

UNIVERSIDADE FEDERAL DE MATO GROSSO DO SUL

ESTUDO TEÓRICO DE GASES QUÂNTICOS DILUÍDOS ULTRAFRIOS
APRISIONADOS POR REDES ÓPTICAS QUASE PERIÓDICAS

RENAN PEREIRA PAES

CAMPO GRANDE, MS

2018

RENAN PEREIRA PAES

ESTUDO TEÓRICO DE GASES QUÂNTICOS DILUÍDOS ULTRAFRIOS
APRISIONADOS POR REDES ÓPTICAS QUASE PERIÓDICAS

*Dissertação apresentada à
Universidade Federal de Mato
Grosso do Sul, como parte das
exigências do Programa de Pós-
Graduação em Ciência dos
Materiais, área de concentração
em Física e Química dos
Materiais, para a obtenção do
título de Mestre.*

Orientador

Professor Dr. João Vitor Batista Ferreira

Coorientador

Professor Dr. Valter Aragão do Nascimento

CAMPO GRANDE, MS

2018

“Todo aquele que se sente capaz de criar um destino, com o seu talento e com o seu esforço, está inclinado a admirar o esforço e o talento nos demais; o desejo da própria glória não pode sentir-se coagido pelo legítimo enaltecimento alheio. Aquele que tem méritos sabe o que eles custam, e os respeita; estima, nos outros, o que desejaria que os outros estimassem nele. O medíocre ignora esta admiração franca: muitas vezes se resigna a aceitar o triunfo que ultrapassa as restrições da sua inveja. Mas aceitar não é amar, resignar-se não é admirar.”

José Ingenieros

AGRADECIMENTOS

Agradeço primeiramente a Deus, porque Nele vivemos, nos movemos e somos.

À minha mãe, Josélia Pereira Silva; ao meu pai, Edevaldo Paes da Silva; e à minha irmã, Ariane Pereira Paes Fernandes.

Aos meus amigos, Anderson Marques, Mauro Matias, Nathan Alves, Heryck Cantilio, Phillipe Vissarionovich e em especial à minha amiga, Letícia Evaristo.

Ao Professor Dr. João Vitor Batista Ferreira que me apresentou ao Professor Dr. Valter Aragão do Nascimento e pela paciência e boa vontade no ensino de mecânica quântica.

Ao Professor Dr. Valter Aragão do Nascimento por ter me ensinado a principal ferramenta utilizada no estudo de gases quânticos degenerados interagindo fracamente: Método de Aproximação Variacional.

Aos Professores: Dr. Anderson Rodrigues Lima Caíres, Dr. Samuel Leite de Oliveira, Dr. Além-Mar Bernardes, Dr. Marco Serrou do Amaral e Dr. Bruno Spolon Marangoni.

A todos da coordenação do Programa de Pós-graduação em Ciência dos Materiais, especialmente o Professor Dr. Heberton Wender Luiz dos Santos.

Finalmente, agradeço a Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) e a Universidade Federal de Mato Grosso do Sul.

RESUMO

Nesta dissertação, estudaremos o comportamento de gases quânticos degenerados em redes ópticas quase periódicas. No regime de interação fraca, o comportamento de um sistema de muitos bósons pode ser perfeitamente descrito através da equação de Gross-Pitaevskii e, no caso dos férmions, através da equação hidrodinâmica de campo médio. Estes modelos teóricos não admitem soluções analíticas exatas de modo geral – este é o motivo pelo qual recorreremos ao Método de Aproximação Variacional. Quando a interação entre os bósons é muito maior que a energia cinética, o sistema sofre uma transição quântica de fases. Em um potencial harmônico ou em uma rede óptica periódica, a natureza desse regime é perfeitamente descrita em termos do Hamiltoniano de Bose-Hubbard. Em uma rede óptica quase periódica, o comportamento microscópico dos bósons sofre uma transformação mais complexa que culmina em um diagrama de fases mais rico. Ou seja, observamos novas fases como a supersólida. Em suma, predizemos a existência de sólitons em condensados de hidrogênio, ^{52}Cr , ^{164}Dy , ^{168}Er e ^{161}Dy , e diagramas de fases que descrevem a transição entre as fases isolante de Mott e superfluida no modelo homogêneo de Bose-Hubbard e, no modelo não-homogêneo, apresentamos um diagrama de fases que prevê a existência das seguintes fases: isolante de Mott, superfluida, *Density Waves* e supersólida.

ABSTRACT

In this dissertation, we will study the behavior of degenerated quantum gases in quasi-periodic optical lattices. In the weak interaction regime, the behavior of a many-bosons system can be perfectly described through the Gross-Pitaevskii equation and, in the case of the fermions, through the mean-field hydrodynamic equation. These theoretical models do not admit of exact analytical solutions in general – this is the reason why we use the Variational Approach Method. When the interaction between the bosons is much greater than their own kinetic energy, the system undergoes a quantum phase transition. In a potential harmonic or in a periodic optical lattices, the nature of this regime is perfectly described in terms of the Hamiltonian of Bose-Hubbard. In a quasi-periodic optical lattice, the microscopic behavior of the bosons undergoes a more complex transformation that culminates in a richer phase diagram. That is, we observe new phases like the supersolid. In short, we predict the existence of solitons in condensates of hydrogen, ^{52}Cr , ^{164}Dy , ^{168}Er and ^{161}Dy , and phase diagrams describing the transition between the Mott insulator and superfluid phases in the homogeneous Bose-Hubbard model and in the inhomogeneous, we present a phase diagram that predicts the existence of the following phases: Mott insulator, superfluid, Density Waves and supersolid.

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO	9
2 REVISÃO DE LITERATURA	14
2.1 PARTÍCULAS IDÊNTICAS	14
2.2 APRISIONAMENTO MAGNÉTICO-ÓPTICO	18
2.2.1 REDES ÓPTICAS	20
2.2.2 SÓLITONS EM CONDENSADOS.....	24
3 OBJETIVOS.....	29
3.1 OBJETIVO GERAL	29
3.2 OBJETIVOS ESPECÍFICOS	29
4 METODOLOGIA TEÓRICA.....	30
4.1 HAMILTONIANO DE MUITOS BÓSONS.....	31
4.1.1 EQUAÇÃO DE GROSS-PITAEVSKII	31
4.1.2 MÉTODO DE APROXIMAÇÃO VARIACIONAL PARA CONDENSADOS COM INTERAÇÃO DE CONTATO	33
4.2 EQUAÇÃO DE GROSS-PITAEVSKII COM INTERAÇÃO DIPOLO-DIPOLO.....	37
4.2.1 MÉTODO DE APROXIMAÇÃO VARIACIONAL APLICADO EM CONDENSADOS COM INTERAÇÃO DIPOLO-DIPOLO	39
4.3 EQUAÇÃO HIDRODINÂMICA DE CAMPO MÉDIO	44
4.4 MÉTODO DE NEWTON-RAPHSON PARA EQUAÇÕES NÃO-LINEARES.....	48
4.4.1 SISTEMA DE EQUAÇÕES NÃO-LINEARES.....	50
4.5 TRANSIÇÕES QUÂNTICAS DE FASE.....	53
4.5.1 HAMILTONIANO DE BOSE-HUBBARD HOMOGÊNEO	55
4.5.2 MODELO NÃO-HOMOGÊNEO DE BOSE-HUBBARD EM UMA REDE ÓPTICA QUASE PERIÓDICA	58
5 RESULTADOS E DISCUSSÕES.....	61
5.1 SÓLITONS ILUMINADOS EM UM CONDENSADO DE BÓSONS COM INTERAÇÃO DE CONTATO	61
5.2 SÓLITONS ESTAVÉIS EM CONDENSADOS DE BÓSONS COM INTERAÇÃO DIPOLO-DIPOLO REPULSIVA.....	65
5.2.1 CONDENSADO DE ÁTOMOS DE ⁵² CR	66
5.2.2 CONDENSADO DE ÁTOMOS DE ¹⁶⁴ DY	68
5.2.3 CONDENSADO DE ÁTOMOS DE ¹⁶⁸ ER.....	71
5.3 SÓLITON ESTÁVEL DE ¹⁶⁴DY	74
5.4 TRANSIÇÕES QUÂNTICAS DE FASE.....	76
5.4.1 HAMILTONIANO DE BOSE-HUBBARD HOMOGÊNEO	76
5.4.2 MODELO NÃO HOMOGÊNEO DE BOSE-HUBBARD EM UMA REDE ÓPTICA QUASE PERIÓDICA	78
5.5 POSSÍVEIS APLICAÇÕES DESTE TRABALHO	81
6 CONCLUSÃO	83

REFERÊNCIAS.....	86
APÊNDICES.....	98
A PARÂMETRO DE ORDEM E POTENCIAL QUÍMICO	98
B REDUÇÃO DIMENSIONAL	100
C BOSE-HUBBARD HOMOGÊNEO	106
D BOSE-HUBBARD NÃO-HOMOGÊNEO	108
E ALGORITMO DE NEWTON-RAPHSON	110
E.1 HIDROGÊNIO.....	111
E.2 BÓSONS COM INTERAÇÃO DIPOLO-DIPOLO.....	113
E.3 FÉRMIONS COM INTERAÇÃO DIPOLO-DIPOLO	115

1 INTRODUÇÃO

Apesar das fundamentações teóricas do condensado de Bose-Einstein terem sido divulgadas em 1925 [1, 2], sua realização experimental somente foi possível a partir de 1995 quando Eric Cornell e Carl Wieman utilizaram um sistema de vapor atômico de átomos de ^{87}Rb arrefecidos [3]. Nestes primeiros experimentos, estudaram como as interações entre as partículas modificam a função de onda do estado do estado fundamental e a energia média. De fato, em tais estudos experimentais envolvendo um condensado de Bose-Einstein diluído, constatou-se que as interações entre partículas podem ser representadas por uma teoria de campo médio, onde variáveis como a termometria e calorimetria do estado fundamental e a energia do estado fundamental do gás em função da temperatura podem ser estudadas através do comportamento entre partículas. Comprovou-se que a temperatura de transição do condensado depende da fração de átomos no estado fundamental, em acordo com previsões para um gás de Bose ideal [3].

A condensação, isto é, o fenômeno que corresponde à ocupação macroscópica do mesmo estado quântico fundamental, está fundamentalmente associada às propriedades dos bósons; entretanto, toda a matéria visível é constituída de férmions, conseqüentemente, o estudo experimental da superfluidez frequentemente requer o emparelhamento de férmions. À medida que as técnicas e a instrumentação necessárias para alcançar o estado de condensação foram evoluindo, as técnicas já consolidadas no estudo de bósons foram aplicadas a outra classe de partículas quânticas, os férmions. O estudo de gases quânticos degenerados constituídos de férmions ampliou consideravelmente o estudo com gases quânticos como simuladores quânticos, uma vez que, os férmions são os blocos construtores da matéria visível – em último caso, até mesmo um átomo bosônico é constituído de férmions, isto é, os átomos são constituídos de prótons, elétrons e nêutrons, ou seja, férmions. Além do desafio experimental de obter um condensado de férmions, os estudos iniciais com átomos fermiônicos foram motivados por questões teóricas pendentes, como por exemplo, a transição entre o regime descrito pela teoria Bardeen-Cooper-Schrieffer e o condensado de Bose-Einstein. Em suma, eventualmente, os férmions podem formar pares de Cooper, se a distância entre os pares forem pequenas, a interação entre eles é regida pela estatística de Fermi-Dirac, se, por outro lado, a distância entre os pares forem muito maior que a distância entre os

férmions que o constituem o par, então o sistema é regido pela estatística de Bose-Einstein, uma vez que o spin resultante é um número inteiro.

