

Luiz Gustavo Ferreira Soares

**Método Variacional Dependente do Tempo  
para a Equação de Schrödinger Não Linear e  
Não-Local em Condensados de Bose-Einstein**

Porto Alegre

06 de Março de 2016

Luiz Gustavo Ferreira Soares

**Método Variacional Dependente do Tempo para a  
Equação de Schrödinger Não Linear e Não-Local em  
Condensados de Bose-Einstein**

Dissertação realizada sob a orientação do Prof. Dr. Fernando Haas, apresentada ao Programa de Pós-Graduação do Instituto de Física da UFRGS em preenchimento parcial dos requisitos para a obtenção do grau de Mestre em Física.

Universidade Federal do Rio Grande do Sul – UFRGS

Instituto de Física

Programa de Pós-Graduação

Orientador: Fernando Haas

Porto Alegre

06 de Março de 2016

# Agradecimentos

Agradeço aos professores Dr. Luizdarcy de Matos Castro, Dra. Cristina Porto Gonçalves, Dr. Marcio Antônio de Andrade Bortoloti e Dr. Julio César dos Reis os quais durante o período da graduação me inspiraram e influenciaram. Sem eles não acredito que teria chegado até aqui.

Agradeço ao orientador Dr. Fernando Haas por ter me aceitado como orientando, pela compreensão e por estar sempre solícito nos momentos de dúvidas.

Agradeço aos amigos Pedro Correia, Abel Ribeiro e Marcel Figueredo os quais iniciaram esta jornada comigo e que tanto me escutaram quanto dividiram suas experiências comigo.

Agradeço aos amigos que aqui fiz Rodrigo Vidmar, Alexandre Silveira e a Dra. Carla Joana Santos Barreto pelas conversas, risadas e conselhos.

Agradeço ao apoio, compreensão de Alana Souza e as muitas risadas assistindo RuPaul's Drag Race.

Agradeço aos amigos mimizentos de longa data Lucas Rinaldi, Rafael Guimarães, Hugo Muiños, Victor Hugo Lessa que são grande parte da minha família, aqueles que sempre estão lá. Agradeço também aos novos amigos Luan Ferreira e William Lessa pelo grandes momentos de conversas e risadas.

Agradeço a minha família pelo apoio.

Agradeço a UFRGS pela estrutura.

Agradeço ao IF pela recepção.

Agradeço a CNPq pela bolsa.

Por fim, agradeço àqueles que de uma maneira ou de outra estiveram presentes até aqui.

# Resumo

SOARES, L.G.F. *Método Variacional Dependente do Tempo para a Equação de Schrödinger Não-Linear e Não-Local em Condensados de Bose-Einstein*. 2017. 76p. Dissertação de Mestrado - Instituto de Física de Porto Alegre, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 2017.

Condensação de Bose-Einstein é um fenômeno quântico que pode ser observado macroscopicamente. Para a sua obtenção são necessários aprisionamentos externos, porém a presença desses leva ao colapso da função de onda. As interações de longo alcance são propostas como uma forma alternativa ao confinamento externo, um vez que podem prevenir o colapso da função de onda. Neste trabalho será apresentada uma revisão sobre os estudos de condensados de Bose-Einstein. Também, será buscada a solução aproximada da equação de Schrödinger não linear e não-local, a qual descreve condensados de Bose-Einstein com auto-interações de longo alcance. Para isso, será suposta uma forma espacial da função de onda, permitindo o tratamento analítico do sistema dinâmico resultante. Ao fim, por meio do método variacional dependente do tempo, será demonstrado que existem soluções estáveis para a função de onda sujeito a interações de longo alcance na forma gaussiana e gravitacional.

**Palavras-chave:** Condensados de Bose-Einstein. Interação de longo alcance. Método variacional dependente do tempo.

# Abstract

SOARES, L.G.F. *Time-Dependent Variational Method for the Non-Linear and Non-Local Schrödinger Equation in Bose-Einstein Condensates*. 2017. 76p. Dissertação de Mestrado - Instituto de Física de Porto Alegre, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 2017.

Bose-Einstein condensation is a quantum phenomenon that can be observed macroscopically. External trappings are required to obtain them, however the presence of these leads to the collapse of the wave function. Long-range interactions are proposed as an alternative to external confinement, since they can prevent the collapse of the wave function. In this work a review will be presented on the Bose-Einstein condensate studies. Also, we review the approximate solution of the non-linear and non-local Schrödinger equation, which describes Bose-Einstein condensates with long-range auto-interactions. For this, a spatial form of the wave function will be assumed, allowing the analytical treatment of the system. Finally, through the time-dependent variational method, it will be demonstrated that there are stable solutions for the wave function subject to long-range interactions in gaussian and gravitational form.

**Keywords:** Bose-Einstein condensates. Long-range interactions. Time-dependent variational method.

# Lista de ilustrações

Figura 1 – A sequência de imagens mostra a formação em tempo real do condensado de Bose-Einstein. Todas as imagens são provenientes de uma única amostra. O caroço de átomos que se forma no meio é o BEC. . . . .	9
Figura 2 – Configuração de uma armadilha magneto-óptica. Três pares de lasers apontando para o mesmo centro em sentidos opostos, juntamente com um par de bombinas anti-Helmholtz que geram um campo magnético quadrupolar. . . . .	10
Figura 3 – O número esperado de partículas para valores diferentes de fugacidade. $\xi = 0.3$ (em azul), $\xi = 0.6$ (em laranja) e $\xi = 1.0$ (em verde). . . . .	13
Figura 4 – Comportamento da fração de partículas no estado fundamental. Sistema partícula-livre (azul) e sistema confinado (laranja). . . . .	18
Figura 5 – Comportamento da onda solitária para $a > 0$ para diferentes valores de comprimento característico. $\varsigma = 0.4$ (em azul), $\varsigma = 1.2$ (em laranja) e $\varsigma = 2.0$ (em verde). . . . .	31
Figura 6 – O comprimento da onda solitária para diferentes valores de comprimento característico. $\varsigma = 0.4$ (em azul), $\varsigma = 1.2$ (em laranja) e $\varsigma = 2.0$ (em verde). . . . .	32
Figura 7 – Perfil da densidade de ondas solitárias em $t = 0$ . Escuro $v = 0$ (em azul), cinza $v = 0.4c_s$ (em laranja) e claro $v = 0$ (em verde). . . . .	33
Figura 8 – O potencial para $P = 1$ (em azul) e $P = 0.2$ (em laranja). . . . .	45
Figura 9 – O potencial para $P = 0.3$ (em azul) e $P = 0.2$ (em laranja). . . . .	46
Figura 10 – O potencial para $P = 0.6$ (em azul) e $P = 0.7$ (em laranja). . . . .	46
Figura 11 – Perfil de densidade em $t = 0$ para $r = 20\mu m$ com $N = 10000$ . O centro de massa está centralizado na origem. Corte no intervalo de $\phi \in [7\pi/4, 2\pi]$	51
Figura 12 – Perfil de densidade em $t = 0$ e $p = 0$ para $r = 20\mu m$ com $N = 10000$ . . . . .	53
Figura 13 – Perfil de densidade em $t = 0$ e $p = 1$ para $r = 20\mu m$ com $N = 10000$ . Corte no intervalo de $\phi \in [7\pi/4, 2\pi]$ . . . . .	53
Figura 14 – Potencial $U(\sigma)$ para $\sigma \in [0, 100\mu m]$ . . . . .	57
Figura 15 – Potencial $U(\sigma)$ para $\sigma \in [100\mu m, 500\mu m]$ . . . . .	57
Figura 16 – $\sigma(t)$ para $\dot{\sigma}(0) < \dot{\sigma}_{escape}$ com $\dot{\sigma}(0) = 50\mu m/s$ em azul. Valor de $\sigma_{01}$ em amarelo . . . . .	58
Figura 17 – $\sigma(t)$ para $\dot{\sigma}(0) > \dot{\sigma}_{escape}$ com $\dot{\sigma}(0) = 200\mu m/s$ em azul. Valor de $\sigma_{01}$ em amarelo . . . . .	58
Figura 18 – Potencial $U(\sigma)$ para $\sigma \in [0, 100\mu m]$ para $p = 0$ . . . . .	62
Figura 19 – Potencial $U(\sigma)$ para $\sigma \in [0, 100\mu m]$ para $p = 1$ . . . . .	62

Figura 20 – $\sigma(t)$ para $\dot{\sigma}(0) < \dot{\sigma}_{escape}$ com $\dot{\sigma}(0) = 50\mu m/s$ para $p = 0$ em azul. Valor de $\sigma_{01}$ em amarelo . . . . .	63
Figura 21 – $\sigma(t)$ para $\dot{\sigma}(0) > \dot{\sigma}_{escape}$ com $\dot{\sigma}(0) = 200\mu m/s$ para $p = 0$ em azul. Valor de $\sigma_{01}$ em amarelo . . . . .	63
Figura 22 – $\sigma(t)$ para $\dot{\sigma}(0) < \dot{\sigma}_{escape}$ com $\dot{\sigma}(0) = 50\mu m/s$ para $p=1$ . Valor de $\sigma_{01}$ em amarelo . . . . .	64
Figura 23 – $\sigma(t)$ para $\dot{\sigma}(0) > \dot{\sigma}_{escape}$ com $\dot{\sigma}(0) = 200\mu m/s$ para $p = 1$ . Valor de $\sigma_{01}$ em amarelo . . . . .	64

# Sumário

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>8</b>
<b>2</b>	<b>Condensados de Bose-Einstein</b>	<b>12</b>
2.1	Formulação estatística do gás ideal quântico	12
2.2	Condensação de Bose-Einstein	14
2.2.1	Partícula livre	15
2.2.2	Sistema confinado	16
<b>3</b>	<b>Equação de Gross-Pitaevskii</b>	<b>19</b>
3.1	Colisões binárias	19
3.1.1	Equação de Gross-Pitaevskii dependente do tempo	22
3.1.2	Equação de Gross-Pitaevskii estacionária	24
3.1.3	Aproximação de Thomas-Fermi	25
3.1.4	Colapso da função de onda	26
3.2	Sólitons	27
3.2.1	Sólitons estáticos	29
3.2.2	Sólitons dinâmicos	32
<b>4</b>	<b>Método variacional</b>	<b>35</b>
4.1	Equação de Euler-Lagrange	35
4.2	Densidade lagrangiana	37
4.2.1	Sistema de equações para um confinamento axial genérico em BECs	38
4.2.2	Sistema de equações para um confinamento transversal genérico em BECs	40
4.2.3	Equações de movimento para o caso 3D	42
<b>5</b>	<b>Método variacional dependente do tempo para a Equação de Schrödinger Não-Linear e Não-Local em Condensados de Bose-Einstein</b>	<b>47</b>
5.1	Motivações e objetivo	47
5.2	Sistema estudado e método	48
5.2.1	Potencial gaussiano	50
5.2.2	Potencial gravitacional	51
<b>6</b>	<b>Desenvolvimento e resultados</b>	<b>54</b>
6.1	Potencial gaussiano	54
6.2	Potencial gravitacional	59
<b>7</b>	<b>Conclusão</b>	<b>66</b>
	<b>Referências</b>	<b>68</b>



# 1 Introdução

No início da década de 20, Satyendra Nath Bose concluiu que para obter o resultado da quantização da energia do corpo negro, seria necessário tratar estatisticamente fótons como indistinguíveis [1]. Inspirado neste trabalho, em 1925, Einstein aplicou a estatística desenvolvida por Bose para um gás de partículas e observou que, para temperaturas muito baixas, haveria uma ocupação macroscópica no estado fundamental de energia. Esse estado ficou conhecido como condensado de Bose-Einstein (Figura 1) (*Bose-Einstein Condensate*, ou BEC) [2].

Esse fenômeno foi observado em laboratório pela primeira vez em 1995, em gases diluídos de metais alcalinos, tais como: rubídio [3], sódio [4] e lítio [5]. Para a criação do condensado de rubídio, foram somadas técnicas de resfriamento por laser, aprisionamento magnético e resfriamento evaporativo. Esse processo consiste da seguinte maneira, no primeiro momento são colocados seis lasers, com frequência ressonante ao átomo, um em cada direção e apontados para o mesmo centro (Figura 2). Devido às colisões frontais, os átomos colidem com os fótons e acomodam o momento destes. A emissão do fóton excitado em direção arbitrária deixa em média os átomos com uma velocidade mais baixa. Diminuindo a frequência com o tempo, a velocidade dos átomos reduz continuamente. Esse primeiro processo resfria o gás até uma temperatura da ordem de microkelvins. No segundo momento, são desligados os lasers e aplica-se um campo magnético forte para evitar que átomos escapem. Por fim, abaixa-se o campo lentamente permitindo que átomos mais energéticos escapem, processo de evaporação, levando-os para a temperatura e a densidade necessárias para a transição para o condensado.

Quando comparados a outros estados da matéria os BECs apresentam certas diferenças. Inicialmente, é necessário alcançar densidades muito baixas, nota-se que a densidade de partículas nos condensados é tipicamente da ordem de  $10^{13} \sim 10^{15} \text{cm}^{-3}$ , enquanto que para o ar, em condições normais de pressão e temperatura, a densidade de partículas é da ordem de  $10^{19} \text{cm}^{-3}$ . Essa densidade para líquidos e sólidos é da ordem de  $10^{22} \text{cm}^{-3}$ . A baixa densidade é necessária para que o sistema não condense no estado líquido normal ou congele antes de ocorrer a condensação de Bose-Einstein. Outro fator importante é uma temperatura extremamente baixa, para a observação do estado de BEC em um gás diluído de rubídio confinado magneticamente e resfriado por evaporação, é preciso alcançar uma temperatura da ordem de nanokelvins. Em contrapartida, para observar a superfluidez do Hélio é necessário alcançar uma temperatura da ordem de 1K e para observação de efeitos de fônons na contribuição do calor específico é necessário atingir a temperatura de Debye, que é da ordem de  $10^2 \text{K}$ . Além disso, condensados são sistemas metaestáveis e a sua existência é da ordem de segundos a minutos [6].

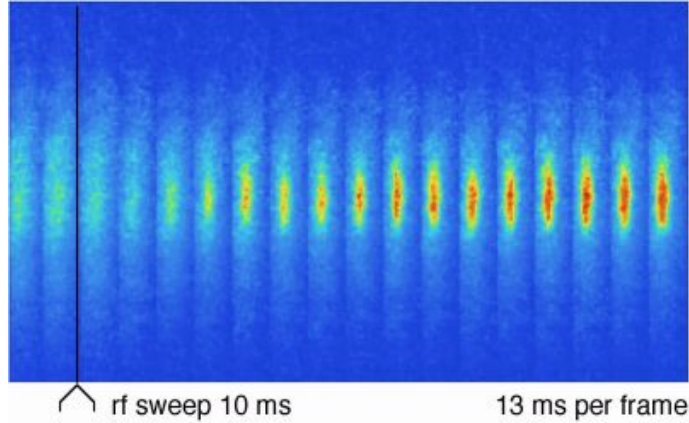


Figura 1: A sequência de imagens mostra a formação em tempo real do condensado de Bose-Einstein. Todas as imagens são provenientes de uma única amostra. O caroço de átomos que se forma no meio é o BEC.

Fonte: Figura retirada de [7]

Nos estudos de BECs, uma das principais quantidades físicas que pode ser mensurada é a densidade de partículas. A distribuição das partículas, depois da expansão do gás diluído, depende da distribuição espacial da densidade e da distribuição das velocidades. A observação do comportamento dessas distribuições pode ser feita por meio de dois processos: imagem de contraste de fase [8, 9] e imagem de absorção [5]. No método de imagem de absorção, ilumina-se a amostra com frequência ressonante e após medir o comportamento de absorção haverá informação sobre a distribuição espacial da densidade. A desvantagem do método se deve à absorção da luz que muda os estados internos dos átomos e aquece de maneira significativa o gás, sendo assim um método destrutivo. Além disso, para estudos de dependência temporal, seria necessário preparar uma nova amostra para cada instante de tempo. Já para o método de contraste de fase, é utilizada a dependência do índice de refração com o meio, nesse caso, sua dependência com a distribuição espacial da densidade de partículas. Dessa forma, haverá mudança no caminho óptico, e ao interferir com um feixe de referência sua intensidade sofrerá mudança. A partir dessa informação têm-se a distribuição espacial da densidade. Por ser um método pouco destrutivo é possível obter o comportamento da dependência temporal somente com uma amostra [6].

No regime em que temperatura do sistema tende ao zero Kelvin, somente as colisões binárias são relevantes. Em um estado quântico em que todas as partículas se encontram no estado fundamental com seu espaçamento interatômico maior que o comprimento de espalhamento, a dinâmica do condensado é dada pela equação de Gross-Pitaevskii [10, 11]:

$$i\hbar \frac{\partial \Phi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \left( -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_{ext}(\mathbf{r}) + g|\Phi(\mathbf{r}, t)|^2 \right) \Phi(\mathbf{r}, t), \quad (1.1)$$

em que  $\Phi(\mathbf{r}, t)$  é a função de onda do condensado para uma aproximação de campo médio,  $V_{ext}(\mathbf{r})$  é o potencial confinador externo,  $m$  a massa dos átomos do condensado e  $g$ ,

denominada como constante de acoplamento, dada por  $g = 4\pi\hbar a/m$ ,  $\hbar$  é a constante de Planck reduzida e  $a$  é o comprimento de espalhamento de onda-s. É possível obter tanto condensados repulsivos ( $a > 0$ ) quanto atrativos ( $a < 0$ ).

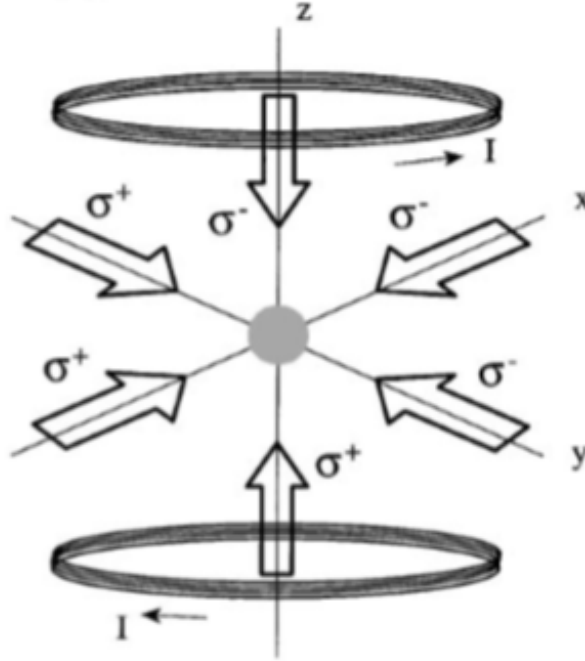


Figura 2: Configuração de uma armadilha magneto-óptica. Três pares de lasers apontando para o mesmo centro em sentidos opostos, juntamente com um par de bobinas anti-Helmholtz que geram um campo magnético quadrupolar.

Fonte: Figura retirada de [12]

Essa equação é do tipo Schrödinger não linear, o termo de não-linearidade é proveniente da consideração das interações por meio das colisões. Como BECs não ocorrem abaixo de três dimensões, pois o número de partículas nos estados excitados não convergem para o nível fundamental devido a efeitos térmicos, é necessário armadilhas externas para que ocorra transição de fase, por isso leva-se em consideração o termo de potencial externo,  $V_{ext}(\mathbf{r})$ , geralmente da forma de um potencial harmônico. Entretanto, a presença desse pode ocasionar ao colapso da função de onda para quando as interações são atrativas [13, 14, 15, 16, 17].

Devido ao colapso da função de onda, interações não-locais têm atraído interesse na comunidade científica, pois é uma forma alternativa ao confinamento por armadilhas externas, uma vez que um dos principais atrativos desse tipo de modelo está na possibilidade de evitar o colapso do condensado [18]. Esse é o maior motivador deste trabalho. Além disso, suportam grande variedade de sólitons espaciais estáveis [19], vortex estáveis [20, 21] e azimutons estáveis [22, 23, 24]. A existência de sólitons em meios não-locais foi observada experimentalmente em cristais líquidos [25] e vidros de chumbo [26]. Somada a isso, com

a adição da interação não-local há proposta experimental para a detecção de ondas de matéria e sólitons de Rydberg auto-induzidos [27].

A proposta deste trabalho é estudar BECs repulsivos ( $a > 0$ ) com interações não-locais por meio do método variacional. Serão estudados os potenciais gaussiano [23, 28, 29] e gravitacional [19, 30, 31] na ausência de potencial externo, com o objetivo de estudar as soluções quanto à estabilidade dos pontos fixos. O estudo será feito na ausência do potencial externo, pois é de interesse estudar a estabilidade somente com a presença do potencial de longa distância. A dinâmica desses sistemas é descrita pela equação de Gross-Pitaevskii não-local, que é do tipo Schrödinger não-linear e não-local, dada por:

$$i\hbar \frac{\partial \Phi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \left( -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + g|\Phi(\mathbf{r}, t)|^2 + \int \Phi^*(\mathbf{r}', t) V(|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|) \Phi(\mathbf{r}', t) d\mathbf{r}' \right) \Phi(\mathbf{r}, t), \quad (1.2)$$

em que a interação não-local é descrita por um potencial que só depende do módulo da distância relativa entre dois pontos,  $V(|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|)$ .

A divisão desta dissertação é feita com o propósito de apresentar uma evolução nos estudos de condensados de Bose-Einstein. O início é dado no segundo capítulo, no qual será apresentado o gás ideal quântico aplicado em bósons, em seguida serão encontrados as condições de condensação para o caso de partícula livre e sistema confinado [6, 32, 33]. No terceiro capítulo, será desenvolvida a primeira tentativa de descrever um condensado real, adicionando um termo de interações binárias, que levará na dedução da equação de Gross-Pitaevskii, também, será apresentada a aproximação da Thomas-Fermi juntamente com o colapso da função de onda. Ainda no mesmo capítulo, será estudada uma solução analítica para essa equação, do tipo sóliton [6, 34, 35, 36, 37]. No quarto capítulo, será apresentado o método variacional e sua aplicação na obtenção das equações de movimento em condensados de Bose-Einstein [36, 38, 39, 40]. O quinto capítulo inicia-se apresentando as motivações e o sistema estudado. Somado a isso, apresentará a lagrangiana adotada para o sistema não linear e não-local, também, como a descrição dos potenciais adotados e a apresentação dos ansatz adotados. No sexto capítulo, será apresentado o desenvolvimento do trabalho e seus resultados, no qual será apresentado a lagrangiana de cada sistema, as equações que descrevem a dinâmica de cada parâmetro relevante para a descrição completa da função de onda do condensado e os estudos sobre os pontos fixos. Por fim, no sétimo capítulo, será feita uma síntese deste trabalho.

## 2 Condensados de Bose-Einstein

Para inciar o estudo sobre BECs é preciso primeiro falar do modelo mais simples em que ocorre a condensação, ou seja, o das partículas não interagentes. Sendo assim, neste capítulo será feita uma discussão teórica sobre um gás ideal de bósons e BECs, apresentando principais tópicos acerca do assunto. No primeiro tópico será apresentado o tratamento estatístico para bósons [32]. Seguido pelo estudo da condensação em um sistema de partículas livres e sistema confinado com simetria esférica e azimutal, neste tópico serão obtidas as temperaturas de transição de fase para esses sistemas e, também, serão obtidas a fração de partículas que se encontram no estado de condensado de Bose-Einstein [6, 35].

### 2.1 Formulação estatística do gás ideal quântico

A representação da função de onda para um sistema de  $N$  partículas é dada por:

$$\Phi = \Phi(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_N), \quad (2.1)$$

em que  $\mathbf{q}_i$  designa todas as coordenadas da partícula  $i$ . Por exemplo,  $\mathbf{q}_i = \mathbf{r}_i$  representa a posição da partícula  $i$  em função de coordenadas cartesianas  $\mathbf{r}_i = (x_i, y_i, z_i)$ . Para os bósons, partículas com spin inteiro tais como o fóton, os glúons, o bóson de Higgs, a troca de posição das partículas não leva para um novo estado quântico, ou seja,

$$\Phi(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_i, \dots, \mathbf{q}_j, \dots, \mathbf{q}_N) = +\Phi(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_j, \dots, \mathbf{q}_i, \dots, \mathbf{q}_N). \quad (2.2)$$

Devido à propriedade de simetria da função de onda, um estado quântico fica inteiramente caracterizado pelo conjunto de números  $\{n_j\}$ , em que  $j$  é o estado quântico de um orbital e  $n_j$  o número de partículas no orbital  $j$ . No caso de bósons,  $n_j$  pode variar de 0 a  $N$ , sendo  $N$  o número total de partículas.

A energia do sistema,  $E\{n_j\}$ , e o número total de partículas,  $N\{n_j\}$ , correspondente ao estado quântico  $\{n_j\}$ , são dados respectivamente por:

$$E\{n_j\} = \sum_j \varepsilon_j n_j \quad (2.3)$$

e

$$N\{n_j\} = \sum_j n_j, \quad (2.4)$$

sendo  $\varepsilon_j$  o valor da energia no orbital  $j$

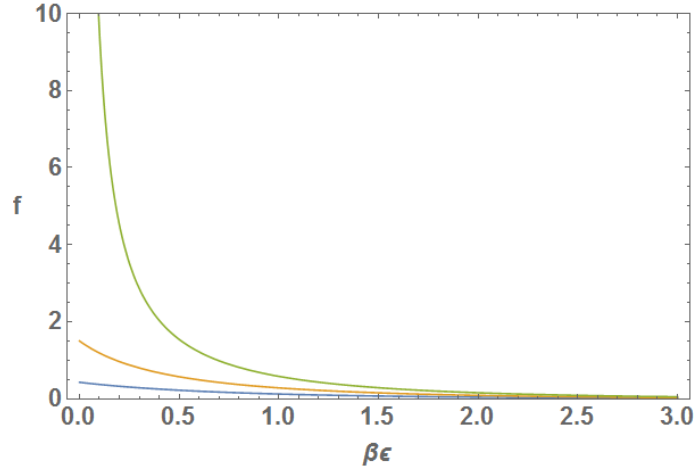


Figura 3: O número esperado de partículas para valores diferentes de fugacidade.  $\xi = 0.3$  (em azul),  $\xi = 0.6$  (em laranja) e  $\xi = 1.0$  (em verde).

Fonte: Elaborada pelo próprio autor

Devido a ausência de restrições sobre a conservação do número total de partículas, uma vez que é de interesse somente saber o número de partículas em cada nível de energia, será utilizado o formalismo do ensemble grande canônico. Dado um sistema de volume  $V$ , com temperatura,  $T$ , fixa e potencial químico,  $\mu$ , também fixo, tem-se que a função de partição no ensemble grande canônico,  $\Xi = \Xi(T, V, \mu)$ , para um gás ideal quântico, de partículas não interagentes, é dado por:

$$\Xi = \sum_{N=0}^{\infty} \exp(\beta\mu N) \sum'_{\{n_j\}} \exp(-\beta \sum_j \varepsilon_j n_j), \quad (2.5)$$

em que  $\sum'$  indica o vínculo dado pela equação (2.4) e  $\beta = 1/k_b T$  com  $k_b$  sendo a constante de Boltzmann. Devido a restrição do vínculo e ao somatório sobre todos os valores possíveis de  $N$ , pode-se fazer uma soma múltipla sobre todos os número de ocupação, tornando o problema livre de qualquer restrição, ou seja  $\sum_{N=0}^{\infty} \sum'_{\{n_j\}} \rightarrow \sum_{n_0} \dots \sum_{n_j} \dots$ . Sendo assim,

$$\Xi = \sum_{n_0} \exp(-\beta(\varepsilon_0 - \mu)n_0) \dots \sum_{n_j} \exp(-\beta(\varepsilon_j - \mu)n_j) = \prod_j \left\{ \sum_n \exp(\beta(\varepsilon_j - \mu)n) \right\}, \quad (2.6)$$

para obter esse resultado o termo  $\exp(\beta\mu N)$  é reescrito como  $\exp(\beta\mu N) = \exp\left(\beta\mu \sum_j n_j\right)$ .

