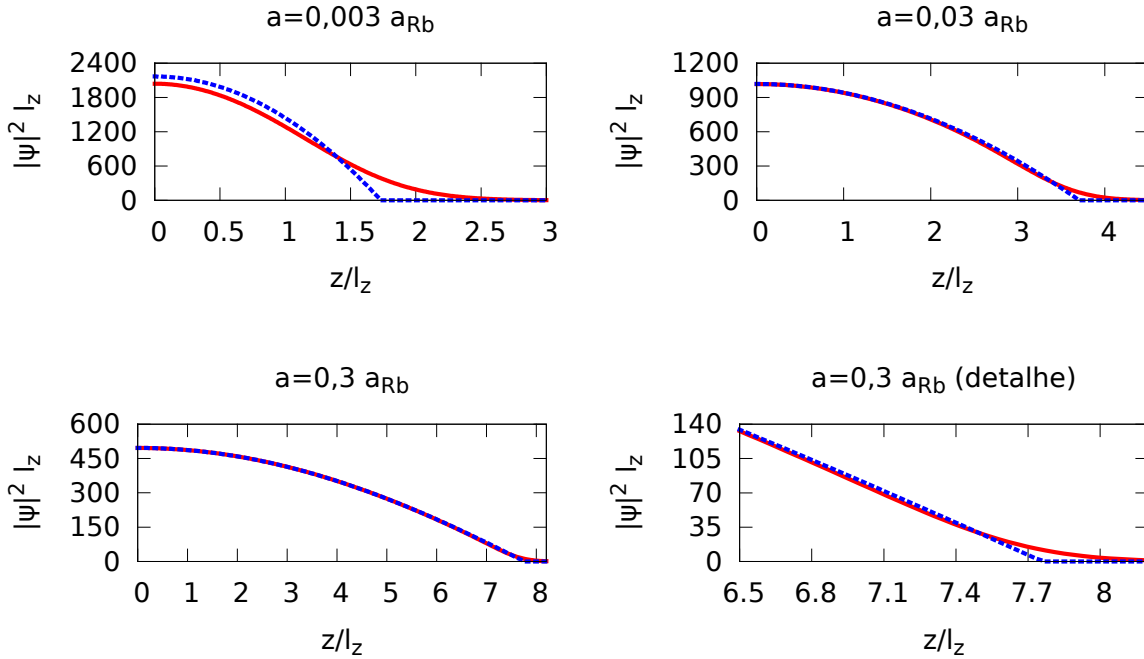


Figura 3.2 Comparação entre os perfis $|\psi|^2$ fundamental (vermelho linha cheia) e de Thomas-Fermi (azul tracejado) para os comprimentos de espalhamento iguais a $0,003a_{Rb}$ (superior esquerdo), $0,03a_{Rb}$ (superior direito) e $0,3a_{Rb}$ (inferior). (Potencial harmônico, Modelo de Muñoz-Mateo e Delgado).

No sentido oposto, à medida que diminuimos o comprimento de espalhamento, a energia cinética do perfil de Thomas-Fermi cresce em proporção às demais. A minimização da energia insere bordas mais largas e suaves no perfil fundamental (veja ilustração na Fig. 3.3). Essas bordas são regiões de concavidade positiva que, à custa de um ligeiro aumento na energia de aprisionamento, diminui a energia cinética acumulada na região central (de concavidade negativa) do condensado. Em outras palavras, com a diminuição do valor de a , o estado fundamental se afasta do perfil de Thomas-Fermi (veja Fig. 3.2).

(In)variância da forma do sóliton homogêneo Considerando a Eq. (2.41), $mv^2 = v_c^2 F'(A_\infty^2) A_\infty^2$, com $v_c < 1$ em acordo com (2.42), e a definição $A =: \bar{A}A_\infty$, podemos

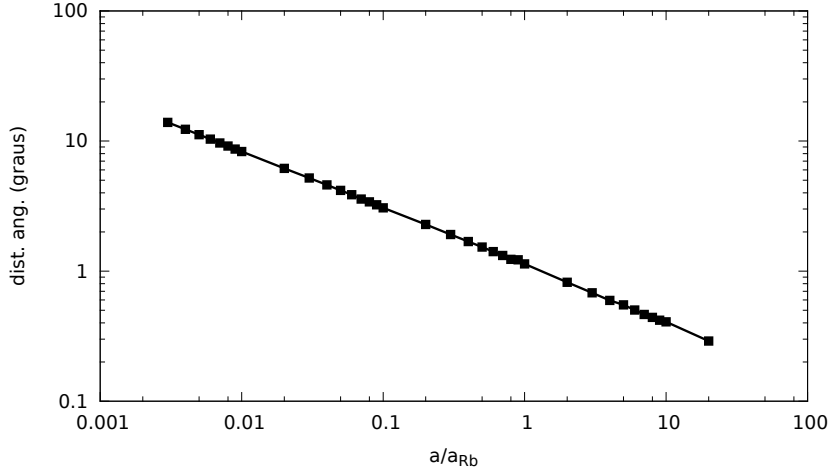


Figura 3.3 Distância angular entre as amplitudes dos perfis fundamental e de Thomas-Fermi para diferentes valores do comprimento de espalhamento. (Potencial harmônico, Modelo de Muñoz-Mateo e Delgado).

reescrever (2.36) na forma

$$\frac{\hbar^2}{2m}\bar{A}'' + [F(A_\infty^2) - F(\bar{A}^2 A_\infty^2)]\bar{A} + v_c^2 \frac{F'(A_\infty^2)A_\infty^2}{2} \left(\bar{A} - \frac{1}{\bar{A}^3} \right) = 0. \quad (3.6)$$

Sejam dados dois sólitons A_1 e A_2 caracterizados pelos comprimentos de espalhamento a_1 e $a_2 = \alpha a_1$ e pelos valores-limite da amplitude $A_{\infty(1)}$ e $A_{\infty(2)} = \beta A_{\infty(1)}$, respectivamente. Da comparação entre as versões da Eq. (3.6) de um e de outro sóliton, fica evidente que no modelo cúbico o sóliton 2 corresponderá a um alargamento ou a um estreitamento do sóliton 1,

$$(\xi_1, \bar{A}_1(\xi_1)) \in \bar{A}_1 \leftrightarrow \left(\frac{\xi_1}{\sqrt{\alpha\beta}}, \bar{A}_1(\xi_1) \right) \in \bar{A}_2,$$

preservando a sua forma. O modelo quadrático apresenta essa mesma correspondência com um fator de alargamento (estreitamento) diferente,

$$(\xi_1, \bar{A}_1(\xi_1)) \in \bar{A}_1 \leftrightarrow \left(\frac{\xi_1}{\sqrt{\sqrt{\alpha\beta}}}, \bar{A}_1(\xi_1) \right) \in \bar{A}_2.$$

O sóliton de Muñoz-Mateo e Delgado, transitando do sóliton cúbico, no limite de pequenos a 's, para o sóliton quadrático, no limite de grandes a 's (veja Fig. 3.4), não apresenta invariância semelhante (veja Fig. 3.5).

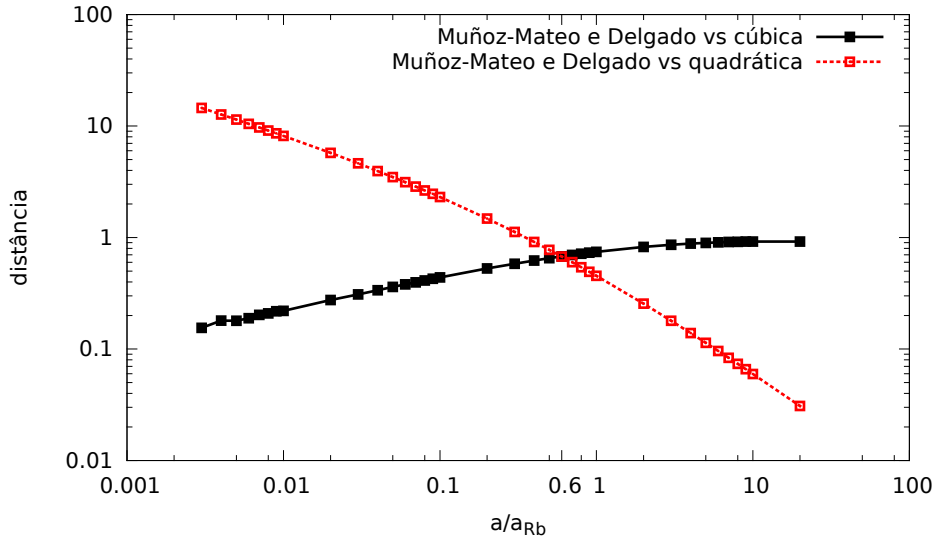


Figura 3.4 Dependência da distância entre a amplitude do sóliton de Muñoz-Mateo e Delgado e a amplitude do sóliton cúbico (preto) e entre a amplitude do sóliton de Muñoz-Mateo e Delgado e a amplitude do sóliton quadrático (vermelho) com o comprimento de espalhamento. (Potencial químico do estado fundamental do potencial harmônico.)

Invertendo a Eq. (2.41), fica evidente que

$$\begin{cases} \alpha\beta^2 = 1 & \rightarrow \mu_2 = \mu_1 \\ \alpha\beta^2 > 1 & \rightarrow \mu_2 > \mu_1 \\ \alpha\beta^2 < 1 & \rightarrow \mu_2 < \mu_1 \end{cases} .$$

a/a_{Rb}	$\mu/\hbar\omega_z$ TF	$\mu/\hbar\omega_z$ Fund.	$ \mu_{Fund} - \mu_{TF} /\mu_{Fund} \cdot 100\%$
0.003	102.345	101.619	0.715179
0.007	103.072	102.708	0.354272
0.02	105.484	105.308	0.166978
0.06	110.907	110.821	0.0777599
0.1	115.092	115.035	0.0494993
0.5	141.26	141.242	0.0131131
0.9	158.71	158.697	0.00822943
4	236.568	236.563	0.00209944
8	296.824	296.82	0.00114053
20	411.375	411.373	0.000469735

Tabela 3.2 Comparação entre o potencial químico da aproximação de Thomas-Fermi e o potencial químico do estado fundamental do condensado. (Potencial harmônico. Modelo de Muñoz-Mateo e Delgado.)

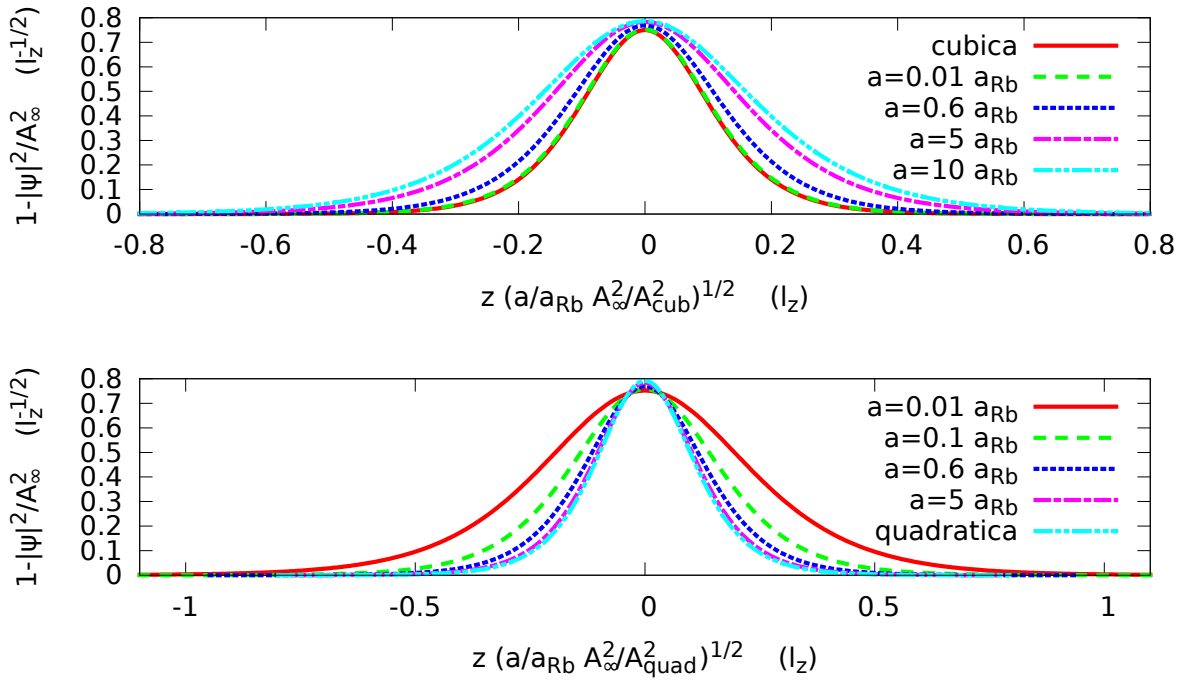


Figura 3.5 Transição da forma do sóliton de Muñoz-Mateo e Delgado para o sóliton cúbico (superior) à medida que diminuimos o comprimento de espalhamento. Transição da forma do sóliton de Muñoz-Mateo e Delgado para o sóliton quadrático (inferior) à medida que aumentamos o comprimento de espalhamento. (Potencial harmônico. $v = 0.5v_{lim}$).

Como veremos a seguir, o único sóliton que se propaga sem decair abruptamente é aquele que tem o mesmo potencial químico que a densidade de fundo (*background*). Tendo os sólitons 1 e 2 o mesmo potencial químico dos estados fundamentais dos respectivos condensados, é difícil prever qual tem maior potencial químico. Nos sistemas que temos simulado, entretanto, o valor desse potencial químico não é muito diferente do valor do potencial químico aproximado de Thomas-Fermi (veja Tabela 3.2). Nesse caso, sabemos que, quanto maior for o comprimento de espalhamento, maior será a largura do condensado e que, quanto maior esta, maior o potencial químico de Thomas-Fermi, Eq. (3.2). Logo, quanto maior o comprimento de espalhamento, mais estreito o sóliton. Uma vez que o sóliton de Muñoz-Mateo e Delgado se situa entre o sóliton cúbico e o sóliton quadrático, esperamos que ele tenha comportamento semelhante.

Comportamento da forma do sóliton com a variação da velocidade. O valor-limite A_∞ da amplitude do sóliton independe da velocidade (veja a Eq. 2.41). O valor da amplitude do sóliton no centro da depressão, A_0 , é definido pela equação $V(A_0) = V(A_\infty)$, onde $V(A)$ é

definido pela Eq. (2.37), e seu valor praticamente é determinado pelo termo $mv^2/2A_\infty^4/A^2$ (veja a Fig. 2.2 e a Eq. 2.37). Isso significa que quanto maior for a velocidade v de um sóliton, maior será a sua amplitude na depressão A_0 .

Através da Eq. 2.38 encontramos que a velocidade dá uma contribuição negativa para o módulo da derivada,

$$\frac{\hbar^2}{2m} (A')^2 = \mu(A_\infty^2 - A^2) + 2[\mathcal{F}(A) - \mathcal{F}(A_\infty)] - \frac{mv^2}{2A^2} (A_\infty^2 - A^2)^2 .$$

Isto é, quanto maior a velocidade, menor a derivada (para um mesmo A). Logo, sólitons mais rápidos são mais rasos e mais largos, atingindo o valor-limite mais lentamente que sólitons menos rápidos.

Evolução da forma do sóliton. Ao se propagar em um meio inhomogêneo, o sóliton não preserva sua forma. Tanto sua amplitude quanto sua fase se deformam continuamente. De fato essa deformação não parece ser aleatória, para haver uma correspondência entre o sóliton e a velocidade em que ele se propaga. Ele parece sempre assumir a forma do sóliton homogêneo cuja velocidade de propagação seja a sua.

Evolução da fase do sóliton Assim como os sólitons homogêneos, numa armadilha os sólitons se propagam no sentido de decrescimento da sua fase. Também como naqueles, nestes quanto maior a velocidade, maior a variação líquida da fase. No trajeto do centro até a borda da armadilha o sóliton se desacelera, mudando de forma e de fase até parar. Neste ponto, a variação total da fase é $-\pi$ e concentrada em um ponto de densidade nula. Dada a ambiguidade de $k2\pi$ na definição da fase, $\Delta\phi$ pode tanto ser $-\pi$ quanto π , de modo que no instante seguinte ele pode assumir uma velocidade diferente de zero no sentido oposto ao anterior sem provocar mudanças drásticas na função de onda.