De fato, na teoria do campo médio, ou seja, na aproximação de campo médio as partículas estão muito separadas uma das outras, e o que sentem na verdade é uma interação média de dois corpos interagentes. Neste contexto, a dinâmica de um gás bosônico pode ser descrita por uma equação do tipo Equação de Schrödinger não linear, também denominada de equação de Gross-Pitaevskii, onde os bósons são aprisionados por um potencial externo harmônico, que por sua vez representa o potencial criado por um laser experimental. A equação de campo médio é eficaz em descrever as interações de gases diluídos a temperatura zero [4, 5]. Entretanto, esta equação não é solúvel ou integrável.

Durante os anos os experimentais tem aprimorado as formas de aprisionamento, e após a descoberta experimental da condensação de gases de Rubídio através de lasers [3], foi realizado experimentos de aprisionamentos de para outros átomos como Sódio [6]. Novas descobertas utilizando lasers de aprisionamento propiciaram a criação de redes ópticas que por sua vez propiciam um novo campo de pesquisas para a condensação de Bose Einstein e para o estudo de um gás degenerado de férmions [7]. O estudo de gases quânticos aprisionados por redes ópticas propicia reproduzir fenômenos fundamentais já observados ou preditos na física do estado sólido, tais como superfluidez e isolantes de Mott [8-10]. Redes ópticas são úteis no estudo na condensação de Bose-Einstein em certas dimensões, por exemplo no gás de Tonks-Girardeau.

Uma rede óptica nada mais é do que uma onda de luz estacionária criada por feixes de lasers contrapropagantes onde os átomos são aprisionados nos nodos e antinodos pela força de dipolo [11]. Assim como ocorre na física de estado sólido, as partículas sob a ação de potenciais nesta configuração permitem o surgimento de gaps espectrais dentro de uma banda de gap linear, formando um gap sólito iluminado [12]. Sólitons iluminados foram criados experimentalmente em Condensados atômicos de ${}^7\text{Li}$ [13] e ${}^{85}\text{Rb}$ [14], e moleculares realizados com átomos de ${}^{40}\text{K}$ e ${}^6\text{Li}$ [15, 16].

Embora os métodos numéricos são eficazes em prever o comportamento de condensados interagentes, Métodos Variacionais descrevem fenomenologias de gases interagentes com uma precisão próxima de métodos numéricos e obtém a vantagem de permitir, explorar e conhecer qualitativamente a natureza do sistema. Diante deste

exposto, utilizando o Método de Aproximação Variacional, nós apresentamos nesta dissertação um estudo que abrange uma série de fenômenos envolvendo gases quânticos aprisionados através de uma combinação específica entre o potencial harmônico e a rede óptica. Nosso estudo contempla bósons interagindo unicamente através da interação de contato, férmions com interação de dipolo-dipolo e bósons interagindo com interação de contato e com interação dipolo-dipolo.

Nesta dissertação é explorada, pela primeira vez, o comportamento de gases quânticos degenerados em redes ópticas quase periódicas em um regime de interação fraca (com interação dipolo-dipolo), onde o comportamento de um sistema de muitos bósons pode ser perfeitamente descrito através da Equação Dipolar de Gross-Pitaevskii e, gases de férmions descritos através da Equação Hidrodinâmica de Campo ou Densidade Funcional. Em um regime de interação forte entre muitos bósons, quando a interação entre os bósons é muito maior que a energia cinética, o sistema sofre uma transição quântica de fases e a Equação de Gross-Pitaevskii não é mais válida.

Como estudo complementar, também foi incluso nesta dissertação a aplicação do Modelo Teórico de Bose Hubbard, que descreve com precisão resultados experimentais. Ou seja, em uma rede óptica quase periódica o comportamento microscópico dos bósons sofre uma transformação mais complexa que culmina em um diagrama de fases com novas fases, como a supersólida, assim é necessária uma descrição teórica ainda mais elaborada.

Enfatizamos a importância de gases quânticos possuem e as oportunidades e possibilidades que fornecem como simuladores quânticos, isto é, os gases quânticos podem ser usados para reproduzir fenômenos presentes em Física da Matéria Condensada. Nesse sentido, os gases quânticos oferecem a oportunidade de compreender e controlar fenômenos que em sólidos reais seriam inacessíveis tanto do ponto de vista experimental quanto teórico. A rede óptica quase periódica amplia consideravelmente as possibilidades em simulações quânticas. Entre os fenômenos podemos citar: o movimento de átomos na rede óptica é análogo ao movimento de elétrons em cristais periódicos; os sólitons observados e previstos em gases quânticos são similares aos sólitons em fibra óptica – novamente, os gases quânticos apresentam a vantagem de possuir uma controlabilidade maior e oferece possibilidades de observações mais precisas (discutiremos este detalhe na seção 5.5); a rede óptica quase periódica pode viabilizar a computação quântica. Por outro lado, a rede óptica pode induzir um sistema quântico a

sofrer uma transição quântica e permite a observação e previsão de novas fases e impulsionar a viabilidade de materiais extremamente avançados, como discutido na seção 5.5.

Aplicamos o Método de Aproximação Variacional condensados descritos através da Equação de Gross-Pitaevskii com e sem interação dipolo-dipolo e em um gás degenerado de Fermi descrito em termos de uma equação de campo médio com interação dipolo-dipolo. Previmos o formato do sóliton e estimamos o valor do potencial químico para quatro condensados constituídos por átomos diferentes: hidrogênio, ^{52}Cr , ^{164}Dy , ^{168}Er e ^{161}Dy . Estudamos o modelo de Bose-Hubbard sem uma rede óptica quase periódica e em uma rede óptica quase periódica e obtivemos o diagrama de fases para cada um destes modelos – o que nos permite prever novas fases quânticas como isolante de Mott, *Spin Density Waves*, *Charge Density Waves* e supersólida.

No capítulo 2 apresentamos as possibilidades e oportunidades que o confinamento de átomos em redes ópticas fornecem, especialmente enfatizamos as redes ópticas quase periódicas. Abordamos conceitualmente como funciona o aprisionamento de átomos e a condensação de átomos – bem como as diferenças que a natureza da partícula afeta o fenômeno de degenerescência quântica.

O capítulo 3 consiste dos objetivos a serem atingidos nesta dissertação, em suma: prever a formação de sólitons em gases quânticos degenerados em redes ópticas quase periódicas interagindo fracamente com e sem interação dipolo-dipolo para átomos de bósons e férmions e; estudar a transição quântica de fases em uma rede óptica quase periódica.

No capítulo 4 abordamos o modelo teórico de muitos bósons, o qual nos permite descrever a interação de gases quânticos degenerados para bósons através da dedução da Equação de Gross-Pitaevskii com e sem interação dipolo-dipolo. Apresentamos o Método de Aproximação Variacional para ambos os casos de bósons interagindo com e sem interação dipolo-dipolo. Do mesmo modo, estudamos brevemente o gás degenerado de Fermi com interação dipolo-dipolo através da Equação Hidrodinâmica de Campo Médio, cujo a origem remota à Densidade Funcional, e do Método de Aproximação Variacional. Explicamos qualitativamente o funcionamento do Método de Newton-Raphson descrito no apêndice E. Finalmente, estudamos qualitativamente o modelo de Bose-Hubbard através da Aproximação de Campo Médio com riqueza de detalhes.

Primeiro, apresentamos sólitons bidimensionais estáveis para um condensado constituído de átomos de hidrogênio confinados através da combinação entre potenciais harmônicos e uma rede óptica quase periódica. Através do Método de Aproximação Variacional obtivemos um conjunto de equações não-lineares que relacionam as dimensões do sóliton com o comprimento de espalhamento e os parâmetros da rede óptica. Quando essas equações não-lineares são solucionadas podemos estimar o valor do potencial químico e prever o formato do sóliton.

Em seguida, no capítulo 5, aplicamos o Método de Aproximação Variacional para gases bosônicos e um gás degenerado de Fermi com interação dipolo-dipolo confinados por um potencial harmônico na direção z e um potencial quase periódico, também na direção z . O Método Variacional nos conduz novamente para um conjunto de equações não-lineares que dependem dos parâmetros da rede óptica; do comprimento de espalhamento, no caso dos bósons; da força de interação dipolar e do número de partículas que constituem o condensado. Nesse caso, quando encontramos uma solução que satisfaça as equações não-lineares através do Método de Newton-Raphson, encontramos sólitons estáveis tridimensionais do tipo disco e estimamos o valor do potencial químico para condensados de átomos de ^{52}Cr , ^{164}Dy , ^{168}Er e ^{161}Dy . Finalmente, estudamos o modelo de Bose-Hubbard através de uma abordagem puramente analítica em duas situações: caso homogêneo e caso não-homogêneo, correspondendo à ausência de rede óptica quase periódica e sua presença, respectivamente. O diagrama de fases previsto no caso homogêneo corrobora com resultados já conhecidos, assim como o caso não-homogêneo. Entretanto, gostaríamos de destacar a vantagem fornecida pela notação mais simples que empregamos.

Finalmente, no capítulo 6, apresentamos nossa conclusão, onde discutimos alguns resultados e realizamos algumas sugestões de trabalhos futuros.

2 REVISÃO DE LITERATURA

Neste capítulo apresentamos os principais conceitos que fundamentam o nosso trabalho. Na seção 2.1 discutimos qualitativamente o processo de condensação envolvendo bósons e férmions, bem como distinguir suas respectivas peculiares. Na seção 2.2 abordamos a rede óptica e contextualizamos a importância que as redes ópticas desempenham no estudo experimental de condensados, em especial discutimos algumas propriedades dos sólitons em redes ópticas. Na subseção 2.2.1 discutimos a qualitativamente a formação de redes ópticas. Na seção 2.2.2 relacionamos qualitativamente a influência da rede óptica sobre o sóliton.