Já que para bósons a ocupação varia entre 0 e  $N$ , isto é, estatística de Bose, no caso de um número muito grande de partículas,  $N \rightarrow \infty$ , o somatório (2.6) tem a forma de uma série geométrica convergente. Portanto a forma da função de partição para um gás ideal de bósons é dado por:

$$\Xi = \prod_j \frac{1}{1 - \exp(-\beta(\varepsilon_j - \mu))}. \quad (2.7)$$

Uma vez que pela física estatística o número esperado de partículas por orbital,  $\langle n_j \rangle$ , é dado por:

$$\langle n_j \rangle = -\frac{1}{\beta} \frac{\partial \ln \Xi}{\partial \varepsilon_j}, \quad (2.8)$$

chega-se que a função de distribuição para bósons não interagentes possui a seguinte forma [32]:

$$f(\varepsilon_j) \equiv \langle n_j \rangle = \frac{1}{\xi^{-1} \exp(\beta \varepsilon_j) - 1}. \quad (2.9)$$

em que  $f(\varepsilon_j)$  é a função distribuição para um dado nível de energia  $\varepsilon_j$  e  $\xi = \exp(\beta\mu)$  é definida como a fugacidade.

Como o número de partículas que ocupa o estado quântico é sempre positivo  $f(\varepsilon_j) \geq 0$ . Essa condição garante a conservação do número de partículas e conclui-se que  $0 < \xi \leq 1$ , ou seja,  $\mu \leq 0$ . Logo, não há sentido físico para o potencial químico assumir valores positivos. Quando  $\xi \rightarrow 1$  inicia-se uma ocupação macroscópica no estado fundamental como pode ser visto na Figura 3, fenômeno de condensação de Bose-Einstein, enquanto que para valores baixos de fugacidade há uma menor ocupação do estado fundamental, regime clássico. Uma outra estatística possível é dado quando o número de ocupação varia entre 0 e 1, estatística de Fermi, dando base ao estudo de férmions, partículas com spin semi-inteiro tais como o elétron, o próton e o neutrino.

## 2.2 Condensação de Bose-Einstein

Na temperatura ambiente, o comportamento dos átomos em um gás é descrito classicamente. Já em baixas temperaturas, pode-se tratar átomos como pacotes de ondas com comprimento de onda de de Broglie,  $\lambda_{dB} = h/2\pi mk_b T$ , em que  $h$  é a constante de Planck. Na medida em que o gás é resfriado, esse comprimento se torna comparável a distância média entre átomos e ocorre uma sobreposição de todas as ondas de de Broglie, criando, assim, uma grande onda de matéria coerente, conseqüentemente, ocorrendo uma ocupação macroscópica no estado fundamental, ou seja, a formação do condensado de Bose-Einstein. A ocupação macroscópica do estado fundamental ocorre a partir de uma temperatura crítica  $T = T_c$  chamada temperatura de Bose-Einstein. Uma vez que há uma ocupação macroscópica no estado fundamental o peso estatístico desse estado é maior, sendo assim, as propriedades termodinâmicas do sistema mudam, sendo possível observar fenômenos puramente quânticos. Em seguida serão obtidas a temperatura crítica e a fração de partículas no condensado para os casos de partícula livre e sistema confinado em um potencial harmônico.

### 2.2.1 Partícula livre

A função de onda para partícula livre é dada por:

$$\Phi_j(\mathbf{r}, t) = A \exp\left(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \frac{i\varepsilon_j t}{\hbar}\right), \quad (2.10)$$

em que  $A$  é uma constante de normalização e com autovalores  $\varepsilon_j = \hbar^2 k^2 / 2m$ , sendo  $m$  a massa e  $\mathbf{k}$  o vetor de onda.

O número termodinâmico de partículas,  $N$ , é dado por:

$$N = \sum_j \langle n_j \rangle = \sum_j \frac{1}{\xi^{-1} \exp(\beta\varepsilon_j) - 1}, \quad (2.11)$$

porém é conveniente transformá-la numa integral através da introdução de densidade de estado. Começando a contagem a partir do estado fundamental, tem-se que:

$$N = N_0 + \int_0^\infty f(\varepsilon) \rho(\varepsilon) d\varepsilon, \quad (2.12)$$

em que  $N_0$  é o número de partículas no estado fundamental e  $\rho(\varepsilon)$  representa a densidade de estados do sistema com energia entre  $\varepsilon$  e  $\varepsilon + d\varepsilon$ , deve ser nula no nível mais baixo de energia. Essa integral se justifica uma vez que, para que a energia seja considerada um contínuo, é necessário  $V \rightarrow \infty$ , além disso, para que  $\xi \rightarrow 1$  é preciso que  $N \rightarrow \infty$ . Portanto toma-se o limite termodinâmico,  $V \rightarrow \infty$  e  $N \rightarrow \infty$  com  $N/V = cte$ .

Para obter a densidade de estados é preciso encontrar o número de estados do sistema,  $G(\varepsilon)$ , para uma dada energia,  $\varepsilon$ , já que  $\rho(\varepsilon) = \frac{dG(\varepsilon)}{d\varepsilon}$ . O número de estados em três dimensões, de uma partícula livre, é dado pelo número células elementares de volume  $(2\pi\hbar)^3$  contidas no volume do espaço de fase com  $\varepsilon' < \varepsilon$ . O volume do espaço de fase é dado pelo produto do volume do gás,  $V$ , e pelo volume da esfera de raio,  $R_\varepsilon = (2m\varepsilon)^{\frac{1}{2}}$ , esse raio é devido a isotropia dos momentos. Portanto  $G(\varepsilon)$  é:

$$G(\varepsilon) = \frac{2^{\frac{1}{2}}}{3\pi^2} \frac{V(m\varepsilon)^{\frac{3}{2}}}{\hbar^3}. \quad (2.13)$$

Sendo assim, a densidade de estados é dado por:

$$\rho(\varepsilon) = \frac{Vm^{\frac{3}{2}}}{2^{\frac{1}{2}}\pi^2\hbar^3} \varepsilon^{\frac{1}{2}}. \quad (2.14)$$

Obtida a densidade de estados é possível encontrar a temperatura crítica. A temperatura de Bose-Einstein é determinada quando o potencial químico é igual ao menor nível de energia, no caso do sistema livre, tem-se que  $\mu = 0$ , ou seja,  $\xi \rightarrow 1$ . Usando esta condição em (2.12), tomando  $N_0 = 0$  e substituindo a densidade (2.14), segue que:

$$N = \frac{Vm^{\frac{3}{2}}}{2^{\frac{1}{2}}\pi^2\hbar^3} \int_0^\infty \frac{\varepsilon^{\frac{1}{2}}}{\exp(\varepsilon\beta_c) - 1} d\varepsilon = \frac{Vm^{\frac{3}{2}}}{2^{\frac{1}{2}}\pi^2\hbar^3} \beta_c^{-\frac{3}{2}} \Gamma\left(\frac{3}{2}\right) \zeta\left(\frac{3}{2}\right), \quad (2.15)$$



em que  $\beta_c = 1/k_b T_c$ ,  $\Gamma(x)$  é a função Gamma com  $\Gamma(3/2) = \pi^{1/2}/2$  e  $\zeta(x)$  é a função zeta de Riemann com  $\zeta(3/2) = 2.612$ . Partindo do resultado acima, conclui-se que a temperatura de Bose-Einstein para partícula livre é:

$$T_c = \frac{2^{1/3} \pi^{4/3} \hbar^2}{m k_b} \left[ \Gamma\left(\frac{3}{2}\right) \zeta\left(\frac{3}{2}\right) \right]^{-2/3} \left(\frac{N}{V}\right)^{2/3}. \quad (2.16)$$

Uma vez conhecida a temperatura crítica é possível determinar em um região de coexistência,  $T \leq T_c$ , a fração de partículas que se encontram no condensado,  $N_0/N$ . Para isso, retorna-se a expressão (2.12) com o resultado (2.15) e conclui-se que:

$$\frac{N_0}{N} = \left(1 - \left(\frac{T}{T_c}\right)^{3/2}\right), \quad (2.17)$$

observa-se que  $N_0 \rightarrow N$  para  $T \rightarrow 0$  e  $N_0 \rightarrow 0$  para  $T \rightarrow T_c$ .

## 2.2.2 Sistema confinado

Dado um potencial harmônico externo da forma:

$$V(\mathbf{r}) = \frac{m}{2} \sum_{\eta=x,y,z} w_\eta^2 \eta^2, \quad (2.18)$$

em que  $\mathbf{r} = (x, y, z)$  é o vetor posição em coordenadas cartesianas,  $w_\eta$  é a frequência de oscilação em cada direção com  $\eta = x, y, z$ . A solução da função de onda para esse sistema é dada por:

$$\Phi_j(\mathbf{r}, t) = A H(\mathbf{r}) \exp\left(-\frac{i\varepsilon_j t}{\hbar}\right), \quad (2.19)$$

em que  $A$  é uma constante de normalização,  $H(\mathbf{r})$  é a solução do oscilador harmônico em termos dos polinômios de Hermite com autovalores dados por:

$$\varepsilon_j = \sum_{\eta=x,y,z} \left(n_\eta + \frac{1}{2}\right) \hbar w_\eta, \quad (2.20)$$

em que  $n_\eta$  é zero ou inteiro positivo.

No estado fundamental,

$$\Phi_0(\mathbf{r}, t) = A \exp\left(-\frac{i}{2} \sum_{\eta=x,y,z} w_\eta t - \frac{m}{2\hbar} \sum_{\eta=x,y,z} w_\eta \eta^2\right). \quad (2.21)$$

A distribuição espacial da densidade é dada por  $n(\mathbf{r}) = N |\Psi_0(\mathbf{r}, t)|^2$ . Para um potencial confinador com simetria esférica  $w_x = w_y = w_z = w_0$ , essa distribuição é dada por:

$$n(\mathbf{r}) = \frac{N}{\pi^{3/2} a_0^3} \exp\left(-\frac{r^2}{a_0^2}\right), \quad (2.22)$$

em que  $a_0 = (\hbar/mw_0)^{\frac{1}{2}}$  é o comprimento típico do oscilador. A obtenção da distribuição das velocidades,  $n(\mathbf{p})$ , pode ser dada em termos do vetor momento  $\mathbf{p} = (p_x, p_y, p_z)$  em coordenadas cartesianas. Realizando a transformada de Fourier em (2.22) tem-se que a distribuição das velocidades é dada por:

$$n(\mathbf{p}) = \frac{N}{\pi^{\frac{3}{2}} c_0^3} \exp\left(-\frac{p^2}{c_0^2}\right), \quad (2.23)$$

em que  $c_0 = \hbar/a_0$ .

Para uma simetria axial com frequências  $w_z$  e  $w_{\perp} = w_y = w_x$ , para  $r_{\perp} = (x^2 + y^2)^{\frac{1}{2}}$ , a distribuição espacial da densidade é dada por:

$$n(\mathbf{r}) = \frac{\lambda^{\frac{1}{2}}}{\pi^{\frac{3}{2}} a_{\perp}^3} \exp\left(-\frac{r_{\perp}^2 + \lambda z^2}{a_{\perp}^2}\right), \quad (2.24)$$

em que  $a_{\perp}$  é o comprimento do oscilador na direção perpendicular e o parâmetro  $\lambda = w_z/w_{\perp}$  caracteriza a assimetria da armadilha. Se  $\lambda > 1$ , obtêm-se a forma *disk-shaped*, para  $\lambda < 1$ , a forma *cigar-shaped* e  $\lambda = 1$ , a forma esférica. A distribuição das velocidades para essa simetria é:

$$n(\mathbf{p}) = \frac{\lambda^{\frac{1}{2}}}{\pi^{\frac{3}{2}} c_{\perp}^3} \exp\left(-\frac{p_{\perp}^2 + lp_z^2}{c_{\perp}^2}\right), \quad (2.25)$$

em que  $c_{\perp} = \hbar/a_{\perp}$ ,  $l = 1/\lambda$  e  $p_{\perp} = (p_x^2 + p_y^2)^{\frac{1}{2}}$ . Conclui-se a partir de (2.22), (2.23), (2.24) e (2.25) o tamanho do condensado, assim como a sua distribuição de velocidade, é independente do número de átomos e somente depende da frequência da armadilha. Esse resultado é contra intuitivo e justificado por não considerar a interação entre os átomos.

Diferente do caso para partícula livre, o menor nível de energia não é dado para  $\varepsilon = 0$  e sim por  $\varepsilon = (\hbar/2) \sum_{\eta=x,y,z} w_{\eta}$ . Sendo assim, o valor para o potencial químico para que comece a transição para o estado de BEC para uma simetria esférica,  $w_x = w_y = w_z = w_0$ , é dado por  $\mu_0 = (3/2)\hbar w_0$ . Esse valor para uma simetria axial,  $w_x = w_y = w_{\perp} \neq w_z$ , é igual a  $\mu_0 = (1/2)\hbar w_z + \hbar w_{\perp}$ .

Para determinar a temperatura de condensação é necessário determinar a densidade de estados correspondente ao sistema. Para isso precisa-se determinar o número de estados do sistema dada uma energia  $\varepsilon = \varepsilon_x + \varepsilon_y + \varepsilon_z$ . Considerando o caso em que o espaçamento entre as energias é muito menor que a energia térmica da nuvem, o número de estados é dado por:

$$G(\varepsilon) = \frac{1}{(\hbar\bar{w})^3} \int_0^{\varepsilon} d\varepsilon_x \int_0^{\varepsilon-\varepsilon_x} d\varepsilon_y \int_0^{\varepsilon-\varepsilon_x-\varepsilon_y} d\varepsilon_z = \frac{\varepsilon^3}{6(\hbar\bar{w})^3}, \quad (2.26)$$

em que  $\bar{w} = (w_x w_y w_z)^{\frac{1}{3}}$ . Por sua vez, a densidade de estados é:

$$\rho(\varepsilon) = \frac{\varepsilon^2}{2(\hbar\bar{w})^3}. \quad (2.27)$$

Voltando para a expressão (2.12), que é válida no caso em que o espaçamento entre as energias é muito menor que a energia térmica, com valores de energia dados por (2.20) e utilizando a densidade (2.27), encontra-se:

$$N = \frac{1}{2(\hbar\bar{w})^3} \int_0^\infty \frac{\varepsilon^2}{\exp(\varepsilon\beta_c - \frac{\hbar}{2} \sum_{\eta=x,y,z} w_\eta) - 1} d\varepsilon = \frac{1}{(\hbar\bar{w})^3} \beta_c^{-3} \zeta(3), \quad (2.28)$$

em que  $\zeta(3) = 1.202$

Partindo do resultado acima, conclui-se que a temperatura de Bose-Einstein para um sistema confinado em um potencial harmônico genérico é:

$$T_c = \frac{\hbar\bar{w}}{k_b} \left( \frac{N}{\zeta(3)} \right)^{\frac{1}{3}}. \quad (2.29)$$

Em contraste com (2.16) a expressão (2.29) mostra que a dependência da temperatura de Bose-Einstein é proporcional a  $N^{\frac{1}{3}}$ . Esse resultado é contrário ao resultado obtido para a partícula livre com a temperatura proporcional a  $N^{\frac{2}{3}}$ . Obtida a temperatura crítica, só resta determinar em uma região de coexistência a fração de partículas que se encontram no condensado. Para isso, retorna-se a expressão (2.12) com o resultado (2.28) e conclui-se que:

$$\frac{N_0}{N} = \left( 1 - \left( \frac{T}{T_c} \right)^3 \right), \quad (2.30)$$

tem-se que  $N_0 \rightarrow N$  para  $T \rightarrow 0$  e  $N_0 \rightarrow 0$  para  $T \rightarrow T_c$  conforme (2.17), porém, com diferença na dependência com a temperatura. Pela Figura 4 é possível observar a comparação entre as convergências da fração de partículas no estado fundamental. Observa-se que apesar da diferença na dependência com a temperatura para as expressões (2.17) e (2.30), ambas convergem para um estado em que todas as partículas se encontram no estado de menor energia quando  $T \rightarrow 0$ .

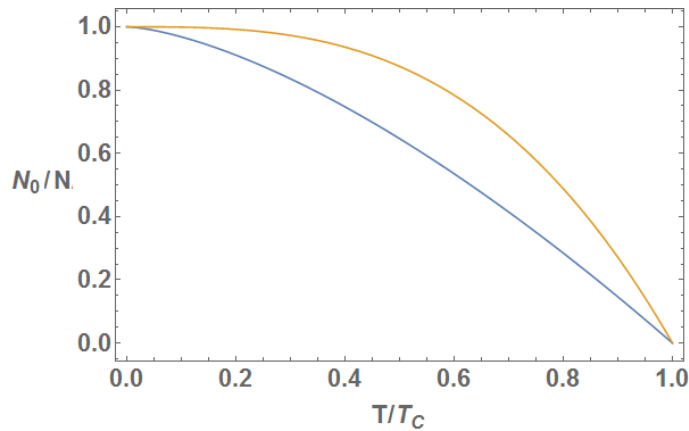


Figura 4: Comportamento da fração de partículas no estado fundamental. Sistema partícula-livre (azul) e sistema confinado (laranja).

Fonte: Elaborada pelo próprio autor

## 3 Equação de Gross-Pitaevskii

No capítulo anterior foi apresentado um estudo de um gás quântico ideal, ou seja, sem interação, porém para obter um primeiro modelo teórico coerente com a realidade é preciso considerar interações entre os átomos. Portanto neste capítulo será apresentado no primeiro tópico uma discussão sobre colisões, primeiro termo relevante de interação, no qual será obtido o potencial que descreve essa interação [35]. Uma vez obtido esse potencial, no segundo e terceiro tópicos, serão determinadas as equações que descrevem o comportamento dinâmico e estacionário da função de onda, conhecidas como equação de Gross-Pitaevskii [10, 11] e a sua forma estacionária. Como primeira tentativa de se obter uma forma analítica para a densidade do condensado, será apresentada a aproximação de Thomas-Fermi.

Devido à utilização de armadilhas magnético-ópticas para o confinamento do gás de bósons, a condensação de Bose-Einstein obtida em laboratório contém não apenas uma localização nas variáveis de momentum, mas também nas variáveis espaciais. Consequentemente, a equação que será obtida inclui um potencial externo, o qual geralmente tem a forma de um potencial harmônico isotrópico ou anisotrópico. Porém o aprisionamento forçado pode ocasionar uma singularidade, portanto, será apresentado a condição para ocorrer o colapso da função de onda. Como dito anteriormente, esse é o motivador para esta dissertação, pois alternativamente ao confinamento externo, há a possibilidade de considerar interações de longo alcance. Para finalizar esta seção, será apresentado como exemplo uma solução estável dessa equação, solução tipo sóliton, para o caso em que a armadilha externa é desligada [6, 35].

### 3.1 Colisões binárias

No estudo de teoria das colisões é utilizado o sistema no referencial do centro de massa, sendo assim, a função de onda,  $\Phi(\mathbf{r}, t)$ , será dependente da posição relativa entre dois átomos de massas  $m_1$  e  $m_2$ ,  $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ , com massa reduzida  $m_r = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$ . Para um potencial de interação,  $V(\mathbf{r})$ , no caso de interesse  $V(\mathbf{r})$  é potencial central, independente do tempo, é possível buscar soluções estacionárias da forma  $\Phi(\mathbf{r}, t) = \Phi(\mathbf{r}) \exp(-iEt/\hbar)$  em que  $E = \mathbf{p}^2/2m$  é a energia com momento  $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$  e que  $\mathbf{k}$  sendo o vetor de onda. Então a equação de Schrödinger que descreve o sistema é comumente escrita da forma [35]:

$$(\nabla^2 + k^2 + U(\mathbf{r}))\Phi(\mathbf{r}) = 0, \quad (3.1)$$

em que  $U(\mathbf{r}) = mV(\mathbf{r})/\hbar^2$  é o potencial reduzido. No processo de espalhamento a sua descrição é dada por funções assintóticas, seu comportamento para grandes distâncias,

$r \rightarrow \infty$ , ignorando a normalização, é dada por:

$$\Phi_k(\mathbf{r}) \simeq \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) + \Phi_{esp}(\mathbf{r}), \quad (3.2)$$

em que  $\mathbf{r} \equiv (r, \theta, \phi)$  é o vetor posição dado em coordenadas esféricas. O primeiro termo é a solução da onda plana (onda incidente) e  $\Phi_{esp}(\mathbf{r}) = f_k(\theta, \phi) \exp(ikr)/r$  é a solução da onda espalhada,  $f_k(\theta, \phi)$  é denominada amplitude de espalhamento. Como no caso de interesse o potencial é central, logo, só há dependência com ângulo de espalhamento  $\theta$ , ângulo entre a onda incidente e espalhada. Então, a dependência em  $\phi$  desaparece. Sendo assim,  $\Phi_k(\mathbf{r})$  pode ser escrita em base de polinômios de Legendre,  $P_l(\cos \theta)$ :

$$\Phi_k(\mathbf{r}) = \sum_{l=0}^{\infty} A_{kl}(\mathbf{r}) P_l(\cos \theta). \quad (3.3)$$

Cada termo dessa série é denominada onda parcial.

Substituindo a expressão acima na equação (3.1) escrita em coordenadas esféricas e assumindo que  $U(\mathbf{r}) \rightarrow 0$  mais rápido que  $r^{-2}$  para  $r \rightarrow \infty$ , tem-se que  $A_{kl}(\mathbf{r})$  possui a solução geral dada pela soma de funções esféricas de Bessel e funções de Newman com seus respectivos coeficientes. Além disso, usando expressões assintóticas para essas funções, é possível escrever para grandes distâncias que:

$$A_{kl}(\mathbf{r}) \simeq \frac{B_{kl}}{kr} \text{sen} \left( kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_{kl} \right), \quad (3.4)$$

em que a diferença de fase  $\delta_{kl}$  que representa o quão espalhada foi a função de onda devido ao potencial  $U(\mathbf{r})$ . A diferença de fase torna-se zero quando  $U(\mathbf{r}) = 0$ .

A densidade de corrente associada a  $\Phi_k(\mathbf{r})$  é dada por  $J(\mathbf{r}) = \Re[(\hbar/(im_r))\Phi_k^*(\mathbf{r})\nabla\Phi_k(\mathbf{r})]$ . Para grandes distâncias a densidade de corrente é proporcional ao número total de partículas espalhadas por unidade de área e tempo. Então, o número de partículas incidentes com velocidade  $v = \hbar k/m_r$  em que atravessam uma área  $dS = r^2 d\Omega$ , em que  $d\Omega$  é o elemento de ângulo sólido, do detector define uma seção de choque diferencial,  $\frac{d\sigma_k}{d\Omega}$ , dada por:

$$\frac{d\sigma_k}{d\Omega} = |f_k(\theta)|^2. \quad (3.5)$$

Para relacionar a diferença de fase com a amplitude de espalhamento,  $f_k(\theta)$ , é necessário escrever a solução da onda incidente em termos de polinômios de Legendre para grandes distâncias

$$\exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \frac{i^l}{kr} \text{sen} \left( kr - \frac{l\pi}{2} \right) P_l(\cos \theta). \quad (3.6)$$

Voltando em (3.2) para  $\Phi_k(\mathbf{r})$  escrita na forma (3.3) e escrevendo  $f_k(\theta)$  como uma série de polinômios de Legendre obtêm-se que:

$$f_k(\theta) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \exp(i\delta_{kl}) \text{sen}(\delta_{kl}) P_l(\cos \theta), \quad (3.7)$$

e devido a relação (3.5) conclui-se que a dependência entre a seção de choque e a fase de espalhamento é dada por:

$$\sigma_k = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \text{sen}^2(\delta_{kl}). \quad (3.8)$$

Como o interesse é estudar átomos no estado fundamental, no limite de baixas energias, será feito um estudo no limite de  $k \rightarrow 0$ . A relação (3.8), nesse limite, converge rapidamente para grandes valores de  $l$ , sendo assim, só o primeiro termo será relevante,  $l = 0$ . A solução para  $l = 0$  é denominada onda-s de espalhamento. Nesse caso:

$$A_{k0}(\mathbf{r}) = \frac{B_{k0}}{kr} \text{sen}[k(r-a)], \quad (3.9)$$

em que  $\delta_{k0} = -ka$ ,  $a$  é o comprimento de onda de espalhamento definido por  $a = -\lim_{k \rightarrow 0} \tan \delta_{k0}/k$ . Portanto a seção de choque de espalhamento será:

$$\sigma_{k \rightarrow 0} = \frac{4\pi}{k^2} \delta_{k0}^2 = 4\pi a^2. \quad (3.10)$$

Ainda falta obter uma dependência explícita de  $\sigma_k$  com  $U(\mathbf{r})$ . Para isto é necessário usar o método das funções de Green. A equação (3.1) pode ser reescrita da seguinte maneira:

$$(\nabla^2 + k^2)\Phi_k(\mathbf{r}) = F(\mathbf{r}), \quad (3.11)$$

em que  $F(\mathbf{r}) = U(\mathbf{r})\Phi_k(\mathbf{r})$ . A solução geral para essa equação pode ser escrita da forma:

$$\Phi_k(\mathbf{r}) = \Phi_k^0(\mathbf{r}) + \int G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') F(\mathbf{r}') d\mathbf{r}', \quad (3.12)$$

em que  $\Phi_k^0(\mathbf{r})$  é a solução do tipo onda plana e  $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ , a função de Green que satisfaz a equação  $(\nabla^2 + k^2)G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ . Sendo assim, tem-se que a solução se tornará:

$$\Phi_k(\mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) - \frac{1}{4\pi} \int \frac{\exp(ik|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} U(\mathbf{r}') \Phi_k(\mathbf{r}') d\mathbf{r}'. \quad (3.13)$$

A expressão (3.13) é conhecida como equação de Lippmann-Schwinger. Para átomos iguais,  $m_1 = m_2 = m \Rightarrow m_r = m/2$ , além disso, numa região  $r \rightarrow \infty, r \gg r'$  pode-se fazer  $k|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \simeq kr - \mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}'$  em que  $\mathbf{k}' = k\mathbf{r}/r$ . Também, usando a primeira aproximação de Born (onda espalhada somente difere da incidente pelo ângulo de espalhamento),  $\Phi_k(\mathbf{r}') \simeq \Phi_k^0(\mathbf{r}')$ , e comparando com a expressão (3.2), no limite  $k \rightarrow 0$ , tem-se que:

$$f_{k \rightarrow 0} \simeq -\frac{m}{4\pi\hbar^2} \int V(\mathbf{r}) d\mathbf{r}. \quad (3.14)$$

Como no limite de baixas energias  $\sigma_0 = 4\pi f_0^2 = 4\pi a^2$ , obtêm-se a seguinte expressão para o comprimento de espalhamento:

$$a = \frac{m}{4\pi\hbar^2} \int V(\mathbf{r}) d\mathbf{r}. \quad (3.15)$$

Sendo assim, para colisões binárias no limite de energia nula, o potencial de interação pode ser descrito por um potencial efetivo da forma  $V_{efetivo}(\mathbf{r}) = V_0\delta(\mathbf{r})$ , ou seja,

$$V_{efetivo}(\mathbf{r}) = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m}\delta(\mathbf{r}). \quad (3.16)$$

Comumente agrupa-se todas essas constante em uma constante única,  $g = 4\pi\hbar^2 a/m$ , denominada de constante de acoplamento. É possível obter em laboratório tanto  $a < 0$ , BECs atrativos, quanto  $a > 0$ , BECs repulsivos. Essa modulação do comprimento de espalhamento é dada por meio de técnicas experimentais baseadas na ressonância de Feshbach [41]. Essa modulação é possível uma vez que dois átomos com baixas energias que colidem entre si podem excitar um novo estado. Esses átomos podem ser sincronizados por meio de um campo magnético externo levando na modulação do comprimento de espalhamento. Também é possível obter  $a = 0$ , nesse caso não haverá mais interações interatômicas e será obtido um gás ideal.