Na Fig. (3.8) observamos a evolução da fase da função de onda subtraída a evolução natural da fase

$$\phi = \theta + \frac{\mu t}{\hbar} .$$

Potencial químico do sóliton Ainda que os cálculos da seção 2.2.2 não indiquem nenhuma objeção quanto à evolução de sólitons com potenciais químicos diferentes dos potenciais químicos dos backgrounds sobre os quais se propaguem, esses sólitons são instáveis e decaem em outras estruturas nos primeiros instantes de sua evolução. Enquanto sólitons com mesmo μ decaem lenta e gradualmente em sólitons mais lentos à medida que se afastam do

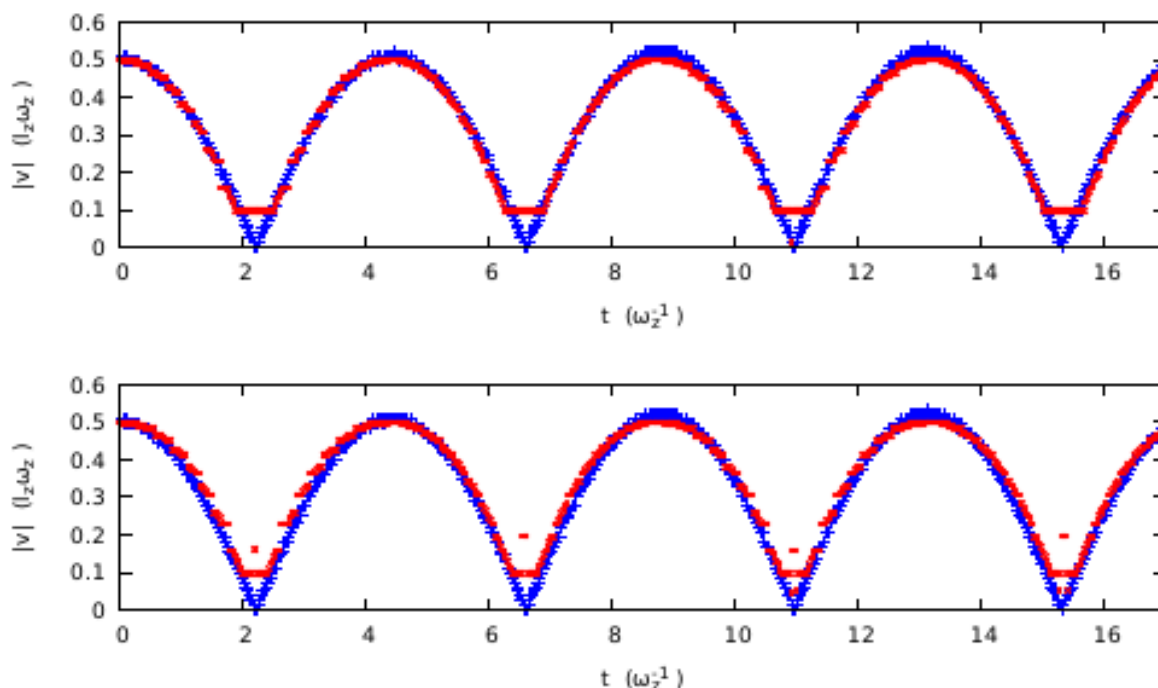


Figura 3.6 Correspondência entre a velocidade de deslocamento do sóliton e a sua forma. A velocidade correspondente à forma da amplitude do sóliton (superior vermelho) apresenta comportamento parecido ao da velocidade do sóliton segundo observação da amplitude (superior azul). A velocidade correspondente à forma da fase do sóliton (inferior vermelho) apresenta comportamento parecido ao da velocidade do sóliton segundo observação da fase (inferior azul). (Modelo de Muñoz-Mateo e Delgado. Potencial harmônico. $a = a_{Rb}$)

centro da armadilha nos primeiros instantes (Figs. (3.9) e (3.12)), sólitons com μ 's menores decaem rapidamente já logo nos primeiros instantes através da emissão de dois outros sólitons iguais em direções opostas (Figs. (3.10) e (3.13)).

Sólitons com potenciais químicos maiores decaem via emissão de ondas sonoras (Figs. (3.11) e (3.14)). As diferenças na evolução dos três sólitons pode ser visualizada na Fig. 3.15.

Trajatória do sóliton em condensado com armadilha harmônica Como esperado, as trajetórias cúbica e MMD são muito próximas uma da outra no regime de pequenos a 's; e as trajetórias quadrática e MMD se aproximam no limite oposto (Fig. (3.16)).

Quando o comprimento de espalhamento é grande, as não linearidades MMD e quadrática são praticamente a mesma, enquanto que a superestimação da cúbica faz com que o processo de minimização que resulta no estado fundamental atinja um perfil mais largo, com variações mais lentas. Quando o comprimento de espalhamento é pequeno, as não linearidades MMD e cúbica são praticamente a mesma, enquanto que a subestimação da quadrática faz com que

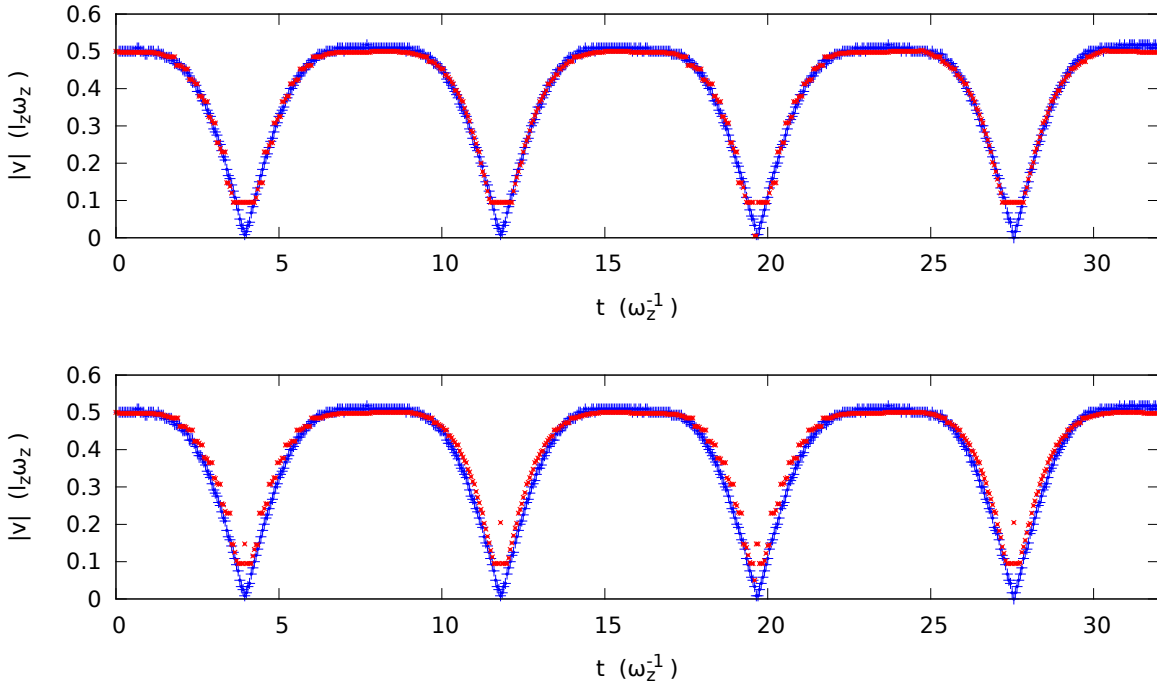


Figura 3.7 Correspondência entre a velocidade de deslocamento do sóliton e a sua forma. A velocidade correspondente à forma da amplitude do sóliton (superior vermelho) apresenta comportamento parecido ao da velocidade do sóliton segundo observação da amplitude (superior azul). A velocidade correspondente à forma da fase do sóliton (inferior vermelho) apresenta comportamento parecido ao da velocidade do sóliton segundo observação da fase (inferior azul). (Modelo de Muñoz-Mateo e Delgado. Potencial quártico. $a = a_{Rb}$)

a sua energia de interação seja uma moeda de troca barata na formação das bordas do estado fundamental que diminuem a energia cinética. Isso faz o perfil fundamental quadrático mais largo que os demais nesse regime.

Esse comportamento dos backgrounds pode nos ajudar a entender a relação entre as trajetórias dos três modelos. De fato, no regime dos grandes a 's, a amplitude de oscilação do modelo cúbico é maior que as amplitudes dos outros modelos (Fig. 3.16), bem como a sua frequência de oscilação é menor (Fig. 3.17). Essas mesmas relações podem ser observadas para o modelo quadrático no regime oposto. Isso acontece porque estes sólitons se propagam sobre backgrounds mais largos e suaves que os dos outros modelos e como as acelerações estão relacionadas com as variações do background, aqueles que se propagam em backgrounds mais largos se deslocam mais entre uma oscilação e outra (maior amplitude) e oscilam mais lentamente (frequência menor).

Esse mesmo argumento pode explicar porque, dentro de um mesmo modelo, quanto maior o comprimento de espalhamento, menor a frequência de oscilação: condensados maiores desa-

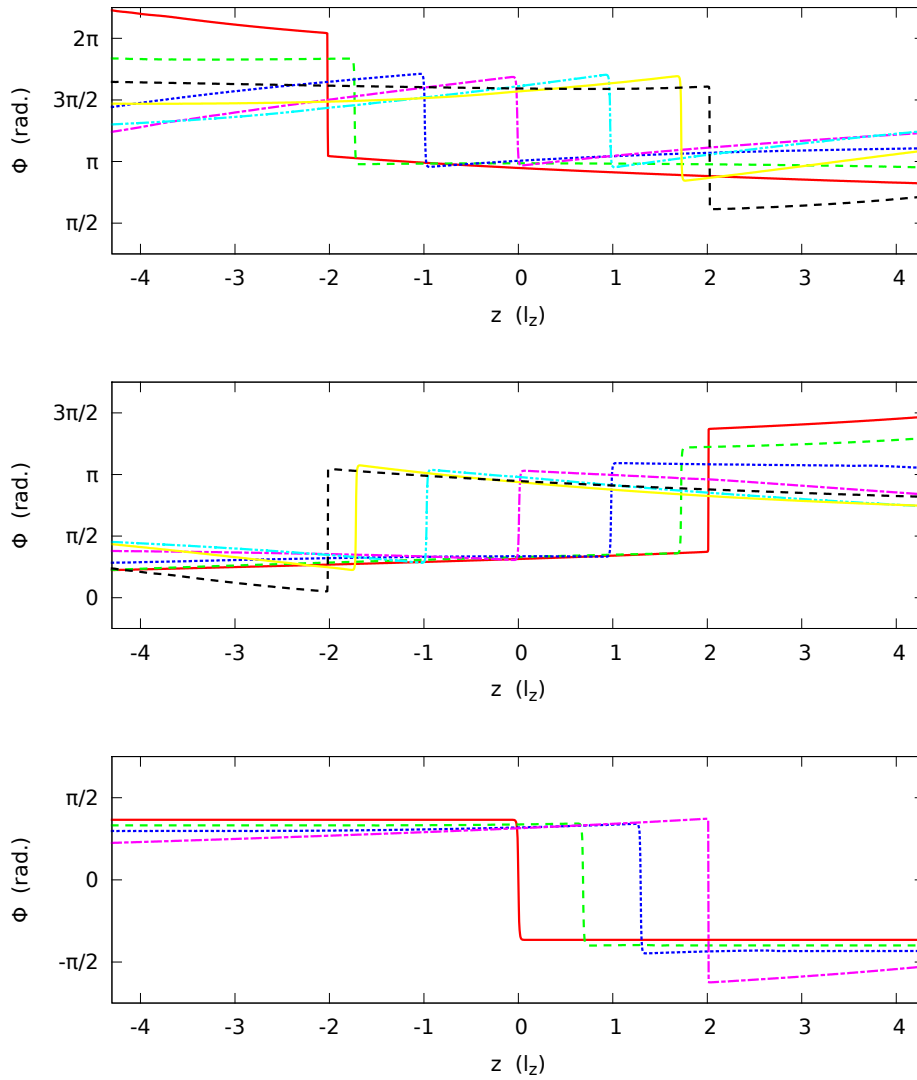


Figura 3.8 Evolução da fase do sóliton. (Modelo MMD. Potencial harmônico. $a = 20a_{Rb}$)

celeram/acceleram sólitons mais lentamente.

3.1 Decaimento de sólitons escuros em condensados de Bose-Einstein

A emissão e absorção de som por parte do sóliton tem papel preponderante na evolução da sua forma sobre um background variável, bem como na sua dinâmica. Alguns backgrounds, como os estados fundamentais dos potenciais harmônico e quártico, aparentemente tem a propriedade de induzir o sóliton a ter um comportamento oscilatório, indo e vindo, formando e

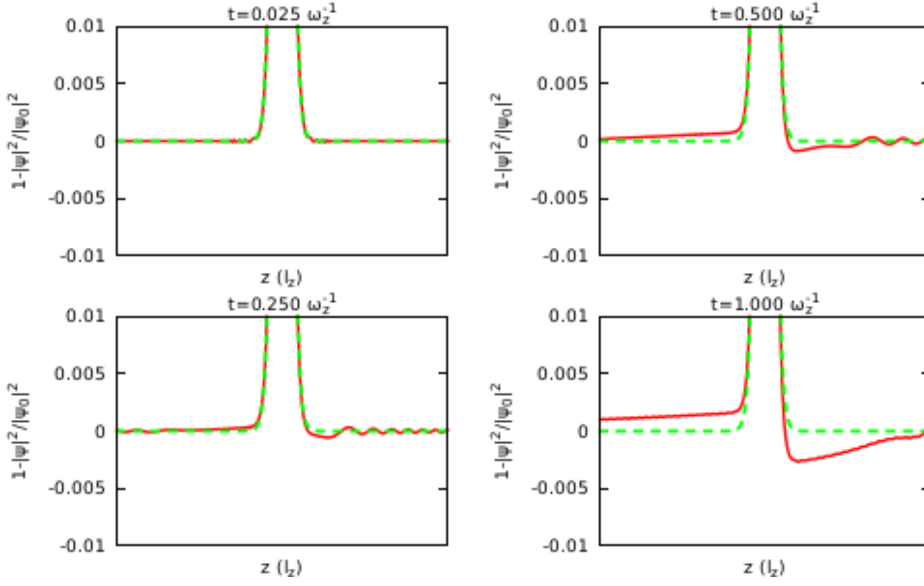


Figura 3.9 Evolução da amplitude do sóliton com mesmo potencial químico que o background. Em verde (tracejado) a amplitude inicial, em vermelho (linha cheia) a amplitude atual. (Modelo MMD. Potencial harmônico. $a = a_{Rb}$)

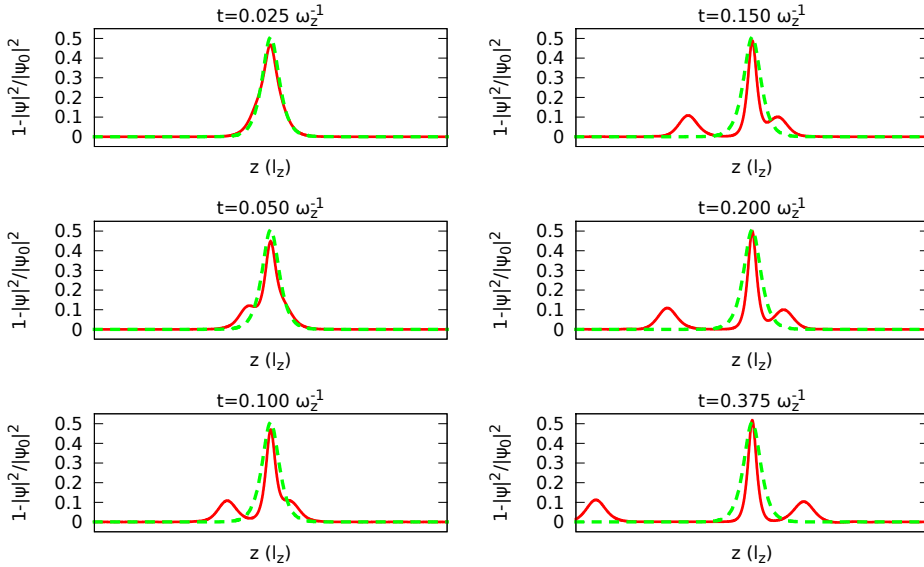


Figura 3.10 Evolução da amplitude do sóliton com potencial químico menor (0.7μ) que o do background. Em verde (tracejado) a amplitude inicial, em vermelho (linha cheia) a amplitude atual. (Modelo MMD. Potencial harmônico. $a = a_{Rb}$)

deformando, indefinidamente dentro da armadilha em uma espécie de equilíbrio entre o sóliton e o som. Outros backgrounds, pelo contrário, tem a propriedade de quebrar esse equilíbrio fazendo com que o sóliton decaia em outros sólitons menores ou que as excitações sonoras se