2.1 PARTÍCULAS IDÊNTICAS

As partículas fundamentais são divididas em duas classes, bósons e férmions. As suas diferenças são expostas de acordo com a tabela 1, abaixo. Em uma representação clássica, partículas idênticas são tratadas como distinguíveis, neste caso podem ser rotuladas. No entanto, na imagem quântica, bósons e férmions são tratados como indistinguíveis. O pressuposto da indistinguibilidade leva a um resultado um pouco contra intuitivo, que pode ser visto mesmo no exemplo simples de duas partículas e dois estados. Para partículas distinguíveis (o caso clássico), a probabilidade de ter ambas as partículas no mesmo estado é $1/2$. No entanto, para partículas indistinguíveis (o caso quântico), a probabilidade de ter ambas as partículas no mesmo estado são aumentadas para $2/3$. Ou seja, o simples fato de que as partículas são indistinguíveis leva a um aumento na ponderação estatística para os casos em que um número maior das partículas está no mesmo estado. Este efeito se torna especialmente importante na condição degenerada, onde o número de partículas, N , é maior ou igual ao número de estados possíveis.

Tabela 1. As diferenças e propriedades entre bósons e férmions.

Bósons	Férmions
Spin inteiro	Spin semi-inteiro
Indistinguíveis	Indistinguíveis
Estados sempre simétricos	Estados sempre antissimétricos
Estatística de Bose-Einstein	Estatística de Fermi-Dirac
Nenhuma restrição quanto ao número de partículas no mesmo estado quântico	Obedece ao princípio de exclusão de Pauli

É interessante destacar ao leitor que quando Einstein publicou seus trabalhos sobre a condensação de Bose-Einstein em 1925 [2], esta divisão de partículas fundamentais ainda não era conhecida. No entanto, as propriedades que ele escolheu para as ondas de matéria que ele considerou em seus artigos -- com base nas decisões tomadas por Bose em seu artigo original sobre fótons [1] --, logo foram reconhecidas como sendo as dos bósons.

Os bósons agrupam-se, ou seja, não existem restrições sobre o número de bósons que podem estar em um mesmo estado quântico. No entanto, os férmions obedecem ao princípio de exclusão de Pauli, o que significa que dois férmions não podem estar no mesmo estado quântico e, portanto, eles não experimentam esse efeito de agrupamento. A figura 1 ilustra a diferença entre férmions e bósons e a sua distribuição nos respectivos níveis de energia. Além dos férmions possuírem spin semi-inteiro, um condensado de bósons distingue-se ainda de um gás degenerado de férmions devido à grandeza que caracteriza a interação entre os bósons, um gás quântico de bósons interagindo fracamente é caracterizado por uma grandeza fundamental denominada comprimento de espalhamento [17]. Os férmions, por sua vez, possuem suas interações caracterizadas pela Energia de Fermi -- em decorrência do Princípio de Exclusão de Pauli supracitado, os férmions não ocupam o mesmo estado quântico fundamental: os férmions preenchem os níveis de energia superiores à medida que os níveis inferiores são preenchidos -- a energia do nível ocupado mais elevado é conhecida como Energia de Fermi [17-19].

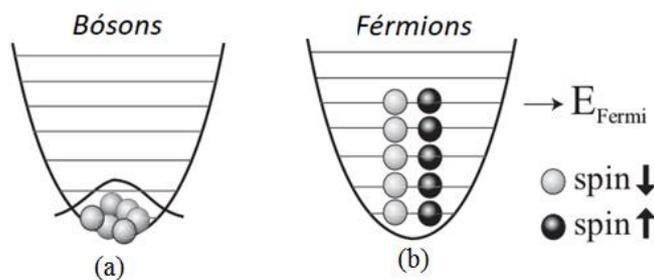


Figura 1: Os bósons ocupam o mesmo estado quântico fundamental, enquanto que, os férmions por sua vez ocupam os níveis de energia superiores à medida que os níveis inferiores forem preenchidos. (Figura extraída da referência [20].)

Este efeito de agrupamento pode ser matematicamente representado pela Distribuição de Bose-Einstein. Tomando o caso específico de bósons não interagindo no equilíbrio térmico e assumindo indistinguibilidade e sem restrições no número de átomos no mesmo estado, o número médio de átomos n_i no estado i com energia ϵ_i à temperatura T é dado por [20]:

$$n_i = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_i - \mu)} - 1} \quad (2.1)$$

Na equação (2.1), β é a constante de Boltzmann, ϵ_i é a energia no i -ésimo estado e μ é um parâmetro denominado como potencial químico no qual está relacionado a condição [21]:

$$\sum_i n_i(\mu, \beta) = N \quad (2.2)$$

O potencial químico é muito grande e negativo para grandes temperaturas. Por outro lado, como T diminui, μ aumenta [21]. É então claro a partir da equação (2.1) que, eventualmente, na temperatura crítica, T_c , a ocupação do estado de uma única partícula de energia mais baixa é da ordem N . Neste ponto, a condensação de Bose-Einstein foi alcançada.

Podemos observar, no quadro (a) da Figura 2 que, para os bósons, todos os átomos estão em um mesmo estado quântico, neste caso, falamos que este sistema interagente pode ser representado por uma única função de onda, como mostra o quadro (d) da Figura 2. Tal fenômeno físico de interação entre partículas é melhor interpretado em termos do comprimento de onda de Broglie dos átomos bosônicos.

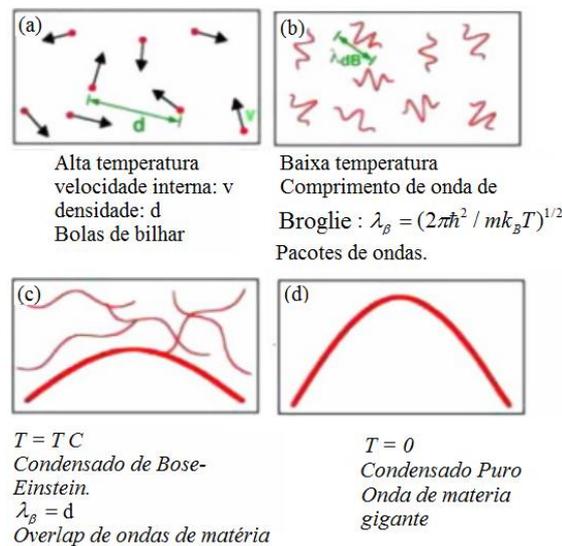


Figura 2: Comportamento das propriedades das partículas bosônicas ao variar a temperatura. (Figura adaptada da referência [22]).

. O comprimento de onda de de Broglie de um átomo é dado por $\lambda_B = (2\pi\hbar^2 / mk_B T)^{1/2}$, onde m é a massa atômica, k_B é a constante de Boltzmann e T é a temperatura. Conforme ilustrado na Figura 2, à medida que T diminui, λ_B aumenta quando

uma determinada temperatura crítica (T_c) é atingida, neste caso o comprimento de onda de Broglie dos átomos é comparável ao espaçamento entre as partículas ($\lambda_B = d$), o quadro (c) da Figura 2 esboça o comportamento dos átomos. Em seguida, os pacotes de ondas atômicas sobrepõem-se e formam uma única onda de matéria gigante (Figura 2.d). A temperatura crítica (T_c) é a temperatura no qual os pacotes de ondas atômicas individuais começam a se sobrepor-se, e exatamente nesta temperatura em que ocorre a condensação de Bose-Einstein [22]. Um condensado pode, portanto, ser visto como uma única onda de matéria macroscópica (Fig.2 d).

A condensação, isto é, o fenômeno que corresponde à ocupação macroscópica do mesmo estado quântico fundamental, está fundamentalmente associada às propriedades dos bósons; entretanto, toda a matéria visível é constituída de férmions, conseqüentemente, o estudo experimental da superfluidez frequentemente requer o emparelhamento de férmions. À medida que as técnicas e a instrumentação necessárias para alcançar o estado de condensação foram evoluindo, as técnicas já consolidadas no estudo de bósons foram aplicadas a outra classe de partículas quânticas, os férmions. O estudo de gases quânticos degenerados constituídos de férmions ampliou consideravelmente os gases quânticos como simuladores quânticos, uma vez que, os férmions são os blocos construtores da matéria visível – em último caso, até mesmo um átomo bosônico é constituído de férmions, isto é, os átomos são constituídos de prótons, elétrons e nêutrons, ou seja, férmions. Além do desafio experimental de obter um condensado de férmions, os estudos iniciais com átomos fermiônicos foram motivados por questões teóricas pendentes, como por exemplo, a transição entre o regime descrito pela teoria Bardeen-Cooper-Schrieffer e o condensado de Bose-Einstein. Em suma, eventualmente, os férmions podem formar pares de Cooper, se a distância entres os pares forem pequenas, a interação entre eles é regida pela estatística de Fermi-Dirac, se, por outro lado, a distância entre os pares forem muito maior que a distância entre os férmions que o constituem o par, então o sistema é regido pela estatística de Bose-Einstein, uma vez que o spin resultante do par é um número inteiro [23]. Concomitantemente a todo este desenvolvimento, os átomos com momento de dipolo magnético intrínseco vêm ganhando o protagonismo em gases quântico na última década, assim como moléculas com grande momento de dipolo elétrico permanente. Em especial podemos citar: o condensado de átomos de ^{52}Cr [24], o qual foi obtido através de armadilhas de dipolo óptico e do resfriamento por vaporização; o condensado de átomos de ^{161}Dy [25], obtido

através do resfriamento à laser; o condensado de átomos de ^{164}Dy [26], obtido através de armadilhas magneto-ópticas (MOT); o condensado de ^{168}Er [27], obtido através de armadilhas de dipolo óptico; finalmente, o condensado fermiônico de moléculas polares de $^{40}\text{K}^{87}\text{Rb}$ [28, 29].

2.2 APRISIONAMENTO MAGNÉTICO-ÓPTICO

Embora o trabalho apresentado nesta dissertação seja de cunho teórico, é necessário ressaltarmos que existem vários parâmetros provenientes de fenômenos experimentais que são essenciais para aplicarmos em uma teoria analítica ou numérica. Desta forma, para obtermos bons resultados, ou seja, os mais próximos dos resultados experimentais, parâmetros como comprimentos de ondas de transição dos átomos, comprimentos de espalhamentos, ou interação dipolo-dipolo, devem ser considerados.

Os lasers são frequentemente usados para aprisionar átomos. Tal configuração denominada de armadilha magnética óptica de átomos neutros depende do efeito Zeeman (Figura 3). O efeito Zeeman pode ser facilmente observado a partir da interação de átomos com momento magnético $\tilde{\mu}$ (como átomos de hidrogênio e outros átomos de um elétron, como os átomos alcalinos) na presença do campo magnético \mathbf{B} , o que causa as linhas espectrais um desdobramento em várias linhas. A energia de interação E_B entre o átomo e campo magnético \mathbf{B} , depende do alinhamento mútuo e do momento magnético atômico μ_B e \mathbf{B} . Os átomos ao terem os seus níveis de energias desdobrados, possuem frequência de transições atômicas que podem ser acessadas por lasers. Na Figura 3 temos os átomos na presença de um campo magnético gerado por uma corrente (I) e em uma configuração Helmholtz. Na Figura 3.b, a estrutura hiperfina no estado fundamental e as primeiras configurações de estado excitado corresponde aos átomos de ^{87}Rb . No quadro (c) da figura 3, temos um esboço das respectivas frequências de transições entre os níveis de energias e os sistemas de lasers usados para o laser de aprisionamento, bombeio e rebombeio óptico e detecção.