### 3.1.1 Equação de Gross-Pitaevskii dependente do tempo

O estado quântico de sistemas bosônicos pode ser descritos pelos operadores de campo que cria e aniquila uma partícula na posição  $\mathbf{r}$ , respectivamente, dados por [6] :

$$\hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}, t) = \sum_n \Psi_n^*(\mathbf{r}, t)\hat{a}_n^\dagger \quad (3.17)$$

e

$$\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) = \sum_n \Psi_n(\mathbf{r}, t)\hat{a}_n \quad (3.18)$$

em que  $\Psi(\mathbf{r}, t)$  é função de onda de uma única partícula,  $\hat{a}_n$  é o operador aniquilação e  $\hat{a}_n^\dagger$  o operador criação. Esses operadores no espaço de Fock são definidos como:

$$\hat{a}_n^\dagger |n_0, \dots, n_\alpha, \dots\rangle = (n_\alpha + 1)^{\frac{1}{2}} |n_0, \dots, n_\alpha + 1, \dots\rangle \quad (3.19)$$

e

$$\hat{a}_n |n_0, \dots, n_\alpha, \dots\rangle = n_\alpha^{\frac{1}{2}} |n_0, \dots, n_\alpha - 1, \dots\rangle. \quad (3.20)$$

O número  $n_\alpha$  é o autovalor que fornece o número de partículas no  $\alpha$ -estado de partícula única. Além disso, obedecem as relações de comutação:

$$[\hat{a}_x, \hat{a}_y^\dagger] = \delta_{x,y}, [\hat{a}_x, \hat{a}_y] = 0, [\hat{a}_x^\dagger, \hat{a}_y^\dagger] = 0. \quad (3.21)$$

Já os operadores de campo bosônicos obedecem as seguintes relações de comutação:

$$[\hat{\Psi}(\mathbf{r}', t), \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}, t)] = \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}), [\hat{\Psi}(\mathbf{r}', t), \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t)] = 0, [\hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}', t), \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}, t)] = 0. \quad (3.22)$$

O condensado pode ser entendido quando  $n_0$ , número de partículas no estado fundamental, se torna muito grande, ou seja,  $n_0 \equiv N_0 \gg 1$ . Também, essa quantidade é

finita no limite termodinâmico, isto é, a razão  $N_0/N$  continua finita no limite  $N \rightarrow \infty$ . Nesse limite,  $N_0$  e  $N_0 \pm 1$  correspondem à mesma configuração física, sendo assim, as flutuações quânticas são desprezíveis. Uma vez que isso é válido é possível fazer uma aproximação de campo médio ou aproximação de Bogoliubov. A aproximação de campo médio é comumente utilizada para sistemas interagentes com o objetivo de contornar o problema de resolver a equação de Schrödinger de muitos corpos [42]. Para o sistema em interesse a aproximação é dada por:

$$\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) = \Phi(\mathbf{r}, t) + \delta\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t), \quad (3.23)$$

em que  $\Phi(\mathbf{r}, t) \equiv \langle \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) \rangle$ , conhecida como função de onda do condensado, é uma função complexa com seu módulo fixo correspondendo a densidade do condensado,  $n_0(\mathbf{r}, t) = |\Phi(\mathbf{r}, t)|^2$ , e  $\delta\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t)$  é uma pequena perturbação.

O Hamiltoniano de  $N$  bósons interagentes confinados por um potencial externo,  $V_{ext}(\mathbf{r}')$ , na segunda quantização é dado por:

$$\hat{H} = \int \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}', t) \left( -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_{ext}(\mathbf{r}') + \frac{1}{2} \int \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}, t) V(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r} \right) \hat{\Psi}(\mathbf{r}', t) d\mathbf{r}'. \quad (3.24)$$

em que  $V(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$  é o potencial de interação entre dois átomos.

Para o caso em que só as colisões binárias são relevantes,  $V(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) = g\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ , o Hamiltoniano se torna:

$$\hat{H} = \int \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}', t) \left( \hat{H}_0 + \frac{g}{2} \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}', t) \hat{\Psi}(\mathbf{r}', t) \right) \hat{\Psi}(\mathbf{r}', t) d\mathbf{r}'. \quad (3.25)$$

em que  $\hat{H}_0 = -(\hbar^2/2m)\nabla^2 + V_{ext}(\mathbf{r}')$ . O Hamiltoniano escrito nessa forma compacta facilitará os cálculos que se seguem.

Para determinar a equação que descreve o sistema, é preciso determinar a evolução temporal do operador  $\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t)$ . Pela representação de Heisenberg, a dinâmica do sistema é dada por:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} &= -\frac{i}{\hbar} [\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t), \hat{H}] \\ &= -\frac{i}{\hbar} \int \left( [\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t), \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}', t) \hat{H}_0 \hat{\Psi}(\mathbf{r}', t)] \right. \\ &\quad \left. + \frac{g}{2} [\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t), \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}', t) \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}', t) \hat{\Psi}(\mathbf{r}', t) \hat{\Psi}(\mathbf{r}', t)] \right) d\mathbf{r}' \end{aligned} \quad (3.26)$$

Para o primeiro comutador adiciona-se e subtrai-se o termo  $\hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}') \hat{\Psi}(\mathbf{r}') \hat{H}_0 \hat{\Psi}(\mathbf{r}')$  e pela regras de comutação (3.22), obtêm-se:

$$[\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t), \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}', t) \hat{H}_0 \hat{\Psi}(\mathbf{r}', t)] = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \hat{H}_0 \hat{\Psi}(\mathbf{r}', t). \quad (3.27)$$



Para o segundo comutador adicionam-se e subtraem-se os termos  $\hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}', t)\hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}', t)\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t)\hat{\Psi}(\mathbf{r}', t)\hat{\Psi}(\mathbf{r}', t)$  e  $\hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}', t)\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t)\hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}', t)\hat{\Psi}(\mathbf{r}', t)\hat{\Psi}(\mathbf{r}', t)$ , manipulando, pela regras de comutação (3.22), encontra-se:

$$[\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t), \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}', t)\hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}', t)\hat{\Psi}(\mathbf{r}', t)\hat{\Psi}(\mathbf{r}', t)] = 2\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')\hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}', t)\hat{\Psi}(\mathbf{r}', t)\hat{\Psi}(\mathbf{r}', t) \quad (3.28)$$

Reunindo os resultados acima, a evolução temporal torna-se:

$$i\hbar\frac{\partial\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = (\hat{H}_0 + g|\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t)|^2)\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t), \quad (3.29)$$

A evolução do operador dada por (3.23) nas condições em que o limite  $T \rightarrow 0$  e para o comprimento de espalhamento muito menor que o comprimento de onda térmico de de Broglie,  $a \ll \lambda_{dB}$ , pode ser descrita pela evolução do campo médio  $\Phi(\mathbf{r}, t)$ , ou seja, o mesmo que tomar  $\delta\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) = 0$ . Sendo assim,

$$i\hbar\frac{\partial\Phi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \left( -\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m} + V_{ext}(\mathbf{r}) + g|\Phi(\mathbf{r}, t)|^2 \right)\Phi(\mathbf{r}, t), \quad (3.30)$$

aqui escrita na forma explícita.

Essa é a equação de Gross-Pitaevskii [10, 11] (*Gross-Pitaevskii Equation*, GPE), ela é do tipo equação de Schrödinger não linear (*Nonlinear Schrödinger Equation*, NLS). Vale a pena notar que para  $g = 0$ , na ausência de colisões, a GPE recai na equação de Schrödinger usual. A equação (3.30) é válida somente no limite  $T \rightarrow 0$ , no qual todos os átomos se encontram no estado de BEC, e para distâncias interatômicas maiores que comprimento de onda-s de espalhamento. As soluções dessa equação compreendem uma vasta gama de estruturas, tais como sólitons claros e escuros, estruturas caóticas e instabilidades lineares e não lineares [35].

### 3.1.2 Equação de Gross-Pitaevskii estacionária

Uma vez obtida a equação de Gross-Pitaevskii dependente do tempo, será agora obtida a sua forma estacionária por meio da aproximação de Hartree. Com o resultado para o potencial que descreve colisões binárias, o Hamiltoniano será escrito da seguinte maneira:

$$H = \sum_{i=1}^N \left( H_0(i) + \sum_{i \neq j} V_{ij} \right), \quad (3.31)$$

em que  $H_0(i) = -\frac{\hbar^2\nabla_i^2}{2m_i} + V_{ext}(\mathbf{r}_i)$  e  $V_{ij} = g\delta(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)$ .

A função de onda do estado fundamental para o caso estacionário pode ser obtida como aquela em que:

$$\frac{\delta(\langle\Psi|H|\Psi\rangle - \mu N\langle\Psi|\Psi\rangle)}{\delta\Psi} = 0. \quad (3.32)$$

Utilizando a aproximação de Hartree, a função de onda para o sistema de  $N$  partículas interagentes é dada por  $\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = \prod_{i=1}^N \Psi_i(\mathbf{r}_i)$ , em que a normalização é dada por:  $\int |\Psi_i(\mathbf{r}_i)|^2 d\mathbf{r}_i = 1$ .

Sendo assim, o valor esperado do Hamiltoniano é dado por:

$$\begin{aligned} & \int d\mathbf{r}_1 \dots \int d\mathbf{r}_N \prod_{i=1}^N \Psi_i^*(\mathbf{r}_i) \left( \sum_{i=1}^N H_0(i) \sum_{i=1}^N \sum_{i \neq j} + V_{ij} \right) \prod_{i=1}^N \Psi_i(\mathbf{r}_i) = \sum_{i=1}^N \int \Psi_i^*(\mathbf{r}_i) H_0(i) \Psi_i(\mathbf{r}_i) d\mathbf{r}_i \\ & + \sum_{i=1}^N \sum_{i \neq j} \int \int \Psi_i^*(\mathbf{r}_i) \Psi_j^*(\mathbf{r}_j) V_{ij} \Psi_j(\mathbf{r}_j) \Psi_i(\mathbf{r}_i) d\mathbf{r}_i d\mathbf{r}_j, \end{aligned} \quad (3.33)$$

então, após simplificações o valor esperado do Hamiltoniano é:

$$N \int d\mathbf{r} \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \Psi(\mathbf{r})^* \nabla^2 \Psi(\mathbf{r}) + V_{ext}(\mathbf{r}) |\Psi(\mathbf{r})|^2 + g \frac{N-1}{2} |\Psi(\mathbf{r})|^4 \right). \quad (3.34)$$

Em posse do resultado acima, o valor para  $\langle \Psi | H | \Psi \rangle - \mu N \langle \Psi | \Psi \rangle$  é dado por:

$$N \int d\mathbf{r} \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \Psi^*(\mathbf{r}) \nabla^2 \Psi(\mathbf{r}) + (V_{ext} - \mu)(\mathbf{r}) |\Psi(\mathbf{r})|^2 + \frac{g(N-1)}{2} |\Psi(\mathbf{r})|^4 \right). \quad (3.35)$$

Minimizando em relação a  $\Psi^*$  e definindo  $\Phi(\mathbf{r}) = N^{\frac{1}{2}} \Psi(\mathbf{r})$  em que a normalização de  $\Phi(\mathbf{r})$  é fixada pela densidade,  $n(\mathbf{r}) = |\Phi(\mathbf{r})|^2$ , e uma vez que para flutuações quânticas desprezíveis,  $N-1 \approx N$ , obtêm-se que:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Phi(\mathbf{r}) + V_{ext}(\mathbf{r}) \Phi(\mathbf{r}) + g |\Phi(\mathbf{r})|^2 \Phi(\mathbf{r}) = \mu \Phi(\mathbf{r}). \quad (3.36)$$

Essa é a equação de Gross-Pitaevskii estacionária. Como  $\Phi(\mathbf{r}, t)$  em condições estacionárias é igual aos elementos de matriz do operador aniquilação,  $\hat{\Psi}(\mathbf{r})$ , entre os estados  $\langle N-1 |$  e  $|N \rangle$  e esses evoluem no tempo, respectivamente, proporcionais à  $\exp(-iE_{N-1}t/\hbar)$  e  $\exp(-iE_N t/\hbar)$ , então, para  $N$  muito grande a diferença  $E_N - E_{N-1}$  é igual ao potencial químico. Essa relação garante a consistência entre as equações (3.36) e (3.30). Vale a pena notar que os autovalores são dados pelo potencial químico, e não pela energia por partícula como no caso usual da equação de Schrödinger. Para partículas não interagentes todas no mesmo estado essas duas grandezas serão iguais.

### 3.1.3 Aproximação de Thomas-Fermi

Para o caso em que as interações repulsivas ( $a > 0$ ) são fortes o bastante, os átomos serão empurrados para longe do centro do condensado. Sendo assim, o centro do condensado se planifica e o tamanho do mesmo cresce. Por consequência a pressão quântica devido ao termo cinético só se torna relevante na sua borda. A aproximação de Thomas-Fermi consiste em desconsiderar o termo de energia cinética na GPE. Essa

é a primeira tentativa de obter uma solução para o perfil da densidade em um regime estacionário. Essa aproximação descreve bem o condensado quando está em equilíbrio, porém na sua borda essa aproximação já não descreve bem a sua estrutura [35, 42].

Negligenciar a derivada espacial em (3.36) leva em um perfil de densidade no qual há somente dependência com potencial químico e com potencial externo dado por:

$$n(\mathbf{r}) = |\phi(\mathbf{r})|^2 = \frac{\mu - V_{ext}(\mathbf{r})}{g}. \quad (3.37)$$

Por meio dessa aproximação é possível determinar o tamanho do condensado, pois  $n(R) = 0$  implica na condição  $\mu = V_{ext}(R)$ . Para uma armadilha esférica,  $V_{ext}(\mathbf{r}) = mw_0^2 r^2/2$ , essa condição implica em  $\mu = mw_0^2 R^2/2$ , em que  $w_0$  é a frequência da armadilha na direção radial. Integrando sobre uma esfera de raio  $R$  e substituindo o valor de  $\mu$  na expressão acima, o tamanho do raio do condensado será:

$$R = a_0 \left( \frac{15Na}{a_0} \right)^{\frac{1}{5}}, \quad (3.38)$$

e, então,

$$\mu = (\hbar w_0/2)(15Na/a_0)^{\frac{2}{5}}. \quad (3.39)$$

No centro da armadilha a distribuição da densidade, na aproximação de Thomas-Fermi, é dada por  $n_{TF}(0) = \mu/g$ . Quando não foram consideradas as colisões, a distribuição de densidade foi dada pela expressão (2.22). No centro da armadilha seu valor é de  $n(0) = N/\pi^{\frac{3}{2}} a_0^3$ . Sendo assim, a razão entre os máximos das densidade é:

$$\frac{n_{TF}(0)}{n(0)} = \frac{15^{\frac{2}{5}} \pi^{\frac{1}{2}}}{8} \left( \frac{Na}{a_0} \right)^{-\frac{3}{5}}. \quad (3.40)$$

Para armadilhas em condensados de sódio e rubídio, o termo  $Na/a_0$  varia entre  $10^3$  e  $10^4$ , sendo assim, a densidade é reduzida em até duas ordens de magnitude. Nota-se que ao adicionar o termo devido à colisões a densidade é diminuída significativamente no centro da armadilha [42].

### 3.1.4 Colapso da função de onda

A presença de interações atrativas ( $a < 0$ ) entre os átomos causa efeitos significativos na estabilidade em BECs, uma vez que para uma interação forte o bastante tornará o condensado instável. O colapso da função de onda é o resultado da competição entre o efeito não linear, do acoplamento, e a dispersão, do termo cinético. No caso estacionário, na presença de um potencial confinador, é a energia cinética que mantém o condensado estável - ou seja, enquanto a energia de interação,  $U$ , for menor que a energia cinética,  $K$ , o BEC mantém a sua forma. Com o aumento da intensidade das interações seja pelo

maior número de átomos ou aumento na força de interação, as interações irão em algum momento sobrepor a energia cinética e o colapso irá ocorrer [41, 43]. Uma condição que prediz quando um condensado confinado por um potencial externo esférico se tornará instável é dado por  $N_c|a|/a_0 = k$ , em que  $k$  é uma constante adimensional e  $N_c$  é o número máximo de partículas em que o BEC mantém a sua forma [13]. O valor obtido para esta condição é dado por  $k = 0.574$  [14, 15].

Uma forma analítica de encontrar este valor é partindo do funcional da energia dado por:

$$E[\Phi] = \int d\mathbf{r} \left( \frac{\hbar^2}{2m} |\nabla\Phi|^2 + V_{ext}(\mathbf{r})|\Phi|^2 + \frac{g}{2}|\Phi|^4 \right). \quad (3.41)$$

Adotando um ansatz normalizado com simetria esférica dado por:

$$\Phi(\mathbf{r}) = \left( \frac{N}{\pi^{\frac{3}{2}}\sigma^3 a_0^3} \right)^{\frac{1}{2}} \exp\left( -\frac{r^2}{2\sigma^2 a_0^2} \right), \quad (3.42)$$

aqui  $\sigma$  é uma grandeza adimensional, pois o comprimento característico do condensado está em unidades do comprimento da armadilha  $a_0$ . A escolha de um ansatz gaussiano será justificado no capítulo seguinte.

Substituindo a expressão acima no funcional da energia é obtido:

$$E[\sigma] = \hbar N a_0 \left[ \frac{3}{4}(\sigma^{-2} + \sigma^2) - (2\pi)^{-\frac{1}{2}} \frac{N|a|}{a_0} \sigma^{-3} \right]. \quad (3.43)$$

O mínimo local deixa de existir quando o parâmetro  $\sigma$  excede certo valor crítico. A condição para encontrar os valores críticos  $\sigma_c$  e  $N_c$  é dada quando as derivadas primeira e segunda do funcional são nulas. Após aplicar essa condição obtêm-se o seguinte sistema de equações:

$$\frac{\partial E}{\partial \sigma} = \sigma_c^5 - \sigma_c + 2(2\pi)^{-\frac{1}{2}} \frac{N_c|a|}{a_0} = 0 \quad (3.44)$$

$$\frac{\partial^2 E}{\partial \sigma^2} = \sigma_c^5 + 3\sigma_c - 8(2\pi)^{-\frac{1}{2}} \frac{N_c|a|}{a_0} = 0 \quad (3.45)$$

Resolvendo o sistema encontra-se os seguintes valores críticos  $\sigma_c = 0.669$  e  $\frac{N_c|a|}{a_0} = 0.671$  que é próximo do valor encontrado para  $k$  [44]. Um método mais rigoroso de demonstração do colapso pode ser encontrado em [16, 17], em que partindo da GPE D-dimensional com grau de não linearidade dado por  $2n + 1$  conclui-se que a condição para ocorrer colapso é dado por  $Dn \geq 2$ . Na GPE usual  $n = 1$ , então o colapso irá ocorrer tanto para BECs bidimensionais quanto tridimensionais.

## 3.2 Sólitons

Após obter a GPE pode-se buscar soluções analíticas para ela. A equação de campo-médio com armadilha desligada possui um tipo de solução analítica do tipo sóliton.

Sólitons foram observados pela primeira vez por John Scott Russel [45] em ondas de água rasa. Esse tipo de solução é estável devido ao equilíbrio entre a não linearidade, termo de acoplamento, e a dispersão, termo cinético, ou seja, essa solução só é possível devido a efeitos não-lineares, esse tipo de solução não é obtida pela equação da onda usual. Sua estrutura é de uma onda solitária que se propaga no meio sem alterar a sua forma e sua velocidade com o tempo. Quando interage por meio de colisão com outro sólíton conserva sua amplitude, forma e velocidade, exceto por uma possível mudança de fase, ou seja, comporta-se como uma "partícula". Podem ser encontrados em diversas formas em sistemas físicos, tais como pulsos de fibra óptica [46, 47], estruturas espaciais em ondas-guia [48] e ondas estacionárias em sistemas mecânicos [49].

Sólitons apresentam três formas: para condensados repulsivos ( $a > 0$ ), sólítons escuros e sólítons cinzas (velocidade de propagação próxima da velocidade do som no condensado) [50, 51, 52] e para condensados atrativos ( $a < 0$ ), sólítons claros [53, 54, 55]. Sólítons escuros em BECs foram primeiro observados em [56, 57, 58] e sólítons claros observados em [59, 60, 61].

Como dito anteriormente o fator  $\lambda = w_z/w_\perp$  é o que caracteriza a anisotropia da armadilha, no caso  $\lambda = 1$  a simetria é dita esférica, para  $\lambda > 1$ , é dita na forma *disk-shaped* e para  $\lambda < 1$ , é dita na forma *cigar-shaped*. Para estudos de sólítons quasi-unidimensional é necessário utilizar uma armadilha na forma *cigar-shaped*, pois assim, só a direção axial estará livre. Supõe-se, para uma armadilha dessa forma, que para uma condição de anisotropia alta que todos os átomos na direção transversal se encontram no estado fundamental. O caso oposto ocorre no estudo de sólítons quasi-bidimensionais utilizando armadilha na forma *disk-shaped*.

Para obter a equação de Gross-Pitaevskii quasi-unidimensional é cômodo utilizar a sua forma adimensional. Partindo de (3.30) nas variáveis  $\bar{\mathbf{r}}$  e  $\tau$ ,

$$i\hbar \frac{\partial \Phi(\bar{\mathbf{r}}, \tau)}{\partial \tau} = \left( -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_{ext}(\bar{\mathbf{r}}) + gN |\Phi(\bar{\mathbf{r}}, \tau)|^2 \right) \Phi(\bar{\mathbf{r}}, \tau), \quad (3.46)$$

em que a normalização é dada por:  $\int |\Phi(\bar{\mathbf{r}}, \tau)|^2 d\bar{\mathbf{r}} = 1$ . O confinamento externo é dado por:

$$V_{ext}(\bar{\mathbf{r}}) = \frac{mw_0^2}{2} (\lambda_x^2 \bar{x}^2 + \lambda_y^2 \bar{y}^2 + \lambda_z^2 \bar{z}^2). \quad (3.47)$$

Definindo as variáveis adimensionais na forma:  $x = \bar{x}/a_0$ ,  $y = \bar{y}/a_0$ ,  $z = \bar{z}/a_0$ ,  $g = 4\pi\hbar^2 \bar{a}/m$ ,  $t = \tau w_0$  e  $\Phi(r, t) = a_0^{3/2} \Phi(\bar{\mathbf{r}}, \tau)$ , em que  $a_0$  é o comprimento da armadilha. Após simplificações, a GPE adimensional é dada por:

$$i \frac{\partial \Phi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \left( -\frac{1}{2} \nabla^2 + V_{ext}(\mathbf{r}) + 4\pi N a_{3D} |\Phi(\mathbf{r}, t)|^2 \right) \Phi(\mathbf{r}, t), \quad (3.48)$$

com  $a_{3D} \equiv a = \bar{a}/a_0$ , é conveniente escrever assim uma vez que será obtida a equação quasi-unidimensional a partir da forma tridimensional, e  $V_{ext}(\mathbf{r}) = (1/2)(\lambda_x^2 x^2 + \lambda_y^2 y^2 + \lambda_z^2 z^2)$ .

Para reduzir a equação acima para uma forma quasi-unidimensional é feita uma separação de variáveis na forma [39, 62]:

$$\Phi(\mathbf{r}, t) = \kappa(z, t)\Psi(\rho), \quad (3.49)$$

em que  $\rho^2 = x^2 + y^2$ . Uma vez feita essa separação de variáveis é de interesse escrever:  $V_{ext}(\mathbf{r}) = V_{ext}(\rho) + V_{ext}(z) = (\rho^2/2) + (\lambda^2 z^2/2)$ , em que  $\lambda_x = \lambda_y = 1$ ,  $\lambda_z = \lambda$  e  $w_0 = w_\perp$

Substituindo na GPE unidimensional, tem-se a seguinte equação para  $\kappa(z, t)$ :

$$\begin{aligned} i\Psi \frac{\partial \kappa(z, t)}{\partial t} &= -\frac{1}{2}\Psi \frac{\partial^2 \kappa(z, t)}{\partial z^2} - \frac{1}{2}\kappa \nabla_\rho^2 \Psi + V_{ext}(\rho)\Psi \kappa(z, t) \\ &+ V_{ext}(z)\Psi \kappa(z, t) + 4\pi a_{3D}N|\Psi|^2|\kappa(z, t)|^2\Psi \kappa(z, t). \end{aligned} \quad (3.50)$$

Em que  $\Psi(\rho)$  satisfaz a equação diferencial correspondente ao problema de autovalor para oscilador harmônico bidimensional isotrópico, esse resultado é obtido por análise de múltiplas escalas, pode ser encontrado no apêndice de [62]. Sendo assim:

$$-\frac{1}{2}\nabla_\rho^2 \Psi + V_{ext_\rho} \Psi = w_\rho \Psi, \quad (3.51)$$

com estado fundamental correspondente a  $\Psi_0(\rho) = \pi^{-\frac{1}{2}} \exp(-\rho^2/2)$  normalizado na unidade.

Multiplicando (3.52) por  $\Psi^*$  e integrando sobre  $\rho$  resulta em:

$$i \frac{\partial \kappa(z, t)}{\partial t} = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2 \kappa(z, t)}{\partial z^2} + V_{ext}(z)\kappa(z, t) + 4\pi a_{1D}N|\kappa(z, t)|^2\kappa(z, t) + w_\rho \kappa(z, t), \quad (3.52)$$

em que  $a_{1D} = a_{3D}/2\pi$ , o termo  $(2\pi)^{-1}$  vem do termo  $\int_0^\infty \int_0^{2\pi} \rho d\theta d\rho |\Psi_0|^4$  [62].

Fazendo a seguinte transformação:

$$\kappa(z, t) = \phi(z, t) \exp(iw_\rho t), \quad (3.53)$$

obtêm-se a equação de Gross-Pitaevskii adimensional dependente do tempo para o caso quasi-unidimensional dada por:

$$i \frac{\partial \phi(z, t)}{\partial t} = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2 \phi(z, t)}{\partial z^2} + V_{ext}(z)\phi(z, t) + 4\pi a_{1D}N|\phi(z, t)|^2\phi(z, t) \quad (3.54)$$

### 3.2.1 Sólitos estáticos

No regime estacionário é válido:

$$\phi(z, t) = \phi(z) \exp(-i\mu t), \quad (3.55)$$

substituindo na equação (3.54) para o caso em que o confinamento externo é desligado,  $V_{ext}(z) = 0$ , obtêm-se a seguinte equação estacionária:

$$-\frac{1}{2} \frac{\partial^2 \phi(z)}{\partial z^2} + 4\pi a_{1D}N|\phi(z)|^2\phi(z) = \mu\phi(z). \quad (3.56)$$

Para um condensado uniforme, o potencial químico pode ser aproximado para um gás bosônico uniforme [6]. Num sistema uniforme de volume  $V$ , o estado fundamental é  $\phi_0(\mathbf{r}) = V^{-\frac{1}{2}}$ , então a energia de interação por partícula é  $\frac{g}{V}$ . A energia,  $E$ , para  $N$  bósons, todos no mesmo estado, é dada pelo produto da energia por partícula com o número possíveis de pares que se podem formar, ou seja,  $E = gN(N-1)/2V \approx gN^2/2V$ . Por definição,  $\mu = \frac{\delta E}{\delta N}$ , portanto  $\mu = gn = g|\phi(r)|^2$ , para o caso quasi-unidimensional escrito em variáveis adimensionais  $\mu = 4\pi a_{1D}N|\phi_0|^2$ , em que  $\phi_0$  é a função de onda no estado fundamental. Sendo assim, tem-se a seguinte equação diferencial para  $\phi(z)$ :

$$\frac{\partial^2 \phi(z)}{\partial z^2} - 8\pi a_{1D}N(|\phi(z)|^2 - |\phi_0|^2)\phi(z) = 0. \quad (3.57)$$

Multiplicando por  $\frac{\partial \phi(z)}{\partial z}$  [63] a equação diferencial reduz para:

$$\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial z} \left[ \left( \frac{\partial \phi(z)}{\partial z} \right)^2 - 4\pi a_{1D}N(\phi(z)^2 - \phi_0^2)^2 \right] = 0, \quad (3.58)$$

devido à condição de contorno,  $\phi(z) \rightarrow \pm\phi_0$  para  $z \rightarrow \pm\infty$ , tem-se que a constante da integração é nula, então,

$$\left( \frac{\partial \phi(z)}{\partial z} \right)^2 = 4\pi a_{1D}N(\phi(z)^2 - \phi_0^2)^2 \quad (3.59)$$

tomando a raiz negativa, a função de onda para o caso estacionário quasi-unidimensional é, portanto

$$\phi(z) = \phi_0 \tanh \left( \frac{z}{2^{\frac{1}{2}}\zeta} \right), \quad (3.60)$$

em que  $\zeta^2 = (8\pi a_{1D}N\phi_0^2)^{-1} = (8n\pi a_{1D})^{-1}$  é denominado comprimento característico do sóliton. O comprimento característico descreve a distância pela qual a função de onda tende para o valor de uma matéria uniforme quando sujeito a perturbações locais. Essa configuração para a função de onda conecta o estado fundamental  $\phi = -\phi_0$  em  $z = -\infty$  ao estado fundamental  $\phi = \phi_0$  em  $z = \infty$ , apresentando uma torção ou *kink*, já que a fase da função de onda salta descontinuamente de  $\pi$  quando passa pela origem (Figura 5). No limite em que  $\zeta \rightarrow 0$  a função de onda tende ao seu valor máximo,  $\phi \rightarrow \phi_0$ , no limite em que  $\zeta \rightarrow \infty$  a função de onda vai a zero. Vale a pena ressaltar que pelo Hamiltoniano desse sistema é possível observar que os estados  $\pm\phi_0$  correspondem ao valor de menor energia possível, ou seja, o estado fundamental é degenerado e esse tipo de solução conecta os dois estados possíveis.