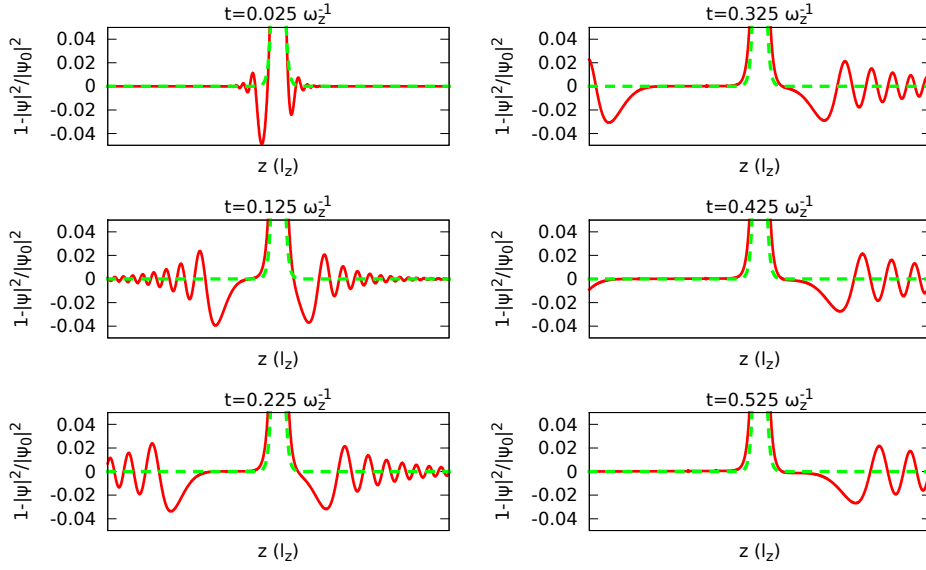


Figura 3.11 Evolução da amplitude do sóliton com potencial químico maior (1.4μ) que o do background. Em verde (tracejado) a amplitude inicial, em vermelho (linha cheia) a amplitude atual. (Modelo MMD. Potencial harmônico. $a = a_{Rb}$)

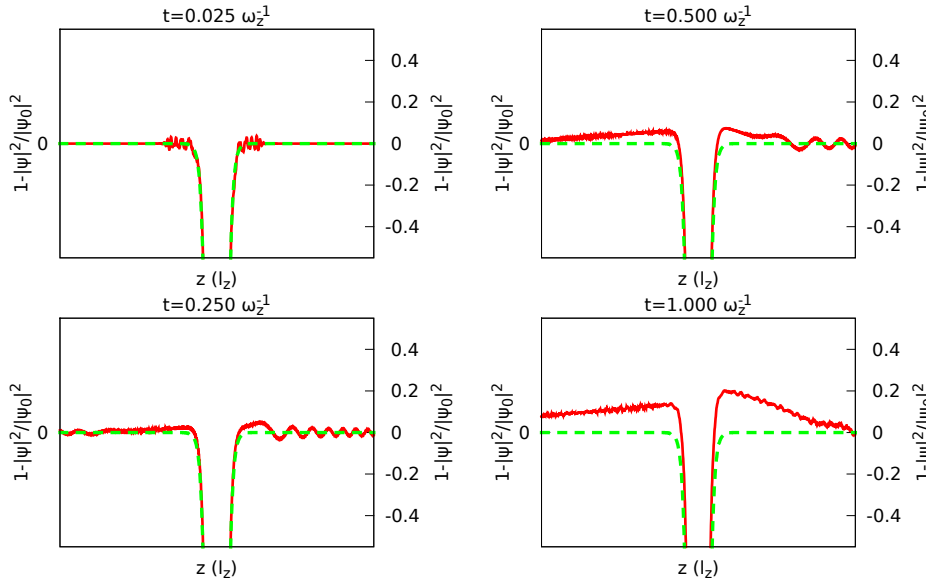


Figura 3.12 Evolução da derivada da fase do sóliton com mesmo potencial químico que o background. Em verde (tracejado) a derivada da fase inicial, em vermelho (linha cheia) a derivada da fase atual. (Modelo MMD. Potencial harmônico. $a = a_{Rb}$)

acumulem de tal forma sobre o background que com o tempo já não seja mais possível rastrear o sóliton pela sua assinatura: a depressão da densidade e a variação repentina da fase. Um background que reconhecidamente cumpre esse papel é o estado fundamental do potencial

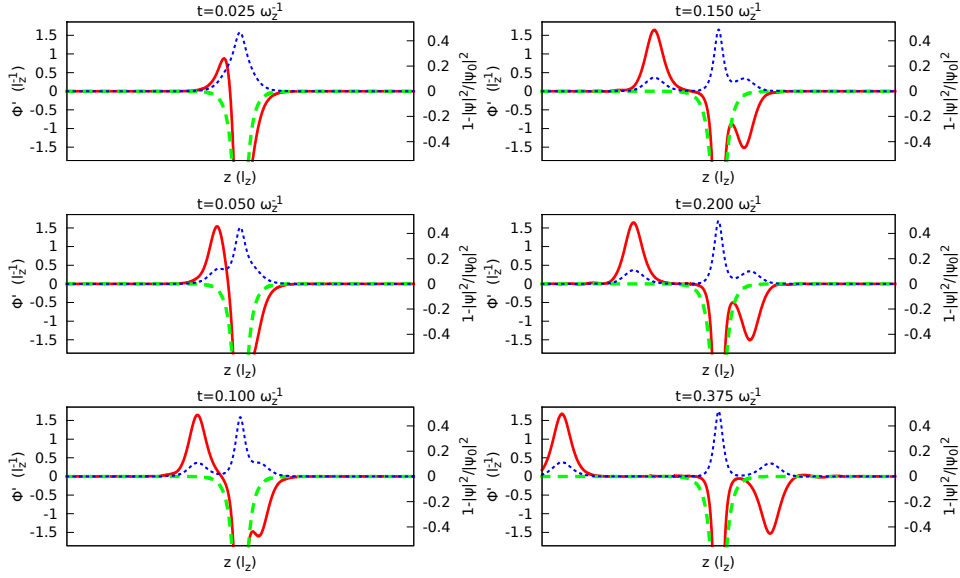


Figura 3.13 Evolução da derivada da fase do sóliton com potencial químico menor (0.7μ) que o do background. Em verde (tracejado) a derivada da fase inicial, em vermelho (linha cheia) a derivada da fase atual, em azul (pontilhado) a amplitude atual. (Modelo MMD. Potencial harmônico. $a = a_{Rb}$)

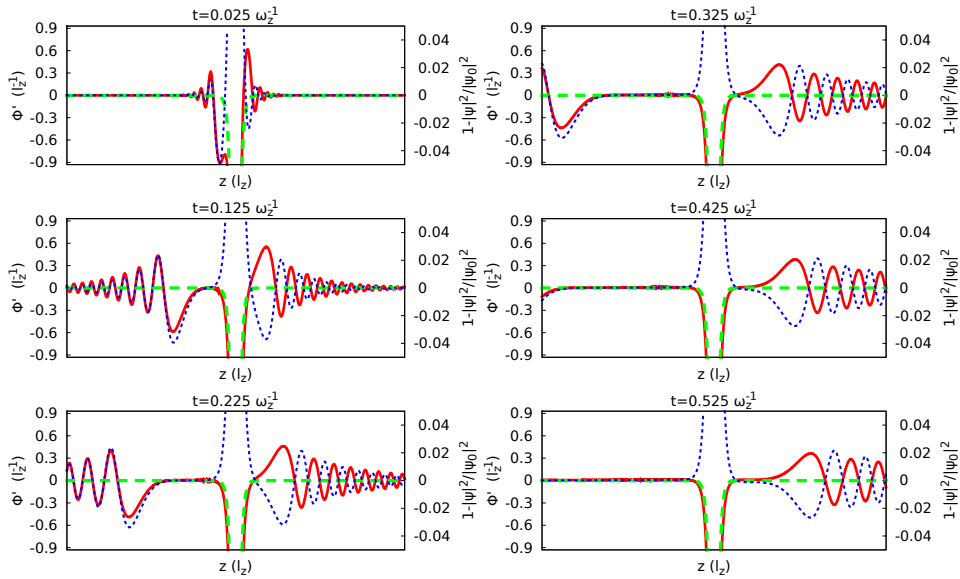


Figura 3.14 Evolução da derivada da fase do sóliton com potencial químico maior (1.4μ) que o do background. Em verde (tracejado) a derivada da fase inicial, em vermelho (linha cheia) a derivada da fase atual, em azul (pontilhado) a amplitude atual. (Modelo MMD. Potencial harmônico. $a = a_{Rb}$)

dimple [40].

Nos restringiremos ao caso em que a descontinuidade do potencial esteja fora da região de propagação do sóliton harmônico, ou seja, $V^{-1}(V_0)$ é maior que a amplitude do movimento

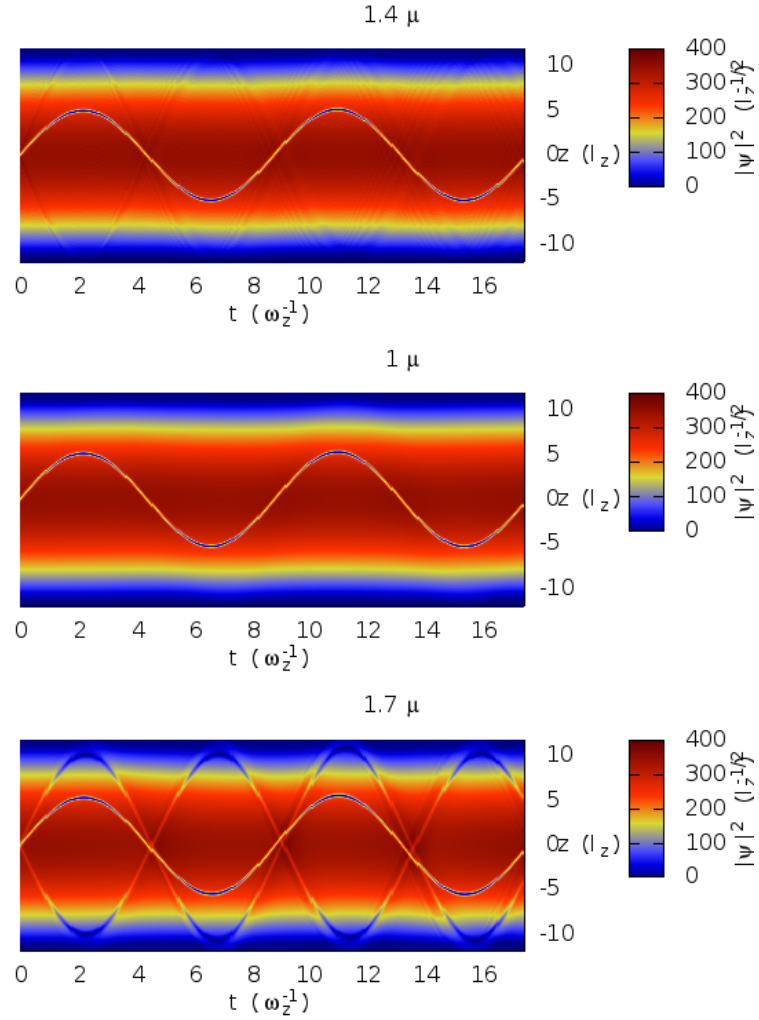


Figura 3.15 Evolução do sóliton com potencial químico 1.4μ (superior), μ (centro) e 0.7μ (inferior). (Modelo MMD. Potencial harmônico. $a = a_{Rb}$)

do sóliton no caso do potencial harmônico. Com isso, pelo menos durante a primeira oscilação, o sóliton só se deslocará no centro da armadilha e o seu eventual decaimento, ou a perda da sua posição, decorrerá da influência do potencial sobre o equilíbrio sóliton-som. Como o condensado comumente tem largura da ordem da largura da sua aproximação de Thomas-Fermi, utilizaremos essa largura $Z = V^{-1}(\mu - \hbar\omega_z)$ como parâmetro para determinação do ponto de descontinuidade do potencial. Simularemos três potenciais distintos: aquele em que $V_0 = \mu_{TF} - \hbar\omega_z$, onde μ_{TF} é o potencial químico da aproximação de Thomas-Fermi para o potencial harmônico, e cuja descontinuidade se encontra exatamente nos limites da aproximação TF; aquele em que $V_0 = 0.8(\mu_{TF} - \hbar\omega_z)$, cuja descontinuidade está no interior do perfil TF; e aquele em que $V_0 = 1.2(\mu_{TF} - \hbar\omega_z)$, cuja descontinuidade está fora do perfil TF. No primeiro

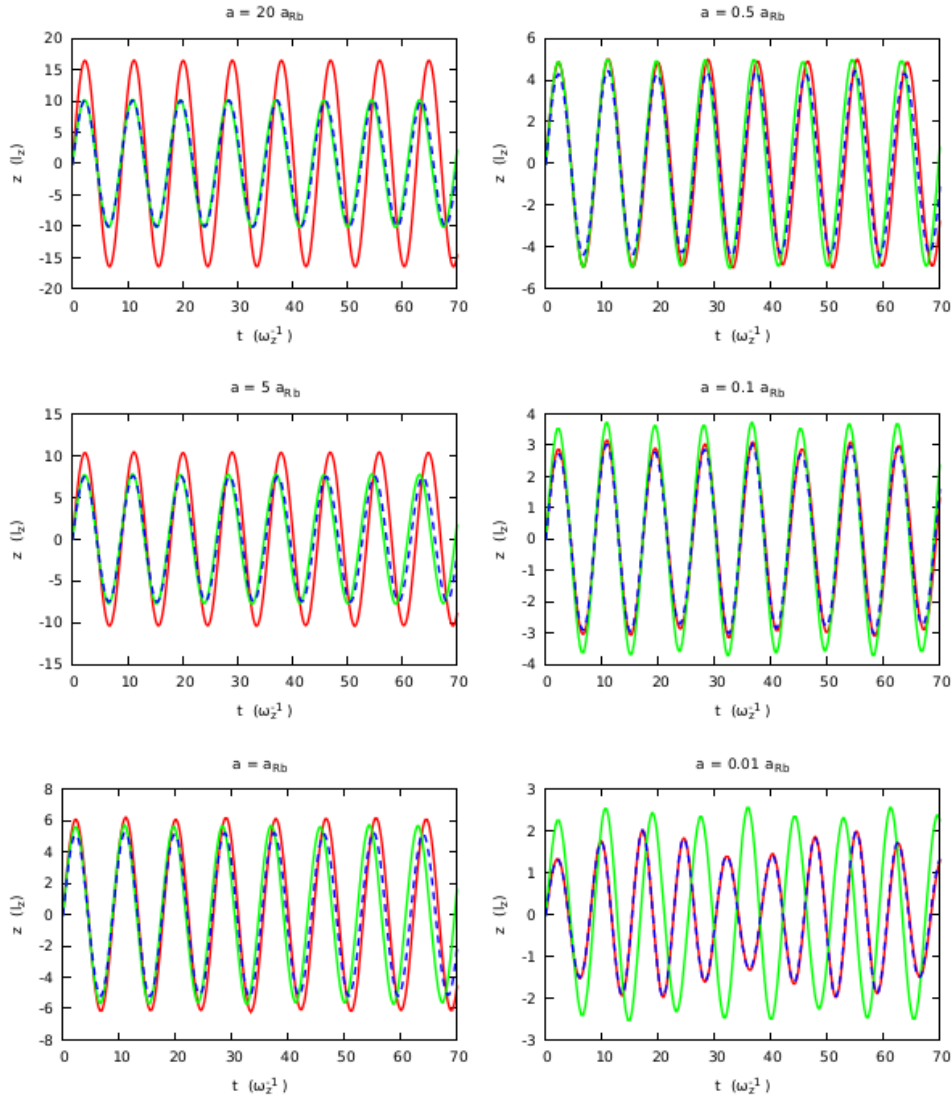


Figura 3.16 Trajetórias dos sólitons em uma armadilha harmônica segundo os modelos cúbico (vermelho), quadrático (verde) e MMD (azul). $a = 20a_{Rb}$ (superior esquerdo), $a = 5a_{Rb}$ (centro esquerdo), $a = a_{Rb}$ (inferior esquerdo), $a = 0.5a_{Rb}$ (superior direito), $a = 0.1a_{Rb}$ (centro direito) e $a = 0.01a_{Rb}$ (inferior direito).

caso, o estado fundamental sofre uma pequena influência da parte externa do potencial sobre as suas bordas, no segundo essa influência é bem mais relevante e no terceiro, se alguma, essa influência só ocorrerá quando a for pequeno e o perfil fundamental se afastar suficientemente da aproximação TF.