As transições que ocorrem do estado fundamental para os estados excitados são transições de dipolo elétrico (Fig.3). Os lasers de aprisionamento e detecção são utilizados para realizarem as transições do estado fundamental $5S_{1/2}$, $F = 2$ e para o estado excitado $5P_{3/2}$, $F = 3$, o qual corresponde a linha D2 e comprimento de onda de $\lambda =$

780 nm. No processo de resfriamento a laser, a luz excita os átomos para níveis superiores $F = 3$, porém existe uma probabilidade finita para excitar para um nível excitado não ressonante $F = 2$, no qual elétrons decaem para o nível $F = 1$ do estado fundamental. Uma questão a ser destacada é que os átomos nos níveis hiperfinos mais baixos não participam do ciclo de aprisionamento. Para inclui-los no ciclo de aprisionamento é necessário utilizarmos lasers adicionais para manter as transições de $5S_{1/2}, F = 1$ para o nível $5P_{3/2}, F = 2$. Este por sua vez é chamado de laser de rebombeio. Para a detecção dos átomos no estado fundamental $F = 1$, os mesmos são primeiramente expostos a luz de rebombeio para leva-los ao nível $F = 2$ do estado fundamental [30].

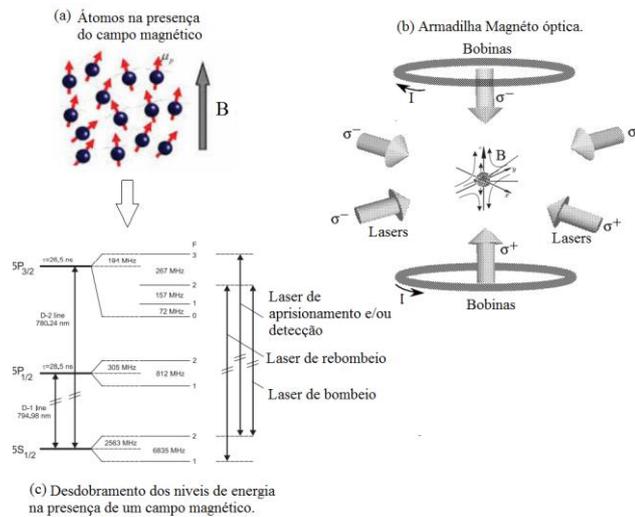


Figura 3: Aprisionamento magnético-óptico. (Figura adaptada da referência [30]).

O potencial de aprisionamento magnético experimental criado por um laser, $V(r)$, pode ser aproximado por um potencial harmônico teórico (que pode ser altamente assimétrico):

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

onde na equação (2.3), m é a massa atômica ω_x, y, z são as frequências dos osciladores harmônicos característicos nas coordenadas x, y e z respectivamente. Nos próximos capítulos ou subseções discutimos os procedimentos de aprisionamento de átomos por outros tipos de potenciais ópticos.

O potencial de aprisionamento descrito na equação (2.3), é também denominado de aprisionamento externo e o mesmo é utilizado em vários estudos envolvendo condensados bosônico e fermiônicos [18, 19, 31-37].

Na Figura 2.d destacamos que, à baixíssimas temperaturas, atingimos uma temperatura no qual ocorre a condensação de Bose-Einstein, e o processo de interação entre as partículas pode ser representada por uma onda gigante e macroscópica. De fato, do ponto de vista experimental, Anderson *et al.* [38] através do tempo de voo, obteve uma distribuição térmica de átomos de ^{87}Rb para um condensado puro de Bose à temperatura de 50 nK . As cores expostas na Figura 4 são apenas para representar o comportamento dos átomos em cada velocidade, indicando o vermelho uma quantidade menor de átomos e o branco quantidade maior de átomos. As áreas em que aparecem branco e azul claro são velocidades menores. Na esquerda temos o sistema de átomos antes da formação do condensado de Bose-Einstein. Porém no centro, temos o instante do aparecimento do condensado. Finalmente a direita: após a rápida evaporação dos átomos com maior energia, existe apenas as amostras puras do condensado. Devido ao Princípio da Incerteza de Heisenberg, o pico não é infinitamente estreito, ou seja, quando um átomo é retido numa região específica do espaço a sua distribuição de velocidade possui necessariamente uma certa largura mínima.

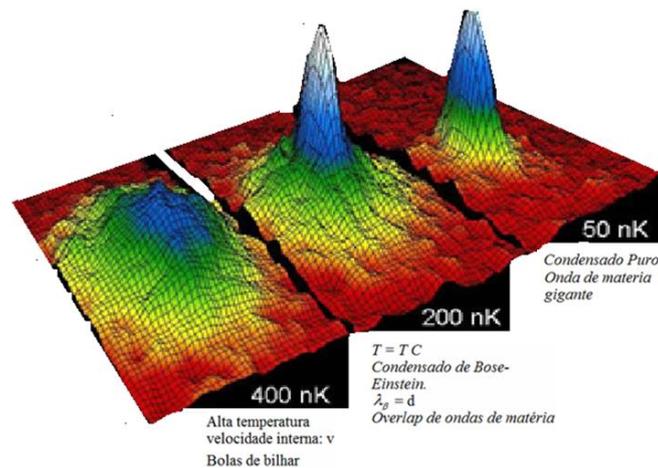


Figura 4: Um gás de ^{87}Rb : antes da condensação ($T = 400 \text{ nK}$); após a condensação ($T=200 \text{ nK}$) e após a condensação total ($T = 50 \text{ nK}$). (Figura adaptada da referência [38]).

2.2.1 REDES ÓPTICAS

Os átomos aprisionados em uma armadilha magnético-óptica podem sentir a presença de outro laser, neste caso, o potencial criado pela ação de um laser adicional ou extra e denominado de rede óptica.

Nas armadilhas magnético ópticas de dipolo, o potencial de aprisionamento pode ser aproximado por um oscilador harmônico (Eq. 2.3). No entanto, uma das vantagens de usar um confinamento óptico para condensados é o controle disponível sobre a forma do potencial de armadilhas devido ao fato de que o potencial de dipolo $V(r)$ está relacionado à intensidade do campo de luz, $I(r)$, por $V(r) \propto I(r)$. A armadilha de dipolo óptico permite a indução de um momento de dipolo na amostra, que, aprisiona as partículas na região de maior intensidade do feixe (antinodo) [39, 40]. Um dos potenciais de aprisionamentos de dipolo mais utilizados é a rede óptica. Uma rede óptica é formada através do campo de luz de uma onda estacionária, de modo que, o potencial de dipolo resultante é similar a uma rede em forma de cristal de poços de potenciais. A forma da rede óptica depende da estrutura espacial da onda estável e, portanto, existem vários tipos diferentes de potenciais periódicos ópticos, *superlattices* [41], redes quase periódicas [42], redes triangulares [43], redes hexagonais [44] e redes de Kagomé [45].

Embora no campo dos processos de interação da luz com a matéria seja conhecido que desde a década de 1960 é possível aprisionar átomos nos nós ou antinodos de uma onda de luz estacionária usando as forças de dipolo [44], as primeiras redes ópticas criadas foram desenvolvidas com o objetivo de resfriar átomos, não para aprisioná-los em potencial periódico. No entanto, reconheceu-se que a configuração de feixes de laser em um melaço óptico poderia aprisionar os átomos arrefecidos em uma rede periódica. Dalibard e Cohen-Tannoudji [46] mostraram que uma configuração linear de ondas contrapropagantes resulta em um potencial de armadilhas que varia periodicamente no espaço com um período de $\lambda/2$, onde λ é o comprimento de onda óptico. No início da década de 1990, vários grupos demonstraram que os átomos estavam presos nos poços do potencial [47].

No entanto, esses exemplos envolveram redes ópticas dissipativas sintonizadas próximas da ressonância, onde a emissão espontânea reduziu a eficácia da captura. Em 1996, Anderson *et al.*, utilizando lasers aprisionou átomos frios em uma rede óptica fora de ressonância [48].

O primeiro experimento envolvendo uma rede óptica e condensado de Bose-Einstein foi realizado em Yale em 2001 [49]. Um condensado foi adiabaticamente localizado em uma onda óptica estacionária unidimensional, e a coerência de um sítio para outro foi analisada pela liberação dos átomos da rede e no padrão de interferência formado pelo conjunto de pacotes de ondas sobrepostas. Neste experimento, observou-se uma perda de contraste de interferência à medida que o tempo de carregamento adiabático

aumentou. Em um artigo de 1999, o grupo de Peter Zoller fez a sugestão [50] de que o modelo de Bose-Hubbard poderia ser realizado em redes ópticas em bidimensionais e tridimensional. Em 2002, em Munique, um grupo [10] relatou a observação da transição de fase superfluido-isolante de Mott em uma rede óptica tridimensional, observando a perda de interferência à medida que o sistema atingiu o estado isolante, bem como a diferença no espectro associado ao estado isolante no transporte.

As redes ópticas podem ser facilmente construídas em geometrias unidimensionais, bidimensionais e tridimensionais. Ao longo dos anos várias experiências estudaram gases de Bose unidimensional confirmando-os em uma rede óptica [51]. Um experimento no NIST [52] observou reduções na perda de interação de três corpos em relação ao de um gás em três dimensões. A partir das evidências experimentais envolvendo redes ópticas, foi possível a observação de um gás unidimensional Tonks-Girardeau de bósons movendo-se livremente em uma dimensão. Embora os bósons de gás Tonks-Girardeau interajam fortemente, eles se comportam como férmions não interativos [53]. Estudos envolvendo o emparelhamento de férmions em uma rede óptica unidimensional duplamente periódica e ajustável usando espectroscopia de radiofrequência também foram realizados [54]. Para uma melhor compreensão de trabalhos experimentais envolvendo redes ópticas, existem vários artigos publicados por Immanuel Bloch[55], Markus Greiner[7] e Olive Morsch et al. [56].

Uma rede óptica unidimensional origina-se da interseção de dois feixes de lasers idênticos contrapropagantes com campos elétricos $E_1(x; t)$ e $E_2(x; t)$ (Fig.5) [23], nos quais é gerado um padrão de interferência em que os átomos são aprisionados nos nodos e antinodos pela força de dipolo (Fig.5(b)). A Fig. 5 ilustra o processo de interação entre os campos elétricos de dois lasers. O termo Ω é a frequência de Rabi, e a dissintonia atômica δ (ou conhecido pelos experimentais como *detuning*), e K representa o vetor de onda do campo elétrico do laser. Para obtermos a equação do potencial de aprisionamento exposto na Fig.5(a), basta considerarmos o campo escrito como

$$\begin{aligned}
 E(x, t) &= E_0 e^{(-i\omega t + iK_L x)} + E_0 e^{(-i\omega t - K_L x)} \\
 E(x, t) &= 2E_0 \cos(K_L x) e^{-i\omega t}
 \end{aligned}
 \tag{2.4}$$

onde $K_K = 2\pi / \lambda$. Ao substituírmos a eq. (2.4) na eq. (2.5) abaixo,

$$V(r) = \frac{3\pi c^2 \Gamma}{2\omega_0^3 \delta} I(r) \quad (2.5)$$

e utilizarmos a relação $I(r) = 2\epsilon_0 c |E|^2$, obtemos a equação que representa um potencial de uma rede ótica periódica unidimensional:

$$V(r) = \frac{I_{max}}{\delta} \sin^2(kx) \quad (2.6)$$

A Figura 5(a) ilustra o que ocorre na equação (2.4) e o quadro (b) exemplifica o resultado consequente obtido pela equação (2.5). O quadro (c) é a equação que descreve a forma do potencial em uma dimensão.