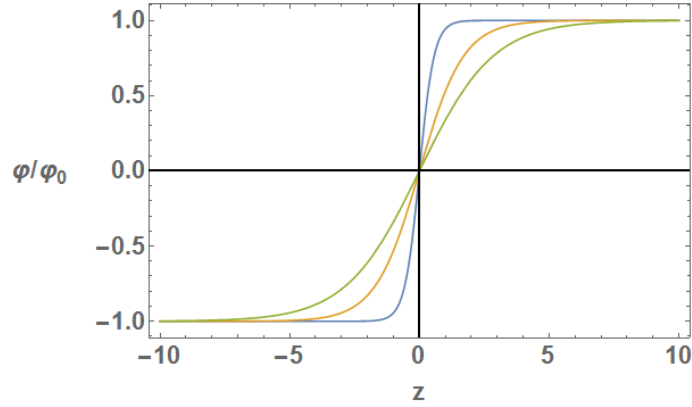


Figura 5: Comportamento da onda solitária para  $a > 0$  para diferentes valores de comprimento característico.  $\zeta = 0.4$  (em azul),  $\zeta = 1.2$  (em laranja) e  $\zeta = 2.0$  (em verde).

Fonte: Elaborada pelo próprio autor

A solução para sólitons claros estáticos [53, 54, 55] pode ser obtida pela equação (3.56) para o caso em que tanto as interações quanto o potencial químico são negativos, ou seja,

$$\frac{1}{2} \frac{\partial^2 \phi(z)}{\partial z^2} + 4\pi |a_{1D}| N |\phi(z)|^2 \phi(z) = |\mu| \phi(z). \quad (3.61)$$

de forma análoga ao que foi apresentado para sólitons escuros estáticos, é possível encontrar:

$$\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial z} \left[ \left( \frac{\partial \phi(z)}{\partial z} \right)^2 - 2|\mu| \phi^2(z) + 4\pi |a_{1D}| N \phi^4(z) \right] = 0, \quad (3.62)$$

devido à condição de contorno,  $\phi(z) \rightarrow \pm \phi_0$  para  $z \rightarrow \pm \infty$ , tem-se que a constante da integração é nula, então,

$$\left( \frac{\partial \phi(z)}{\partial z} \right)^2 = 2|\mu| \phi^2(z) - 4\pi |a_{1D}| N \phi^4(z) \quad (3.63)$$

que resulta na solução

$$\phi(z) = \phi_0 \operatorname{sech} \left( \frac{z}{2^{\frac{1}{2}} \zeta} \right), \quad (3.64)$$

em que foi definido  $\phi_0 = |\mu|/2\pi N |a_{1D}|$  e  $\zeta = (8|a_{1D}| \phi_0)^{\frac{1}{2}}$ , então,  $|\mu| = (4\zeta^2)^{-1}$ . Aqui o comprimento característico caracteriza o tamanho do condensado (Figura 6). No limite em que  $\zeta \rightarrow \infty$  a função de onda tende ao seu valor máximo,  $\phi \rightarrow \phi_0$ . No limite em que  $\zeta \rightarrow 0$  a função de onda vai a zero.



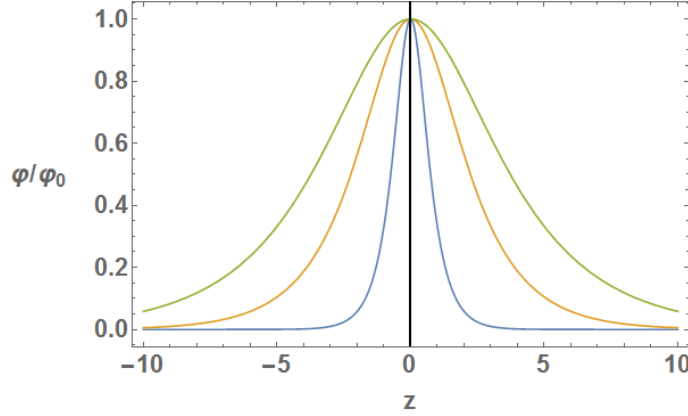


Figura 6: O comprimento da onda solitária para diferentes valores de comprimento característico.  $\zeta = 0.4$  (em azul),  $\zeta = 1.2$  (em laranja) e  $\zeta = 2.0$  (em verde).

Fonte: Elaborada pelo próprio autor

### 3.2.2 Sólitos dinâmicos

Para obter o comportamento dinâmico dos sólitos viajando com velocidade  $v$  pelo condensado na direção axial, utiliza-se a seguinte função de onda:

$$\phi(z, t) = f(z - vt) \exp(-i\mu t). \quad (3.65)$$

Substituindo a equação acima em (3.54) para o confinamento externo desligado, definindo as variáveis  $\zeta = z - vt$  e  $\bar{\zeta} = \zeta/\varsigma$  [6, 35, 51, 55], tem-se que a equação diferencial nas novas variáveis que descreve a dinâmica de um sóliton é dada por:

$$-\frac{iv}{\varsigma} \frac{\partial f}{\partial \bar{\zeta}} = \left( -\frac{1}{2\varsigma^2} \frac{\partial^2}{\partial \bar{\zeta}^2} + (4\pi a_{1D} N |f|^2 - \mu) \right) f. \quad (3.66)$$

Para sólitos escuros o potencial químico pode ser escrito pelo potencial de um condensado uniforme, logo,  $\mu = 4\pi a_{1D} N f_0^2$ . Separando em partes reais e imaginárias,  $f = f_0(f_1 + if_2)$ , em que pela normalização  $f_0 = (n_0/N)^{\frac{1}{2}}$ , em que  $n(z) = n_0$  no limite  $z \rightarrow \pm\infty$ , e  $f_2$  é uma constante, tem-se as seguintes equações diferenciais para a parte imaginária e real, respectivamente :

$$\frac{\partial f_1}{\partial \bar{\zeta}} - \frac{4\pi a_{1D} N \varsigma}{v} f_0^2 f_2 (1 - f_1^2 - f_2^2) = 0 \quad (3.67)$$

e

$$\frac{\partial^2 f_1}{\partial \bar{\zeta}^2} + 8\pi a_{1D} N \varsigma^2 f_0^2 f_1 (1 - f_1^2 - f_2^2) = 0. \quad (3.68)$$

Multiplicando (3.68) por  $\frac{\partial f_1}{\partial \bar{\zeta}}$  e integrando resulta-se em:

$$\left( \frac{\partial^2 f_1}{\partial \bar{\zeta}^2} \right)^2 = 4\pi a_{1D} N \varsigma^2 f_0^2 (1 - f_1^2 - f_2^2)^2. \quad (3.69)$$

Para garantir a validade entre a expressão acima com a equação (3.67) é necessário que  $f_2^2 = v^2/4\pi a_{1D} N f_0^2 = v^2/c_s^2$ , em que  $c_s = (4\pi a_{1D} N f_0^2)^{\frac{1}{2}}$  é a velocidade do som no meio. Sendo assim, a solução para a equação (3.69) é dada por:

$$f_1 = \left(1 - \frac{v^2}{c_s^2}\right)^{\frac{1}{2}} \tanh \left[ \left(1 - \frac{v^2}{c_s^2}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{z - vt}{2^{\frac{1}{2}} \zeta} \right]. \quad (3.70)$$

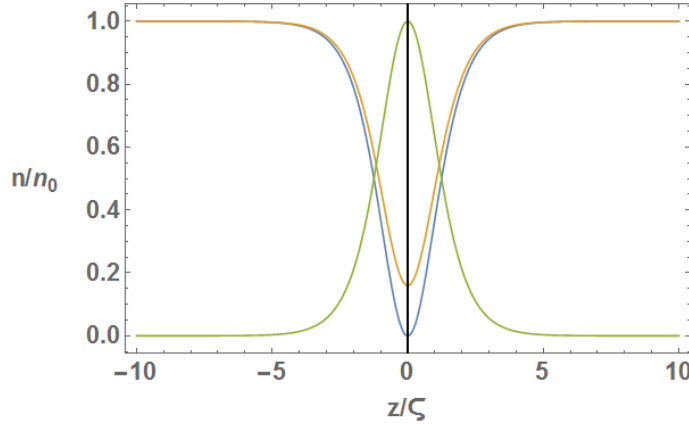


Figura 7: Perfil da densidade de ondas solitárias em  $t = 0$ . Escuro  $v = 0$  (em azul), cinza  $v = 0.4c_s$  (em laranja) e claro  $v = 0$  (em verde).

Fonte: Elaborada pelo próprio autor

Portanto a função de onda e a densidade, respectivamente, para um sóliton escuro viajando com velocidade  $v$  em condensado de Bose-Einstein confinado por uma armadilha na forma disk-shaped são dados por:

$$\phi(z, t) = \left(\frac{n_0}{N}\right)^{\frac{1}{2}} \left\{ i \frac{v}{c_s} + \left(1 - \frac{v^2}{c_s^2}\right)^{\frac{1}{2}} \tanh \left[ \left(1 - \frac{v^2}{c_s^2}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{z - vt}{2^{\frac{1}{2}} \zeta} \right] \right\} \exp(-i\mu t) \quad (3.71)$$

e sua respectiva densidade

$$n(z, t) = n_0 \left\{ \frac{v^2}{c_s^2} + \left(1 - \frac{v^2}{c_s^2}\right) \tanh^2 \left[ \left(1 - \frac{v^2}{c_s^2}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{z - vt}{2^{\frac{1}{2}} \zeta} \right] \right\} \quad (3.72)$$

Para obter a dinâmica para sólitons claros basta realizar  $a_{1D} \rightarrow -|a_{1D}|$  e  $|\mu| = 2\pi N |a_{1D}| f_0^2$  o que leva para uma solução:

$$\phi(z, t) = \left(\frac{n_0}{N}\right)^{\frac{1}{2}} \operatorname{sech} \left( \frac{z - vt}{2^{\frac{1}{2}} \zeta} \right) \exp(-i\mu t) \quad (3.73)$$

e

$$n(z, t) = n_0 \operatorname{sech}^2 \left( \frac{z - vt}{2^{\frac{1}{2}} \zeta} \right), \quad (3.74)$$

também é possível obter esses resultados por meio de transformação Galileana na GPE [6].

Pela figura (Figura 7) é possível ver a principal diferença entre as soluções, para escuro e cinza a densidade apresenta um mínimo enquanto que para sóliton claro apresenta um máximo. Além disso, por (3.73) é possível observar que em contraste com (3.71) que a amplitude não depende da velocidade, ou seja, a energia do sóliton claro não é dispersiva. Para uma grande matéria uniforme, sólitons puramente unidimensionais são instáveis perante perturbações em outras dimensões [6, 64, 65].

## 4 Método variacional

A GPE é uma equação diferencial parcial e obter as soluções para ela é algo bastante trabalhoso, em alguns casos até impossível. Sendo assim, uma abordagem utilizada para encontrar soluções aproximadas é por meio do método variacional. Esse método reduz o problema para um conjunto de equações diferenciais ordinárias, ou seja, reduz o problema de dimensão infinita dada pela GPE para um problema de dimensão finita dada pela resolução da equação da Lagrange [36]:

$$\frac{d}{dt} \left( \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} \right) - \frac{\partial L}{\partial q_j} = 0, \quad (4.1)$$

em que  $q_j$  é uma coordenada generalizada e  $\dot{q}_j$  sua respectiva derivada temporal.

Esse método tem sido aplicado em diversas áreas, tais como: condensados de Bose-Einstein anisotrópicos bidimensionais [34], aglomerados metálicos nanoscópicos [66], sistema de Schrödinger-Newton [37], aglomerados de pósitrons e elétrons [67], fios quânticos em semicondutores [68, 69] e na dinâmica não linear de ondas ion-acústicas e de Langmuir em plasmas quânticos [70, 71]. No caso dos condensados de Bose-Einstein, os trabalhos mais elementares estão relacionados ao estudo com simetria axial, forma *cigar-shaped* e *disk-shaped*. Motivado pelo método que será utilizado nesta dissertação, será apresentado no primeiro tópico a demonstração da equação de Euler-Lagrange para um sistema contínuo. No segundo tópico, a demonstração da obtenção da equação de Gross-Pitaevskii por meio de uma densidade lagrangiana. Como exemplos de aplicação do método será obtido um sistema de equações que descreve um condensado sujeito a uma armadilha genérica na direção axial e um genérico na direção transversal [39, 40], para isto, será minimizada a densidade lagrangiana adotada. Como último exemplo serão obtidas as equações de Euler-Lagrange para os parâmetros relevantes na descrição da função de onda sujeito a um potencial harmônico anisotrópico. Será adotado um ansatz Gaussiano em que o centro do condensado se desloca com o tempo [36, 72, 38].

### 4.1 Equação de Euler-Lagrange

A lagrangiana de um sistema discreto envolve uma soma sobre todos os graus de liberdade, de modo que a lagrangiana de um sistema contínuo deve ser expressa em termos de uma densidade lagrangiana,  $\mathcal{L}$ . Ela deve conter um termo cinético e um termo de interação consigo mesmo numa vizinhança infinitesimal [63]. Ou seja, se o sistema mecânico depende dos campos  $\Phi(\mathbf{r}, t)$  e  $\Phi^*(\mathbf{r}, t)$ , a densidade lagrangiana será da forma  $\mathcal{L} = \mathcal{L} \left( \Phi, \Phi^*, \frac{\partial \Phi}{\partial t}, \frac{\partial \Phi^*}{\partial t}, \nabla \Phi, \nabla \Phi^*, \mathbf{r}, t \right)$ . Felizmente, as variações de campo são independentes, então, será necessário tomar a variação somente sobre um dos campos.

A ação desse sistema é então:

$$S = \int_{t_1}^{t_2} \int_V dt d\mathbf{r} \mathcal{L}, \quad (4.2)$$

em que  $t_1$  e  $t_2$  são os extremos temporais e  $V$  é a superfície que limita a região tridimensional dada pelas coordenadas  $(x_1, y, z)$ ,  $(x_2, y, z)$ ,  $(x, y_1, z)$ ,  $(x, y_2, z)$ ,  $(x, y, z_1)$  e  $(x, y, z_2)$ . Tanto a variação em  $\Phi(\mathbf{r}, t)$  quanto  $\Phi^*(\mathbf{r}, t)$  devem se anular nesses extremos.

Para obter as equações de Euler-Lagrange para este sistema é necessário minimizar a ação, aqui será minimizada a variação em relação ao campo  $\Phi^*$ , sendo assim:

$$\delta S = \int_{t_1}^{t_2} \int_V dt d\mathbf{r} \left( \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \Phi^*} \delta \Phi^* + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\Phi}^*} \delta \dot{\Phi}^* + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\nabla \Phi^*)} \delta (\nabla \Phi^*) \right), \quad (4.3)$$

em que  $\delta \dot{\Phi}^* = \delta \frac{\partial \Phi^*}{\partial t} = \frac{\partial \delta (\Phi^*)}{\partial t}$ .

A integral que contém  $\delta \dot{\Phi}^*$  pode ser reescrita por integração por partes,

$$\int_{t_1}^{t_2} \int_V dt d\mathbf{r} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\Phi}^*} \delta \dot{\Phi}^* = - \int_{t_1}^{t_2} \int_V dt d\mathbf{r} \frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\Phi}^*} \delta \Phi^* \right), \quad (4.4)$$

aqui foi utilizada a condição de que  $\delta[\Phi^*(\mathbf{r}, t_1)] = \delta[\Phi^*(\mathbf{r}, t_2)] = 0$ .

A integral que contém  $\delta(\nabla \Phi^*)$  pode também ser reescrita, para isso será utilizada a identidade  $\mathbf{A} \cdot \nabla f = \nabla \cdot (f \mathbf{A}) - f \nabla \cdot \mathbf{A}$  em que  $\mathbf{A} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \nabla \Phi^*}$  e  $f = \delta \Phi^*$ , já que  $\nabla(\delta \Phi^*) = \nabla(\delta \Phi)$ . Além disso, utilizando o teorema da divergência,  $\int_V d\mathbf{r} \nabla \cdot (f \mathbf{A}) = \int_\Gamma d\mathbf{a} \cdot (f \mathbf{A})$ , tem-se que:

$$\begin{aligned} \int_{t_1}^{t_2} \int_V dt d\mathbf{r} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\nabla \Phi^*)} \nabla(\delta \Phi^*) &= \int_{t_1}^{t_2} \int_\Gamma dt d\mathbf{a} \cdot \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\nabla \Phi^*)} \delta \Phi^* - \int_{t_1}^{t_2} \int_V dt d\mathbf{r} \nabla \cdot \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\nabla \Phi^*)} \delta \Phi^* \\ &= - \int_{t_1}^{t_2} \int_V dt d\mathbf{r} \nabla \cdot \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\nabla \Phi^*)} \delta \Phi^*. \end{aligned} \quad (4.5)$$

Aqui foi utilizada a condição de que  $\delta \Phi^*$  anula-se na superfície  $\Gamma$  que limita o volume  $V$ .

Reunindo os resultados acima, a minimização da variação da ação se torna:

$$\delta S = \int_{t_1}^{t_2} \int_V dt d\mathbf{r} \left[ \left( \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \Phi^*} - \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\Phi}^*} - \nabla \cdot \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\nabla \Phi^*)} \right) \delta \Phi^* \right] = 0. \quad (4.6)$$

Pela arbitrariedade de  $\delta \Phi^*$  conclui-se que a equação de Euler-Lagrange para esse sistema é:

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \Phi^*} - \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\Phi}^*} - \nabla \cdot \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\nabla \Phi^*)} = 0. \quad (4.7)$$

Vale a pena notar que se fosse tomada a variação em relação ao campo  $\Phi(\mathbf{r}, t)$  a equação de Euler-Lagrange seria

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \Phi} - \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\Phi}} - \nabla \cdot \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\nabla \Phi)} = 0. \quad (4.8)$$

## 4.2 Densidade lagrangiana

Para sistemas descritos pela equação de Gross-Pitaevskii a densidade lagrangiana comumente utilizada é dada por [36, 39, 40]:

$$\mathcal{L} = \frac{i\hbar}{2} \left( \Phi^* \frac{\partial \Phi}{\partial t} - \Phi \frac{\partial \Phi^*}{\partial t} \right) - \frac{\hbar^2}{2m} |\nabla \Phi|^2 - V_{ext}(\mathbf{r}, t) |\Phi|^2 - \frac{g}{2} |\Phi|^4. \quad (4.9)$$

Para mostrar que ela gera a GPE, será feito o mesmo processo da seção anterior aplicado na densidade lagrangiana adotada. A ação para esse sistema é dada por:

$$S = \int_{t_1}^{t_2} \int_V dt d\mathbf{r} \frac{i\hbar}{2} \left( \Phi^* \frac{\partial \Phi}{\partial t} - \Phi \frac{\partial \Phi^*}{\partial t} \right) - \frac{\hbar^2}{2m} |\nabla \Phi|^2 - V_{ext}(\mathbf{r}, t) |\Phi|^2 - \frac{g}{2} |\Phi|^4, \quad (4.10)$$

em que  $t_1, t_2$  são os extremos temporais e a região é limitada pelo volume  $V$ . Variando cada termo em relação a  $\Phi^*$  tem-se que:

$$\int_{t_1}^{t_2} \int_V dt d\mathbf{r} \delta \left( \Phi^* \frac{\partial \Phi}{\partial t} - \Phi \frac{\partial \Phi^*}{\partial t} \right) = 2 \int_{t_1}^{t_2} \int_{r_1}^{r_2} dt d\mathbf{r} \frac{\partial \Phi}{\partial t} \delta \Phi^*, \quad (4.11)$$

$$\int_{t_1}^{t_2} \int_V dt d\mathbf{r} \delta (|\nabla \Phi|^2) = - \int_{t_1}^{t_2} \int_{r_1}^{r_2} dt d\mathbf{r} \nabla^2 \Phi \delta \Phi^*, \quad (4.12)$$

$$\int_{t_1}^{t_2} \int_V dt d\mathbf{r} \delta (|\Phi|^2) = \int_{t_1}^{t_2} \int_{r_1}^{r_2} dt d\mathbf{r} \Phi \delta \Phi^* \quad (4.13)$$

e

$$\int_{t_1}^{t_2} \int_V dt d\mathbf{r} \delta (|\Phi|^4) = 2 \int_{t_1}^{t_2} \int_{r_1}^{r_2} dt d\mathbf{r} \Phi |\Phi|^2 \delta \Phi^*. \quad (4.14)$$

Em (4.11) foi realizada uma integração por partes no termo  $\int_{t_1}^{t_2} \int_V dt d\mathbf{r} \Phi \frac{\partial \Phi^*}{\partial t}$ , somada a isso, foi utilizada a condição de extremização  $\delta \Phi^*(\mathbf{r}, t_1) = \delta \Phi^*(\mathbf{r}, t_2) = 0$  e que  $\delta \frac{\partial \Phi^*}{\partial t} = \frac{\partial \delta(\Phi^*)}{\partial t}$ . Em (4.12) foi utilizada a identidade  $\nabla \Phi \cdot \nabla (\delta \Phi^*) = \nabla \cdot (\delta \Phi^* \nabla \Phi) - \nabla^2 \Phi \delta \Phi^*$ , uma vez que  $\delta(\nabla \Phi^*) = \nabla(\delta \Phi^*)$ , e, por meio do teorema da divergência, a integral do termo  $\nabla \cdot (\delta \Phi^* \nabla \Phi)$  limitada pela superfície se anula, uma vez que  $\delta \Phi^*$  deve se anular nela. Já no último termo foi utilizado que  $\delta(|\Phi|^4) = \delta(\Phi^* \Phi \Phi^* \Phi) = |\Phi|^2 \Phi \delta \Phi^* + |\Phi|^2 \Phi \delta \Phi^*$ .

Reunindo todos os resultados acima tem-se que a variação da ação é dada por:

$$\delta S = \int_{t_1}^{t_2} \int_V dt d\mathbf{r} \left[ i\hbar \frac{\partial \Phi}{\partial t} + \frac{\hbar^2 \nabla^2 \Phi}{2m} - V_{ext}(\mathbf{r}, t) \Phi - g |\Phi|^2 \Phi \right] \delta \Phi^*. \quad (4.15)$$

A minimização da ação leva em:

$$i\hbar \frac{\partial \Phi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \left( - \frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_{ext}(\mathbf{r}, t) + g |\Phi(\mathbf{r}, t)|^2 \right) \Phi(\mathbf{r}, t). \quad (4.16)$$

### 4.2.1 Sistema de equações para um confinamento axial genérico em BECs

Neste tópico serão seguidas as referências [39, 40]. O potencial externo é da forma:

$$V_{ext}(x, y, z) = U(x, y) + V(z) = \frac{m}{2}w_{\perp}^2(\lambda^2x^2 + y^2) + V(z), \quad (4.17)$$

em que  $U(x, y)$  é um potencial confinador harmônico com anisotropia dada pelo fator  $\lambda$ ,  $w_{\perp}$  é a frequência perpendicular, escolhida na direção  $y$ , com comprimento característico dado por  $a_{\perp} = (\hbar/mw_{\perp})^{\frac{1}{2}}$ . Já  $V(z)$  é um potencial genérico na direção axial. Para estudar um sistema quasi-unidimensional é mais conveniente trabalhar com a GPE nas unidades de comprimento  $a_{\perp}$ , de tempo  $w_{\perp}^{-1}$  e de energia  $\hbar w_{\perp}$ . Sendo assim, a GPE para esse problema é:

$$i\frac{\partial\Phi}{\partial t} = \left( -\frac{\nabla^2}{2} + \frac{1}{2}(\lambda^2x^2 + y^2) + V(z) + 2\pi gN|\Phi|^2 \right)\Phi, \quad (4.18)$$

com normalização  $\int |\Phi|^2 d\mathbf{r} = 1$  e  $g = 2a/a_{\perp}$ . Neste tópico e no seguinte será mantida a constante de acoplamento  $g$ , pois será mais útil para analisar os limites de acoplamento forte e fraco.

A expressão acima pode ser derivada da seguinte densidade lagrangiana:

$$\mathcal{L} = \frac{i}{2} \left( \Phi^* \frac{\partial\Phi}{\partial t} - \Phi \frac{\partial\Phi^*}{\partial t} \right) - \frac{1}{2} |\nabla\Phi|^2 - \frac{1}{2} (\lambda^2x^2 + y^2) |\Phi|^2 - V(z) |\Phi|^2 - \pi g N |\Phi|^4. \quad (4.19)$$

Adota-se o seguinte ansatz, justificado, já que no limite em que não há interações,  $g = 0$ , deve-se reproduzir o estado fundamental da equação de Schrödinger usual:

$$\begin{aligned} \Phi(\mathbf{r}, t) &= f(z, t) \Phi_{\perp}(x, y, t, \sigma(z, t), \chi(z, t)) \\ &= \frac{f(z, t)}{\pi^{\frac{1}{2}} \sigma(z, t)^{\frac{1}{2}} \chi(z, t)^{\frac{1}{2}}} \exp - \left( \frac{x^2}{2\sigma^2(z, t)} + \frac{y^2}{2\chi^2(z, t)} \right), \end{aligned} \quad (4.20)$$

em que  $\sigma(z, t)$  e  $\chi(z, t)$  são os parâmetros que representam o comprimento característico do condensado na direção  $x$  e comprimento característico do condensado na direção  $y$ , e  $f(z, t)$  é a função de onda na direção axial. A variação temporal dos comprimentos transversais são muito lentas, ou seja,  $\sigma(z, t)$  e  $\chi(z, t)$  serão tidos como contantes no tempo [73], além disso, suas derivadas espaciais também serão ignoradas [39, 40]. Substituindo o ansatz em (4.19), fazendo a aproximação em que  $\nabla\Phi_{\perp} = \nabla_{\perp}\Phi_{\perp}$  e realizando as integrais nas direções transversais, deriva-se a seguinte densidade lagrangiana efetiva para  $f$  dada por:

$$\begin{aligned} \bar{\mathcal{L}} &= \frac{i}{2} \left( f^* \frac{\partial f}{\partial t} - f \frac{\partial f^*}{\partial t} \right) - \frac{1}{2} \left| \frac{\partial f}{\partial z} \right|^2 - \frac{1}{4} \left( \frac{1}{\sigma^2} + \frac{1}{\chi^2} \right) |f|^2 \\ &\quad - \frac{1}{4} (\lambda^2 \sigma^2 + \chi^2) |f|^2 - V(z) |f|^2 - \frac{1}{2} g N \frac{|f|^4}{\sigma \chi}, \end{aligned} \quad (4.21)$$

aqui foi omitido as dependências espaciais e temporais.