Como exemplo da influência de V_0 sobre a dinâmica e o tempo de vida do sóliton, observe a evolução da densidade de um condensado com $a = 0.1a_{Rb}$ em cada um dos casos (Fig. 3.18). Enquanto que no caso 1.2 perdemos a informação da densidade do sóliton no instante

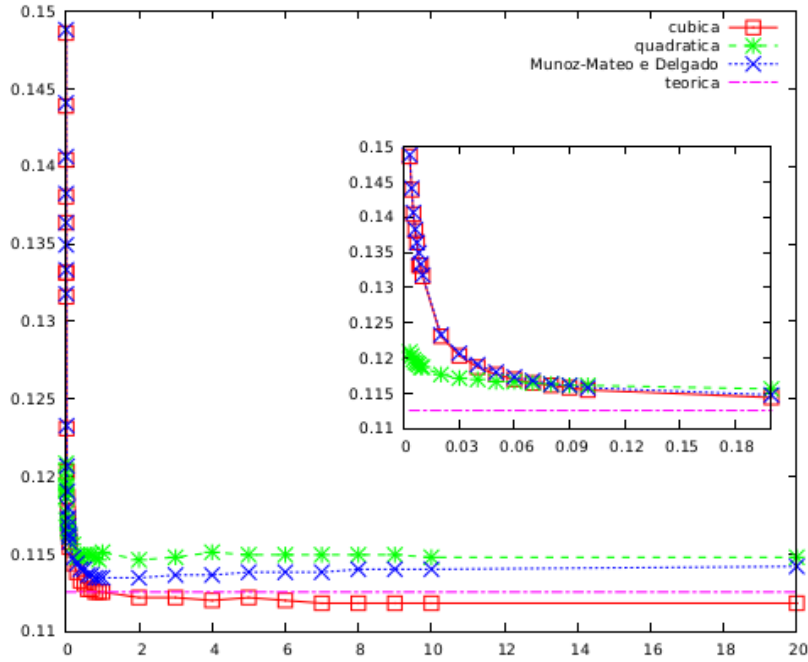


Figura 3.17 Dependência da frequência de oscilação dos sólitons em uma armadilha harmônica com o comprimento de espalhamento. ($v = 0.5v_{\text{lim}}$)

$\approx 185.45\omega_z$, no caso 1.0 a perda ocorre em $\approx 34.35\omega_z$ e o no caso 0.8 em $\approx 20.35\omega_z$. Observe que a parte central do background inicial varia muito pouco de um caso a outro (Fig. 3.19) e que a trajetória dos três sólitons durante o primeiro período de oscilação é praticamente a mesma. As diferenças começam a aparecer mais adiante: as trajetórias dos sólitons 1.0 e 0.8 começam a se abrir mais, indicando que a diferença está no padrão de interação com o som. Quanto maior a influência da parte externa do potencial sobre a dinâmica do som, maior a sua interferência na interação sóliton-som e menor o tempo de vida do sóliton.

Como o decaimento e a perda do sóliton estão associados à interação sóliton-som, devemos esperar que eles aconteçam tanto antes quanto maior for essa interação. O volume de emissão de som está associado ao tamanho do sóliton no condensado: em condensados em que o sóliton é muito estreito se comparado ao background, como aqueles com a 's relativamente grandes, a emissão de som é irrisória e a perda do sóliton improvável; no limite oposto, sólitons largos emitem bastante som quando acelerados e podem eventualmente decair ao reinteragir com essas ondas (Fig. 3.20). Quando o sóliton é excessivamente grande, entretanto, a sua perda pode ocorrer nem tanto pelo seu decaimento quanto por conta do seu ocultamento por variações abruptas no background. Veja por exemplo o caso de um sóliton oscilando em um condensado com $a = 0.01a_{\text{Rb}}$ armadilhado por um potencial *dimple* com barreira $V_0 = 1.2(\mu_{\text{Rb}} - \hbar\omega_{\perp})$ (Fig. 3.21). Esse sóliton é perdido quando as variações da forma do background momentaneamente

anulam a depressão que o caracteriza. Logo após o sóliton é recuperado.

Para observarmos a perda de sólitons por decaimento é prudente que nos restrinjamos ao regime da equação de Muñoz-Mateo e Delgado propriamente dito $a \sim a_{Rb}$ e ao regime em que a equação cúbica é aproximadamente válida, $a \lesssim a_{Rb}$, sem que o condensado seja muito pequeno ($a \ll a_{Rb}$).

De fato, podemos observar diferenças consideráveis nos tempos de vida dos sólitons cúbico e MMD no regime MMD, as quais, à medida que nos deslocamos para o regime cúbico, vão diminuindo até que praticamente inexistam. Considere, primeiramente, o caso $V_0 = \mu_{TF} - \hbar\omega_{\perp}$. Enquanto que com $a = 0.5a_{Rb}$ o tempo de vida MMD é bem maior que o tempo de vida cúbico (Fig. 3.22), quando $a = 0.1a_{Rb}$ e $a = 0.01a_{Rb}$ os tempos são praticamente o mesmo (Figs. 3.23 e 3.24).

Podemos entender essa sobrevida do sóliton MMD da seguinte forma: ambos estados fundamentais se encontram praticamente na parte interna do potencial e, quanto a isso, não se distinguem do perfil fundamental do potencial harmônico (Fig. 3.22) a menos na borda. Como o perfil cúbico é mais largo que o perfil MMD, o som naquele modelo “sente” mais a anarmonicidade do potencial, o que resulta em uma interferência maior na interação sóliton-som e num decaimento mais rápido do sóliton.

O caso $V_0 = 1.2(\mu_{TF} - \hbar\omega_{\perp})$ também apresenta diferenças consideráveis no tempo de vida do sóliton, só que desta vez quem sobrevive mais é o sóliton cúbico (Figs. 3.25, 3.26 e 3.27). Uma outra vez o estado fundamental cúbico é mais largo que o estado fundamental MMD, ambos invadindo ostensivamente a região externa do potencial. Diferentemente do caso anterior, os perfis são bastante diferentes na região central do potencial, na qual o sóliton se desloca. O perfil MMD, mais estreito, varia de densidade mais abruptamente, acelerando o sóliton mais intensamente, emitindo um volume maior de som e provocando um decaimento mais precoce do sóliton.

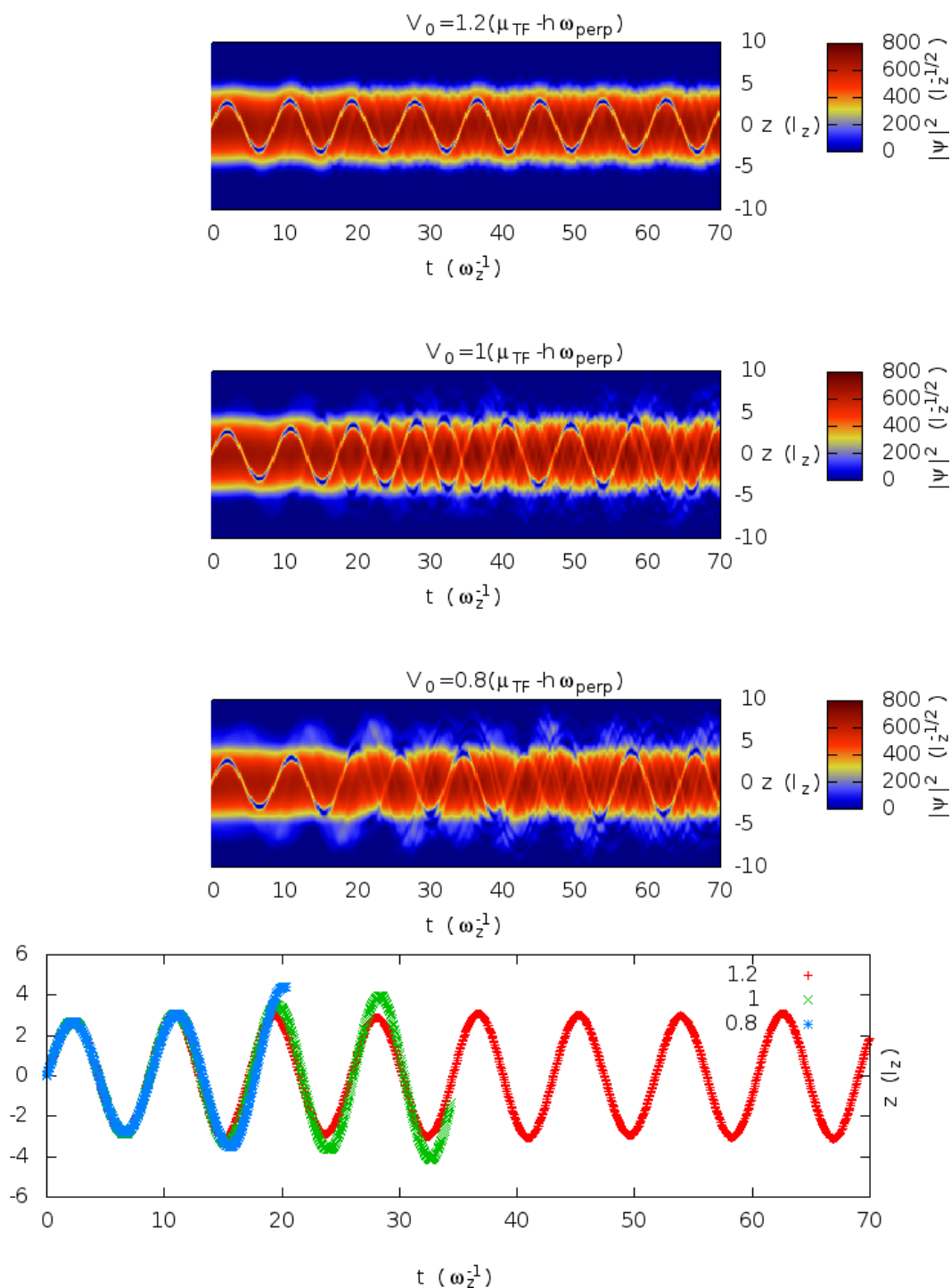


Figura 3.18 Evolução do sóliton em armadilha *dimple* com $V_0 = 1.2(\mu_{\text{TF}} - \hbar\omega_{\perp})$ (superior), $V_0 = 1(\mu_{\text{TF}} - \hbar\omega_{\perp})$ (segunda figura) e $V_0 = 0.8(\mu_{\text{TF}} - \hbar\omega_{\perp})$ (terceira figura). Comparação entre as posições dos sólitons segundo a depressão na densidade (inferior): $V_0 = 1.2(\mu_{\text{TF}} - \hbar\omega_{\perp})$ em vermelho, $V_0 = 1(\mu_{\text{TF}} - \hbar\omega_{\perp})$ em verde, $V_0 = 0.8(\mu_{\text{TF}} - \hbar\omega_{\perp})$ em azul. (Modelo MMD. $a = 0.1a_{\text{Rb}}$.)

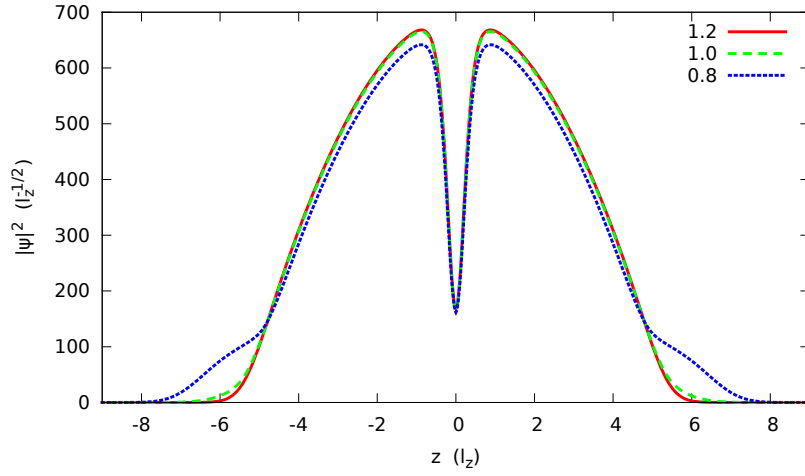


Figura 3.19 Perfil inicial de evolução do sóliton em condensado aprisionado por potencial *dimple* com $V_0 = 1.2(\mu_{\text{TF}} - \hbar\omega_{\perp})$ (vermelho), $V_0 = 1(\mu_{\text{TF}} - \hbar\omega_{\perp})$ (verde) e $V_0 = 0.8(\mu_{\text{TF}} - \hbar\omega_{\perp})$ (azul).

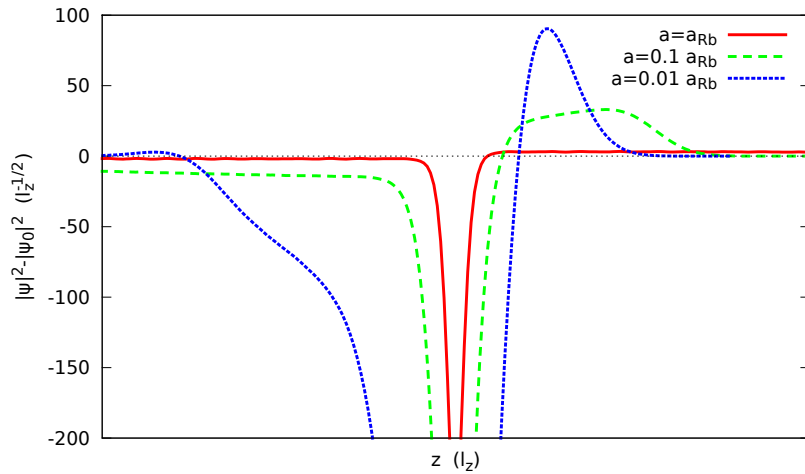


Figura 3.20 Densidade renormalizada do condensado na região do sóliton ao inverter pela primeira vez o sentido de propagação. (Modelo MMD. Potencial harmônico. $a = a_{\text{Rb}}$ em vermelho, $a = 0.1a_{\text{Rb}}$ em verde, $a = 0.01a_{\text{Rb}}$ em azul.)

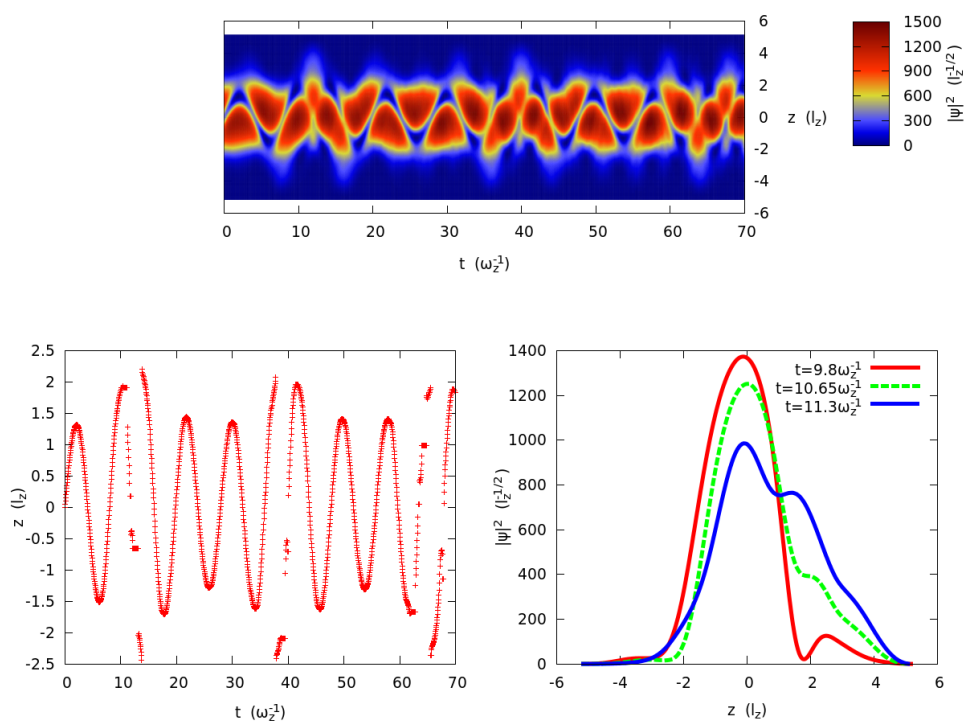


Figura 3.21 Evolução do sóliton em armadilha *dimple* com $V_0 = 1.2(\mu_{\text{Rb}} - \hbar\omega_{\perp})$ (superior), sua trajetória segundo a amplitude (inferior esquerdo) e o perfil da função de onda (inferior direito) instantes antes da primeira perda do sóliton (vermelho), durante a perda (verde) e depois de reencontrado (azul). (Modelo MMD. $a = 0.01a_{\text{Rb}}$.)