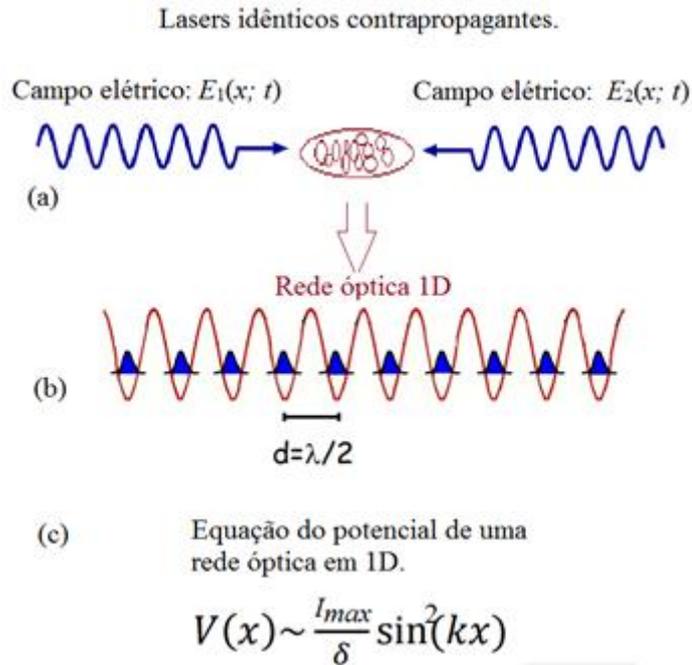


Figura 5: Formação de uma rede ótica periódica através de dois lasers idênticos contrapropagantes.

Estudos experimentais e modelos teóricos considerando vários tipos de redes óticas foram realizados por Louis *et al*, em suas publicações [57, 58]. Estudos envolvendo a dinâmica de condensados em redes óticas podem ser encontrados no *review* publicado por Oliver Morsch e Markus Oberthaler[56]. Embora vários estudos experimentais ou teóricos abordam as várias propriedades de redes óticas, alguns tipos de redes óticas como as não periódicas, ou duplamente periódica, efeitos de dispersão e estabilidade de sólitons ainda não foram estudadas em certas configurações da equação de Gross- Pitaevskii em uma, duas e três dimensões.

Evidências experimentais, utilizando uma rede quase periódica em três dimensões, comprovaram que uma configuração de rede óptica é mais eficaz no aprisionamento de átomos quando é utilizado uma maior quantidade de lasers de aprisionamento, ou seja, através da interferência de quatro, cinco e até seis lasers, exploraram a temperatura e expansão balística dos átomos aprisionados, demonstrando que seis feixes de lasers são mais eficientes para capturar átomos do outros tipos de redes ópticas [17].

Várias propriedades físicas foram exploradas utilizando gases bosônicos aprisionados por redes ópticas simples ou com dupla periodicidade, entretanto, o estudo de gases fermiônicos aprisionados por uma rede óptica quase periódica utilizando métodos variacionais é inovador, uma vez que podem fornecer novas informações sobre a estabilidade de sistemas fermiônicos.

Uma vez que a rede óptica é periódica e ocorrem efeitos não lineares, a mesma permite a formação de sólitons iluminados, também definidos como gaps sólitons iluminados, os quais foram estudados experimentalmente em condensados atômicos de ${}^6\text{Li}$ [12], ${}^{85}\text{Rb}$ [14] e em moléculas constituídas de ${}^{40}\text{K}$ e ${}^6\text{Li}$ [15].

2.2.2 SÓLITONS EM CONDENSADOS

Um dos pioneiros do estudo de sólitons foi John Scott Russel em 1834, que investigou qualitativamente a propagação de ondas aquáticas no canal de Edimburgo-Glasgow. Entretanto foi em 1895 que D. J. Korteweg e G.de Vries deduziram matematicamente tais fenômenos aquáticos. Por volta de 1965, Zabusky e M. Kruskal estudando as soluções propostas por D.J. Korteweg e G. de Vries, definiram tal efeito como sólitons ou ondas solitárias, onde *on* denomina partículas, como fótons, elétrons *et cetera* [59].

No contextos dos condensados, os sólitons são ondas solitárias de matéria que conservam o seu formato quando deslocam-se em velocidade constante e dividem-se em sólitons iluminados e escuros [31, 37, 57, 58, 60-68], como podemos ver na Figura 6, o sólito escuro se distingue do sólito iluminado por ser um buraco que se move em um fundo de matéria. Em um condensado típico, um sólito requer condições especiais para ser gerado, sem um potencial de aprisionamento externo, são necessárias uma interação

atrativa e uma quantidade relativamente baixa de partículas. Caso contrário, o sóliton colapsa ou decai [12, 13]. Em uma rede óptica, por outro lado, os sólitons iluminados apresentam estabilidade devido à interações repulsiva entre as partículas [18, 63, 69]. Os dois exemplos de sólitons apresentados na Fig.6 são ilustrativos, entretanto, a função de distribuição ($|\varphi(x,t)|^2$) pode ser a solução de uma equação não linear do tipo Schrödinger aplicada a sistemas gasosos ou fibras ópticas.

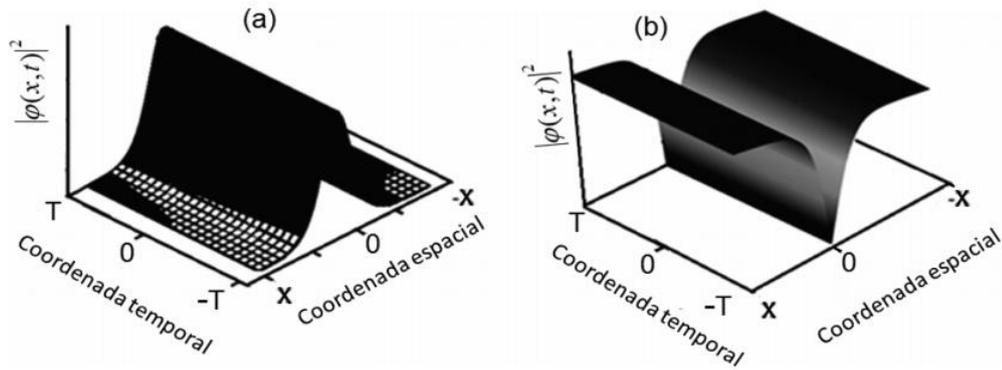


Figura 6: Exemplo ilustrativo de um (a) sóliton claro ou iluminado, (b) e um sóliton escuro, respectivamente. (Figura extraída da referência [70].)

Os primeiros experimentos foram realizados em átomos bosônicos de Rubídio [38], Sódio [6] e Lítio [71]. Em um condensado de bósons típico a dinâmica do sistema pode ser perfeitamente descrita através da equação de Gross-Pitaevskii [17, 72]. No entanto, essa equação é válida apenas quando as partículas que compõem o condensado interagem fracamente. Recentemente, novas técnicas experimentais permitem alcançar regimes que são mais relevantes por questões teóricas pendentes; estamos falando de questões que surgem em sistemas onde as partículas interagem fortemente. Como, por exemplo, a transição de fase quântica de uma fase superfluida para a fase isolante de Mott [9, 10]. Além de sistemas que possuem interação dipolo-dipolo entre as partículas [27, 32-34]. Consequentemente exigem uma descrição teórica mais elaborada que aquela fornecida pela teoria de campo médio. Além disso, ao mesmo tempo que as pesquisas em gases interagindo fortemente avançavam, as técnicas criadas para criar um condensado de Bose-Einstein foram aplicadas à outra classe de partículas, os férmions [73]. Isso ampliou consideravelmente a aplicação dos gases quânticos como modelo teórico, uma vez que os férmions são os blocos fundamentais da matéria. Há na natureza uma variedade de fenômenos físicos que resultam das interações entre muitos férmions. Por exemplo,

elétrons em metais [74, 75], supercondutores [76, 77], superfluidez [72], anãs brancas [78], estrelas de nêutrons [79] e o plasma quark-glúon do universo primitivo [80-83]. Esses estudos envolvendo férmions foram impulsionados pelo desafio de criar um condensado de Fermi ou um superfluido de Fermi. O estudo de gases interagindo fortemente ainda abriu uma janela de oportunidades em computação quântica [84] e em emaranhamento quântico [85-87].

Após a realização experimental de condensados com interação dipolo-dipolo utilizando átomos de ^{52}Cr [32, 33], ^{164}Dy [34] e ^{168}Er [27], o interesse em gases quânticos como modelo teórico foi renovado e ampliado [18]. A maioria desses estudos concentra-se em gases quânticos aprisionados por potenciais harmônicos [18, 19, 31-37] e potenciais periódicos e/ou não-lineares [60, 64]. Os condensados com interação dipolo-dipolo são facilmente distinguíveis daqueles com interação puramente de contato por sua peculiar dependência do potencial de aprisionamento externo [18]. Em muitos aspectos, poder-se-ia dizer que o potencial de confinamento externo desempenha um papel fundamental no estudo de gases quânticos, tanto do ponto de vista teórico quanto do ponto de vista experimental. Há trabalhos experimentais [41, 88, 89] e numéricos [58, 65, 66] que destacam a eficiência de redes ópticas quase periódicas em confinamentos de átomos, entretanto, estes estudos se limitam ao estudo de bósons interagindo fracamente (interação isotrópica de curto alcance), ou seja, sem levar em conta a interação entre os dipolos (interação dipolo-dipolo).

Em contraste com maioria dos estudos teóricos, numéricos e experimentais em condensados, enfatizamos neste trabalho o potencial quase periódico ou duplamente periódico combinado com o potencial harmônico em sistemas de gases quânticos constituídos por bósons com interação anisotrópica de longo alcance (interação dipolo-dipolo). Uma das principais vantagens da rede óptica quase periódica é que o potencial efetivo criado por laser contrapropagantes pode ser facilmente manipulado alterando a frequência, intensidade, polarização e o arranjo geométrico entre os lasers. Por exemplo, a amplitude da rede óptica pode ser controlada através da intensidade do laser [90].