Variando  $\bar{\mathcal{L}}$  com respeito a  $f^*$ ,  $\sigma$  e  $\chi$  obtêm-se um sistema de três equações acopladas dadas por:

$$i\frac{\partial f}{\partial t} = \left( -\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{1}{4}\left(\frac{1}{\sigma^2} + \frac{1}{\chi^2} + \lambda^2\sigma^2 + \chi^2\right) + V(z) + gN\frac{|f|^2}{\sigma\chi} \right) f, \quad (4.22)$$

$$\lambda^2\sigma^4 = 1 + gN|f|^2\frac{\sigma}{\chi} \quad (4.23)$$

e

$$\chi^4 = 1 + gN|f|^2\frac{\chi}{\sigma}. \quad (4.24)$$

Essas equações descrevem condensados de Bose-Einstein em um confinamento anisotrópico transversal quasi-unidimensional. É denominada equação de Schrödinger não-polinomial generalizada em 1D (*Generalized Non-polynomial Non-linear Schrödinger Equation*, 1D g-NPSE) [40]. Vale a pena notar que a dependência dos comprimentos transversais com  $z$  e  $t$  é implícita e se dá por meio da dependência com  $|f|^2$ . Resolver o sistema acima não é uma tarefa simples, portanto serão analisadas situações em que ocorre simetria e limites de interesse para tornar o sistema de equações mais simples.

Para simetria radial,  $\lambda = 1 \Rightarrow \sigma = \chi$ , as equações ficam mais simples e se reduzem para:

$$\chi^4 = 1 + gN|f|^2 \quad (4.25)$$

e

$$i\frac{\partial f}{\partial t} = \left( -\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(z) \right) f + \frac{1 + \frac{3gN|f|^2}{2}}{(1 + gN|f|^2)^{\frac{1}{2}}} f. \quad (4.26)$$

No regime de acoplamento fraco, ( $gN|f|^2 \ll 1$ ), pode-se fazer uma expansão em séries de potência de  $g|f|^2$  e as equações se reduzem para, a expansão é feita até a primeira ordem:

$$\sigma = \frac{1}{\lambda^{\frac{1}{2}}} + \frac{1}{4\lambda}gN|f|^2, \quad (4.27)$$

$$\chi = 1 + \frac{\lambda^{\frac{1}{2}}}{4}gN|f|^2 \quad (4.28)$$

e

$$i\frac{\partial f}{\partial t} = \left( -\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{1}{2}(\lambda + 1) + V(z) + gN\lambda^{\frac{1}{2}}|f|^2 \right) f. \quad (4.29)$$

A equação (4.29) possui a forma de uma GPE de  $f$  com renormalização no termo de acoplamento  $g \rightarrow \lambda^{\frac{1}{2}}g$  e com energia transversal  $(\lambda + 1)/2$ .

No regime de acoplamento forte ( $gN|f|^2 \gg 1$ ), o sistema de equações tomam a seguinte forma:

$$\sigma = \frac{(gN|f|^2)^{\frac{1}{4}}}{\lambda^{\frac{3}{4}}}, \quad (4.30)$$



$$\chi = \lambda^{\frac{1}{4}}(gN|f|^2)^{\frac{1}{4}} \quad (4.31)$$

e

$$i\frac{\partial f}{\partial t} = \left( -\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(z) + \frac{3}{2}(\lambda gN)^{\frac{1}{2}}|f| \right) f. \quad (4.32)$$

Também é possível buscar um perfil de densidade no limite de altas interações. Utilizando para o regime estacionário que  $f(z, t) = f(z) \exp(-i\mu t)$  e realizando a aproximação de Thomas-Fermi, a função de onda na direção axial recai na forma analítica

$$|f(z)|^2 = \frac{4}{9\lambda gN}(\mu - V(z))^2, \quad (4.33)$$

com potencial químico,  $\mu$ , fixado pela condição de normalização. A dependência com  $(\mu - V(z))^2$  também seria obtida se fosse tomada a aproximação de Thomas-Fermi em (4.18), exceto por uma mudança no fator numérico multiplicativo.

No mesmo trabalho [40], Salasnich mostra, por simulações numéricas, que para um perfil em que  $gN = -1$ ,  $V(z) = 0$  e para diferentes fatores de anisotropia,  $\lambda = 1$ ,  $\lambda = 1.4$  e  $\lambda = 2$  que a 1D g-NPSE está de bom acordo com a GPE usual para as mesmas condições para a forma *cigar-shaped*.

#### 4.2.2 Sistema de equações para um confinamento transversal genérico em BECs

Assim como no caso anterior, o caso 2D é derivado do problema em três dimensões. Dada uma armadilha externa da forma:

$$V(\mathbf{r}) = W(x, y) + V(z) = W(x, y) + \frac{1}{2}w_z^2 z^2. \quad (4.34)$$

em que  $V(z)$  é uma armadilha harmônica na direção axial com comprimento característico dado por  $a_z = (\hbar/mw_z)^{\frac{1}{2}}$  e  $W(x, y)$  é uma armadilha genérica na direção transversal. Para esse sistema é conveniente escrever nas unidades de comprimento  $a_z$ , de tempo  $w_z^{-1}$  e de energia  $\hbar w_z$ . Sendo assim, a GPE para o problema é dada por:

$$i\frac{\partial \Phi}{\partial t} = \left( -\frac{\nabla^2}{2} + W(x, y) + \frac{1}{2}z^2 + 2\pi gN|\Phi|^2 \right) \Phi, \quad (4.35)$$

com  $g = 2a/a_z$

O ansatz adotado para este problema é dado por:

$$\begin{aligned} \Phi(\mathbf{r}, t) &= f(z, t, \chi(x, y, t))\Phi_{\perp}(x, y, t) \\ \Phi(\mathbf{r}, t) &= \frac{\Phi_{\perp}(x, y, t)}{\pi^{\frac{1}{4}}\chi(x, y, t)^{\frac{1}{2}}} \exp\left(-\frac{z^2}{2\chi^2(x, y, t)}\right), \end{aligned} \quad (4.36)$$

$\chi(x, y, t)$  é o parâmetro que descreve a largura do condensado na direção axial. É assumido que a variação de  $f$  é lenta na direção transversal,  $\nabla^2 f = \partial^2 f / \partial z^2$ , assim como sua variação ao longo do tempo. Ao substituir (4.34) na densidade lagrangiana (4.19) tem-se a seguinte lagrangiana efetiva para  $\Phi$ :

$$\begin{aligned} \bar{\mathcal{L}} &= \frac{i}{2} \left( \Phi_{\perp}^* \frac{\partial \Phi_{\perp}}{\partial t} - \Phi_{\perp} \frac{\partial \Phi_{\perp}^*}{\partial t} \right) - \frac{1}{2} \left( \left| \frac{\partial \Phi_{\perp}}{\partial x} \right|^2 + \left| \frac{\partial \Phi_{\perp}}{\partial y} \right|^2 \right) \\ &- \frac{1}{4\chi^2} |\Phi_{\perp}|^2 - \left( W + \frac{\chi^2}{4} \right) |\Phi_{\perp}|^2 - \frac{gN}{2(2\pi)^{\frac{1}{2}}\chi} |\Phi_{\perp}|^4. \end{aligned} \quad (4.37)$$

aqui foram omitidas as dependências espaciais e temporais.

Variando  $\bar{\mathcal{L}}$  em relação a  $\Phi^*$  e  $\chi$  tem-se:

$$i \frac{\partial \Phi_{\perp}}{\partial t} = \left( -\frac{1}{2} \nabla_{\perp}^2 + W(x, y) + \frac{1}{4} \left( \frac{1}{\chi^2} + \chi^2 \right) + \frac{gN}{(2\pi)^{\frac{1}{2}}\chi} |\Phi_{\perp}|^2 \right) \Phi_{\perp} \quad (4.38)$$

e

$$\chi^4 = 1 + (2\pi)^{-\frac{1}{2}} gN |\Phi_{\perp}|^2 \chi. \quad (4.39)$$

A equação (4.35) é denominada de equação não-polinomial de Schrödinger em duas dimensões (2D NPSE) com condição dada por (4.39) [39]. Assim como no caso anterior, também serão analisados caso de simetria e limites de interesse.

No limite de interações fracas a largura do condensado na direção axial é igual ao comprimento do oscilador na direção azimutal,  $\chi = 1$ , ou seja,  $gN |\Phi|^2 \ll 1$ . Portanto a equação se reduz para:

$$i \frac{\partial \Phi_{\perp}}{\partial t} = \left( -\frac{1}{2} \nabla_{\perp}^2 + W + \frac{1}{4} + \frac{gN}{(2\pi)^{\frac{1}{2}}} |\Phi_{\perp}|^2 \right) \Phi_{\perp}. \quad (4.40)$$

Esse resultado tem a forma de uma GPE de  $\Phi_{\perp}$  em duas dimensões com energia axial  $1/4$  e  $g \rightarrow \frac{g}{(2\pi)^{\frac{1}{2}}}$ .

No caso de interações fortes,  $gN |\Phi_{\perp}|^2 \gg 1$ , então,  $\chi = (gN / (2\pi)^{\frac{1}{2}})^{\frac{1}{3}} |\Phi_{\perp}|^{\frac{2}{3}}$  o problema recai em:

$$i \frac{\partial \Phi_{\perp}}{\partial t} = \left( -\frac{1}{2} \nabla_{\perp}^2 + W + \frac{3}{4} \left( \frac{gN}{(2\pi)^{\frac{1}{2}}} \right)^{\frac{2}{3}} |\Phi_{\perp}|^{\frac{4}{3}} \right) \Phi_{\perp}. \quad (4.41)$$

Também é possível obter o perfil da densidade. Utilizando para o regime estacionário que  $\Phi_{\perp}(x, y, t) = \Phi_{\perp}(x, y) \exp(-i\mu t)$  e realizando a aproximação de Thomas-Fermi, a função de onda na direção transversal recai na forma analítica para  $\Phi_{\perp}$  dada por:

$$|\Phi_{\perp}(x, y)|^2 = \frac{8(2\pi)^{\frac{1}{2}}}{(3)^{\frac{3}{2}} gN} (\mu - W(x, y))^{\frac{3}{2}}, \quad (4.42)$$

com potencial químico,  $\mu$ , dado pela condição de normalização. A dependência com  $(\mu - W(x, y))^{\frac{3}{2}}$  também seria obtida se fosse tomada a aproximação de Thomas-Fermi em (4.35) e (4.37), exceto por uma mudança no fator numérico multiplicativo.

Por simulações numéricas, adotando uma armadilha harmônica na direção transversal, no perfil de  $N = 10^4$  e fator de anisotropia  $w_{\perp}/w_z = 1/10$  em [39] conclui-se que os resultados obtidos por 2D NPSE descrevem bem o estado fundamental para forma *disk-shaped* em BECs. Apresentando erro de 0.7% a 5% no valor da densidade na origem para valores crescentes da razão  $a/a_z$ .

### 4.2.3 Equações de movimento para o caso 3D

Neste tópico serão seguidas as referências [36, 38] e suas discussões. Para uma GPE dada na forma (3.30) e um potencial externo harmônico escrito na forma:

$$V_{ext}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2}mw_{\perp}^2 \sum_{\eta=x,y,z} \lambda_{\eta}\eta^2, \quad (4.43)$$

em que  $w_{\perp}$  é a frequência da armadilha externa na direção radial e  $\lambda_{\eta}$  são as constantes que caracterizam a anisotropia do sistema, com  $\eta = x, y, z$ . Para o seguinte desenvolvimento  $\lambda_x = \lambda_y = 1$  e  $\lambda_z = w_z/w_{\perp}$  em que  $w_z$  é a frequência da armadilha na direção  $z$ .

Adota-se um ansatz do tipo Gaussiano da forma:

$$\phi(\mathbf{r}, t) = A(t) \prod_{\eta=x,y,z} \exp \left[ - \left( \frac{\eta - \eta_0(t)}{2\sigma_{\eta}^2(t)} + i\eta\alpha_{\eta}(t) + i\eta^2\beta_{\eta}(t) \right) \right], \quad (4.44)$$

para um dado tempo  $t$ , a função define um máximo centrado em  $(x_0, y_0, z_0)$  e é descrita pela amplitude  $A(t)$ , o comprimento característico do condensado,  $\sigma_{\eta}(t)$ . Já os parâmetros que estão relacionados com a velocidade com que o máximo se desloca são dados por  $\alpha_{\eta}(t)$  e  $\beta_{\eta}(t)$ . A escolha dessa forma se justifica para o caso em que as interações são irrelevantes,  $g = 0$ , deve-se reproduzir o estado fundamental do limite linear, solução da equação de Schrödinger usual. Uma outra forma possível é uma função secante hiperbólica, porém, ela falha na reprodução do limite linear.

É possível de início já obter a amplitude pela condição de normalização,  $\int |\phi(\mathbf{r}, t)|^2 = N$ , sendo assim, determina-se que  $|A(t)|^2 = N/[\pi^{\frac{3}{2}}\sigma_x(t)\sigma_y(t)\sigma_z(t)]$ .

Substituindo o ansatz na densidade lagrangiana dada por:

$$\mathcal{L} = \frac{i\hbar}{2} \left( \phi^* \frac{\partial \phi}{\partial t} - \phi \frac{\partial \phi^*}{\partial t} \right) - \frac{\hbar^2}{2m} |\nabla \phi|^2 - V_{ext}(\mathbf{r}, t) |\phi|^2 - \frac{g}{2} |\phi|^4, \quad (4.45)$$

e como a lagrangiana se relaciona com a densidade lagrangiana por meio de  $L = \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{L} d\mathbf{r}$ , tem-se que a lagrangiana para o sistema é dado por:

$$L = \frac{\pi^{\frac{3}{2}}}{2} \sigma_x \sigma_y \sigma_z \left[ i\hbar (A^* \dot{A} - A \dot{A}^*) + |A|^2 \sum_{\eta=x,y,z} \left[ \left( \dot{\beta}_{\eta} - \frac{2\hbar^2}{m} \right) \beta_{\eta}^2 - \frac{1}{2} m w_{\perp}^2 \lambda_{\eta}^2 \right] \right. \\ \left. \cdot \left( \sigma_{\eta}^2 + 2\eta_0^2 \right) - \frac{\hbar^2}{2m} \sigma_{\eta}^2 + \frac{\hbar^2}{m} \alpha_{\eta}^2 + 2\eta_0 \left( \dot{\alpha}_{\eta} - \frac{2\hbar^2}{m} \alpha_{\eta} \beta_{\eta} \right) \right] + \frac{2^{\frac{1}{2}} \pi \hbar^2 a}{m} |A|^4, \quad (4.46)$$

aqui foi omitida a dependência temporal e os pontos referem-se à derivada temporal.

As equações de movimento para o problema são dadas pelas coordenadas  $q_j \equiv \{\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z, A, A^*, x_0, y_0, z_0, \alpha_x, \alpha_y, \alpha_z, \beta_x, \beta_y, \beta_z\}$ . Sendo assim, a primeira equação de movimento de interesse é a equação para o centro do condensado e é dada por:

$$\frac{\partial^2 \eta_0}{\partial t^2} + \lambda_{\eta_0}^2 w_{\perp}^2 \eta_0 = 0, \quad (4.47)$$

com  $\eta = x, y, z$ . Essa equação corresponde a uma oscilação harmônica do centro de massa do condensado com frequência de oscilação dada por  $\lambda_{\eta} w_{\perp}$ . Vale a pena notar que esse movimento é independente do número de partículas, então, o movimento do centro de gravidade do condensado não será afetado por efeitos não lineares e dependerá somente das características do potencial confinador. Isso implica que o comportamento do centro, para efeitos externos, corresponde a de uma partícula clássica. Porém esse não é um resultado particular, pois já se é esperado devido ao teorema de Ehrenfest para a NLS (*Non-linear Schrödinger Equation*). Esse resultado consiste na invariância da NLS para translações espaciais, pois assim, existe conservação do momento do centro de massa. Calculando a evolução temporal por meio das equações de Ehrenfest do operador posição do centro de massa e do seu operador de momento, encontra-se uma equação de movimento para o centro de massa que independe da influência de efeitos não lineares [74]. Vale a pena ressaltar que esse resultado é válido para qualquer forma de não linearidade da equação de Schrödinger e que a dinâmica do centro de massa não pode influenciar outras propriedades do pacote de onda .

As equações para o comprimento característico do condensado podem ser expressas somente com a equação:

$$\frac{\partial^2 \sigma_{\eta}}{\partial t^2} + \lambda_{\eta}^2 w_{\perp} \sigma_{\eta} - \frac{\hbar^2}{m^2 \sigma_{\eta}^3} - \left(\frac{2}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{a \hbar^2 N}{m^2 \sigma_{\eta} \sigma_x \sigma_y \sigma_z} = 0. \quad (4.48)$$

Os outros parâmetros podem ser obtidos em função dos parâmetros de comprimento característico e coordenadas de centro, então, uma vez conhecidas o comportamento desses parâmetros pode-se calcular completamente a evolução do ansatz adotado. Estão relacionados pelas seguintes equações de movimento:

$$\beta_{\eta} + \frac{m \dot{\sigma}_{\eta}}{2 \hbar \sigma_{\eta}} = 0 \quad (4.49)$$

e

$$\alpha_{\eta} + \frac{m \dot{\eta}_0}{\hbar^2} + 2 \beta_{\eta} \eta_0 = 0. \quad (4.50)$$

os pontos representam as derivadas temporais,

Para facilitar a análise é introduzido as escalas  $\tau = w_{\perp} t$ ,  $\nu_{\eta} = \sigma_{\eta} / a_{\perp}$  e a constante  $P = (2/\pi)^{\frac{1}{2}} N a / a_{\perp}$  em que  $a_{\perp} = (\hbar / m w_{\perp})^{\frac{1}{2}}$  é o comprimento da armadilha na direção

perpendicular. A constante  $P$  basicamente fornece a força de interação atômica relacionado com o potencial confinador e pode ser tanto positivo quanto negativo, dependendo do valor do comprimento de espalhamento. Nessa escala a equação do comprimento característico do condensado se torna:

$$\frac{\partial^2 v_\eta}{\partial \tau^2} + \lambda_\eta^2 v_\eta - \frac{1}{v_\eta^3} - \frac{P}{v_\eta v_x v_y v_z} = 0. \quad (4.51)$$

Essa equação pode ser interpretada como a evolução do comprimento característico do condensado em termos da dinâmica de uma partícula clássica nas coordenadas  $(v_x, v_y, v_z)$  sujeito ao potencial:

$$U(v_x, v_y, v_z) = \frac{1}{2}(\lambda_x^2 v_x^2 + \lambda_y^2 v_y^2 + \lambda_z^2 v_z^2) + \frac{1}{2v_x^2} + \frac{1}{2v_y^2} + \frac{1}{2v_z^2} + \frac{P}{v_x v_y v_z}. \quad (4.52)$$

Pela expressão (4.51) conclui-se que o termo dispersivo,  $v_\eta^{-3}$  tende a separar o pacote de onda. Já o termo atrativo fica por conta do termo linear proveniente do confinamento externo e o último termo corresponde a interação não linear.

Para uma simetria esférica,  $\lambda_x = \lambda_y = \lambda_z = 1$ , todos os comprimentos são iguais, ou seja,  $v_x = v_y = v_z = v$ . Além disso, é adotado que inicialmente o condensado está em repouso,  $\dot{v}(0) = 0$ . Portanto a equação (4.51) reduz-se para:

$$\frac{\partial^2 v}{\partial \tau^2} = \frac{1}{v^3} + \frac{P}{v^4} - v. \quad (4.53)$$

Os pontos de equilíbrio são encontrados tomando a derivada do potencial e igualando a zero. Para o caso em que o comprimento de espalhamento é positivo, os pontos de equilíbrio são dado pela equação: polinomial de quinta ordem

$$v_0^5 = v_0 + P, \quad (4.54)$$

em que  $v_0$  é o ponto de equilíbrio. As soluções correspondem a pontos de equilíbrio estáveis para diferentes valores de  $P$  com oscilações anarmônicas em torno do ponto de equilíbrio (Figura 8). Um regime que pode ser analisado é o de altas interações,  $P \gg 1$ , sendo assim,  $v_0 = P^{\frac{1}{5}}$ .

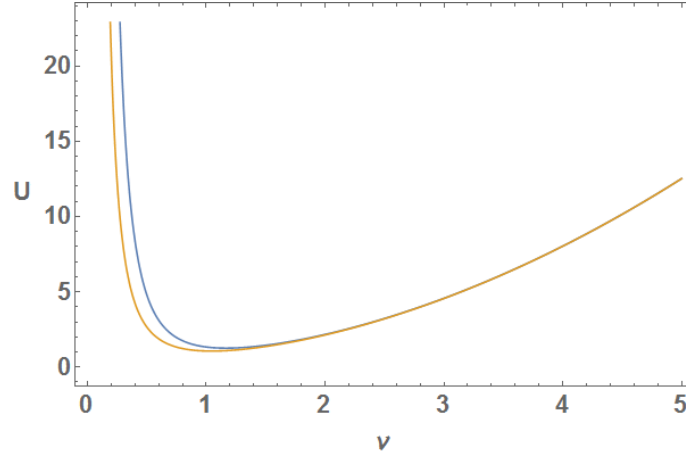


Figura 8: O potencial para  $P = 1$  (em azul) e  $P = 0.2$  (em laranja).

Fonte: Elaborada pelo próprio autor

Para o caso em que o comprimento de espalhamento é negativo, os pontos de equilíbrio são dados pelas equações:

$$v_0^5 = v_0 - |P| \quad (4.55)$$

e

$$-\frac{3}{v_0^4} + \frac{4|P|}{v_0^5} = 1. \quad (4.56)$$

Esse sistema possui um valor crítico dado por  $|P_c| = 0.5350$ . Para  $P < P_c$  há dois pontos de equilíbrio (Figura 9), um estável e outro instável e para  $P > P_c$  não há pontos de equilíbrio (Figura 10).

Outra configuração de interesse é a de simetria axial  $\lambda_x = \lambda_y = 1 \neq \lambda_z$ , nessa configuração os comprimentos são dados por  $v_x = v_y = v \neq v_z$ . Então, a equação (4.51) se torna:

$$\frac{\partial^2 v}{\partial \tau^2} + v - \frac{1}{v_\eta^3} - \frac{P}{v^3 v_z} = 0 \quad (4.57)$$

e

$$\frac{\partial^2 v_z}{\partial \tau^2} + \lambda_z^2 v_z - \frac{1}{v_z^3} - \frac{P}{v^2 v_z^2} = 0. \quad (4.58)$$

Os pontos de equilíbrio para este sistema são dados por:

$$v_{0z} v_0^4 = v_{0z} + P \quad (4.59)$$

e

$$\lambda_z^2 v_{0z}^4 = 1 + \frac{P v_{0z}}{v_0^2}. \quad (4.60)$$

Para o caso em que o comprimento de espalhamento é positivo, obter soluções para o sistema acima são necessárias técnicas numéricas. Porém no regime de alta interação,  $P \gg 1$ , é possível obter as seguintes soluções analíticas:

$$v_0 = (P \lambda_z)^{\frac{1}{5}} \quad (4.61)$$

e

$$v_{0z} = \left( \frac{P}{\lambda_z^4} \right)^{\frac{1}{5}}. \quad (4.62)$$

Para o caso em que o comprimento de espalhamento é negativo, no caso em que  $\lambda_z = 0$  existe um máximo para  $|P|$  dado por  $|P_{max}| = 0.6204$ . Já pra o caso em que  $\lambda_z \gg 1$  o comportamento é dado por  $|P_{max}| \simeq (\lambda_z)^{-\frac{1}{2}}$ . Isso significa que para um dado comprimento de espalhamento, pode-se ter mais partículas no estado fundamental antes do colapso acontecer para um confinamento na forma *cigar-shaped*, pois condensados nessa configuração estão próximos de uma distribuição unidimensional. O mesmo não é válido para confinamento na forma *disk-shaped*, uma vez que nessa configuração a distribuição é próxima de uma distribuição bidimensional, na qual o colapso pode ocorrer. Maiores discussões podem ser encontradas em [36, 38].

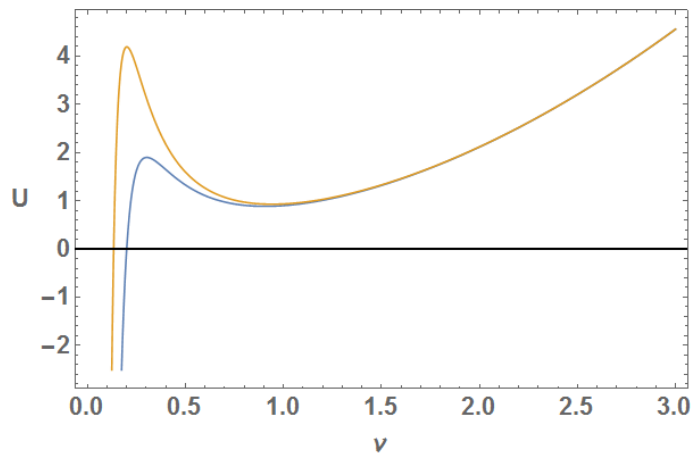


Figura 9: O potencial para  $P = 0.3$  (em azul) e  $P = 0.2$  (em laranja).

Fonte: Elaborada pelo próprio autor

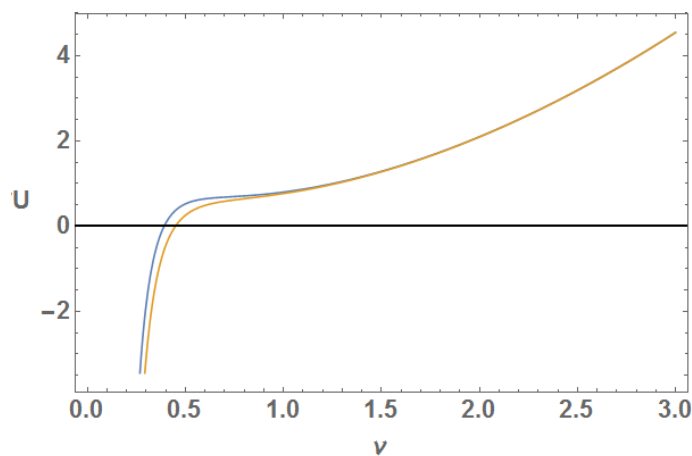


Figura 10: O potencial para  $P = 0.6$  (em azul) e  $P = 0.7$  (em laranja).

Fonte: Elaborada pelo próprio autor

# 5 Método variacional dependente do tempo para a Equação de Schrödinger Não-Linear e Não-Local em Condensados de Bose-Einstein

Nos capítulos anteriores foram apresentados resultados dos estudos de BECs, desde o estudo para um gás ideal quântico até a obtenção de resultados analíticos para a equação que descreve condensados com interações. Este capítulo tem como ponto de partida apresentar as motivações e objetivos no estudo de interações de longo alcance em condensados de Bose-Einstein. Sendo assim, será apresentado o sistema estudado, o método utilizado e o detalhamento do processo para obter os resultados desejados.

## 5.1 Motivações e objetivo

Colapso da função de onda é um efeito bem conhecido na dinâmica de sistema não lineares [43, 75, 76]. Em BECs, geralmente ocorrem devido à existência de uma armadilha externa, necessário para confinar condensados, e à existência de interações atrativas intensas. Porém a adição de um potencial não-local pode evitar este problema. Então será investigado a possibilidade de soluções estáveis somente na presença de interações de longo alcance e na ausência de um confinamento externo.

Interações não-locais na física estão presente desde a física básica, por exemplo a interação proveniente entre dois corpos que contenham massa é dada por um potencial que depende da distância relativa entre os dois corpos,  $V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \propto |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|^{-1}$ , em que  $\mathbf{r}_1$  é a posição do corpo um e  $\mathbf{r}_2$  é a posição do corpo dois. O mesmo é valido para interação entre dois corpos com carga elétrica. Em BECs, a existência de interações não-locais faz com que ele se torne auto-confinado, ou seja, torna-se estável na ausência de uma armadilha externa [18]. Devido a isso, a adição desse termo tem atraído interesse da comunidade científica. Os trabalhos desenvolvidos nessa área abarcam estudos sobre a estabilidade de sólitons e vórtices em meios não-locais [22, 23, 30, 29, 77, 78, 79, 80].