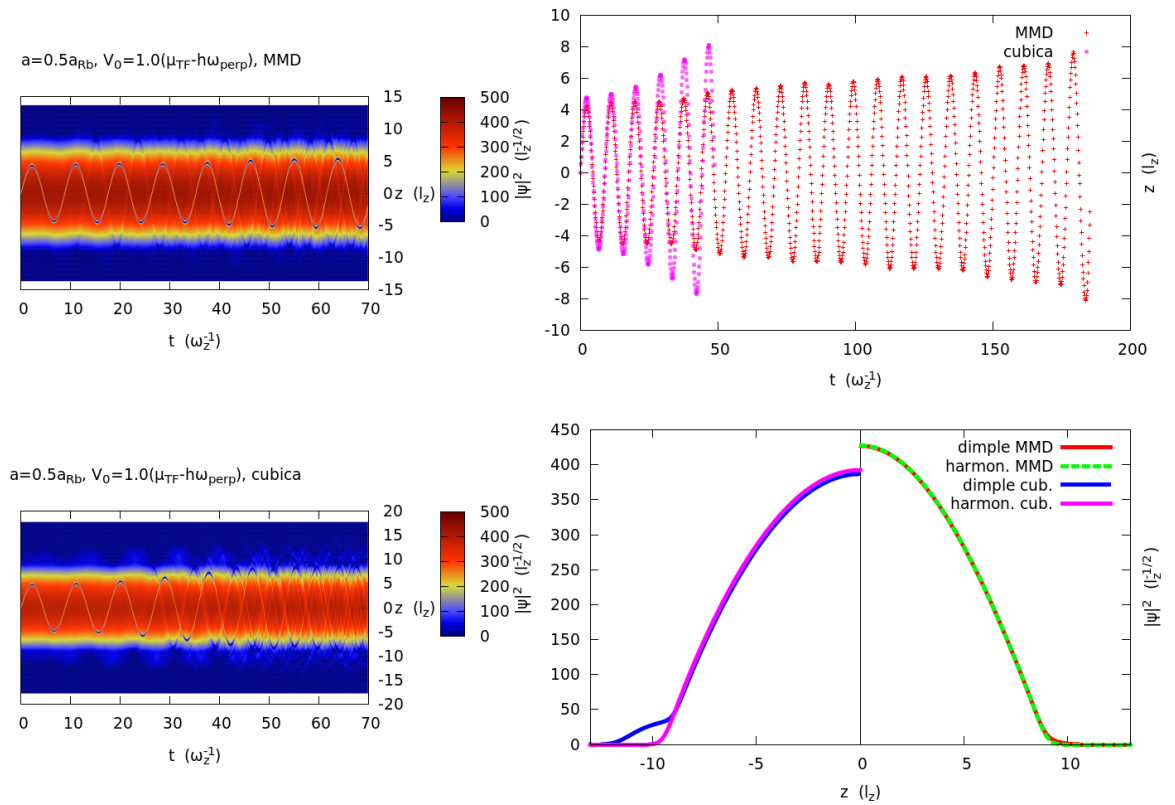


Figura 3.22 Evolução do sóliton em armadilha *dimple* com $V_0 = 1.0(\mu_{\text{Rb}} - \hbar\omega_{\perp})$ e condensado com $a = 0.5a_{\text{Rb}}$ segundo o modelo MMD (superior esquerdo) e segundo o modelo cúbico (inferior esquerdo). Comparação entre as trajetórias e tempo de decaimento do sóliton (superior direito) segundo o modelo MMD (vermelho) e segundo o modelo cúbico (rosa). Comparação entre os perfis fundamentais do condensado na armadilha *dimple* e na armadilha harmônica.

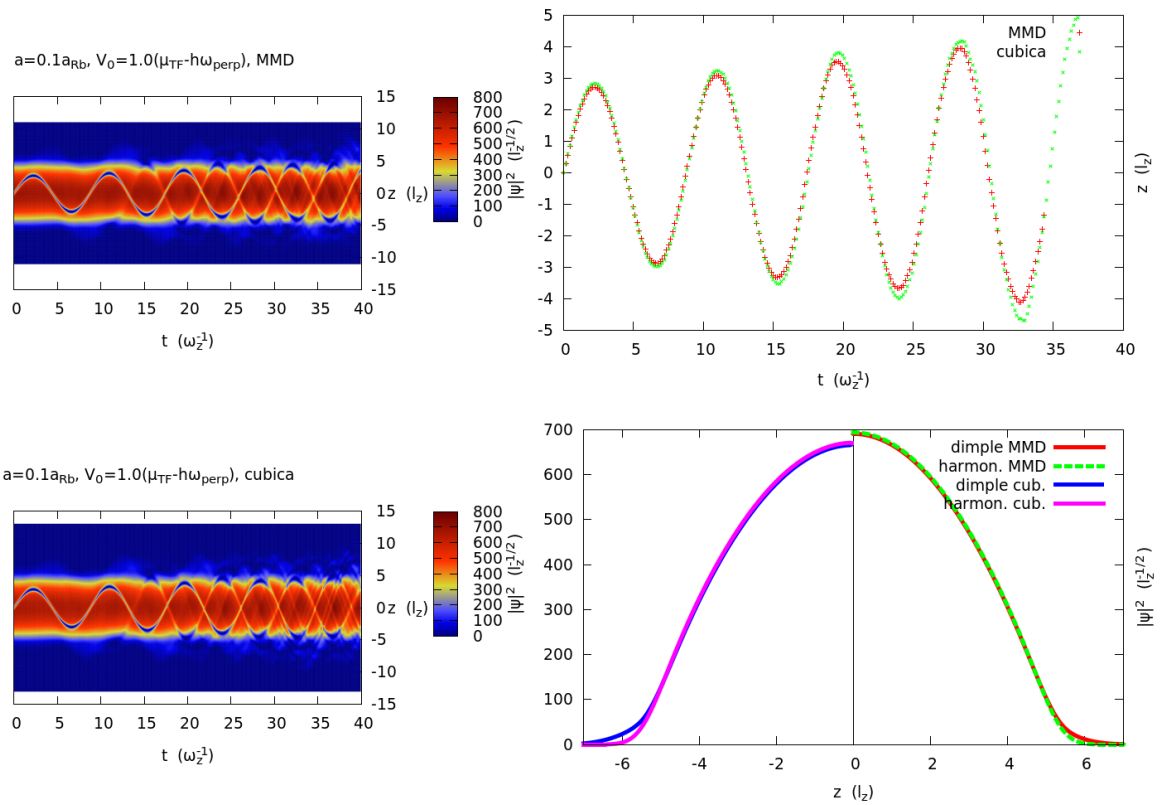


Figura 3.23 Evolução do sóliton em armadilha *dimple* com $V_0 = 1.0(\mu_{Rb} - \hbar\omega_{\perp})$ e condensado com $a = 0.1a_{Rb}$ segundo o modelo MMD (superior esquerdo) e segundo o modelo cúbico (inferior esquerdo). Comparação entre as trajetórias e tempo de decaimento do sóliton (superior direito) segundo o modelo MMD (vermelho) e segundo o modelo cúbico (rosa). Comparação entre os perfis fundamentais do condensado na armadilha *dimple* e na armadilha harmônica.

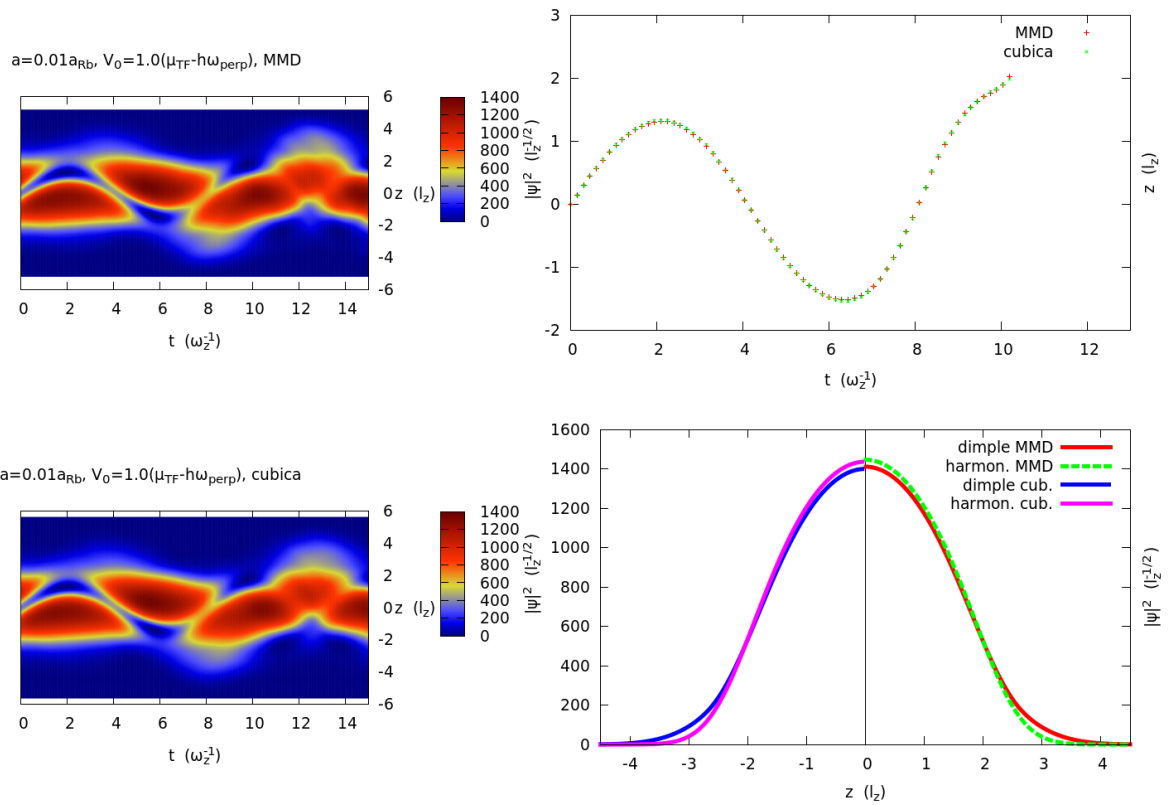


Figura 3.24 Evolução do sóliton em armadilha *dimple* com $V_0 = 1.0(\mu_{\text{Rb}} - \hbar\omega_{\perp})$ e condensado com $a = 0.01a_{\text{Rb}}$ segundo o modelo MMD (superior esquerdo) e segundo o modelo cúbico (inferior esquerdo). Comparação entre as trajetórias e tempo de decaimento do sóliton (superior direito) segundo o modelo MMD (vermelho) e segundo o modelo cúbico (rosa). Comparação entre os perfis fundamentais do condensado na armadilha *dimple* e na armadilha harmônica.

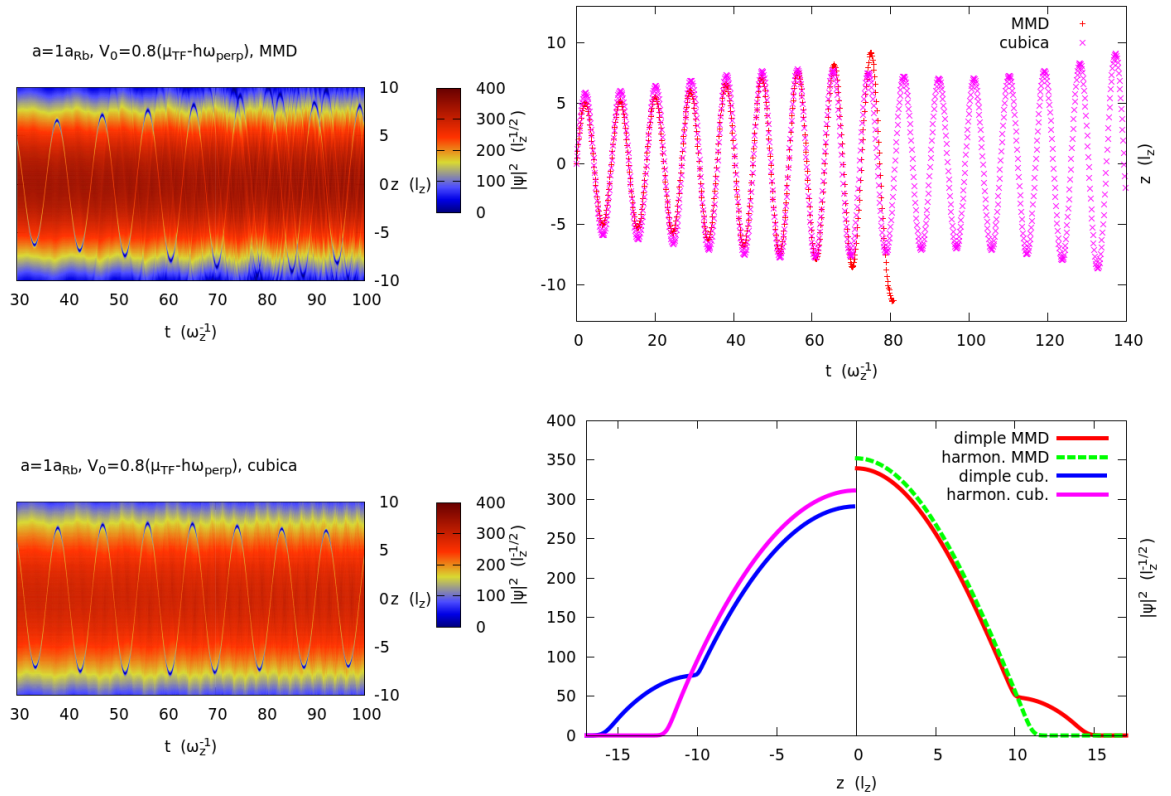


Figura 3.25 Evolução do sóliton em armadilha *dimple* com $V_0 = 0.8(\mu_{\text{Rb}} - \hbar\omega_{\perp})$ e condensado com $a = 1a_{\text{Rb}}$ segundo o modelo MMD (superior esquerdo) e segundo o modelo cúbico (inferior esquerdo). Comparação entre as trajetórias e tempo de decaimento do sóliton (superior direito) segundo o modelo MMD (vermelho) e segundo o modelo cúbico (rosa). Comparação entre os perfis fundamentais do condensado na armadilha *dimple* e na armadilha harmônica.