Conseqüentemente, a rede óptica quase periódica eleva o nível de controlabilidade do condensado, alterando propriedades como por exemplo: as dimensões do sóliton; induzir transições quânticas de fase e eventualmente controlar a distribuição de átomos – *condition sine qua non* para o desenvolvimento de computação quântica, como proposto por Jackschet *al.* [91].

Poder-se-ia argumentar que outros tipos de potencias de aprisionamento externo, como por exemplo lasers de CO₂ [92-94] ou armadilhas de dipolo óptico [4], poderiam atingir o(s) mesmo(s) objetivo(s), entretanto, estas alternativas exigem um aparato experimental muito mais sofisticado. Portanto, as redes ópticas quase periódicas fornecem a possibilidade de estudar regimes quânticos mais complexos e mais relevantes por questões teóricas e experimentais que permanecem pendentes.

Em um resfriamento à laser, pouco abaixo da transição atômica, o átomo estará mais ressonante com feixes contrapropagantes. Isto faz com que o fóton seja absorvido na direção oposta ao movimento dos átomos, criando conseqüentemente uma força de fricção e resfriando a amostra. Porém, este método não é suficiente para aprisionar os átomos, a nuvem atômica tem sua energia cinética reduzida, mas continua a se expandir na câmara. O confinamento ocorre efetivamente através da escolha adequada da polarização circular dos lasers e/ou através de campos magnéticos externos [39, 40].

A interação dipolo-dipolo possui duas propriedades principais, em primeiro lugar se trata de uma interação de longo alcance. Em segundo lugar, uma dependência do ângulo entre os dipolos resulta em um comportamento anisotrópico, contrastando fortemente com o comportamento isotrópico e de curto alcance da interação de contato [31, 95].

Diante das específicas apresentadas acima, averigua-se que existem poucos estudos envolvendo átomos frios com o propósito de investigar a transição quântica de fases em redes ópticas, periódica e quase periódica, através do modelo de Bose-Hubbard. O modelo de Bose-Hubbard foi proposto em 1989 por Fisher *et al.*[9] e previa a existência de um diagrama de fases quânticos que, inicialmente, descrevia a transição entre duas fases: superfluida e isolante de Mott. Posteriormente, Jakchs *et al.*[50] propôs que o modelo fosse aplicado ao estudo de gases quânticos ultrafrios. Finalmente, em 2002, Greiner *et al.*[10] demonstrou experimentalmente a transição de fase prevista pelo modelo supracitado. Do ponto de vista experimental, isto não é tudo, o modelo de Bose-Hubbard foi responsável por desencadear esforços que culminaram na observação de uma nova fase quântica em 2007 [96]. Recentemente, o interesse neste modelo foi renovado graças a possibilidade teórica de observar uma fase supersólida [97, 98]. Um supersólido, ou uma fase supersólida, é o resultado de um fenômeno paradoxal em que uma substância resistente ao cisalhamento – um sólido – também apresenta comportamento característico de um superfluido [99].

Devido à possibilidade de encontrar novas fases, alguns trabalhos teóricos e numéricos enfatizam a importância da rede óptica [66, 100-107]. Em especial podemos destacar: um estudo teórico que investiga o diagrama de fases em uma rede óptica quase periódica [104]; um estudo numérico que leva em conta as interações dipolares [108] e um estudo que utiliza Aproximação Variacional para solucionar o hamiltoniano de Bose-Hubbard [109]. Além disso, devemos enfatizar ainda as oportunidades que o modelo fornece em: computação quântica [84] e emaranhamento quântico [85-87]. Neste trabalho, recorreremos à Aproximação de Campo Médio para solucionar os hamiltonianos e investigarmos o modelo de Bose-Hubbard em uma rede óptica periódica e/ou harmônica e em uma rede quase periódica. Assim, apresentamos o diagrama de fases para os respectivos sistemas do modo mais didático e detalhado possível.

3 OBJETIVOS

3.1 OBJETIVO GERAL

Estudar o comportamento de gases quânticos degenerados aprisionados, interagindo na presença de uma rede óptica quase periódica, através de soluções analíticas.

3.2 OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- Determinar as dimensões do sóliton e estimar o valor do potencial químico para gases quânticos aprisionados em uma configuração que combina potencial harmônico com o potencial quase periódico através do Método Variacional.
- Investigar as transições quânticas de fase presentes no modelo teórico de Bose-Hubbard.

4 METODOLOGIA TEÓRICA

Neste capítulo abordaremos três classes de fenômenos conhecidos em gases quânticos degenerados que estão relacionados entre si. Do ponto de vista físico-matemático esses modelos partem do Hamiltoniano em segunda quantização que, em física de muitos corpos, descreve o comportamento de muitas partículas interagindo. Na seção 4.1 apresentamos o Hamiltoniano de muitos bósons que nos permite deduzir a Equação de Gross-Pitaevskii com e sem interação dipolo-dipolo e o Modelo de Bose-Hubbard. Na seção 4.1.1, abordaremos a Equação de Gross-Pitaevskii considerando a combinação de um potencial harmônico combinado com um potencial quase periódico. Na seção 4.1.2 descrevemos o Método de Aproximação Variacional empregado na resolução da Equação de Gross-Pitaevskii, como geralmente esta equação não admite solução analítica exata empregaremos o Método Variacional, que é uma abordagem analítica. Em consequência do Método Variacional teremos que empregar um método numérico para solucionar um conjunto de equações não-lineares que relacionam as dimensões do sóliton às quantidades físicas que descrevem o condensado. A utilização do método numérico utilizado na linguagem MATLAB [110], encontra-se disponível no apêndice E. Na seção 4.2 abordaremos a Equação de Gross-Pitaevskii para um condensado com interação dipolo-dipolo e, na seção 4.2.1, apresentaremos o Método de Aproximação Variacional adequado à esta equação. Na seção 4.3 apresentaremos um breve estudo sobre um gás degenerado de Fermi com interação dipolo-dipolo. Na seção 4.4 apresentaremos qualitativamente o Método de Newton-Raphson. Finalmente, na seção 4.5, apresentaremos um estudo sobre transição quântica de fases, na seção 4.5.1 abordaremos o caso homogêneo – adequado às redes periódicas --, e na seção 4.5.2 o caso não homogêneo – adequado às redes quase-periódicas.

Apesar das dificuldades intrínsecas em descrever um gás degenerado de férmions, o estudo desses gases é impulsionado pela possibilidade de simular fenômenos em física do estado sólido, como já citado no capítulo 2. No capítulo 5 e no capítulo 6 damos mais detalhes sobre as possibilidades fornecidas pelos gases quânticos.

4.1 HAMILTONIANO DE MUITOS BÓSONS

Nesta seção apresentamos o Hamiltoniano de muitos bósons onde, basicamente, todos os principais modelos teóricos contemplados neste trabalho derivam. O Hamiltoniano de muitos bósons interagindo e confinados em um potencial de aprisionamento externo é dado por [111]:

$$\hat{H} = \int \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}, t) \hat{H}_0 \hat{\Psi}(\vec{r}, t) dr + \frac{1}{2} \iint \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}, t) \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}', t) V(\vec{r} - \vec{r}') \hat{\Psi}(\vec{r}', t) \hat{\Psi}(\vec{r}, t) dr dr' \quad (4.1)$$

onde, o Hamiltoniano para um única partícula é definida por:

$$\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}) \quad (4.2)$$

O primeiro termo na equação (4.2) se trata do operador de energia cinética, e o segundo termo é o operador da energia potencial. Na equação (4.1), os termos $\hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}', t)$ e $\hat{\Psi}(\vec{r}, t)$ são os operadores de criação e aniquilação de campos de bósons. Tais operadores obedecem às seguintes regras de comutações:

$$[\hat{\Psi}(\vec{r}, t), \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}', t)] = \delta(\vec{r} - \vec{r}') \quad (4.3)$$

$$[\hat{\Psi}(\vec{r}, t), \hat{\Psi}(\vec{r}', t)] = 0 \quad (4.4)$$

$$[\hat{\Psi}(\vec{r}', t), \hat{\Psi}(\vec{r}, t)] = 0 \quad (4.5)$$

O termo $V(\vec{r} - \vec{r}')$, na equação (4.1), se representa as interações entre o bósons. Podemos defini-la como interação de contato, ou como interação dipolo-dipolo.

4.1.1 EQUAÇÃO DE GROSS-PITAEVSKII

Na equação (4.1), o seguinte potencial de interação de contato entre os bósons é escrito como:

$$V(\vec{r} - \vec{r}') = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m} \delta(\vec{r} - \vec{r}') \quad (4.6)$$

O potencial de interação de contato é caracterizado por uma grandeza singular conhecida como comprimento de espalhamento a na equação (4.6). O termo $\delta(\vec{r} - \vec{r}')$ corresponde, na equação (4.6), à função delta de Dirac, e m é a massa da partícula (não é a massa reduzida). Quando o Comprimento de Espalhamento assume um valor maior que zero ($a > 0$), a interação é dita repulsiva e esta por sua vez é conhecida por sua estabilidade no estudo de sólitons em condensados.

Ao substituírmos a equação (4.6) na equação (4.1), obtemos um sistema quântico de muitos bósons interagindo através da notação de Heisenberg [112]:

$$i\hbar \frac{\partial \hat{\Psi}(\vec{r}', t)}{\partial t} = [\hat{\Psi}(\vec{r}', t), \hat{H}] \quad (4.7)$$

Inserindo a equação (4.1) na equação (4.7) e obedecendo às regras usuais de comutações estabelecidos pelas equações (4.3), (4.4) e (4.5), temos:

$$i\hbar \frac{\partial \hat{\Psi}(\vec{r}', t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \hat{\Psi}(\vec{r}', t) + V(\vec{r}) \hat{\Psi}(\vec{r}', t) + \frac{4\pi\hbar^2 a}{m} \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}', t) \hat{\Psi}(\vec{r}', t) \hat{\Psi}(\vec{r}', t) \quad (4.8)$$

Em virtude do estado de condensação, os bósons ocupam o mesmo estado quântico fundamental, isto equivale a dizer que o estado do condensado varia muito pouco em função do tempo. Portanto, podemos recorrer à aproximação de Bogoliubov [5] que decompõe o operador de campo de bósons em uma onda macroscópica que, descreve aproximadamente o estado do condensado:

$$\hat{\Psi}(\vec{r}', t) = \Psi(\vec{r}', t) + \delta\hat{\Psi}(\vec{r}', t) \quad (4.9)$$

O primeiro termo na equação (4.9) é o parâmetro de ordem, o segundo termo descreve as pequenas flutuações quânticas e/ou térmicas. Inserindo a equação (4.9) na equação (4.8) e desprezando as flutuações quânticas do condensado, temos [113, 114]:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\vec{r}, t) + V(\vec{r}) \Psi(\vec{r}, t) + \frac{4\pi\hbar^2 a}{m} |\Psi(\vec{r}, t)|^2 \Psi(\vec{r}, t) \quad (4.10)$$

Um dos aspectos mais importantes da equação de Gross-Pitaevskii é a sua não-linearidade. Essa não linearidade surge da interação entre os bósons e estabelece uma correspondência entre o estudo de gases quânticos e a óptica não-linear [72]. O primeiro termo no lado direito da equação (4.10) corresponde à energia cinética, o segundo termo corresponde ao potencial de aprisionamento, o terceiro termo corresponde à interação de

contato entre os bósons. Esta equação é uma equação não-linear de Schrödinger, e contrasta com a equação de Schrödinger por conter um termo não-linear e por ser regida pelo potencial químico e não pela energia, mais detalhes no apêndice A.