No estudo de interações de longo alcance os potenciais adotados são da forma gaussiana e gravitacional. O potencial gaussiano, atualmente, não possui sistema físico associado. Entretanto, é utilizado como modelo analítico para estudo de estabilidade de soluções tipo: sóliton dipolo rotativo [23], sóliton interagente [28], sóliton quadrupolar [29, 80] e vórtices bidimensionais [22].



Em contrapartida, o potencial gravitacional pode ser criado artificialmente por meio de lasers fixos e rotativos [30, 81, 82]. O estudo fica restringido a essa forma, pois, para interações do tipo  $r^{-\alpha}$  para  $\alpha \geq 2$  a função de onda colapsa [83]. Além disso, o potencial gravitacional pode ser utilizado para simular cosmologia em laboratório [84], em particular estrelas de Bósons [81]. Estudos sobre estabilidade nesse potencial podem ser encontradas em [30], excitações coletivas em [31] e sólitons rotativos tridimensionais em [19].

Nesta dissertação, o principal objetivo é analisar as equações de movimento quanto à natureza dos pontos fixos e sua estabilidade linear para os potenciais gaussiano e gravitacional na ausência de confinamento externo. Para isso, será resolvida a equação de Gross-Pitaevskii não-local pelo método variacional aplicado em ansatzs adotados na literatura.

## 5.2 Sistema estudado e método

O sistema a ser estudado são BECs com interações não-locais. A equação diferencial integral que descreve dinâmica desse sistema é a equação de Gross-Pitaevskii não-local, que é do tipo Schrödinger não-linear e não-local, dada por:

$$i\hbar \frac{\partial \Phi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \left( -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_{ext}(\mathbf{r}, t) + g|\Phi(\mathbf{r}, t)|^2 + \int \Phi^*(\mathbf{r}', t)V(|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|)\Phi(\mathbf{r}', t)d\mathbf{r}' \right) \Phi(\mathbf{r}, t), \quad (5.1)$$

em que  $V(|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|)$  é o potencial de interação não-local e  $\Phi(\mathbf{r}', t)$  é a função de onda dada no ponto  $\mathbf{r}'$ , ou seja, a dinâmica da função de onda em um ponto qualquer depende da interação com a sua vizinhança, para o caso em que as colisões são desprezíveis,  $g = 0$ , assim como a interação de longo alcance,  $V(|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|) = 0$ , a equação acima recai na equação de Schrödinger usual. Como o objetivo desta dissertação é estudar o caso em que não há confinamento externo, uma vez que é de interesse analisar a estabilidade somente com a interação de longo alcance, a equação se reduz para:

$$i\hbar \frac{\partial \Phi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \left( -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + g|\Phi(\mathbf{r}, t)|^2 + \int \Phi^*(\mathbf{r}', t)V(|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|)\Phi(\mathbf{r}', t)d\mathbf{r}' \right) \Phi(\mathbf{r}, t). \quad (5.2)$$

Para obter soluções aproximadas será adotado o método variacional, pois como dito no capítulo anterior, reduzirá o problema para um conjunto de equações diferenciais ordinárias. A densidade lagrangiana adotada é:

$$\begin{aligned} \mathcal{L} &= i\hbar \Phi^*(\mathbf{r}, t) \frac{\partial \Phi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} - \frac{\hbar^2}{2m} |\nabla \Phi(\mathbf{r}, t)|^2 - \frac{g}{2} |\Phi(\mathbf{r}, t)|^4 \\ &\quad - \frac{|\Phi(\mathbf{r}, t)|^2}{2} \int \Phi^*(\mathbf{r}', t)V(|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|)\Phi(\mathbf{r}', t)d\mathbf{r}'. \end{aligned} \quad (5.3)$$

Como os demais termos já foram demonstrados no capítulo anterior, será apenas necessário mostrar que o termo adicional,  $\frac{|\Phi(\mathbf{r}, t)|^2}{2} \int \Phi^*(\mathbf{r}', t)V(|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|)\Phi(\mathbf{r}', t)d\mathbf{r}'$ , gera o

termo não-local em (5.2). Diferenciando o termo adicional em relação a  $\Phi^*$

$$\begin{aligned} & \int_{t_1}^{t_2} \int_V \delta \left( \frac{|\Phi(\mathbf{r}, t)|^2}{2} \int \Phi^*(\mathbf{r}', t) V(|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|) \Phi(\mathbf{r}', t) d\mathbf{r}' \right) d\mathbf{r} dt = \\ & \int_{t_1}^{t_2} \int_V \frac{1}{2} \left( \int \delta(\Phi^*(\mathbf{r}, t)) \Phi^*(\mathbf{r}', t) V(|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|) \Phi(\mathbf{r}', t) \Phi(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r}' \right) d\mathbf{r} dt \\ & + \int_{t_1}^{t_2} \int_V \frac{1}{2} \left( \int \Phi^*(\mathbf{r}, t) \delta(\Phi^*(\mathbf{r}', t)) V(|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|) \Phi(\mathbf{r}', t) \Phi(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r}' \right) d\mathbf{r} dt = \\ & \int_{t_1}^{t_2} \int_V \left( \int \Phi^*(\mathbf{r}', t) V(|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|) \Phi(\mathbf{r}', t) \Phi(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r}' \right) \delta\Phi^* d\mathbf{r} dt, \end{aligned} \quad (5.4)$$

em que na terceira linha foi realizada a mudança  $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r}'$ ,  $\mathbf{r}' \rightarrow \mathbf{r}$  e  $V(|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|) = V(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$ , já que o potencial de interação de longo alcance só depende do módulo da distância relativa entre dois pontos no espaço.

Em posse do resultado (4.15), tem-se que a variação da ação para esse sistema é dado por:

$$\begin{aligned} \delta S &= \int_{t_1}^{t_2} \int_V dt d\mathbf{r} \left[ i\hbar \frac{\partial \Phi}{\partial t} + \frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} \Phi - g|\Phi|^2 \Phi \right. \\ & \left. - \int \Phi^*(\mathbf{r}', t) V(|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|) \Phi(\mathbf{r}', t) \Phi(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r}' \right] \delta\Phi^*. \end{aligned} \quad (5.5)$$

A minimização da ação leva em:

$$i\hbar \frac{\partial \Phi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \left( -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + g|\Phi(\mathbf{r}, t)|^2 + \int \Phi^*(\mathbf{r}', t) V(|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|) \Phi(\mathbf{r}', t) d\mathbf{r}' \right) \Phi(\mathbf{r}, t). \quad (5.6)$$

Após substituir os ansatz adotados na densidade lagrangiana (5.3) será feita a integração no espaço das configurações para obter a lagrangiana do sistema:

$$L = \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{L} d\mathbf{r}. \quad (5.7)$$

Feito isso, serão obtidos as lagrangianas  $L = L(\sigma, \dot{\sigma}, \beta, \dot{\beta}, \dot{x}_0, \dot{y}_0, \dot{z}_0, \dot{c})$  para o potencial gaussiano e  $L = L(\sigma, \dot{\sigma}, \beta, \dot{\beta})$  para o potencial gravitacional, como serão demonstradas no próximo capítulo. O significado de cada parâmetro sera discutido na próxima seção. As equações de movimento para cada parâmetro serão obtidas aplicando a equação de Euler-Lagrange em cada um dos mesmos.

Tipicamente é possível desacoplar as demais dependências de  $\sigma(t)$  como será visto mais a frente. Sendo assim, a equação de movimento para  $\sigma(t)$  é uma equação diferencial da forma:

$$\ddot{\sigma} = F(\sigma). \quad (5.8)$$

Os pontos representam a derivada segunda em relação ao tempo e  $F(\sigma)$  é um função dependente apenas de  $\sigma$ . A partir dessa equação será encontrado um potencial,  $U(\sigma)$ , tal

que:

$$\ddot{\sigma} = -\frac{dU(\sigma)}{d\sigma}. \quad (5.9)$$

Em seguida, serão construídos os gráficos de  $U(\sigma)$  adotando os valores das constantes encontrados na literatura [19, 82]. O ponto de equilíbrio será encontrado pela condição  $\frac{dU(\sigma)}{d\sigma} = 0$ . Pela análise do gráfico será analisado a sua estabilidade.

Encontrado os pontos de equilíbrio,  $\sigma_0$ , será feita uma aproximação harmônica no seu entorno, isso será feito nos pontos de equilíbrio estável,

$$U(\sigma) \approx \left( \frac{d^2U}{d\sigma^2} \right)_{\sigma_0} \frac{\sigma^2}{2} = K \frac{\sigma^2}{2}. \quad (5.10)$$

Consecutivamente, será obtida a frequência de oscilação  $\nu$ . Este estudo servirá para comparar os resultados obtidos entre o potencial gaussiano e gravitacional.

Posteriormente, será encontrado a velocidade de escape,  $\dot{\sigma}_{escape}$ . Para  $\dot{\sigma} > \dot{\sigma}_{escape}$ , o valor de  $\sigma(t)$  deixa de realizar oscilações lineares e não-lineares em torno do ponto fixo. Seja  $E$  a energia dada por  $E = \frac{\dot{\sigma}^2}{2} + U(\sigma)$ , a velocidade de escape é encontrada pela condição  $E > 0$ . Portanto:

$$\dot{\sigma}_{escape} = (-2U(\sigma_0))^{\frac{1}{2}} \quad (5.11)$$

é o valor limite para a velocidade. Para observar este resultado, serão analisados os gráficos para  $\dot{\sigma}(0) < \dot{\sigma}_{escape}$  e  $\dot{\sigma}(0) > \dot{\sigma}_{escape}$  por meio da evolução numérica de  $\sigma(t)$ . Neste estudo serão adotadas as condições iniciais  $\sigma(0) = \sigma_0$  com  $\dot{\sigma}(0) > \dot{\sigma}_{escape}$  e  $\sigma(0) = \sigma_0$  com  $\dot{\sigma}(0) < \dot{\sigma}_{escape}$ .

### 5.2.1 Potencial gaussiano

O primeiro potencial a ser estudado é o gaussiano, dado por:

$$V(|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|) = -A_r \exp(-(|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|^2/\gamma^2)), \quad (5.12)$$

em que  $A_r$  é a amplitude do potencial e  $\gamma$  mede o grau de não-localidade. O sinal negativo significa que o potencial não-local é atrativo. Apesar do fato de não haver nenhum sistema físico conhecido que pode ser descrito por uma resposta gaussiana, esse modelo tem servido como exemplo fenomenológico de um meio não-local, permitindo por sua forma, um tratamento analítico para a função de onda [24].

Para o estudo desse potencial, será adotado o seguinte ansatz [38, 66], ignorando a evolução temporal com o potencial químico:

$$\Phi(\mathbf{r}, t) = A(t) \prod_{\eta=x,y,z} \exp - \left[ \frac{(\eta - \eta_0(t))^2}{2\sigma(t)^2} + i[\beta(t)(\eta - \eta_0(t))^2 + c(t)(\eta - \eta_0(t))] \right], \quad (5.13)$$

em que  $A(t)$  é a amplitude,  $\sigma(t)$  é o parâmetro que descreve a evolução do tamanho do condensado com o tempo e o parâmetro  $\beta(t)$  é a curvatura de  $\sigma(t)$  no espaço dos momentos. O parâmetro  $\eta_0(t)$  representa o centro de massa do condensado no ponto  $(x_0, y_0, z_0)$  em um dado tempo  $t$ , aqui é suposto que o comprimento característico do condensado é isotrópico. Já  $c(t)$  é o parâmetro determinado pela velocidade com que o máximo se desloca. Esse ansatz possui um perfil da distribuição de densidade esférico (Figura 11). O valor adotado para o comprimento característico do condensado foi o encontrado nos resultados.

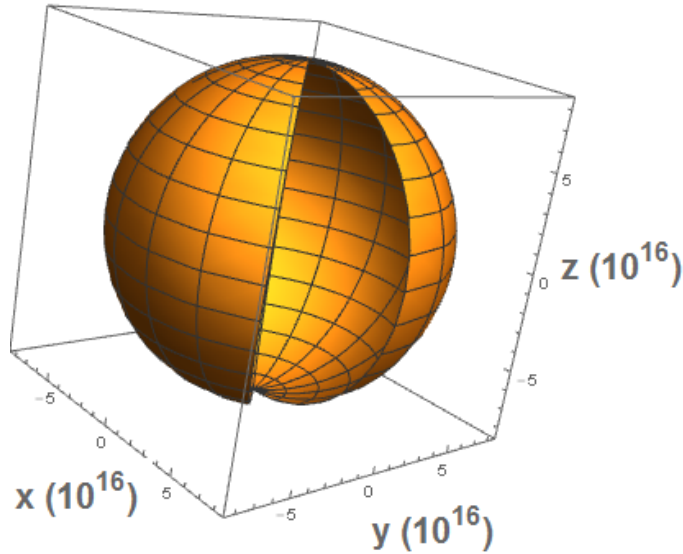


Figura 11: Perfil de densidade em  $t = 0$  para  $r = 20\mu m$  com  $N = 10000$ . O centro de massa está centralizado na origem. Corte no intervalo de  $\phi \in [7\pi/4, 2\pi]$

Fonte: Elaborada Pelo Autor

## 5.2.2 Potencial gravitacional

O segundo potencial a ser estudado é o gravitacional. Esse tipo de interação é obtida irradiando átomos com intensos, não ressonantes, campos eletromagnéticos. Por meio disso, formarão dipolos induzidos. Utilizando uma configuração de lasers fixos ou rotativos é possível criar um potencial puramente  $r^{-1}$ .

A energia de interação de dipolo-dipolo induzido por uma radiação eletromagnética externa de intensidade  $I$ , com vetor de onda  $\mathbf{k}$  e vetor de polarização  $\hat{\mathbf{e}}(\mathbf{k})$  com componentes  $i$  e  $j$  é dada por:

$$V(\mathbf{r}) = \frac{I\alpha^2(k)}{\epsilon_0 c} \sum_{i,j} \hat{e}_i^*(\mathbf{k}) \hat{e}_j(\mathbf{k}) U_{ij}(\mathbf{r}, k) \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}), \quad (5.14)$$

em que  $\mathbf{r}$  é o eixo interatômico,  $\alpha(k)$  é a polarizabilidade isotrópica e dinâmica com frequência  $ck$ , em que  $c$  é a velocidade da luz. O fator  $U_{ij}(\mathbf{r}, k)$  é denominado tensor de interação retardada dipolo-dipolo (*retarded dipole-dipole interaction tensor*) dado por:

$$U_{ij}(\mathbf{r}, k) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0 r^3} [(\delta_{ij} - 3\hat{r}_i \hat{r}_j)(\cos(kr) + kr \sin(kr)) - (\delta_{ij} - \hat{r}_i \hat{r}_j) k^2 r^2 \cos(kr)] \quad (5.15)$$

em que  $\hat{r}_i = r_i/r$  e  $\epsilon_0$  é a permissividade elétrica no vácuo.

Utilizando a relação  $\sum_{\pm} \hat{e}_i^{*(\pm)}(\mathbf{k}) \hat{e}_j^{(\pm)}(\mathbf{k}) = 1/2[(\delta_{ij} - \hat{k}_i \hat{k}_j) \pm i \epsilon_{ijk} \hat{k}_k]$ , em que  $\pm$  caracteriza vetores circularmente polarizados a direita (-) e polarizados a esquerda (+). Sem perda de generalidade é possível assumir que o campo radiado está orientado ao longo do eixo  $\hat{z}$ . Sendo assim, o termo  $\hat{k}_i \hat{k}_j$  é nulo. Além disso, usando a propriedade que o tensor  $U_{ij}$  é i,j-simétrico tem-se que:

$$V(\mathbf{r}) = \frac{I\alpha^2(k)}{\epsilon_0 c} \sum_{i,j} \delta_{ij} U_{ij}(\mathbf{r}, k) \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}). \quad (5.16)$$

Como para gases e líquidos qualquer direção é igualmente provável, é possível tomar uma média angular sobre todas as possíveis orientações do dipolo-dipolo em relação ao feixe incidente. Essa média é conhecida como *tumbling average*. Para isso, toma-se a integral sobre todas as possíveis orientações angulares:

$$\begin{aligned} \langle V(\mathbf{r}) \rangle &= \frac{I\alpha^2(k)}{4\pi\epsilon_0^2 c r^3} \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} \int_{-1}^1 d\cos(\theta) \cos(kr \cos(\theta)) \\ &\quad [(2 - 3 \sin^2(\theta))(\cos(kr) + kr \sin(kr)) - (2 - \sin^2(\theta))kr \cos(kr)] \\ &= -\frac{I\alpha^2(k)}{8\pi\epsilon_0^2 c r^3} \left[ -\frac{6 \cos(2kr)}{k^2 r^2} + 2 \cos(2kr) + kr \sin(2kr) - \frac{5 \sin(2kr)}{kr} \right. \\ &\quad \left. + \frac{3 \sin(2kr)}{k^3 r^3} \right]. \end{aligned} \quad (5.17)$$

Para um região denominada região próxima,  $kr \ll 1$ , é possível realizar uma expansão dos termos em cosseno e seno. Essa expansão é realizada até o terceiro termo, então,  $\cos(2kr) \approx 1 - (2kr)^2/2 + (2kr)^4/24$  e  $\sin(2kr) \approx (2kr) - (2kr)^3/6 + (2kr)^5/120$ . Substituindo na expressão acima e negligenciando os termos de ordem  $(kr)^3$  e superiores, tem-se que potencial interatômico se torna:

$$V(|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|) = -\frac{u}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|}, \quad (5.18)$$

em que  $u = 11Ik^2\alpha^2(k)/60\pi\epsilon_0^2 c$ . Este tipo de interação dependendo da intensidade e do comprimento de onda dos lasers, pode criar uma interação de até 17 ordens maior do que a interação gravitacional devido a suas massas em uma mesma distância [81]. A primeira proposta de como se poderia tomar a média sobre todas as orientações para gases frios foi realizada por [81]. Neste trabalho é proposto uma configuração específica de seis tríades de lasers, cada tríade é composto por três lasers fixos e ortogonais entre si. Uma outra proposta foi feita em [30] na qual são utilizados três lasers rotativos, essa configuração por utilizar menos lasers o torna mais barato do que a proposta anterior.

Para esse potencial será adotado o seguinte ansatz [19], novamente ignorando a evolução temporal com o potencial químico:

$$\Phi(\mathbf{r}, t) = A(t)r \sin(\theta) \exp - \left[ \frac{r^2}{2\sigma(t)^2} + i\beta(t)r^2 \right] [\cos(\phi - wt) + ip \sin(\phi - wt)], \quad (5.19)$$

em que  $r^2 = x^2 + y^2 + z^2$ ,  $A(t)$  é a amplitude,  $\sigma(t)$  é o parâmetro que descreve o tamanho do condensado com o tempo, o parâmetro  $\beta(t)$  é a curvatura de  $\sigma(t)$  no espaço dos momentos e  $w$  é a frequência de rotação. O parâmetro  $p$  varia entre zero e um. Para  $p = 0$  a função (5.19) descreve uma estrutura de dipolo (Figura 12), enquanto que para  $p = 1$  descreve uma solução do tipo toroidal centralizada na origem (Figura 13). O valor adotado para o comprimento característico do condensado foi o encontrado nos resultados.

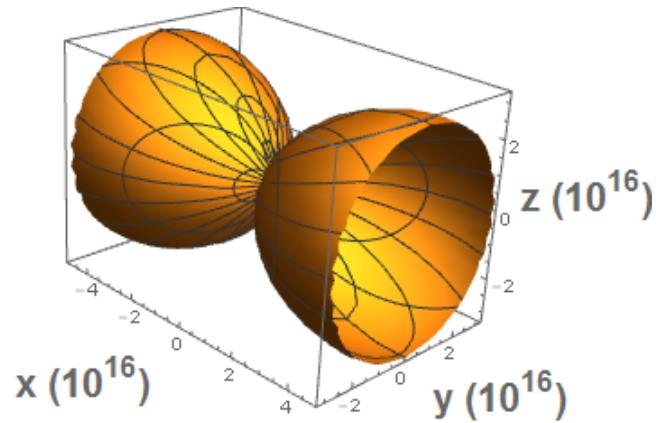


Figura 12: Perfil de densidade em  $t = 0$  e  $p = 0$  para  $r = 20\mu m$  com  $N = 10000$ .

Fonte: Elaborada Pelo Autor

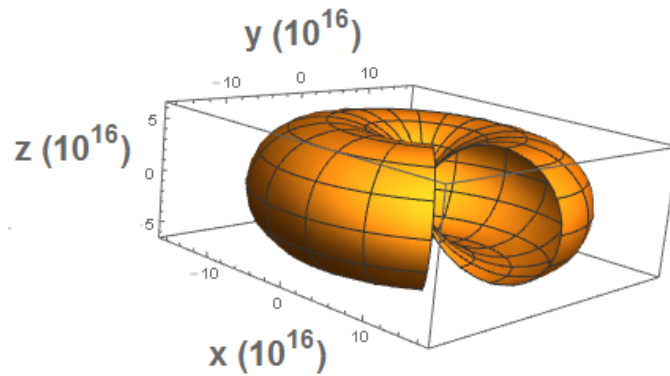


Figura 13: Perfil de densidade em  $t = 0$  e  $p = 1$  para  $r = 20\mu m$  com  $N = 10000$ . Corte no intervalo de  $\phi \in [7\pi/4, 2\pi]$

Fonte: Elaborada Pelo Autor

## 6 Desenvolvimento e resultados

Neste capítulo serão apresentados com detalhes os cálculos desenvolvidos seguindo os passos apresentados no capítulo anterior e com base nos resultados já obtidos nos trabalhos [81, 82] juntamente com a tese [30]. Na primeira seção será estudado o potencial gaussiano e em seguida o potencial gravitacional. Para concluir, uma comparação dos resultados entre os dois potenciais não-locais será feita no fim do capítulo.

### 6.1 Potencial gaussiano

Partindo do ansatz:

$$\Phi(\mathbf{r}, t) = A(t) \prod_{\eta=x,y,z} \exp - \left[ \frac{(\eta - \eta_0(t))^2}{2\sigma(t)^2} + i[\beta(t)(\eta - \eta_0(t))^2 + c(t)(\eta - \eta_0(t))] \right] \quad (6.1)$$

e normalizando,  $\int |\Phi|^2 d\mathbf{r} = N$ , sendo  $N$  o número de átomos, obtêm-se que a amplitude é dada por  $A(t) = N^{\frac{1}{2}} / \pi^{\frac{3}{4}} \sigma(t)^{\frac{3}{2}}$ . Então a função de onda normalizada é:

$$\Phi(\mathbf{r}, t) = \frac{N^{\frac{1}{2}}}{\pi^{\frac{3}{4}} \sigma(t)^{\frac{3}{2}}} \prod_{\eta=x,y,z} \exp - \left[ \frac{(\eta - \eta_0(t))^2}{2\sigma(t)^2} + i[\beta(t)(\eta - \eta_0(t))^2 + c(t)(\eta - \eta_0(t))] \right]. \quad (6.2)$$

Substituindo a função de onda normalizada acima na densidade lagrangiana:

$$\begin{aligned} \mathcal{L} &= i\hbar\Phi^*(\mathbf{r}, t) \frac{\partial\Phi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} - \frac{\hbar^2}{2m} |\nabla\Phi(\mathbf{r}, t)|^2 - \frac{g}{2} |\Phi(\mathbf{r}, t)|^4 \\ &\quad - \frac{|\Phi(\mathbf{r}, t)|^2}{2} \int \Phi^*(\mathbf{r}', t) V(|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|) \Phi(\mathbf{r}', t) d\mathbf{r}', \end{aligned} \quad (6.3)$$

encontra-se os seguintes valores para cada termo:

$$\begin{aligned} i\hbar\Phi^* \frac{\partial\Phi}{\partial t} &= - \left( \frac{\hbar N}{2\pi^{\frac{3}{2}} \sigma^6} \right) \exp - \left[ \frac{(x - x_0)^2 + (y - y_0)^2 + (z - z_0)^2}{\sigma^2} \right] \\ &\quad \{ -i[-3\sigma^2 + 2((x - x_0)^2 + (y - y_0)^2 + (z - z_0)^2)]\dot{\sigma} \\ &\quad + 2\sigma^3 [((x - x_0)^2 + (y - y_0)^2 + (z - z_0)^2)\dot{\beta} + (x + y + z - x_0 - y_0 - z_0)\dot{c} \\ &\quad - (c + 2\beta(x - x_0)\dot{x}_0) - (c + 2\beta(y - y_0)\dot{y}_0) - (c + 2\beta(z - z_0)\dot{z}_0) \\ &\quad - i((x - x_0)\dot{x}_0 + (y - y_0)\dot{y}_0 + (z - z_0)\dot{z}_0)] \}, \end{aligned} \quad (6.4)$$

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} |\nabla\Phi|^2 &= - \left( \frac{\hbar^2 N}{2m\pi^{\frac{3}{2}} \sigma^7} \right) \exp - \left[ \frac{(x - x_0)^2 + (y - y_0)^2 + (z - z_0)^2}{\sigma^2} \right] \\ &\quad \{ (x - x_0)^2 + (y - y_0)^2 + (z - z_0)^2 + \sigma^4 [3c^2 + 4\beta c(x + y + z - x_0 - y_0 - z_0) \\ &\quad + 4\beta^2((x - x_0)^2 + (y - y_0)^2 + (z - z_0)^2)] \}, \end{aligned} \quad (6.5)$$

$$-\frac{g}{2}|\Phi|^4 = -\left(\frac{gN^2}{2\pi^3\sigma^6}\right) \exp - \left[ \frac{2((x-x_0)^2 + (y-y_0)^2 + (z-z_0)^2)}{\sigma^2} \right] \quad (6.6)$$

e

$$-\frac{|\Phi(\mathbf{r}, t)|^2}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \Phi^*(\mathbf{r}', t) V(|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|) \Phi(\mathbf{r}', t) d\mathbf{r}' = \left( \frac{N^2 A_r \gamma^3}{2\pi^{\frac{3}{2}}} \right) \exp - \left[ \frac{(x^2 + y^2 + z^2)(\gamma^2 + 2\sigma^2)}{\sigma^2(\gamma^2 + \sigma^2)} \right] \quad (6.7)$$

Daqui em diante a dependência em relação a posição e o tempo serão omitidas quando possível, exceto no último termo, pois é preciso diferenciar a função de onda no ponto  $\mathbf{r}$  do ponto  $\mathbf{r}'$ . Os pontos sobre os parâmetros significam a derivada temporal. Reunindo o termos (6.4), (6.5), (6.6) e (6.7) em (6.3) é obtida a densidade lagrangiana. Integrando cada termo da densidade lagrangiana no espaço das configurações resulta no seguintes termos:

$$\int_{-\infty}^{\infty} i\hbar\Phi^* \frac{\partial\Phi}{\partial t} d\mathbf{r} = \frac{\hbar N}{2} [3\sigma^2\dot{\beta} - 2c(\dot{x}_0 + \dot{y}_0 + \dot{z}_0)], \quad (6.8)$$

$$-\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\hbar^2}{2m} |\nabla\Phi|^2 d\mathbf{r} = -\frac{3\hbar^2 N(1 + 4\sigma^4\beta^2)}{4m\sigma^2} - \frac{3\hbar^2 Nc^2}{2m}, \quad (6.9)$$

$$-\int_{-\infty}^{\infty} \frac{g}{2} |\Phi|^4 d\mathbf{r} = \frac{gN^2}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}\sigma^3} \quad (6.10)$$

e

$$-\int_{-\infty}^{\infty} \frac{|\Phi(\mathbf{r}, t)|^2}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \Phi^*(\mathbf{r}', t) V(|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|) \Phi(\mathbf{r}', t) d\mathbf{r}' d\mathbf{r} = \frac{\gamma^3 N^2 A_r}{2(\gamma^2 + 2\sigma^2)^{\frac{3}{2}}}. \quad (6.11)$$

Agrupando os termos (6.8), (6.9), (6.10) e (6.11) é encontrada a lagrangiana  $L = L(\sigma, \dot{\sigma}, \beta, \dot{\beta}, \dot{x}_0, \dot{y}_0, \dot{z}_0, \dot{c})$  dada por:

$$\begin{aligned} L &= \frac{\hbar N}{2} [3\sigma^2\dot{\beta} - 2c(\dot{x}_0 + \dot{y}_0 + \dot{z}_0)] - \frac{3\hbar^2 N(1 + 4\sigma^4\beta^2)}{4m\sigma^2} - \frac{3\hbar^2 Nc^2}{2m} - \frac{gN^2}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}\sigma^3} \\ &+ \frac{\gamma^3 N^2 A_r}{2(\gamma^2 + 2\sigma^2)^{\frac{3}{2}}}. \end{aligned} \quad (6.12)$$

Nota-se que na lagrangiana todos os termos dispersivos são acompanhados do sinal negativo, somente o termo não-local, atrativo, contribui com a parte positiva. Obtida a lagrangiana, o próximo passo é obter as equações de movimento para cada parâmetro,  $q_j = \{\sigma, \eta_0, \beta, c\}$ , em que  $\eta = x, y, z$ . Dessa forma, a aplicação da equação de Euler-Lagrange para cada parâmetro resulta nas seguintes equações:

$$\dot{c} = 0, \quad (6.13)$$

$$\dot{\eta}_0 = -\frac{\hbar c}{m}, \quad (6.14)$$

$$\frac{2\hbar\sigma^2\dot{\beta}}{m} = -\sigma\dot{\sigma} \quad (6.15)$$



e

$$\frac{3gN^2}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}\sigma^4} + \frac{3\gamma^3 N^2 A_r \sigma}{(\gamma^2 + 2\sigma^2)^{\frac{5}{2}}} - \frac{3\hbar N}{2m\sigma^3} (-\hbar^2 + 4\hbar\sigma^4 \beta(t)^2 - 2m\sigma^4 \dot{\beta}) = 0. \quad (6.16)$$

Primeiro será tratada as duas primeiras equações. Para o parâmetro  $c(t)$ , é resolvida a equação (6.13) adotando a condição inicial  $c(0) = c_0$ . Para o parâmetro posição do centro de massa é adotada que a sua posição inicial se encontra na origem, ou seja,  $\eta_0(0) = 0$ . Sendo assim encontrou-se:

$$c(t) = c_0 \quad (6.17)$$

e

$$\eta_0(t) = -\frac{\hbar}{m} c_0 t. \quad (6.18)$$

Nota-se pelos resultados o motivo de  $c(t)$  ser o parâmetro que determina a velocidade do máximo do condensado, pois caso  $c(0) = 0$ , a velocidade do máximo é nula. Além disso, pela expressão (6.18), conclui-se que o centro de massa do condensado se move como em um movimento retilíneo uniforme. Esse movimento é independente tanto do número de partículas quanto do grau de não-localidade, ou seja, o movimento não é afetado por efeitos não lineares e não-locais.