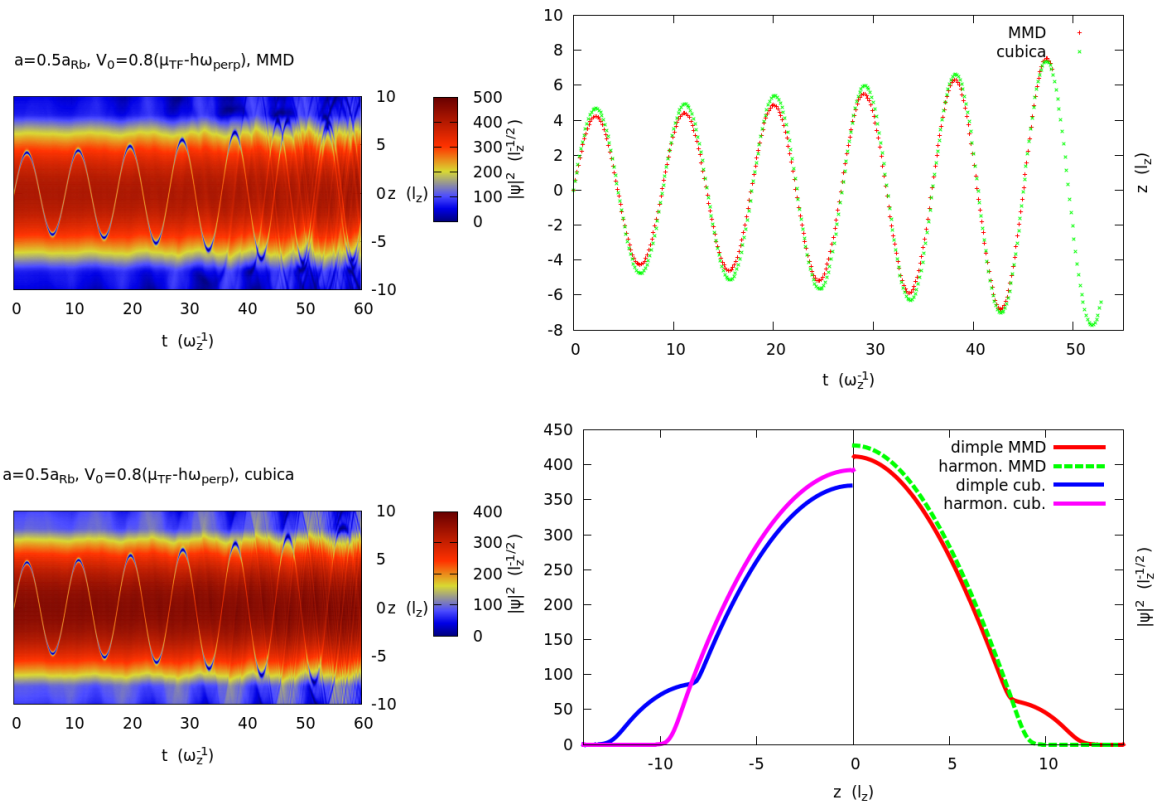


Figura 3.26 Evolução do sóliton em armadilha *dimple* com $V_0 = 0.8(\mu_{Rb} - \hbar\omega_{\perp})$ e condensado com $a = 0.5a_{Rb}$ segundo o modelo MMD (superior esquerdo) e segundo o modelo cúbico (inferior esquerdo). Comparação entre as trajetórias e tempo de decaimento do sóliton (superior direito) segundo o modelo MMD (vermelho) e segundo o modelo cúbico (rosa). Comparação entre os perfis fundamentais do condensado na armadilha *dimple* e na armadilha harmônica.

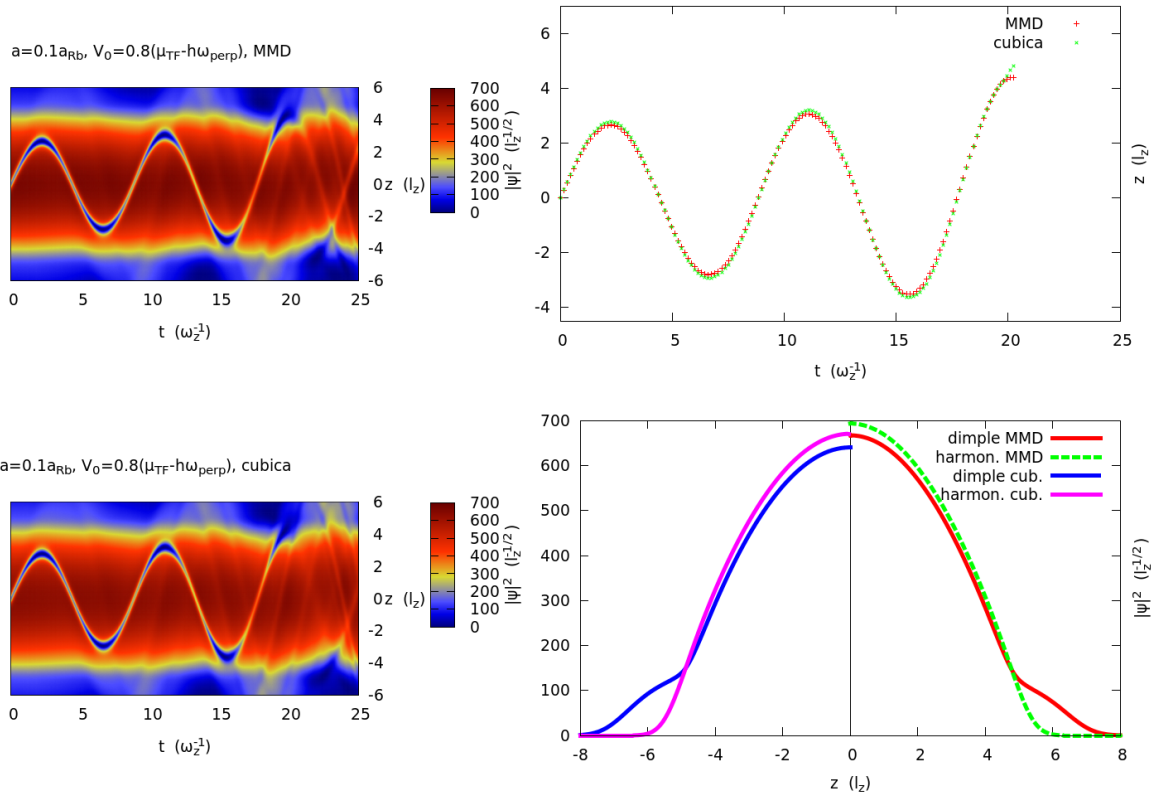


Figura 3.27 Evolução do sóliton em armadilha *dimple* com $V_0 = 0.8(\mu_{Rb} - \hbar\omega_{\perp})$ e condensado com $a = 0.1a_{Rb}$ segundo o modelo MMD (superior esquerdo) e segundo o modelo cúbico (inferior esquerdo). Comparação entre as trajetórias e tempo de decaimento do sóliton (superior direito) segundo o modelo MMD (vermelho) e segundo o modelo cúbico (rosa). Comparação entre os perfis fundamentais do condensado na armadilha *dimple* e na armadilha harmônica.

Conclusão

No presente trabalho nos propomos a comparar a dinâmica e decaimento de sólitons escuros em condensados de Bose-Einstein segundo os modelos cúbico e de Muñoz Mateo e Delgado (MMD). Avaliamos primeiramente a trajetória do sóliton sobre o estado fundamental de uma armadilha harmônica. O resultado foi como o esperado, as trajetórias do modelo MMD se aproximavam das trajetórias do modelo cúbico à medida que diminuíamos a intensidade da interação interatômica (diminuindo o comprimento de espalhamento a) e se aproximavam das trajetórias do modelo quadrático à medida que aumentávamos a . Observamos que no limite dos maiores (menores) valores de a simulados, o modelo cúbico (quadrático) apresentou amplitudes de oscilação bem maiores e frequências de oscilação bem menores que o modelo MMD. Atribuímos esse fenômeno a diferenças nas geometrias dos estados fundamentais que serviam de fundo para a propagação do sóliton. De fato o perfil do estado fundamental cúbico (quadrático) é bem mais largo que o perfil do estado fundamental MMD no limite dos maiores (menores) valores de a . Essas diferenças geométricas podem ser qualitativamente entendidas em termos da competição das energias envolvidas no processo de minimização que resulta no perfil do estado fundamental.

O comportamento do perfil fundamental com o valor do comprimento de espalhamento também nos ajudou a compreender o comportamento da amplitude e da frequência de oscilação com as variações de a dentro de um mesmo modelo. É compreensível que as variações mais suaves dos *backgrounds* mais largos impliquem em trajetórias mais largas e lentas.

Estudamos em seguida a dinâmica de sólitons em três potenciais do tipo *dimple*

$$V(z) = \begin{cases} \frac{m\omega_i^2 z^2}{2} & \left(z < z_0 := \frac{1}{\omega_i} \sqrt{\frac{2V_0}{m}} \right) \\ V_0 + \frac{m\omega_o^2 (|z| - z_0)^2}{2} & (z \geq z_0; \omega_0 < \omega_i) \end{cases} .$$

Um potencial, $V_0 = 1, 2(\mu_{\text{TF}} - \hbar\omega_{\perp})$, cuja parte interna consegue abranger todo o perfil da aproximação de Thomas-Fermi (TF), outro, $V_0 = \mu_{\text{TF}} - \hbar\omega_{\perp}$, cuja parte interna tem exatamente a mesma largura do perfil TF, e um terceiro, $V_0 = 0, 8(\mu_{\text{TF}} - \hbar\omega_{\perp})$, mais estreito que o perfil TF. Mantendo os outros parâmetros fixos, obtemos tempos de vida menores para as simulações

com a parte interna mais estreita. Acreditamos que isso se deva à influência crescente da parte externa do potencial na determinação do *background*. Quanto menor V_0 , maior essa influência, mais distinto o *background* do *background* harmônico, mais distante o padrão de emissão sonora do padrão harmônico, mais distante o sistema do equilíbrio harmônico da interação sóliton-som e mais rápida a perda do sóliton.

As simulações dos modelos cúbico e MMD com valores de a muito pequenos retornaram funções de onda muito semelhantes com tempos de decaimento bem próximos. Nas simulações com valores de a intermediários, da ordem de a_{Rb} , as evoluções apresentaram diferenças relevantes e tempos de vida bastante distintos: por vezes o sóliton cúbico sobrevivia mais, outras o sóliton MMD é que levava mais tempo para desaparecer. Acreditamos que essas diferenças se devam à competição de dois efeitos que por sua vez decorrem da diferença nas geometrias dos perfis fundamentais cúbico e MMD.

A superestimação cúbica da não linearidade, se comparada à não linearidade MMD, faz com que o seu perfil fundamental seja mais largo que o perfil MMD e que seja, por isso, mais influenciado pela parte externa do potencial *dimple*. Consequentemente, o padrão de interação sóliton-som cúbico tende a se afastar mais do equilíbrio harmônico dessa interação e abreviar o tempo de vida do sóliton cúbico. Por outro lado, a maior desconcentração do perfil cúbico implica um perfil mais suave na região de propagação do sóliton que desacelere mais lentamente o sóliton e que o induza a emitir som a uma taxa menor que o sóliton MMD. Com isso, a intensidade da interação sóliton-som cúbica é menor, promovendo um decaimento mais lento e uma sobrevida ao sóliton cúbico.

Nas simulações com potencial *dimple* $V_0 = \mu_{TF} - \hbar\omega_{\perp}$, ambos os *backgrounds* avançam suficientemente sobre a parte externa do potencial para que o equilíbrio da interação sóliton-som seja perdido, mas não tanto que altere muito a sua forma na parte interna do potencial. Mais estreito, o perfil MMD preserva durante um tempo maior o equilíbrio sóliton-som. O som, no modelo cúbico, avançando mais sobre a região anarmônica do *background*, perde mais rapidamente o padrão de interação harmônico com o sóliton e abrevia o tempo de vida do sóliton cúbico.

Nas simulações com potencial *dimple* $V_0 = 0,8(\mu_{TF} - \hbar\omega_{\perp})$, ambos os *backgrounds* avançam ostensivamente sobre a parte externa do potencial e perdem completamente o equilíbrio da interação sóliton-som. Nesse regime, o volume de emissão de som parece importar mais que o padrão de interação, de modo que o sóliton MMD, que emite mais, é perdido antes que o sóliton cúbico.

As diferenças por vezes gritantes entre os tempos de vida dos sólitons cúbico e MMD servem de alerta para a usabilidade do modelo cúbico e, de maneira geral, para a usabilidade dos

modelos unidimensionais. Enquanto que dentro do regime apropriado, esses modelos conseguem fornecer boas aproximações para o estado fundamental do condensado e descrever bem as trajetórias dos sólitons, dentro desse mesmo regime, eles podem falhar redondamente na estimativa de propriedades mais sensíveis à forma do background, como o tempo de vida do sóliton, que é extremamente sensível ao padrão de interação sóliton-som, que, por sua vez, tem forte dependência com a forma do *background*. O mais prudente, no estudo dessas propriedades, talvez seja fazer uso, sempre que possível, da equação tridimensional de Gross-Pitaevskii, ou, ao menos, o modelo unidimensional mais aproximado, papel atualmente cumprido pelo modelo de Muñoz-Mateo e Delgado.

Princípios básicos dos métodos experimentais

As etapas de um procedimento experimental para obtenção de um BEC são:

1. A emissão um feixe de átomos de sódio a $\approx 600K$ por um forno;
2. Esse feixe atravessa um desacelerador (*Zeeman slower*), do qual emerge a uma temperatura de $\approx 1K$;
3. Uma armadilha magneto-óptica captura o feixe atômico e o resfria até $\approx 100\mu K$;
4. O laser é desligado e uma armadilha magnética é ligada;
5. O terceiro e último resfriamento, esse evaporativo, é realizado.

No que segue expomos os princípios físicos básicos envolvidos nesse procedimento.

Resfriamento óptico

O fóton tem momento linear no sentido da sua propagação. Quando um átomo o absorve, ele “ganha” esse momento; quando um átomo emite um fóton, ele perde o momento transferido para o fóton emitido. Suponha um feixe de luz monocromática incidindo contra um feixe atômico, a força média da radiação sobre o feixe atômico é determinada pelos processos de absorção e de emissão de fótons.

A força média devida a absorção tem módulo igual ao produto do momento do fóton pela taxa de absorção de fótons e tem a direção e o sentido do feixe luminoso, isto é, essa força tende a frear o feixe atômico. Quanto à emissão, são dois os mecanismos de emissão, cujas contribuições separamos: a emissão espontânea, cuja direção é aleatória e, por isso, tem força média nula; e a emissão estimulada, que ocorre por influência da radiação incidente que não é absorvida. O fóton emitido por emissão estimulada tem a mesma direção, sentido e frequência de oscilação da radiação incidente. A força média devida à emissão estimulada é igual ao produto do momento do fóton emitido pela taxa de emissão espontânea e tem a direção e o sentido do feixe atômico, acelerando-o [41].

Depois de um certo tempo, o sistema deve entrar em equilíbrio de maneira que as populações de átomos excitados e de átomos no estado fundamental devam se manter constantes, o que significa que as taxas de emissão e de absorção são iguais. Como a emissão espontânea estatisticamente não promove nenhuma mudança no estado de movimento dos átomos e a taxa de absorção é maior que a taxa de emissão estimulada, a força resultante média terá a direção e o sentido do feixe luminoso [41], o que diminui a velocidade do feixe atômico, resfriando-o. Esse é o princípio básico de resfriamento de feixes atômicos do Zeeman *slower*.

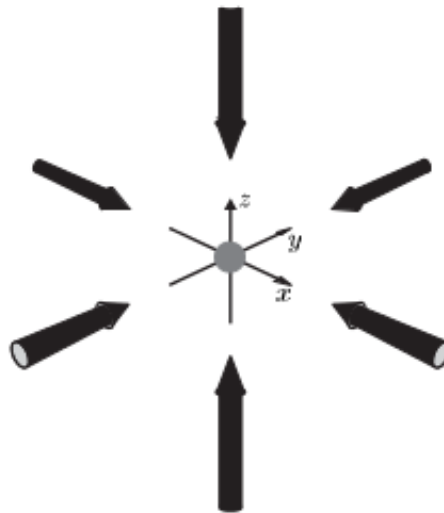


Figura A.1 Resfriamento óptico de um gás pela atuação de seis feixes luminosos monocromáticos incidindo sobre os eixos cartesianos (fig. extraída de [41, p.186]).

Considere agora um gás. Os átomos se movimentam em todas as direções. Se quisermos resfriá-lo, devemos diminuir as velocidades das partículas em todas as direções. Suponha que apliquemos lasers sobre a amostra a partir de cada uma das direções dos eixos de um sistema cartesiano (ver Figura A.1). Todos os feixes tem a mesma frequência (no referencial do laboratório) e polarização. Suponha que essa frequência seja um pouco menor que a frequência de ressonância da transição atômica pertinente.

Se a projeção da velocidade de um átomo sobre um dos eixos de incidência é diferente de zero, então, por efeito Doppler, no referencial do átomo, os dois feixes luminosos que incidem na direção desse eixo tem frequências diferentes. A frequência do feixe contrapropagante é um pouco maior que a frequência no referencial do laboratório, ficando mais próxima da frequência ressonante, e a frequência do outro feixe é um pouco menor, se afastando da frequência ressonante. Com isso a taxa de absorção de fótons do feixe contrapropagante torna-se maior que a do outro feixe, promovendo uma força líquida no sentido contrário ao da projeção da

velocidade atômica [41]. Fazendo essa consideração nas direções de cada um dos três eixos fica evidente que o gás será resfriado em todas as direções na região de interseção dos feixes. Essa configuração de feixes luminosos está presente na armadilha magneto-óptica, onde, além de resfriar o gás, o aprisiona por influência do campo magnético.