A equação (4.10) geralmente é empregada em sua forma adimensional:

$$i \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = -\frac{1}{2} \nabla^2 \Psi(\vec{r}, t) + V(\vec{r}) \Psi(\vec{r}, t) + 4\pi a |\Psi(\vec{r}, t)|^2 \Psi(\vec{r}, t) \quad (4.11)$$

Maiores detalhes envolvendo a equação (4.11) podem ser encontrados no apêndice B, que detalha o procedimento de redução dimensional empregado, baseado na referência [115]. A equação (4.11) não admite solução analítica exata, eis motivo pelo qual precisamos utilizar métodos numéricos e/ou analíticos para estudar sistemas descrito por ela. Nesta dissertação empregamos o Método de Aproximação Variacional, que é um método analítico já consolidado.

4.1.2 MÉTODO DE APROXIMAÇÃO VARIACIONAL PARA CONDENSADOS COM INTERAÇÃO DE CONTATO

Nesta seção abordaremos a aplicação do Método de Aproximação Variacional para um condensado de bósons aprisionados por uma rede óptica quase periódica em combinação com o potencial harmônico. Através do Método de Aproximação Variacional podemos relacionar as dimensões do sóliton com os parâmetros da rede óptica e com a intensidade e natureza da interação presente no condensado, bem como estimar o valor do potencial químico por partícula.

A Aproximação Variacional [116] vem se consolidando fortemente nos estudos de gases quânticos diluídos ultrafrios por se tratar de uma aproximação extremamente eficiente, precisa e até mesmo elegante. A Aproximação Variacional consiste essencialmente em reescrever a equação de Gross-Pitaevskii como uma densidade lagrangiana. A partir desta reformulação, podemos obter novamente a equação de Gross-Pitaevskii através da aplicação da equação de Euler-Lagrange à densidade lagrangiana. Por outro lado, podemos obter a lagrangiana efetiva do sistema e ao aplicar nela a equação de Euler-Lagrange, desta vez, obteremos um conjunto de equação não-lineares que

relacionam as dimensões do sóliton às quantidades fundamentais que descrevem a interação entre as partículas. A equação (4.11) pode ser reescrita como [17, 116]:

$$\mathcal{L} = \frac{i\hbar}{2} \left\{ \Psi(\vec{r}, t)^* \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} - \Psi(\vec{r}, t) \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)^*}{\partial t} \right\} - \frac{1}{2} |\nabla \Psi(\vec{r}, t)|^2 - V(\vec{r}) |\Psi(\vec{r}, t)|^2 - \frac{4\pi a}{2} |\Psi(\vec{r}, t)|^4 \quad (4.12)$$

O potencial de aprisionamento externo que adotamos nesse estudo é uma combinação entre o potencial descrito por osciladores harmônicos [18, 19, 31-37] e uma rede óptica quase periódica [57, 58, 117]:

$$V(\vec{r}) = \frac{1}{2}(x^2 + y^2) + U[\varepsilon \sin^2 z + (1 - \varepsilon) \sin^2 \gamma z] \quad (4.13)$$

A equação (4.13) é a forma adimensional do potencial considerado no Apêndice B, equação (B.12). Onde U é a amplitude da rede óptica, ε e γ são parâmetros que definem o comportamento da rede óptica – em uma rede óptica quase periódica ou duplamente periódica adotamos $\varepsilon = 0.3$ e $\gamma = 2$.

De acordo com a teoria de campo médio, o parâmetro de ordem $\Psi(\vec{r}, t)$ é a solução da Equação Dipolar de Gross-Pitaevskii. A Figura 7 exhibe o comportamento do potencial definido na equação (4.13). Por uma questão de convenção adotamos $x^2 + y^2 = \rho^2$, ou seja, utilizamos coordenadas polares para este estudo envolvendo bósons levando em consideração apenas interação de contanto.

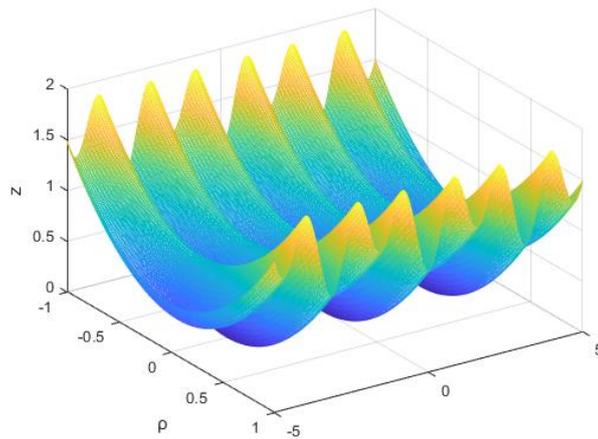


Figura 7: Potencial de aprisionamento gerado pela equação (4.13) quando $\varepsilon = 0$ e $U=1$. As dimensões espaciais da rede óptica sóliton estão dadas em unidades de $1\mu\text{m}$. Note que adotamos: $x^2 + y^2 = \rho^2$.

Podemos transformar a equação 4.11 em uma equação estacionária, para isso basta considerarmos:

$$\Psi(\vec{r}, t) = e^{-i\mu t/\hbar}\varphi(\vec{r}) \quad (4.14)$$

A equação (4.14) quando considerado o *ansatz* gaussiano (Eq. 4.16), e realizando os cálculos conforme Eq. (4.17), resulta em:

$$\mathcal{L} = \mu\varphi(\vec{r}) - \frac{1}{2}|\nabla\varphi(\vec{r})|^2 - V(\vec{r})|\varphi(\vec{r})|^2 - \frac{4\pi a}{2}|\varphi(\vec{r})|^4 \quad (4.15)$$

Como solução da equação (4.15), adotamos um *ansatz* gaussiano, também conhecida por função teste [116] da forma:

$$\varphi(\vec{r}) = \frac{\sqrt{N}}{\pi^{3/4}WV^{1/2}} e^{-\frac{x^2+y^2}{2W^2} - \frac{z^2}{2V^2}} \quad (4.16)$$

Na equação (4.16), o termo N corresponde à norma, o termo W refere-se a largura do sóliton na direção x e y , por outro lado V é a largura do sóliton axial na direção z . Podemos integrar a equação (4.15) escrita em termos da Eq. 4.16 – obtendo assim a Lagrangiana efetiva conforme explicito na equação (4.17). Quando aplicamos a equação de Euler-Lagrange sobre a Lagrangiana efetiva equação (4.17), obtemos um conjunto de equações não-lineares que relacionam as dimensões do sóliton à quantidade fundamental que descreve as interações entre bósons. A lagrangiana efetiva é dada por:

$$L = \int \mathcal{L} dr = \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{L}(x, y, z) dx dy dz \quad (4.17)$$

A equação (4.14) quando considerado o *ansatz* gaussiano, e realizando os cálculos conforme Eq. 4.17, resulta em:

$$L = \mu N - 0.5NW^{-2} - 0.25NV^{-2} - 0.5NW^2 - 0.5NU[\varepsilon(1 - e^{-V^2}) + (1 - \varepsilon)(1 - e^{-V^2V^2})] - \frac{N^2 a}{\sqrt{2\pi W^2 V}} \quad (4.18)$$

Aplicamos sobre a equação (4.18) a equação (4.19):

$$\frac{\partial L}{\partial q} - \frac{d}{dt} \left[\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right] = 0 \quad (4.19)$$

A equação (4.19), neste caso, significa apenas que temos que derivar a equação (4.18) em relação as dimensões W e V , e em relação ao número de partículas N – isto é: $q = (W, V, N)$. Como assumimos que as dimensões do sóliton, os parâmetros da rede e a interação entre as partículas não estão variando, como consequência o termo d/dt é igual a zero. As equações não-lineares serão obtidas a partir da lagrangiana efetiva, equação (4.18). Derivando a equação (4.18) em relação a W , temos:

$$\frac{\partial L}{\partial W} = NW^{-3} - NW + \frac{2N^2a}{\sqrt{2\pi}W^3V} \quad (4.20)$$

Similar ao realizado anteriormente, ao derivarmos a equação (4.18) em relação a V , obtém-se:

$$\begin{aligned} \frac{\partial L}{\partial V} = 0.5NV^{-2} - NU[\varepsilon Ve^{-V^2} + (1 - \varepsilon)(1 + \gamma^2Ve^{-\gamma^2V^2})] \\ + \frac{N^2a}{\sqrt{2\pi}W^2V^2} \end{aligned} \quad (4.21)$$

As equações (4.20) e (4.21) relacionam as dimensões do sóliton à interação entre as partículas e aos parâmetros da rede óptica. Derivando a equação (4.18) em relação a N , temos:

$$\begin{aligned} \frac{\partial L}{\partial N} = \mu - 0.5W^{-2} - 0.25V^{-2} - W^2 - 0.5U[\varepsilon(1 - e^{-V^2}) + (1 - \varepsilon)(1 - e^{-\gamma^2V^2})] \\ - \frac{2Na}{\sqrt{2\pi}W^2V} \end{aligned} \quad (4.22)$$

Reorganizando os termos na equação (4.22), obtemos uma expressão para o potencial químico.

$$\begin{aligned} \mu = 0.5W^{-2} + 0.25V^{-2} + W^2 + 0.5U[\varepsilon(1 - e^{-V^2}) + (1 - \varepsilon)(1 - e^{-\gamma^2V^2})] \\ + \frac{2Na}{\sqrt{2\pi}W^2V} \end{aligned} \quad (4.23)$$

O potencial químico, equação (4.23), é estimado quando as equações (4.20) e (4.21) são solucionadas. As equações (4.20) e (4.21) constituem um sistema de equações não-lineares. Esse conjunto de equações não-lineares são solucionadas utilizando o método de Newton-Raphson [118, 119]. A equação (4.28) permite prever o valor para o potencial químico quando as equações não-lineares são solucionáveis. O Método de Newton-Raphson empregado nesta dissertação será abordado no capítulo 4.4 e no apêndice E.