Voltando em (6.15), resolvendo tem-se:

$$\beta(t) = -\frac{m\dot{\sigma}}{2\hbar\sigma} \quad (6.19)$$

e sua respectiva derivada temporal, necessária para obter a equação do comprimento característico do condensado,

$$\dot{\beta}(t) = \frac{m\dot{\sigma}^2}{2\hbar\sigma^2} - \frac{m\ddot{\sigma}}{2\hbar\sigma}. \quad (6.20)$$

Pela expressão (6.19) observa-se que o parâmetro  $\beta(t)$  é a curvatura de  $\sigma(t)$  no espaço dos momentos, ou seja, a dinâmica de  $\sigma(t)$  pode ser interpretada como uma "partícula" de massa  $m$  com velocidade  $\dot{\sigma}(t)$ .

Substituindo (6.20) em (6.16) resulta na equação diferencial de  $\sigma(t)$  dada por:

$$\ddot{\sigma} - \frac{2^{\frac{1}{2}}gN}{4\pi^{\frac{3}{2}}m\sigma^4} - \frac{4\hbar^2}{m^2\sigma^3} + \frac{2\gamma^3 N A_r \sigma}{m(\gamma^2 + 2\sigma^2)^{\frac{5}{2}}} = 0. \quad (6.21)$$

Pela equação diferencial para  $\sigma(t)$  percebe-se a dependência tanto no número de partículas quanto do grau de não-localidade, sendo assim, é o comprimento característico do condensado que é modificado pela ação de efeitos não-lineares e não locais.

Pode-se reescrever a equação diferencial (6.21) na forma  $\ddot{\sigma}(t) = F(\sigma)$ , em que  $F(\sigma)$  é dado por:

$$F(\sigma) = \frac{2^{\frac{1}{2}}gN}{4\pi^{\frac{3}{2}}m\sigma^4} + \frac{4\hbar^2}{m^2\sigma^3} - \frac{2\gamma^3 N A_r \sigma}{m(\gamma^2 + 2\sigma^2)^{\frac{5}{2}}}. \quad (6.22)$$

Como dito acima, pode-se interpretar a dinâmica de  $\sigma(t)$  como a evolução do comprimento característico do condensado em termos da dinâmica de uma partícula clássica nas coordenadas  $(\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ . Vale a pena relembrar que foi suposto uma isotropia no comprimento característico do condensado, sujeito ao potencial:

$$U(\sigma) = \frac{gN}{2^{\frac{1}{2}}6\pi^{\frac{3}{2}}m\sigma^3} + \frac{\hbar^2}{2m^2\sigma^2} - \frac{\gamma^3 NA_r}{3m(\gamma^2 + 2\sigma^2)^{\frac{3}{2}}}. \quad (6.23)$$

Nota-se que o único termo atrativo fica por conta da interação não-local, os demais efeitos são dispersivos.

Para gerar o gráfico desta função adotou-se os seguintes valores:  $m = 3.8 \cdot 10^{-26} kg$ ,  $N = 10000$ ,  $a = 3nm$ ,  $A_r = 1.278 \cdot 10^{-15} eV$  e  $\gamma = 19 \cdot 10\mu m$ . Para esses valores o potencial tem a forma, os cortes nos intervalos apresentados foram feitos para observar os pontos fixos:

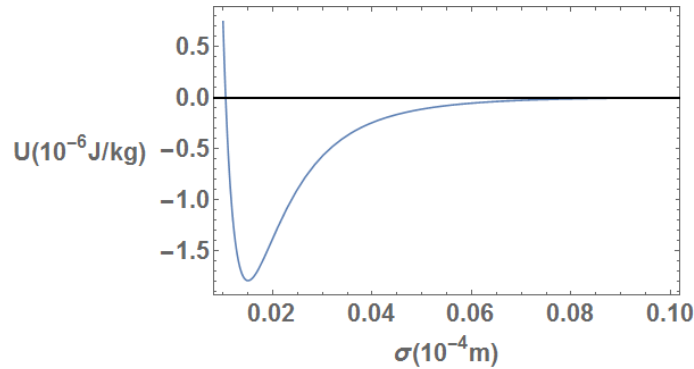


Figura 14: Potencial  $U(\sigma)$  para  $\sigma \in [0, 100\mu m]$

Fonte: Elaborada Pelo Autor

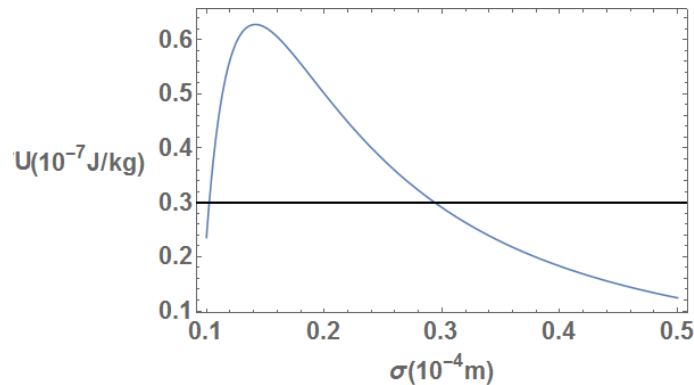


Figura 15: Potencial  $U(\sigma)$  para  $\sigma \in [100\mu m, 500\mu m]$

Fonte: Elaborada Pelo Autor

Pela análise do gráfico encontra-se dois pontos de equilíbrio,  $\sigma_{01}$  e  $\sigma_{02}$ . O primeiro sendo um ponto de equilíbrio estável (Figura 14) e o segundo um ponto de equilíbrio

instável (Figura 15), dados pelo valores:

$$\sigma_{01} = 15.03\mu m \quad (6.24)$$

e

$$\sigma_{02} = 141.57\mu m. \quad (6.25)$$

A expansão harmônica em torno de  $\sigma_{01}$  para potencial harmônico é dada por (5.10). A frequência de oscilação para esse ponto são dadas por:

$$\nu = 4.27s^{-1}. \quad (6.26)$$

Pela condição de velocidade de escape (5.11) para o ponto de equilíbrio  $\sigma_{01}$  obteve-se o valor:

$$\dot{\sigma}_{escape} = \pm 189.28\mu m/s. \quad (6.27)$$

O comportamento do comprimento característico do condensado para  $\dot{\sigma}(0) < \dot{\sigma}_{escape}$  e  $\dot{\sigma}(0) > \dot{\sigma}_{escape}$  são dados pelas seguintes figuras.

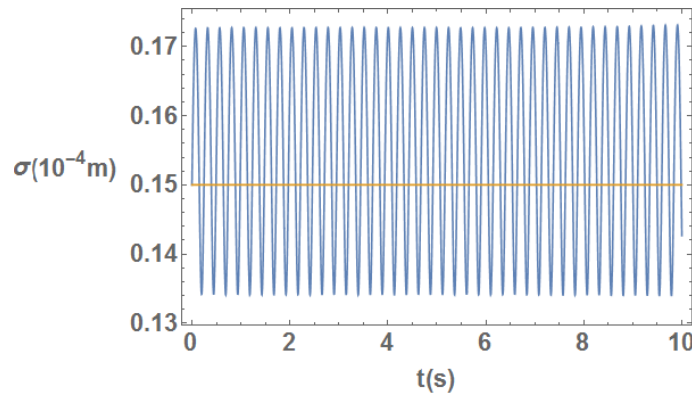


Figura 16:  $\sigma(t)$  para  $\dot{\sigma}(0) < \dot{\sigma}_{escape}$  com  $\dot{\sigma}(0) = 50\mu m/s$  em azul. Valor de  $\sigma_{01}$  em amarelo

Fonte: Elaborada Pelo Autor

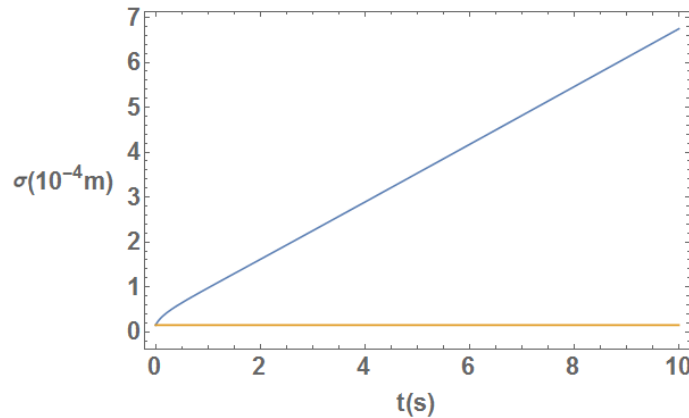


Figura 17:  $\sigma(t)$  para  $\dot{\sigma}(0) > \dot{\sigma}_{escape}$  com  $\dot{\sigma}(0) = 200\mu m/s$  em azul. Valor de  $\sigma_{01}$  em amarelo

Fonte: Elaborada Pelo Autor

Pela Figura 16, percebe-se que abaixo da velocidade de escape, o valor do comprimento característico do condensado realiza oscilações anarmônicas entorno do ponto fixo  $\sigma_{01}$ . Pela Figura 17, percebe-se que acima da velocidade de escape, o valor do comprimento característico do condensado cresce indefinidamente.

A dinâmica da estabilidade do ansatz adotado (6.1) para um potencial não-local gaussiano, na ausência de um potencial confinador externo, fica demonstrado pelo gráfico (Figura 14), pois há um ponto de equilíbrio estável. Devido ao potencial gaussiano ser de curto alcance, a estabilidade fica restrita para valores muito próximos de  $\sigma_{01}$ . Já pela (Figura 15), fica claro que para variações positivas ao redor do ponto  $\sigma_{02}$  o comprimento característico do condensado destabiliza, enquanto que para variações negativas, o comprimento característico do condensado retorna ao poço potencial.

## 6.2 Potencial gravitacional

Partindo do ansatz:

$$\Phi(\mathbf{r}, t) = A(t)r \sin(\theta) \exp - \left( \frac{r^2}{2\sigma(t)^2} + i\beta(t)r^2 \right) [\cos(\phi - wt) + ip \sin(\phi - wt)], \quad (6.28)$$

e normalizando,  $\int |\Phi|^2 d\mathbf{r} = N$ , sendo  $N$  o número de átomos, obtêm-se que a amplitude é dada por  $A(t) = (2N/\pi^{\frac{3}{2}}(1+p^2)\sigma(t)^5)^{\frac{1}{2}}$ . Então a função de onda normalizada é:

$$\begin{aligned} \Phi(\mathbf{r}, t) &= \left( \frac{2N}{\pi^{\frac{3}{2}}(1+p^2)\sigma(t)^5} \right)^{\frac{1}{2}} r \sin(\theta) \exp - \left( \frac{r^2}{2\sigma(t)^2} + i\beta(t)r^2 \right) \\ &+ [\cos(\phi - wt) + ip \sin(\phi - wt)]. \end{aligned} \quad (6.29)$$

Substituindo a função de onda normalizada acima na densidade lagrangiana (6.3) encontra-se os seguintes valores para cada termo:

$$\begin{aligned} i\hbar\Phi^* \frac{\partial\Phi}{\partial t} &= \left( \frac{i\hbar N}{\pi^{\frac{3}{2}}(1+p^2)\sigma^8} \right) r^2 \sin^2(\theta) \exp - \left( \frac{r^2}{\sigma^2} \right) [\cos(\phi - wt) - ip \sin(\phi - wt)] \\ &\quad \{2r^2 \cos(\phi - wt) + ip \sin(\phi - wt)\} \dot{\sigma} - 5\sigma^2 [\cos(\phi - wt) + ip \sin(\phi - wt)] \dot{\sigma}(t) \\ &+ 2\sigma(t)^3 (w - (-ip \cos(\phi - wt) + \sin(\phi - wt) + r^2(i \cos(\phi - wt) \\ &- p \sin(\phi - wt)\dot{\beta}(t))), \end{aligned} \quad (6.30)$$

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} |\nabla\Phi(\mathbf{r}, t)|^2 &= - \left( \frac{\hbar^2 N}{m(1+p^2)\pi^{\frac{3}{2}}\sigma^9} \right) \exp - \left( \frac{r^2}{\sigma^2} \right) \{ (1+p^2)\sigma^4 + r^4 \cos^2(\phi - wt) \sin^2(\theta) \\ &+ 2r^2\sigma^2(-1 + 2r^2\sigma^2\beta^2 \cos^2(\phi - wt) \sin^2(\theta) \\ &+ p^2r^2[r^2 - \sigma^2 + 4r^2\sigma^4\beta^2] \sin^2(\theta) \sin^2(\phi - wt) \} \end{aligned} \quad (6.31)$$

e

$$-\frac{g}{2}|\Phi(\mathbf{r}, t)|^4 = -\frac{2gN^2}{(1+p^2)^2\pi^3\sigma(t)^{10}} \exp\left(-\frac{r^2}{\sigma(t)^2}\right) r^4 \sin^4(\theta) [\cos^2(\phi - wt) + p^2 \sin^2(\phi - wt)] \quad (6.32)$$

Daqui em diante também serão omitidas as dependências em relação a posição e o tempo quando possível. Reunindo os termos (6.30), (6.31) e (6.32) em (6.3) obteve-se a densidade lagrangiana. O termo não-local, devido a sua forma, é resolvido somente na lagrangiana.

Integrando-se cada termo da densidade lagrangiana no espaço das configurações resulta nos seguintes termos :

$$\int_{-\infty}^{\infty} i\hbar\Phi^* \frac{\partial\Phi}{\partial t} d\mathbf{r} = \frac{2\hbar Npw}{1+p^2} - \frac{5}{2}\hbar N\sigma^2\dot{\beta}, \quad (6.33)$$

$$-\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\hbar^2}{2m} |\nabla\Phi(\mathbf{r}, t)|^2 d\mathbf{r} = -\frac{5\hbar^2 N}{4m\sigma(t)^2} - \frac{5\hbar^2 N\sigma^2\beta^2}{m}, \quad (6.34)$$

$$-\int_{-\infty}^{\infty} \frac{g}{2} |\Phi|^4 d\mathbf{r} = -\frac{gN^2(3+2p^2+3p^4)}{2^{\frac{9}{2}}(1+p^2)^2\pi^{\frac{3}{2}}\sigma^3} \quad (6.35)$$

e

$$-\int_{-\infty}^{\infty} \frac{|\Phi(\mathbf{r}, t)|^2}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \Phi^*(\mathbf{r}', t)V(|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|)\Phi(\mathbf{r}', t) d\mathbf{r}' d\mathbf{r} = \frac{N^2(1+p)(49+43p)u}{120(1+p^2)^2(2\pi)^{\frac{1}{2}}\sigma}. \quad (6.36)$$

O termo não-local é resolvido expandindo  $|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|^{-1}$  em harmônicos esféricos.

Agrupando os termos (6.33), (6.34), (6.35) e (6.36) encontrou-se a lagrangiana  $L = L(\sigma, \dot{\sigma}, \beta, \dot{\beta})$ , dada por:

$$L = \frac{2\hbar Npw}{1+p^2} + \frac{5}{2}\hbar N\sigma^2\dot{\beta} - \frac{5\hbar^2 N}{4m\sigma^2} - \frac{5\hbar^2 N\sigma^2\beta^2}{m} - \frac{gN^2(3+2p^2+3p^4)}{2^{\frac{9}{2}}(1+p^2)^2\pi^{\frac{3}{2}}\sigma^3} + \frac{N^2(1+p)(49+43p)u}{120(1+p^2)^2(2\pi)^{\frac{1}{2}}\sigma}. \quad (6.37)$$

Nota-se que na lagrangiana todos os termos dispersivos são acompanhados do sinal negativo, somente o termo não-local, atrativo, contribui com a parte positiva. Obtida a lagrangiana, o próximo passo é obter as equações de movimento para cada parâmetro,  $q_j = \{\sigma, \beta\}$ . Desta forma, aplicando a equação de Euler-Lagrange para cada parâmetro resulta nas seguintes equações:

$$\frac{2\hbar\sigma^2\beta}{m} = -\sigma\dot{\sigma} \quad (6.38)$$

e

$$45(2)^{\frac{1}{2}}gmN(3+2p^2+3p^4) - (2)^{\frac{3}{2}}mN(1+p)(49+43p)\pi u\sigma(t)^2 - 1200(1+p^2)^2\pi^{\frac{3}{2}}\sigma(t)[- \hbar + 2\sigma^4(2\hbar\beta^2 - m\dot{\beta})] = 0. \quad (6.39)$$

Voltando em (6.38), resolvendo têm-se:

$$\beta(t) = -\frac{m\dot{\sigma}(t)}{2\hbar\sigma(t)} \quad (6.40)$$

e sua respectiva derivada temporal, necessária para obter a equação do comprimento característico do condensado,

$$\dot{\beta}(t) = \frac{m\dot{\sigma}(t)^2}{2\hbar\sigma(t)^2} - \frac{m\ddot{\sigma}(t)}{2\hbar\sigma(t)}. \quad (6.41)$$

Pela expressão (6.38) observa-se que o parâmetro  $\beta(t)$  é a curvatura de  $\sigma(t)$  no espaço dos momentos, ou seja, a dinâmica de  $\sigma(t)$  pode ser interpretada como uma "partícula" de massa  $m$  com velocidade  $\dot{\sigma}(t)$ .

Substituindo (6.41) em (6.38) resulta na equação diferencial de  $\sigma(t)$  dada por:

$$\ddot{\sigma} - \frac{2^{\frac{1}{2}}3gN(3 + 2p^2 + 3p^4)}{80m(1 + p^2)^2\pi^{\frac{3}{2}}\sigma^4} - \frac{2\hbar^2}{m^2\sigma^3} + \frac{2^{\frac{1}{2}}Nu(49 + 92p + 43p^2)}{600m(1 + p^2)^2\pi^{\frac{1}{2}}\sigma^2} = 0 \quad (6.42)$$

Nota-se que a equação diferencial que descreve o tamanho do condensado é independente da frequência de oscilação. Porém dependente tanto do número de partículas quanto da constante do gravitacional, ou seja, o tamanho do condensado sobre ação do efeito não-linear e não-local.

Reescrevendo a equação diferencial (6.42) na forma  $\ddot{\sigma}(t) = F(\sigma)$ , em que:

$$F(\sigma) = \frac{2^{\frac{1}{2}}3gN(3 + 2p^2 + 3p^4)}{80m(1 + p^2)^2\pi^{\frac{3}{2}}\sigma^4} + \frac{\hbar^2}{m^2\sigma^3} - \frac{2^{\frac{1}{2}}Nu(49 + 92p + 43p^2)}{600m(1 + p^2)^2\pi^{\frac{1}{2}}\sigma^2}. \quad (6.43)$$

Como dito acima, pode-se interpretar a dinâmica de  $\sigma(t)$  como a evolução do comprimento característico do condensado em termos da dinâmica de uma partícula clássica nas coordenadas  $(\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ , foi suposto uma isotropia no comprimento característico do condensado, sujeito ao potencial:

$$U(\sigma) = \frac{2^{\frac{1}{2}}gN(3 + 2p^2 + 3p^4)}{80m(1 + p^2)^2\pi^{\frac{3}{2}}\sigma^3} + \frac{\hbar^2}{2m^2\sigma(t)^2} - \frac{2^{\frac{1}{2}}Nu(49 + 92p + 43p^2)}{600m(1 + p^2)^2\pi^{\frac{1}{2}}\sigma}. \quad (6.44)$$

Para gerar o gráfico dessa função adota-se os seguintes valores:  $m = 3.8 \cdot 10^{-26}kg$ ,  $N = 10000$ ,  $a = 3nm$ ,  $u = 2 \cdot 10^{-13}eVnm$ . Para esses valores o potencial tem a forma, para  $p = 0$  e  $p = 1$  respectivamente:

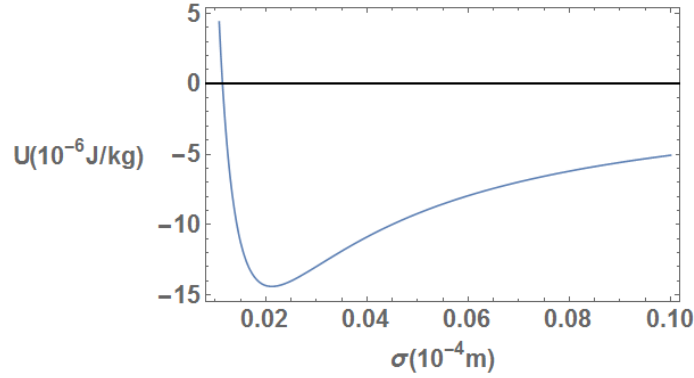


Figura 18: Potencial  $U(\sigma)$  para  $\sigma \in [0, 100\mu m]$  para  $p = 0$

Fonte: Elaborada Pelo Autor

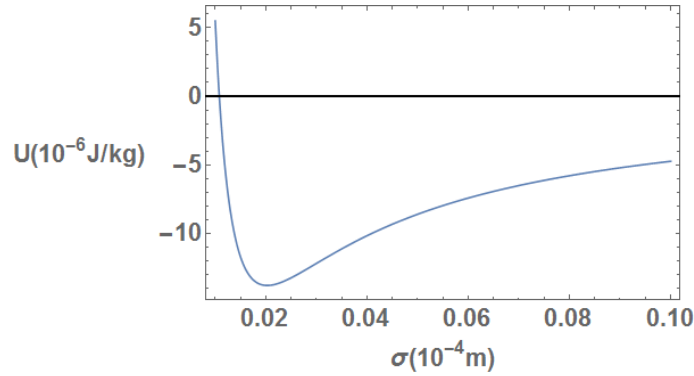


Figura 19: Potencial  $U(\sigma)$  para  $\sigma \in [0, 100\mu m]$  para  $p = 1$

Fonte: Elaborada Pelo Autor

Pela análise dos gráficos encontra-se um ponto de equilíbrio,  $\sigma_{01}$ , para cada valor de  $p$ . Esses pontos são de equilíbrio estável (Figuras 18 e 19). Pela análise do gráfico determinou-se que os pontos de equilíbrio são dados pelo valores, para  $p = 0$  e  $p = 1$  respectivamente:

$$\sigma_{01} = 21.19\mu m \quad (6.45)$$

e

$$\sigma_{01} = 20.27\mu m. \quad (6.46)$$

A expansão harmônica em torno de  $\sigma_0$  para potencial harmônico é dada por (5.10). As frequências de oscilação são dadas por, para  $p = 0$  e  $p = 1$  respectivamente:

$$\nu = 1.40s^{-1} \quad (6.47)$$

e

$$\nu = 1.40s^{-1}. \quad (6.48)$$

Pela condição de velocidade de escape (5.11) encontrou-se, para  $p = 0$  e  $p = 1$  respectivamente:

$$\dot{\sigma}_{escape} = \pm 169.70\mu m/s \quad (6.49)$$

e

$$\dot{\sigma}_{escape} = \pm 166.21 \mu m/s. \quad (6.50)$$

O comportamento do comprimento característico do condensado para  $\dot{\sigma}(t) < \dot{\sigma}_{escape}$  e  $\dot{\sigma}(t) > \dot{\sigma}_{escape}$  é, para  $p = 0$  e  $p = 1$ :

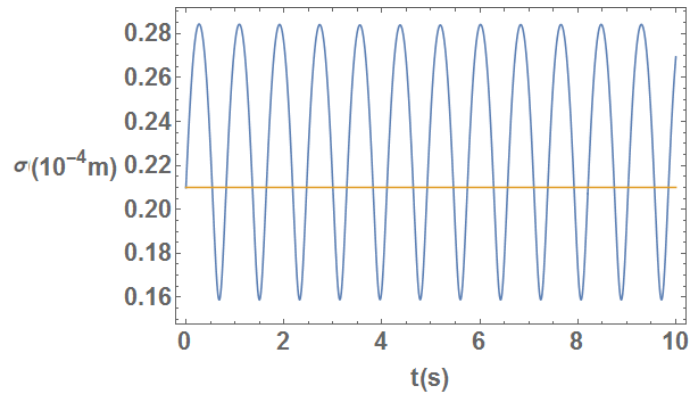


Figura 20:  $\sigma(t)$  para  $\dot{\sigma}(0) < \dot{\sigma}_{escape}$  com  $\dot{\sigma}(0) = 50 \mu m/s$  para  $p = 0$  em azul. Valor de  $\sigma_{01}$  em amarelo

Fonte: Elaborada Pelo Autor

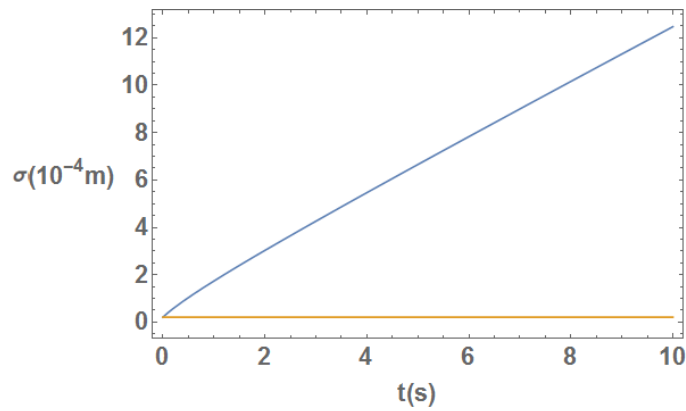


Figura 21:  $\sigma(t)$  para  $\dot{\sigma}(0) > \dot{\sigma}_{escape}$  com  $\dot{\sigma}(t) = 200 \mu m/s$  para  $p = 0$  em azul. Valor de  $\sigma_{01}$  em amarelo

Fonte: Elaborada Pelo Autor



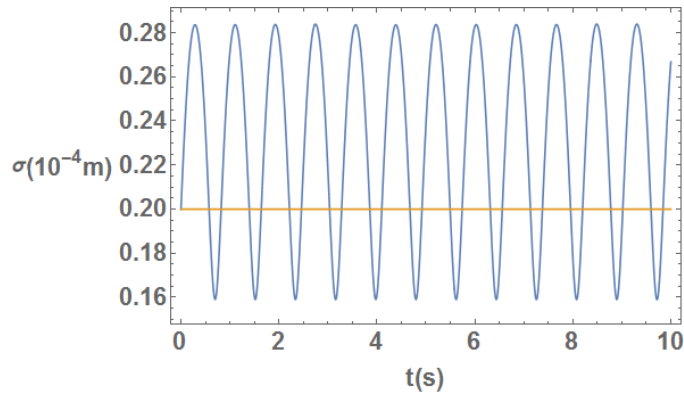


Figura 22:  $\sigma(t)$  para  $\dot{\sigma}(0) < \dot{\sigma}_{escape}$  com  $\dot{\sigma}(0) = 50\mu m/s$  para  $p=1$ . Valor de  $\sigma_{01}$  em amarelo

Fonte: Elaborada Pelo Autor

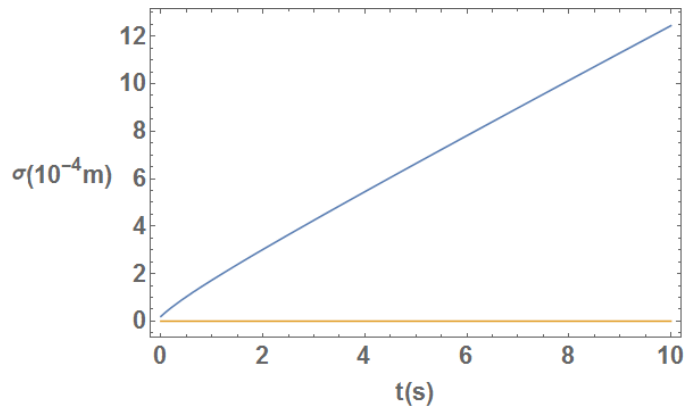


Figura 23:  $\sigma(t)$  para  $\dot{\sigma}(t) > \dot{\sigma}_{escape}$  com  $\dot{\sigma}(0) = 200\mu m/s$  para  $p = 1$ . Valor de  $\sigma_{01}$  em amarelo

Fonte: Elaborada Pelo Autor

Pelas Figuras 20 e 22, percebe-se que abaixo da velocidade de escape, o valor do comprimento característico do condensado realiza oscilações anarmônicas entorno do ponto fixo  $\sigma_{01}$ . Pelas Figuras 21 e 23, percebe-se que acima da velocidade de escape, o valor do comprimento característico do condensado cresce indefinidamente.