Armadilha magneto-óptica

O laser resfria o gás, mas sozinho não o pode aprisionar em uma região do espaço, uma vez que as forças atuantes independem da posição. Para criar essa dependência, vamos nos valem da quebra de degenerescência dos orbitais atômicos com relação ao número quântico magnético quando da aplicação de campo magnético (efeito Zeeman) e da dependência dessa quebra com relação à direção e intensidade do campo magnético.

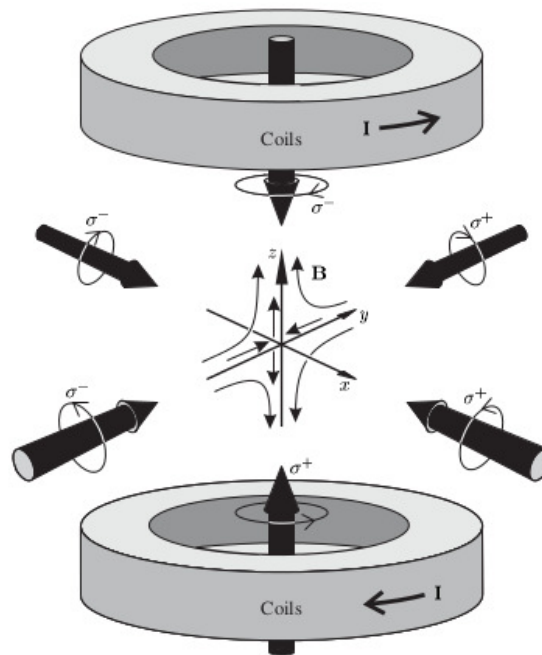


Figura A.2 Representação esquemática de uma armadilha magneto-óptica formada por seis feixes de luz monocromática incidindo sobre o centro da armadilha e duas espiras paralelas com correntes em sentidos opostos (fig. extraída de [41, p.192]).

Considere o aparato experimental da Fig. A.2. O campo magnético tem intensidade mínima ($B = 0$) no centro do sistema de referência e tem um gradiente aproximadamente constante em torno dessa região. O campo magnético aumenta linearmente a medida que nos afastamos da origem, o que significa que a quebra da degenerescência dos orbitais também cresce linear-

mente com o afastamento da origem [41]. A simetria do campo nos garante que, dado o campo em um ponto $\mathbf{r} = (x, y, z)$, o campo no ponto oposto, $-\mathbf{r} = (-x, -y, -z)$ tem a mesma intensidade e direção e sentido oposto. Logo, os desvios Zeeman nas energias dos orbitais em um ponto e outro são invertidos (Fig. A.3).

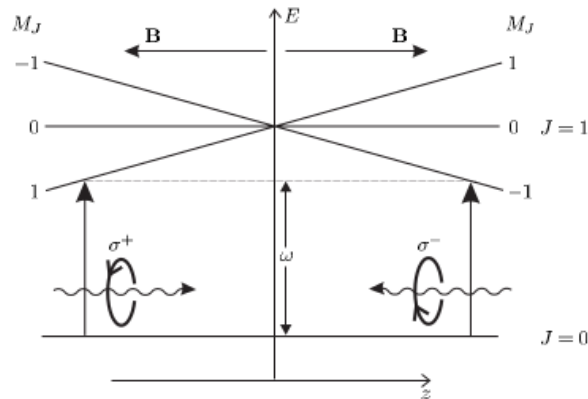


Figura A.3 Representação da dependência do desvio Zeeman com a distância do centro da armadilha (fig. extraída de [41, p.186]).

As regras de seleção para a transição atômica impõem que, para uma transição em que $\Delta M_J = 1$, o átomo deve absorver um fóton com uma polarização circular específica e que, para uma transição $\Delta M_J = -1$, o fóton deve ter a polarização circular oposta. Tendo isso em vista, escolhamos as polarizações dos lasers de maneira a serem favorecidas as transições que impulsionem os átomos em direção ao centro da armadilha.

Tome o eixo x como exemplo. Suponha que um átomo, mesmo parado, esteja em um ponto $x > 0$. Considerando que a frequência do laser é menor que a da transição, a transição $\Delta M_J = -1$ nesse ponto é favorecida. Para que o átomo volte para a origem, a radiação propagando no sentido negativo de x deve ser a correspondente a essa transição e a radiação propagando no sentido positivo de x deve corresponder à transição $\Delta M_J = 1$. Se o átomo estiver em uma posição $x < 0$, as transições favorecida e prejudicada se invertem, de modo que a mesma configuração de lasers “empurra” o átomo de volta para a origem [41].

Armadilha magnética

Esse tipo de armadilha explora o comportamento dos átomos em campos magnéticos inhomôneos. Uma vez que o eixo de quantização do momento magnético atômico é definido pela direção do campo magnético, a energia magnética do átomo, $-\mu \cdot \mathbf{B}$, independe da direção do

campo,

$$V = g_F \mu_B M_F B \quad ,$$

variando com o número quântico magnético total do estado atômico, M_F , e com o módulo do campo. Como os átomos tendem a se mover na direção das regiões com menor energia, aqueles cujos estados tem $g_F M_F > 0$ tendem as regiões com B mínimo. Os estados $g_F M_F < 0$, pelo contrário, tendem às regiões que maximizem B [41]. Como não é possível uma configuração de campo magnético em que ocorra um máximo numa região sem corrente [5, 41], e como configurações que minimizem B podem ser feitas sem dificuldades, podemos construir armadilhas magnéticas para a primeira espécie de estados atômicos, mas não para as segundas. Estas espécies, aliás, tendem a ser expulsas da armadilha, fato que é o princípio chave para um dos métodos de resfriamento evaporativo.

Resfriamento evaporativo

A ideia chave do resfriamento evaporativo é: permitindo-se que os átomos mais energéticos do gás saiam da armadilha, o gás armadilhado retermaliza para uma temperatura inferior a original. Podemos realizar esse resfriamento em uma armadilha magnética promovendo a transição dos átomos mais energéticos do estado $g_F M_F > 0$ para um estado $g_F M_F < 0$, o que os expulsa da armadilha. Como somente os átomos mais energéticos chegam as regiões mais afastadas do centro da armadilha e como a energia da transição varia com a intensidade do campo magnético, podemos aplicar radiação sobre a amostra com frequência tal que essa entre em ressonância com a transição somente na região das partículas mais energéticas [41].

Métodos numéricos

B.1 Método de separação de operadores

O método de separação de operadores é uma estratégia de resolução de equações diferenciais que se propõe a resolver um problema de valor inicial,

$$\begin{cases} U(0) = U_0 \\ \frac{\partial U}{\partial t}(t) = (A + B)U(t) \end{cases} \quad (\text{B.1})$$

no qual os operadores A e B são independentes de t , por meio da substituição desse problema por problemas de valor inicial mais simples cuja solução se conhece, ou numericamente se possa obter [42].

$$\begin{cases} u(0) = u_0 \\ \frac{\partial u}{\partial t}(t) = Au(t) \end{cases} \quad \begin{cases} v(0) = v_0 \\ \frac{\partial v}{\partial t}(t) = Bv(t) \end{cases} \quad (\text{B.2})$$

A utilização desse método se justifica quando a solução exata do problema original, formalmente

$$U(t) = \exp[(A + B)t]U_0 \quad , \quad (\text{B.3})$$

não puder ser calculada. Existem vários procedimentos que realizam essa aproximação, a seguir apresentaremos dois deles.

Esquema de Lie-Trotter

No esquema de separação de operadores de Lie-Trotter, substituímos a evolução temporal devido a operação simultânea e aditiva de A e B pela evolução não simultânea devido a operação de A e àquela devido a operação de B . Mais precisamente, substituímos o Problema (B.1) pelo

seguinte

$$\begin{aligned}
 & u_{LT}(0) = U(0) \\
 & \left\{ \begin{array}{ll} u(0) = u_{LT}(0) & \text{(condição inicial)} \\ \frac{\partial u}{\partial t}(t) = Au(t) & t \in [0, \Delta t] \end{array} \right. \quad \left\{ \begin{array}{ll} v(0) = u(\Delta t) & \text{(condição inicial)} \\ \frac{\partial v}{\partial t}(t) = Bv(t) & t \in [0, \Delta t] \\ u_{LT}(\Delta t) = v(\Delta t) & \text{(solução)} \end{array} \right.
 \end{aligned} \tag{B.4}$$

Tomamos $u_{LT}(\Delta t)$ como solução aproximada de (B.1). O erro dessa aproximação pode ser estimado através da comparação entre a expansão de Taylor da solução exata e a expansão da solução aproximada [42].

$$\begin{aligned}
 U(\Delta t) &= U_0 + (A+B)U_0\Delta t + (A+B)^2U_0\frac{\Delta t^2}{2} + O(\Delta t^3) \\
 u_{LT}(\Delta t) &= U_0 + (A+B)U_0\Delta t + (A^2 + 2BA + B^2)U_0\frac{\Delta t^2}{2} + O(\Delta t^3)
 \end{aligned}$$

O erro relativo tem dependência linear com Δt .

$$\boxed{\frac{u_{LT}(\Delta t) - U(\Delta t)}{\Delta t} = [B, A]U_0\frac{\Delta t}{2}}$$

Esquema de Strang

No esquema de Strang melhoramos a aproximação do método substituindo o problema original por três outros: a evolução temporal da solução, em metade do tempo, devido a operação de A , a evolução, durante todo o intervalo, devido a operação de B e a evolução, durante a outra metade do tempo, devido a A . Matematicamente temos o seguinte problema

$$\begin{aligned}
 & u_{St}(0) = U(0) \\
 & \left\{ \begin{array}{ll} u(0) = u_{St}(0) & \text{(condição inicial)} \\ \frac{\partial u}{\partial t}(t) = Au(t) & t \in [0, \Delta t/2] \end{array} \right. \quad \left\{ \begin{array}{ll} w(\Delta t/2) = v(\Delta t) & \text{(condição inicial)} \\ \frac{\partial w}{\partial t}(t) = Aw(t) & t \in [\Delta t/2, \Delta t] \\ u_{St}(\Delta t) = w(\Delta t) & \text{(solução)} \end{array} \right. \\
 & \left\{ \begin{array}{ll} v(0) = u(\Delta t/2) & \text{(condição inicial)} \\ \frac{\partial v}{\partial t}(t) = Bv(t) & t \in [0, \Delta t] \end{array} \right.
 \end{aligned} \tag{B.5}$$

Comparando as expansões de Taylor da solução aproximada e da solução exata

$$U(\Delta t) = U_0 + (A + B)U_0\Delta t + (A + B)^2U_0\frac{\Delta t^2}{2} + (A + B)^3U_0\frac{\Delta t^3}{3!} + O(\Delta t^4)$$

$$u_{St}(\Delta t) = U_0 + (A + B)U_0\Delta t + (A + B)^2U_0\frac{\Delta t^2}{2} + \left(A^3 + \frac{3}{4}A^2B + \frac{3}{2}ABA + \frac{3}{4}BA^2 + \frac{3}{2}B^2A + \frac{3}{2}AB^2 + B^3 \right) \frac{\Delta t^3}{3!} + O(\Delta t^4)$$

obtemos um erro relativo quadrático

$$\boxed{\frac{u_{St}(\Delta t) - U(\Delta t)}{\Delta t} = \left(\frac{1}{2} [B, [B, A]] - \frac{1}{4} [A, [A, B]] \right) U_0 \frac{\Delta t^2}{3!}}$$

o que significa que o esquema de Strang fornece uma aproximação melhor que o método de Lie-Trotter [42].

B.2 Método de propagação em tempo imaginário

Os estados estacionários da equação linear de Schrödinger

$$i\hbar\partial_t\Psi_n = H\Psi_n ,$$

satisfazendo à equação de autovalor

$$i\hbar\partial_t\Psi_n = E_n\Psi_n ,$$

tem dependência temporal do tipo

$$\Psi_n(z, t) = e^{-iE_n t/\hbar} \psi_n(z) .$$

A linearidade de H implica na independência da evolução de cada uma das autofunções de uma combinação linear

$$\Psi(z, 0) = \sum_n c_n \psi_n(z) ,$$

isto é,

$$\Psi(z, t) = \Psi(z, 0) + \int_0^t \partial_{t'} \Psi(z, t') dt' = \sum_n c_n \left(\psi_n(z) + \int_0^t \partial_{t'} \psi_n(z, t') dt' \right).$$

Em um instante t qualquer, a única mudança que observamos no perfil da função de onda

$$\Psi(z, t) = \sum_n c_n e^{-iE_n t/\hbar} \psi_n(z)$$

decorre da dependência da velocidade angular da fase com a energia, $\omega_n = E_n/\hbar$, maior nas fases das autofunções mais energéticas.

Se, ao invés de evoluirmos a função de onda durante um intervalo de tempo $[0, t]$ real, a evoluíssemos durante um intervalo de tempo $[0, -i\tau]$ ($\tau \in \mathcal{R}^+$) imaginário,

$$\psi(z, -i\tau) = \sum_n c_n e^{-E_n \tau/\hbar} \psi_n(z),$$

observaríamos que as exponenciais complexas se convertem em exponenciais reais dissipativas. Quanto mais energética, mais rapidamente uma autofunção será dissipada, o que implica que, quanto maior o tempo τ , maior é a contribuição relativa dos estados menos energéticos para a combinação. No limite em que $\tau \rightarrow \infty$, a única contribuição significativa é aquela do estado de menor energia: $\psi(z, -i\tau) \rightarrow c_0 e^{-E_0 \tau/\hbar} \psi_0(z)$.

Em sistemas não lineares, nos quais H tem dependência com a função de onda, as autofunções de uma combinação linear não evoluem independentemente, impossibilitando a determinação da evolução dos seus coeficientes em uma propagação em tempo imaginário.

A formulação variacional desses problemas, particularmente a versão imaginária da equação de Schrödinger em termos do funcional-energia (veja Eq. (2.31)),

$$\hbar \partial_\tau \Psi(z, -i\tau) = - \frac{\delta E}{\delta \Psi^*(z, -i\tau)},$$

pode nos ajudar a esclarecer o comportamento de Ψ durante a evolução imaginária. De fato, com a separação das partes real e imaginária,

$$\hbar \partial_\tau \Psi_1(z, -i\tau) = - \frac{\delta E}{\delta \Psi_1(z, -i\tau)}, \quad \hbar \partial_\tau \Psi_2(z, -i\tau) = - \frac{\delta E}{\delta \Psi_2(z, -i\tau)}, \quad (\Psi = \Psi_1 + i\Psi_2), \quad (\text{B.6})$$

fica evidente que, quanto maior o crescimento (decréscimo) de E com $\Psi_1(z, -i\tau)$, mais $\Psi_1(z, -i\tau)$ vai decrescer (crescer) nos próximos instantes, o mesmo valendo para Ψ_2 . Uma vez

que E é um funcional de Ψ_1 e de Ψ_2 , cada $\Psi_1(z, -i\tau)$, e cada $\Psi_2(z, -i\tau)$, é uma variável com a qual a “função” E tem dependência. A diferencial total desse funcional é dada pelo produto escalar entre o seu gradiente naquele ponto e um vetor deslocamento no espaço definido pelos Ψ s. As componentes do gradiente são as derivadas funcionais de E , $\delta E/\delta\Psi_1$ e $\delta E/\delta\Psi_2$. A direção e o sentido do gradiente, determinados por essas derivadas, indicam a direção e o sentido de maior crescimento de E . Deslocamentos $d\Psi = \partial_\tau\Psi d\tau$ no sentido contrário ao do gradiente, como em (B.6), conduzirão Ψ a regiões com energias cada vez menores. Em outras palavras, a propagação de Ψ em tempo imaginário é no sentido de diminuir E cada vez mais até que se atinja a função Ψ_0 que minimize E .

Não precisamos, entretanto, da propagação em tempo imaginário para descobrir que a função que minimiza E nos casos de Mateo e Delgado, Eq. (2.29), cúbico, Eq. (2.25), e quadrático, Eq. (2.28), é identicamente zero – basta uma rápida inspeção da Eq. (2.32) em cada um dos casos. Um problema mais interessante é tentar descobrir qual a função Ψ_0 que minimiza E , dada a restrição de que Ψ_0 tenha norma fixa $N^2 = \int dz \Psi_0^* \Psi_0$. Estudemos esse problema.

A variação no funcional-energia devido a variações na função de onda,

$$\delta E = \int dz \left(\frac{\delta E}{\delta\Psi(z,t)} \delta\Psi(z,t) + \frac{\delta E}{\delta\Psi^*(z,t)} \delta\Psi^*(z,t) \right),$$

decorrente de uma evolução temporal real infinitesimal dt é identicamente nula,

$$\delta^t E = dt \int dz \left[\frac{\delta E}{\delta\Psi(z,t)} \left(\frac{1}{i\hbar} \frac{\delta E}{\delta\Psi^*(z,t)} \right) + \frac{\delta E}{\delta\Psi^*(z,t)} \left(\frac{-1}{i\hbar} \frac{\delta E}{\delta\Psi(z,t)} \right) \right] = 0,$$

como era de se esperar. A variação devido a uma evolução temporal imaginária infinitesimal $-i d\tau$ é não positiva,

$$\delta^\tau E = \frac{-d\tau}{\hbar} \int dz \left[\left(\frac{\delta E}{\delta\Psi_1(z,t)} \right)^2 + \left(\frac{\delta E}{\delta\Psi_2(z,t)} \right)^2 \right] \leq 0,$$

e não conserva norma,

$$N'^2 := \int dz \Psi(z, t - id\tau) \Psi^*(z, t - id\tau) = N^2 - \frac{2d\tau}{\hbar} \int dz \left(\Psi_1(z, t) \frac{\delta E}{\delta\Psi_1(z, t)} + \Psi_2(z, t) \frac{\delta E}{\delta\Psi_2(z, t)} \right),$$

$$N^2 = \int dz \Psi^*(z, t) \Psi(z, t).$$

Em primeira ordem, a variação da norma é dada por

$$dN := N' - N = -\frac{d\tau}{\hbar N} \int dz \left(\Psi_1(z,t) \frac{\delta E}{\delta \Psi_1(z,t)} + \Psi_2(z,t) \frac{\delta E}{\delta \Psi_2(z,t)} \right).$$

A re-normalização de Ψ através de um $\delta\Psi(z,t - i d\tau) = \frac{N-N'}{N'} \Psi(z,t - i d\tau)$ implica numa variação positiva da energia, em primeira ordem, igual a

$$\delta^N E = \frac{d\tau}{\hbar N^2} \left[\int dz \left(\frac{\delta E}{\delta \Psi_1(z,t)} \Psi_1(z,t) + \frac{\delta E}{\delta \Psi_2(z,t)} \Psi_2(z,t) \right) \right]^2 > 0.$$

A variação total da energia (evolução imaginária mais normalização),

$$\begin{aligned} \delta E &= \delta^\tau E + \delta^N E \\ &= -\frac{d\tau}{\hbar} \left\{ \int dz \left[\left(\frac{\delta E}{\delta \Psi_1(z,t)} \right)^2 + \left(\frac{\delta E}{\delta \Psi_2(z,t)} \right)^2 \right] - \left[\int dz \left(\frac{\delta E}{\delta \Psi_1(z,t)} \frac{\Psi_1(z,t)}{N} + \frac{\delta E}{\delta \Psi_2(z,t)} \frac{\Psi_2(z,t)}{N} \right) \right]^2 \right\}, \end{aligned}$$

pode, *a priori*, tanto ser positiva quanto negativa.

Defina-se a função complexa

$$\nabla E(z,t) := \frac{\delta E}{\delta \Psi_1(z,t)} + i \frac{\delta E}{\delta \Psi_2(z,t)},$$

e a sua projecção sobre Ψ ,

$$\text{Proj}_\Psi \nabla E = \langle \nabla E, \Psi \rangle \frac{\Psi}{\langle \Psi, \Psi \rangle},$$

onde $\langle f, g \rangle := \int dz f^*(z)g(z)$ é o produto interno entre f e g .

Considerando que

$$\langle \nabla E, \nabla E \rangle = \int dz \left[\left(\frac{\delta E}{\delta \Psi_1(z,t)} \right)^2 + \left(\frac{\delta E}{\delta \Psi_2(z,t)} \right)^2 \right],$$

que

$$\begin{aligned} \langle \text{Proj}_\Psi \nabla E, \text{Proj}_\Psi \nabla E \rangle &= \left[\int dz \left(\frac{\delta E}{\delta \Psi_1(z,t)} \frac{\Psi_1(z,t)}{N} + \frac{\delta E}{\delta \Psi_2(z,t)} \frac{\Psi_2(z,t)}{N} \right) \right]^2 \\ &\quad + \left[\int dz \left(\frac{\delta E}{\delta \Psi_1(z,t)} \frac{\Psi_2(z,t)}{N} - \frac{\delta E}{\delta \Psi_2(z,t)} \frac{\Psi_1(z,t)}{N} \right) \right]^2, \end{aligned}$$

e que a norma de um vetor (função) é maior ou igual à norma de sua projecção sobre um outro

vetor (função), temos que

$$\int dz \left[\left(\frac{\delta E}{\delta \Psi_1(z,t)} \right)^2 + \left(\frac{\delta E}{\delta \Psi_2(z,t)} \right)^2 \right] \geq \left[\int dz \left(\frac{\delta E}{\delta \Psi_1(z,t)} \frac{\Psi_1(z,t)}{N} + \frac{\delta E}{\delta \Psi_2(z,t)} \frac{\Psi_2(z,t)}{N} \right) \right]^2$$

e que, portanto, $\delta E \leq 0$. A igualdade ocorrendo quando $\nabla E \propto \Psi$, o que, por (B.6), implica que, nesse instante, a evolução em tempo imaginário não altera a forma de Ψ , tão-somente a sua norma. Como o estado fundamental é aquele cuja variação só varia a energia através da norma,

$$\Delta E = \int dz \left(\frac{\delta E}{\delta \psi_1} \delta \psi_1 + \frac{\delta E}{\delta \psi_2} \delta \psi_2 \right) = \frac{\partial E}{\partial N} dN = 2\mu \psi ,$$

e como isso implica em $\nabla E \propto \psi$, o estado atingido pela propagação em tempo imaginário evidentemente é o estado fundamental do sistema.

Esse resultado é importante porque dele derivamos um método para obtenção do perfil do estado fundamental do sistema com um número específico de partículas, o *método de propagação em tempo imaginário*, o qual consiste em alternar evoluções imaginárias do sistema com re-normalizações da função de onda até que a forma do seu perfil se mantenha, quando então julgamos que a função de onda tenha atingido o perfil do estado fundamental procurado.

Referências Bibliográficas

- [1] A. Muñoz Mateo and V. Delgado, “Effective mean-field equations for cigar-shaped and disk-shaped bose-einstein condensates,” *Phys. Rev. A*, vol. 77, p. 013617, Jan 2008.
- [2] S. N. Bose, “Plancks gesetz und lichtquantenhypothese ("planck's law and light quantum hypothesis"),” *Z. Phys.*, no. 26, p. 178, 1924.
- [3] A. Einstein, “Sitzungsberichte der preussischen akademie der wissenschaften,” *Physikalisch-mathematische Klasse*, p. 261, 1924.
- [4] A. Einstein, “Sitzungsberichte der preussischen akademie der wissenschaften,” *Physikalisch-mathematische Klasse*, p. 3, 1925.
- [5] C. J. Pethick and H. Smith, *Bose-Einstein Condensation in Dilute Gases*. Cambridge University Press, 2002.
- [6] A. J. Leggett, “Bose-einstein condensation in the alkali gases: Some fundamental concepts,” *Rev. Mod. Phys.*, vol. 73, pp. 307–356, Apr 2001.
- [7] M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthews, C. E. Wieman, and E. A. Cornell, “Observation of bose-einstein condensation in a dilute atomic vapor,” *Science*, vol. 269, no. 5221, pp. 198–201, 1995.
- [8] K. Davis, M. Mewes, M. Andrews, N. van Druten, D. Durfee, D. Kurn, and W. Ketterle, “Bose-einstein condensation in a gas of sodium atoms,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 75, pp. 3969–3973, Nov 1995.
- [9] “<http://www.uibk.ac.at/exphys/ultracold/atomtraps.html>.” Acessado em 10/10/2013.
- [10] L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Quantum Mechanics: non-relativistic theory*, vol. 3 of *Course of Theoretical Physics*. Pergamon Press, 3 ed., 1977.
- [11] L. Pitaevskii and S. Stringari, *Bose-Einstein Condensation*. Oxford University Press, 2003.

- [12] D. J. Frantzeskakis, “Dark solitons in atomic bose-einstein condensates: from theory to experiments,” *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, vol. 43, no. 21, p. 213001, 2010.
- [13] V. Pérez-García, H. Michinel, and H. Herrero, “Bose-einstein solitons in highly asymmetric traps,” *Phys. Rev. A*, vol. 57, pp. 3837–3842, May 1998.
- [14] L. Salasnich, A. Parola, and L. Reatto, “Effective wave equations for the dynamics of cigar-shaped and disk-shaped bose condensates,” *Phys. Rev. A*, vol. 65, p. 043614, Apr 2002.
- [15] N. Parker, *Numerical Studies of Vortices and Dark Solitons in Atomic Bose-Einstein Condensates*. Department of Physics, University of Durham, 2004.
- [16] Y. S. Kivshar and G. P. A. F. F. to Photonic Crystals, *Optical Solitons*. Academic Press, 2003.
- [17] S. Burger, K. Bongs, S. Dettmer, W. Ertmer, K. Sengstock, A. Sanpera, G. V. Shlyapnikov, and M. Lewenstein, “Dark solitons in bose-einstein condensates,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 83, pp. 5198–5201, Dec 1999.
- [18] J. Denschlag, J. E. Simsarian, D. L. Feder, C. W. Clark, L. A. Collins, J. Cubizolles, L. Deng, E. W. Hagley, K. Helmerson, W. P. Reinhardt, S. L. Rolston, B. I. Schneider, and W. D. Phillips, “Generating solitons by phase engineering of a bose-einstein condensate,” *Science*, vol. 287, no. 5450, pp. 97–101, 2000.
- [19] B. Anderson, P. Haljan, C. Regal, D. Feder, L. Collins, C. Clark, and E. Cornell, “Watching dark solitons decay into vortex rings in a bose-einstein condensate,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 86, pp. 2926–2929, Apr 2001.
- [20] D. Krökel, N. Halas, G. Giuliani, and D. Grischkowsky, “Dark-pulse propagation in optical fibers,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 60, pp. 29–32, Jan 1988.
- [21] G. Swartzlander, D. Andersen, J. Regan, H. Yin, and A. Kaplan, “Spatial dark-soliton stripes and grids in self-defocusing materials,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 66, pp. 1583–1586, Mar 1991.
- [22] B. Denardo, W. Wright, S. Putterman, and A. Larraza, “Observation of a kink soliton on the surface of a liquid,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 64, pp. 1518–1521, Mar 1990.

- [23] M. Chen, M. Tsankov, J. Nash, and C. Patton, “Microwave magnetic-envelope dark solitons in yttrium iron garnet thin films,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 70, pp. 1707–1710, Mar 1993.
- [24] T. Tsuzuki, “Nonlinear waves in the pitaeviskii-gross equation,” *Journal of Low Temperature Physics*, vol. 4, no. 4, 1971.
- [25] N. G. Parker, N. P. Proukakis, M. Leadbeater, and C. S. Adams, “Soliton-sound interactions in quasi-one-dimensional bose-einstein condensates,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 90, p. 220401, Jun 2003.
- [26] E. Gross, “Structure of a quantized vortex in boson systems,” *Il Nuovo Cimento Series 10*, vol. 20, no. 3, pp. 454–477, 1961.
- [27] E. H. Lieb, R. Seiringer, and J. Yngvason, “Bosons in a trap: A rigorous derivation of the gross-pitaeviskii energy functional,” *Phys. Rev. A*, vol. 61, p. 043602, Mar 2000.
- [28] N. Benedikter, G. de Oliveira, and B. Schlein, “Quantitative derivation of the gross-pitaeviskii equation,” *ArXiv e-prints*, Aug. 2012.
- [29] T. Chen and N. Pavlovic, “Derivation of the cubic nls and gross-pitaeviskii hierarchy from manybody dynamics in $d = 3$ based on spacetime norms,” *Annales Henri Poincaré*, pp. 1–46, 2013.
- [30] P. Pickl, “Derivation of the Time Dependent Gross Pitaeviskii Equation with External Fields,” *ArXiv e-prints*, Jan. 2010.
- [31] L. Erdos, B. Schlein, and H.-T. Yau, “Derivation of the Gross-Pitaeviskii Equation for the Dynamics of Bose-Einstein Condensate,” *ArXiv Mathematical Physics e-prints*, June 2006.
- [32] L. I. Schiff, *Quantum Mechanics*. Singapore: McGraw-Hill, 3 ed., 1968.
- [33] J. J. Sakurai, *Modern Quantum Mechanics*. Addison-Wesley, rev. ed., 1994.
- [34] A. Messiah, *Quantum Mechanics*. Dover books on physics, Dover Publications, 1999.
- [35] L. P. Pitaeviskii, “Vortex lines in an imperfect bose gas,” *Soviet Physics JETP-USSR*, vol. 13, no. 2, 1961.

- [36] A. Muñoz Mateo and V. Delgado, “Extension of the thomas-fermi approximation for trapped bose-einstein condensates with an arbitrary number of atoms,” *Phys. Rev. A*, vol. 74, p. 065602, Dec 2006.
- [37] A. Muñoz Mateo and V. Delgado, “Ground-state properties of trapped bose-einstein condensates: Extension of the thomas-fermi approximation,” *Phys. Rev. A*, vol. 75, p. 063610, Jun 2007.
- [38] S. E. Brodie, “<http://www.cut-the-knot.org/fta/ROS2.shtml>.” Acessado em 06/02/2014.
- [39] V. A. Brazhnyi and V. V. Konotop, “Evolution of a dark soliton in a parabolic potential: Application to bose-einstein condensates,” *Phys. Rev. A*, vol. 68, p. 043613, Oct 2003.
- [40] N. G. Parker, N. P. Proukakis, and C. S. Adams, “Dark soliton decay due to trap anharmonicity in atomic bose-einstein condensates,” *Phys. Rev. A*, vol. 81, p. 033606, Mar 2010.
- [41] C. J. Foot, *Atomic Physics*. Oxford University Press, 2005.
- [42] Y. Yazici, *Operator splitting methods for differential equations*. Izmir Institute of Technology, may. 2010.
- [43] E. Butkov, *Física Matemática*. Rio de Janeiro, RJ, Brasil: LTC Editora, 1988.
- [44] F. J. Vesely, *Computational Physics, An Introduction*. New York: Plenum Press, 1994.
- [45] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, and B. P. Flannery, *Numerical Recipes: The Art of Scientific Computing*. Cambridge University Press, 3 ed., 2007.
- [46] R. Eisberg and R. Resnick, *Física Quântica. Átomos, Moléculas, Sólidos, Núcleos e Partículas*. Rio de Janeiro: Elsevier, 1979.
- [47] J. D. Jackson, *Classical Electrodynamics*. John Wiley & Sons, 3 ed., 1999.
- [48] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, and F. Laloë, *Quantum Mechanics*, vol. 2. Singapore: John Wiley & Sons, 2005.
- [49] L. Lehtovaara, J. Toivanen, and J. Eloranta, “Solution of time-independent schrödinger equation by the imaginary time propagation method,” *Journal of Computational Physics*, vol. 221, no. 1, pp. 148 – 157, 2007.

- [50] P. Muruganandam and S. Adhikari, “Fortran programs for the time-dependent gross-pitaevskii equation in a fully anisotropic trap,” *Computer Physics Communications*, vol. 180, no. 10, pp. 1888 – 1912, 2009.
- [51] V. S. Shchesnovich and S. B. Cavalcanti, “Rayleigh functional for nonlinear systems,” *eprint arXiv:nlin/0411033*, Nov. 2004.
- [52] V. M. Pérez-García, H. Michinel, J. I. Cirac, M. Lewenstein, and P. Zoller, “Dynamics of bose-einstein condensates: Variational solutions of the gross-pitaevskii equations,” *Phys. Rev. A*, vol. 56, pp. 1424–1432, Aug 1997.