A dinâmica da estabilidade do ansatz adotado (6.1) para um potencial não-local gravitacional fica demonstrada pelos gráficos mostrados nas Figuras 18 e 19, pois há um ponto de equilíbrio estável.

Por fim, comparando os resultados para cada caso pode-se concluir que: pelos parâmetros comuns,  $\beta(t)$  apresenta a mesma dinâmica, mesmo para ansatz diferentes, (6.19) e (6.42), já a dinâmica do comprimento característico do condensado difere significadamente para cada caso, (6.40)(6.42). Comparando os potenciais, observa-se que o potencial que descreve a dinâmica de  $\sigma(t)$  para uma interação de longo alcance do tipo gaussiana é mais estreito e apresenta um ponto de equilíbrio estável e outro instável. Já aquele gerado

por uma interação de longo alcance gravitacional possui um alcance maior e apresenta somente um ponto de equilíbrio estável. Uma vez que o potencial para interação gaussiana é mais estreito, o tamanho de BECs para o segundo potencial (6.45) e (6.46) é maior em comparação que o primeiro (6.25). Além disso, a frequência de oscilação para uma aproximação harmônica em torno de  $\sigma_{01}$  para o potencial gaussiano (6.26) é maior do que para o gravitacional (6.47)(6.48). Sendo assim, perturbações no entorno do ponto de equilíbrio para o potencial gravitacional são mais estáveis Figuras 18 e 19.

## 7 Conclusão

Nessa dissertação foi apresentado um estudo de interações não-locais em condensados de Bose-Einstein. Para isso, buscou-se soluções aproximadas por meio do método variacional em interações de longa distância na forma gaussiana e gravitacional. Partindo dos ansatz adotados, foram obtidas as equações de movimento para os parâmetros e estudada a estabilidade dos pontos fixos.

Com a intenção de dar uma boa base teórica para o formalismo que seguiria, essa dissertação apresentou uma evolução dos modelos teóricos para a explicação da dinâmica do condensado de Bose-Einstein. No segundo capítulo, o qual se inicia a dissertação, foi apresentado o formalismo de gás ideal quântico para bósons e foi definido o que são condensados de Bose-Einstein. Para o tratamento de BECs como gás ideal, foi definida a temperatura crítica,  $T_c$ , pois para temperaturas abaixo dessa, inicia-se a ocupação macroscópica do estado fundamental de energia, iniciando, assim, a transição de fase desejada. Juntamente a isso, foram encontradas as temperaturas críticas e fração de partículas que ocupam o estado de BEC para os casos de partícula livre e confinamento harmônico externo, na ausência de interação interatômica.

No terceiro capítulo, foi adicionado o primeiro termo de interação entre átomos, termo de colisões binárias, foi demonstrado como encontrar um potencial efetivo de colisões no limite de baixas energias. Em sequência, foi obtida a equação que descreve condensados com essa interação, equação de Gross-Pitaevskii, a qual é do tipo Schrödinger não linear. Foi também apresentado seu regime estacionário juntamente com a discussão da aproximação de Thomas-Fermi. Esta aproximação descreve bem condensados repulsivos estacionários quando sujeitos a alta interação. Ainda foi apresentado o colapso da função de onda para condensados atrativos. Como estudo de soluções para equação dependente do tempo, foram apresentadas as soluções do tipo sólitons, sendo eles: escuros, cinzas ( $a > 0$ ) e claros ( $a < 0$ ). No quarto capítulo, foi apresentado o método variacional dependente do tempo e encontrada a equação de Euler-Lagrange para um sistema contínuo. Além disso, foi dado exemplos de sua aplicação na equação de Gross-Pitaevskii.

No quinto capítulo foram apresentadas as motivações e o objetivo dessa dissertação. Também, foi apresentado o sistema adotado, juntamente com os potenciais que seriam estudados, e a equação que descreve a sua dinâmica, equação de Gross-Pitaevskii não-local dependente do tempo, assim como o detalhamento do processo para obter os resultados desejados.

Por fim, no sexto capítulo, foi apresentado todo o desenvolvimento dos resultados obtidos. Sendo eles: as equações de movimento para cada parâmetro, os pontos de equilíbrio,

as velocidades de escape, estabilidade dos pontos fixos e a frequência de oscilação no entorno do ponto fixo para um aproximação harmônica. Juntamente a isso, foi observado que para uma interação de longo alcance da forma gaussiana as soluções para o comprimento característico possuem tanto uma solução de ponto de equilíbrio estável quanto uma solução de ponto de equilíbrio instável. Já para uma interação de longo alcance da forma gravitacional foi somente obtida uma solução de ponto de equilíbrio estável. Também, foi possível observar que as oscilações no entorno do ponto de equilíbrio estável para uma interação gaussiana ficam sujeito a um poço potencial mais estreito do que aquela gerado pela interação gravitacional. Por meio da condição de velocidade de escape, foi observada que, para os dois potenciais adotados, a dinâmica para o comprimento característico se comportam da mesma maneira, tanto para uma condição inicial abaixo da velocidade de escape quanto para uma condição inicial acima da velocidade de escape. Com base nos resultados obtidos, ficou demonstrada a existência de pontos de equilíbrio estável para a função de onda do condensado na presença de um potencial de longo alcance e na ausência de um confinamento externo.

## Referências

- [1] BOSE, S. N. Plancks gesetz und lichtquantenhypothese. *Z. Phys*, Springer, v. 26, n. 3, p. 178, 1924. Citado na página 8.
- [2] EINSTEIN, A. Geometrie und erfahrung. *Albert Einstein: Akademie-Vorträge: Sitzungsberichte der Preußischen Akademie der Wissenschaften 1914-1932*, Wiley Online Library, p. 188–196, 1991. Citado na página 8.
- [3] ANDERSON, M. H. et al. Observation of Bose-Einstein condensation in a dilute atomic vapor. *Science*, American Association for the Advancement of Science, v. 269, n. 5221, p. 198–201, 1995. Citado na página 8.
- [4] DAVIS, K. B. et al. Bose-Einstein condensation in a gas of sodium atoms. *Physical Review Letters*, APS, v. 75, n. 22, p. 3969, 1995. Citado na página 8.
- [5] BRADLEY, C. C. et al. Evidence of Bose-Einstein condensation in an atomic gas with attractive interactions. *Physical Review Letters*, APS, v. 75, n. 9, p. 1687, 1995. Citado 2 vezes nas páginas 8 e 9.
- [6] PETHICK, C. J.; SMITH, H. *Bose-Einstein condensation in dilute gases*. [S.l.]: Cambridge University Press, 2002. Citado 10 vezes nas páginas 8, 9, 11, 12, 19, 22, 30, 32, 33 e 34.
- [7] MIESNER, H.-J. et al. Bosonic stimulation in the formation of a Bose-Einstein condensate. *Science*, American Association for the Advancement of Science, v. 279, n. 5353, p. 1005–1007, 1998. Citado na página 9.
- [8] MEWES, M.-O. et al. Collective excitations of a Bose-Einstein condensate in a magnetic trap. *Physical Review Letters*, APS, v. 77, n. 6, p. 988, 1996. Citado na página 9.
- [9] INGUSCIO, M.; STRINGARI, S.; WIEMAN, C. *Bose-Einstein condensation in atomic gases*. [S.l.]: IOS Press, 1999. v. 140. Citado na página 9.
- [10] GROSS, E. P. Structure of a quantized vortex in boson systems. *Il Nuovo Cimento (1955-1965)*, Springer, v. 20, n. 3, p. 454–477, 1961. Citado 3 vezes nas páginas 9, 19 e 24.
- [11] PITAEVSKII, L. Vortex lines in an imperfect Bose gas. *Sov. Phys. JETP*, v. 13, n. 2, p. 451–454, 1961. Citado 3 vezes nas páginas 9, 19 e 24.
- [12] PARKINS, A. S.; WALLS, D. F. The physics of trapped dilute-gas Bose-Einstein condensates. *Physics Reports*, Elsevier, v. 303, n. 1, p. 1–80, 1998. Citado na página 10.
- [13] RUPRECHT, P. et al. Time-dependent solution of the nonlinear Schrödinger equation for bose-condensed trapped neutral atoms. *Physical Review A*, APS, v. 51, n. 6, p. 4704, 1995. Citado 2 vezes nas páginas 10 e 27.
- [14] DALFOVO, F.; STRINGARI, S. Bosons in anisotropic traps: Ground state and vortices. *Physical Review A*, APS, v. 53, n. 4, p. 2477, 1996. Citado 2 vezes nas páginas 10 e 27.

- [15] HOUBIERS, M.; STOOF, H. Stability of bose condensed atomic li 7. *Physical Review A*, APS, v. 54, n. 6, p. 5055, 1996. Citado 2 vezes nas páginas 10 e 27.
- [16] RYBIN, A. et al. Similarity solutions and collapse in the attractive gross-pitaevskii equation. *Physical Review E*, APS, v. 62, n. 5, p. 6224, 2000. Citado 2 vezes nas páginas 10 e 27.
- [17] SULEM, C.; SULEM, P.-L. *The nonlinear Schrödinger equation: self-focusing and wave collapse*. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2007. v. 139. Citado 2 vezes nas páginas 10 e 27.
- [18] TURITSYN, S. K. Spatial dispersion of nonlinearity and stability of multidimensional solitons. *Theoretical and Mathematical Physics*, Springer, v. 64, n. 2, p. 797–801, 1985. Citado 2 vezes nas páginas 10 e 47.
- [19] MAUCHER, F. et al. Rotating three-dimensional solitons in Bose-Einstein condensates with gravitylike attractive nonlocal interaction. *Physical Review A*, APS, v. 81, n. 6, p. 063617, 2010. Citado 5 vezes nas páginas 10, 11, 48, 50 e 52.
- [20] YAKIMENKO, A. I.; ZALIZNYAK, Y. A.; KIVSHAR, Y. Stable vortex solitons in nonlocal self-focusing nonlinear media. *Physical Review E*, APS, v. 71, n. 6, p. 065603, 2005. Citado na página 10.
- [21] BRIEDIS, D. et al. Ring vortex solitons in nonlocal nonlinear media. *Optics Express*, Optical Society of America, v. 13, n. 2, p. 435–443, 2005. Citado na página 10.
- [22] LASHKIN, V. Two-dimensional nonlocal vortices, multipole solitons, and rotating multisolitons in dipolar Bose-Einstein condensates. *Physical Review A*, APS, v. 75, n. 4, p. 043607, 2007. Citado 2 vezes nas páginas 10 e 47.
- [23] LOPEZ-AGUAYO, S. et al. Stable rotating dipole solitons in nonlocal optical media. *Optics Letters*, Optical Society of America, v. 31, n. 8, p. 1100–1102, 2006. Citado 3 vezes nas páginas 10, 11 e 47.
- [24] SKUPIN, S. et al. Stability of two-dimensional spatial solitons in nonlocal nonlinear media. *Physical Review E*, APS, v. 73, n. 6, p. 066603, 2006. Citado 2 vezes nas páginas 10 e 50.
- [25] CONTI, C.; PECCIANI, M.; ASSANTO, G. Observation of optical spatial solitons in a highly nonlocal medium. *Physical Review Letters*, APS, v. 92, n. 11, p. 113902, 2004. Citado na página 10.
- [26] ROTSCCHILD, C. et al. Solitons in nonlinear media with an infinite range of nonlocality: first observation of coherent elliptic solitons and of vortex-ring solitons. *Physical Review Letters*, APS, v. 95, n. 21, p. 213904, 2005. Citado na página 10.
- [27] MAUCHER, F. et al. Rydberg-induced solitons: three-dimensional self-trapping of matter waves. *Physical Review Letters*, APS, v. 106, n. 17, p. 170401, 2011. Citado na página 11.
- [28] KROLIKOWSKI, W. et al. Modulational instability, solitons and beam propagation in spatially nonlocal nonlinear media. *Journal of optics B: Quantum and Semiclassical Optics*, IOP Publishing, v. 6, n. 5, p. S288, 2004. Citado 2 vezes nas páginas 11 e 47.

- [29] MAUCHER, F. et al. Quasiperiodic oscillations and homoclinic orbits in the nonlinear nonlocal Schrödinger equation. *New Journal of Physics*, IOP Publishing, v. 15, n. 8, p. 083055, 2013. Citado 2 vezes nas páginas 11 e 47.
- [30] SCHÜTTE, M. *Bose-Einstein condensates with long-range interactions*. Tese (Doutorado) — Freie Universität Berlin, 2007. Citado 5 vezes nas páginas 11, 47, 48, 52 e 54.
- [31] GIOVANAZZI, S. et al. Collective excitations of a "gravitationally" self-bound Bose gas. *EPL (Europhysics Letters)*, IOP Publishing, v. 56, n. 1, p. 1, 2001. Citado 2 vezes nas páginas 11 e 48.
- [32] SALINAS, S. R. A. *Introdução à Física Estatística*. 2nd. ed. São Paulo: Editora da Universidade de São Paulo, 2005. Citado 3 vezes nas páginas 11, 12 e 14.
- [33] PATHRIA, R. K. *Statistical Mechanics*. 2nd. ed. Oxford: Butterworth-Heinemann, 1996. Citado na página 11.
- [34] HAAS, F. Anisotropic Bose-Einstein condensates and completely integrable dynamical systems. *Physical Review A*, APS, v. 65, n. 3, p. 033603, 2002. Citado 2 vezes nas páginas 11 e 35.
- [35] MENDONÇA, J. T.; TERÇAS, H. *Physics of Ultra-Cold Matter: Atomic Clouds, Bose-Einstein Condensates and Rydberg Plasmas*. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2012. v. 70. Citado 6 vezes nas páginas 11, 12, 19, 24, 26 e 32.
- [36] PEREZ-GARCIA, V. M. et al. Dynamics of Bose-Einstein condensates: Variational solutions of the Gross-Pitaevskii equations. *Physical Review A*, APS, v. 56, n. 2, p. 1424, 1997. Citado 5 vezes nas páginas 11, 35, 37, 42 e 46.
- [37] MANFREDI, G.; HERVIEUX, P.-A.; HAAS, F. Variational approach to the time-dependent Schrödinger Newton equations. *Classical and Quantum Gravity*, IOP Publishing, v. 30, n. 7, p. 075006, 2013. Citado 2 vezes nas páginas 11 e 35.
- [38] PEREZ-GARCIA, V. M. et al. Low energy excitations of a Bose-Einstein condensate: A time-dependent variational analysis. *Physical Review Letters*, APS, v. 77, n. 27, p. 5320, 1996. Citado 5 vezes nas páginas 11, 35, 42, 46 e 50.
- [39] SALASNICH, L.; PAROLA, A.; REATTO, L. Effective wave equations for the dynamics of cigar-shaped and disk-shaped Bose condensates. *Physical Review A*, APS, v. 65, n. 4, p. 043614, 2002. Citado 7 vezes nas páginas 11, 29, 35, 37, 38, 41 e 42.
- [40] SALASNICH, L. Generalized nonpolynomial Schrödinger equations for matter waves under anisotropic transverse confinement. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, IOP Publishing, v. 42, n. 33, p. 335205, 2009. Citado 6 vezes nas páginas 11, 35, 37, 38, 39 e 40.
- [41] ROBERTS, J. L. et al. Controlled collapse of a bose-einstein condensate. *Physical Review Letters*, APS, v. 86, n. 19, p. 4211, 2001. Citado 2 vezes nas páginas 22 e 27.
- [42] DALFOVO, F.; PITAEVSKII, L.; STRINGARI, S. The condensate wave function of a trapped atomic gas. *National Institute of Standards and Technology, Journal of Research*, v. 101, n. 4, p. 537–544, 1996. Citado 2 vezes nas páginas 23 e 26.

- [43] RYBIN, A. et al. Singularity formation in the Gross-Pitaevskii equation and collapse in BEC. *arXiv preprint cond-mat/0208111*, 2002. Citado 2 vezes nas páginas 27 e 47.
- [44] DALFOVO, F. et al. Theory of bose-einstein condensation in trapped gases. *Reviews of Modern Physics*, APS, v. 71, n. 3, p. 463, 1999. Citado na página 27.
- [45] RUSSELL, J. Report on waves, 14th meeting of the british association for the advancement of science. London. Citado na página 28.
- [46] EMPLIT J.P. HAIMADE, F. R. C. F. A. B. P. 14th meeting of the british association for the advancement of science. *Opt. Commun*, v. 62, n. 29, 1987. Citado na página 28.
- [47] KRÖKEL, D. et al. Dark-pulse propagation in optical fibers. *Physical Review Letters*, APS, v. 60, n. 1, p. 29, 1988. Citado na página 28.
- [48] ALLAN, G. et al. Observation of fundamental dark spatial solitons in semiconductors using picosecond pulses. *Optics Letters*, Optical Society of America, v. 16, n. 3, p. 156–158, 1991. Citado na página 28.
- [49] DENARDO, B. et al. Observations of localized structures in nonlinear lattices: domain walls and kinks. *Physical review letters*, APS, v. 68, n. 11, p. 1730, 1992. Citado na página 28.
- [50] TSUZUKI, T. Nonlinear waves in the Pitaevskii-Gross equation. *Journal of Low Temperature Physics*, Springer, v. 4, n. 4, p. 441–457, 1971. Citado na página 28.
- [51] FRANTZESKAKIS, D. Dark solitons in atomic Bose–Einstein condensates: from theory to experiments. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, IOP Publishing, v. 43, n. 21, p. 213001, 2010. Citado 2 vezes nas páginas 28 e 32.
- [52] SMAIRA, A. de F. *Dinâmica de um condensado de Bose-Einstein contendo sólitons*. Dissertação (Mestrado) — USP, São Carlos, 2015. Citado na página 28.
- [53] KIVSHAR, Y. S.; AGRAWAL, G. *Optical solitons: from fibers to photonic crystals*. [S.l.]: Academic press, 2003. Citado 2 vezes nas páginas 28 e 31.
- [54] WANG, S.-J. et al. Dark and bright solitons in a quasi-one-dimensional Bose-Einstein condensate. *Physical Review A*, APS, v. 68, n. 1, p. 015601, 2003. Citado 2 vezes nas páginas 28 e 31.
- [55] MÁRQUEZ, E. E. C. *Bright solitons in a quasi-one-dimensional dipolar Bose-Einstein condensate*. Dissertação (Mestrado) — Unesp, São Paulo, 2014. Citado 3 vezes nas páginas 28, 31 e 32.
- [56] DUTTON, Z. et al. Observation of quantum shock waves created with ultra-compressed slow light pulses in a Bose-Einstein condensate. *Science*, American Association for the Advancement of Science, v. 293, n. 5530, p. 663–668, 2001. Citado na página 28.
- [57] ANDERSON, B. P. et al. Watching dark solitons decay into vortex rings in a Bose-Einstein condensate. *Physical Review Letters*, APS, v. 86, n. 14, p. 2926, 2001. Citado na página 28.



- [58] BONGS, K. et al. Coherent manipulation and guiding of Bose-Einstein condensates by optical dipole potentials. *Comptes Rendus de l'Académie des Sciences-Series IV-Physics*, Elsevier, v. 2, n. 4, p. 671–680, 2001. Citado na página 28.
- [59] STRECKER, K. E. et al. Formation and propagation of matter-wave soliton trains. *Nature*, Nature Publishing Group, v. 417, n. 6885, p. 150–153, 2002. Citado na página 28.
- [60] KHAYKOVICH, L. et al. Formation of a matter-wave bright soliton. *Science*, American Association for the Advancement of Science, v. 296, n. 5571, p. 1290–1293, 2002. Citado na página 28.
- [61] CORNISH, S. L.; THOMPSON, S. T.; WIEMAN, C. E. Formation of bright matter-wave solitons during the collapse of attractive Bose-Einstein condensates. *Physical Review Letters*, APS, v. 96, n. 17, p. 170401, 2006. Citado na página 28.
- [62] PÉREZ-GARCÍA, V. M.; MICHINEL, H.; HERRERO, H. Bose-Einstein solitons in highly asymmetric traps. *Physical Review A*, APS, v. 57, n. 5, p. 3837, 1998. Citado na página 29.
- [63] LEMOS, N. A. *Mecânica analítica*. [S.l.]: Editora Livraria da Física, 2007. Citado 2 vezes nas páginas 30 e 35.
- [64] TIKHONENKO, V. et al. Observation of vortex solitons created by the instability of dark soliton stripes. *Optics Letters*, Optical Society of America, v. 21, n. 15, p. 1129–1131, 1996. Citado na página 34.
- [65] ZAKHAROV, V.; RUBENCHIK, A. Instability of waveguides and solitons in nonlinear media. *Zh. Eksp. Teor. Fiz*, v. 65, p. 997–1011, 1973. Citado na página 34.
- [66] HURST, J. et al. High-harmonic generation by nonlinear resonant excitation of surface plasmon modes in metallic nanoparticles. *Physical Review B*, APS, v. 89, n. 16, p. 161111, 2014. Citado 2 vezes nas páginas 35 e 50.
- [67] MANFREDI, G.; HERVIEUX, P.-A.; HAAS, F. Nonlinear dynamics of electron–positron clusters. *New Journal of Physics*, IOP Publishing, v. 14, n. 7, p. 075012, 2012. Citado na página 35.
- [68] HAAS, F. et al. Breather mode in the many-electron dynamics of semiconductor quantum wells. *Physical Review B*, APS, v. 80, n. 7, p. 073301, 2009. Citado na página 35.
- [69] HAAS, F. Variational method for the three-dimensional many-electron dynamics of semiconductor quantum wells. *Plasma Physics*, 2012. Citado na página 35.
- [70] HAAS, F. Variational approach for the quantum Zakharov system. *Physics of Plasmas*, AIP Publishing, v. 14, n. 4, p. 042309, 2007. Citado na página 35.
- [71] HAAS, F.; SHUKLA, P. K. Quantum and classical dynamics of Langmuir wave packets. *Physical Review E*, APS, v. 79, n. 6, p. 066402, 2009. Citado na página 35.
- [72] SALASNICH, L. Time-dependent variational approach to Bose-Einstein condensation. *International Journal of Modern Physics B*, World Scientific, v. 14, n. 01, p. 1–11, 2000. Citado na página 35.

- [73] JACKSON, A.; KAVOULAKIS, G.; PETHICK, C. J. Solitary waves in clouds of Bose-Einstein condensed atoms. *Physical Review A*, APS, v. 58, n. 3, p. 2417, 1998. Citado na página 38.
- [74] GARCÍA-RIPOLL, J. J.; PÉREZ-GARCÍA, V. M.; VEKSLERCHIK, V. Construction of exact solutions by spatial translations in inhomogeneous nonlinear Schrödinger equations. *Physical Review E*, APS, v. 64, n. 5, p. 056602, 2001. Citado na página 43.
- [75] ABLOWITZ, M.; BAKIRTAS, I.; ILAN, B. On a class of nonlocal nonlinear Schrödinger equations and wave collapse. *The European Physical Journal Special Topics*, Springer, v. 147, n. 1, p. 343–362, 2007. Citado na página 47.
- [76] VLASOV, S.; PISKUNOVA, L.; TALANOV, V. Three-dimensional wave collapse in the nonlinear Schrödinger equation model. *Zh. Eksp. Teor. Fiz*, v. 95, p. 1945, 1989. Citado na página 47.
- [77] JIA, J.; LIN, J. Solitons in nonlocal nonlinear kerr media with exponential response function. *Optics Express*, Optical Society of America, v. 20, n. 7, p. 7469–7479, 2012. Citado na página 47.
- [78] BANG, O. et al. Collapse arrest and soliton stabilization in nonlocal nonlinear media. *Physical Review E*, APS, v. 66, n. 4, p. 046619, 2002. Citado na página 47.
- [79] UMAROV, B. et al. Scattering of a two-soliton molecule by Gaussian potentials in dipolar Bose-Einstein condensates. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, IOP Publishing, v. 49, n. 12, p. 125307, 2016. Citado na página 47.
- [80] BUCCOLIERO, D.; DESYATNIKOV, A. S. Quasi-periodic transformations of nonlocal spatial solitons. *Optics Express*, Optical Society of America, v. 17, n. 12, p. 9608–9613, 2009. Citado na página 47.
- [81] O'DELL, D. et al. *Bose condensates with 1/r Interatomic Attraction*. [S.l.], 1999. Citado 3 vezes nas páginas 48, 52 e 54.
- [82] O'DELL, D. et al. Bose-Einstein condensates with 1/r interatomic attraction: Electromagnetically induced “gravity”. *Physical Review Letters*, APS, v. 84, n. 25, p. 5687, 2000. Citado 3 vezes nas páginas 48, 50 e 54.
- [83] MAUCHER, F.; SKUPIN, S.; KROLIKOWSKI, W. Collapse in the nonlocal nonlinear Schrödinger equation. *Nonlinearity*, IOP Publishing, v. 24, n. 7, p. 1987, 2011. Citado na página 48.
- [84] ANGLIN, J. Theoretical physics: Why trapped atoms are attractive. *Nature*, Nature Publishing Group, v. 406, n. 6791, p. 29–30, 2000. Citado na página 48.