4.2 EQUAÇÃO DE GROSS-PITAEVSKII COM INTERAÇÃO DIPOLO-DIPOLO

Nesta seção abordamos a Equação de Gross-Pitaevskii para um condensado com interação dipolo-dipolo. As interações de contato – abordadas na seção 4.1 – são isotrópicas, o que significa que sua natureza não depende do formato do potencial de aprisionamento externo, por exemplo, considerando um gás interagindo repulsivamente, independentemente do formato do condensado – seja do tipo charuto, seja do tipo disco – a interação permanece do tipo repulsivo, note o leitor que o formato do sóliton depende da configuração das armadilhas magneto-ópticas. Essa independência que a natureza das interações de contato desempenha em relação ao potencial de aprisionamento é o que se denomina isotrópico. As interações dipolo-dipolo, que são interações anisotrópicas de longo alcance – isto é, ao contrário das interações puramente de contato, depende fortemente da configuração do potencial de aprisionamento, apesar do momento magnético de dipolo ser uma quantidade intrínseca, os dipolos precisam estar alinhados em uma determinada configuração para privilegiar uma determinada natureza de interação, a qual pode ser repulsiva ou atrativa –, são provenientes de átomos com momento de dipolo magnético e de moléculas com momento de dipolo elétrico relativamente grande [37]. Para um gás quântico com interação dipolo-dipolo o Hamiltoniano em segunda quantização é [111]:

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \int \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}, t) \hat{H}_0 \hat{\Psi}(\vec{r}, t) dr \\ & + \frac{1}{2} \iint \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}, t) \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}', t) V(\vec{r} - \vec{r}') \hat{\Psi}(\vec{r}', t) \hat{\Psi}(\vec{r}, t) dr dr' \\ & + \frac{1}{2} \iint \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}, t) \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}', t) U_{dd}(\vec{r} - \vec{r}') \hat{\Psi}(\vec{r}', t) \hat{\Psi}(\vec{r}, t) dr dr' \end{aligned} \quad (4.24)$$

$$U_{dd}(\vec{r} - \vec{r}') = \frac{\mu_0 \tilde{\mu}^2}{4\pi} \frac{1 - \cos^2 \theta}{|\vec{r} - \vec{r}'|^3} \quad (4.25)$$

O potencial da equação (4.25) vem sendo adotada para estudos em gases quânticos desde que a equipe de Jürgen, et al. [120] observou a condensação de átomos de ^{52}Cr . Na equação (4.25), μ_0 é a permissividade magnética do vácuo, $\tilde{\mu}$ é o momento de dipolo magnético e θ é o ângulo entre os dipolos. Inserindo a equação (4.24) na equação (4.7) e desprezando as flutuações quânticas, temos:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\vec{r}, t) + V(\vec{r}) \Psi(\vec{r}, t) + \frac{4\pi \hbar^2 a N}{m} |\Psi(\vec{r}, t)|^2 \Psi(\vec{r}, t) + \frac{\mu_0 \tilde{\mu}^2 N}{4\pi} \left\{ \int \frac{1 - \cos^2 \theta}{|\vec{r} - \vec{r}'|^3} |\Psi(\vec{r}', t)|^2 d\vec{r}' \right\} \Psi(\vec{r}, t) \quad (4.26)$$

O primeiro termo no lado direito da equação (4.26) corresponde à energia cinética, o segundo termo corresponde ao potencial de aprisionamento, o terceiro termo corresponde à interação de contato entre os bósons, por fim, o último termo descreve a interação dipolar (dipolo-dipolo) entre os bósons. Observe que o parâmetro N foi introduzido explicitamente apenas ao condensado dipolar. Por uma questão de viabilizar estudos teóricos e numéricos é mais conveniente lidar com a equação (4.26) em sua forma adimensional [18, 19, 31, 95, 111, 121, 122]:

$$i \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = -\frac{1}{2} \nabla^2 \Psi(\vec{r}, t) + V(\vec{r}) \Psi(\vec{r}, t) + 4\pi a |\Psi(\vec{r}, t)|^2 \Psi(\vec{r}, t) + 3a_{dd} \left\{ \int \frac{1 - \cos^2 \theta}{|\vec{r} - \vec{r}'|^3} |\Psi(\vec{r}', t)|^2 d\vec{r}' \right\} \Psi(\vec{r}, t) \quad (4.27)$$

Em contraste com condensados com interação puramente de contato, a interação dipolo-dipolo depende fortemente da geometria do potencial de aprisionamento, como ilustra a figura (8), de tal forma que um condensado na forma de charuto com interação dipolo-dipolo corresponde a uma interação dipolo-dipolo atrativa, como ilustra o quadro (b) da Figura (9) e o quadro (d) da figura (8). Na equação (4.27), a interação dipolo-dipolo é caracterizada por uma quantidade singular conhecida por força de interação dipolar a_{dd} .

Em um gás quântico, a interação dipolo-dipolo é responsável por alterar muitas propriedades termodinâmicas, incluindo o caso não degenerado. Por exemplo, a interação dipolo-dipolo conduz o sistema a um desvio na temperatura crítica [121, 122]. Entretanto, os efeitos mais relevantes surgem no caso degenerado. Um dos efeitos das interações entre os dipolos é facilmente percebido nos sólitons tridimensionais. Como mostra a Figura (9). A natureza da interação dipolo-dipolo está intrinsecamente relacionada com o formato do sóliton: interação dipolo-dipolo repulsiva corresponde a um sóliton do tipo disco, Figura 9. (a), interação dipolo-dipolo atrativa corresponde a um sóliton do tipo charuto, figura 9(b). Do mesmo modo, uma interação repulsiva, quadro (c) da figura (8), corresponde a um condensado do tipo disco, quadro (a) da figura (9).

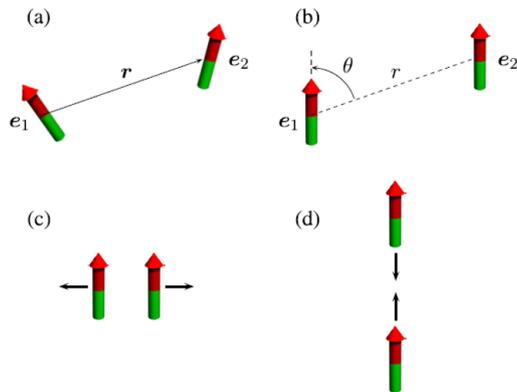


Figura 8: Quadro (a): dipolos não polarizados; Quadro (b): dipolos polarizados; Quadro (c): dipolos polarizados interagindo repulsivamente; Quadro (d): dipolos polarizados interagindo atrativamente. (Figura extraída da referência [33].)

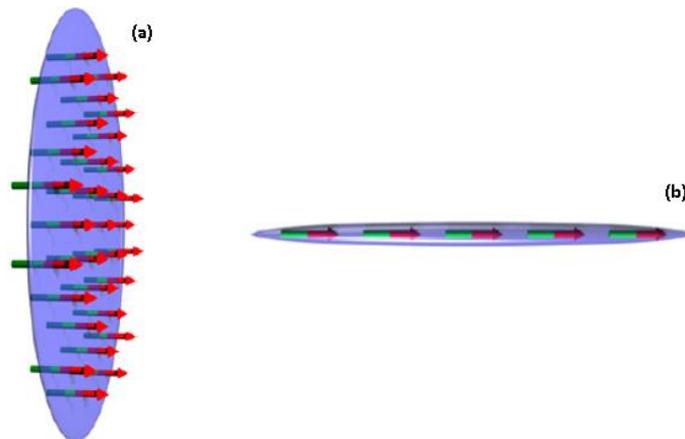


Figura 9: Quadro (a): Em um caso de interação dipolo-dipolo repulsiva, o sólito adquire o formato de um disco; Quadro (b): No outro extremo, quando os dipolos estão interagindo atrativamente, o sólito assume a forma de um cigarro. (Figura adaptada da referência [33].)

4.2.1 MÉTODO DE APROXIMAÇÃO VARIACIONAL APLICADO EM CONDENSADOS COM INTERAÇÃO DIPOLO-DIPOLO

Nesta seção abordaremos a aplicação do Método de Aproximação Variacional para um condensado de bósons com interação dipolo-dipolo aprisionados por uma rede óptica quase periódica em combinação com o potencial harmônico (ambos unidimensionais).

Através do Método de Aproximação Variacional podemos relacionar as dimensões do sóliton com os parâmetros da rede óptica e com a intensidade e natureza da interação presente no condensado, bem como estimar o valor do potencial químico por partícula.

A estabilidade do condensado é determinada através do princípio de mínima ação (minimização da energia) fornecido concomitantemente através da aplicação do Método de Aproximação Variacional. As soluções de algumas equações diferenciais, como a Equação De Gross-Pitaevskii, são conhecidas por soluções solitônicas (funções de onda macroscópica do tipo sóliton estável). O que significa na prática solucionar o sistema de equações não-lineares mantendo alguns parâmetros fixos, como por exemplo: a amplitude da rede óptica, o número de átomos *et cetera* [18, 123, 124]. Por se tratar de uma interação de longo alcance, o número de partículas no sistema exerce uma importância fundamental na estabilidade ou instabilidade do condensado [33]. A densidade lagrangiana para um condensado com interação dipolo-dipolo:

$$\begin{aligned} \mathcal{L} = & \frac{i\hbar}{2} \left\{ \Psi(\vec{r}, t)^* \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} - \Psi(\vec{r}, t) \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)^*}{\partial t} \right\} - \frac{1}{2} |\nabla \Psi(\vec{r}, t)|^2 \\ & - V(\vec{r}) |\Psi(\vec{r}, t)|^2 - \frac{4\pi a N}{2} |\Psi(\vec{r}, t)|^4 \\ & - \frac{3a_{dd} N}{2} \left\{ \int \frac{1 - \cos^2 \theta}{|\vec{r} - \vec{r}'|^3} |\Psi(\vec{r}', t)|^2 d\vec{r}' \right\} |\Psi(\vec{r}, t)|^2 \end{aligned} \quad (4.28)$$

Para estudarmos sólitons moveis no plano x-y, nós consideramos o seguinte potencial de aprisionamento externo [57, 58, 60, 117]:

$$V(\vec{r}) = \frac{1}{2} z^2 + U[\varepsilon \sin^2 z + (1 - \varepsilon) \sin^2 \gamma z] \quad (4.29)$$

O termo z^2 corresponde à armadilha magnética descrita na seção 2.2, e U é a amplitude da rede óptica, o termos ε e γ são parâmetros que permitem ajustar a diferença de fase e a periodicidade do laser, baseando-nos em outros estudos [13, 58, 66], adotaremos $\varepsilon = 0.3$ e $\gamma = 2$. A Figura 10 exhibe o comportamento descrito pela equação (4.29).

A configuração do potencial de aprisionamento externo, equação (4.29), permitirá ajustar a dimensão do sóliton ao longo do eixo z, enquanto que as outras dimensões do sóliton irão se ajustar naturalmente à ela, em outras palavras, o potencial descrito pela equação (4.29) irá confinar e “comprimir” o sóliton ao longo da direção z enquanto que, concomitantemente, a isto as dimensões x e y estão livres para se expandir ou contrair em

função desse tipo de confinamento. Essa configuração, teoricamente, permitirá que o sóliton se mova livremente ao longo do plano x-y [60].

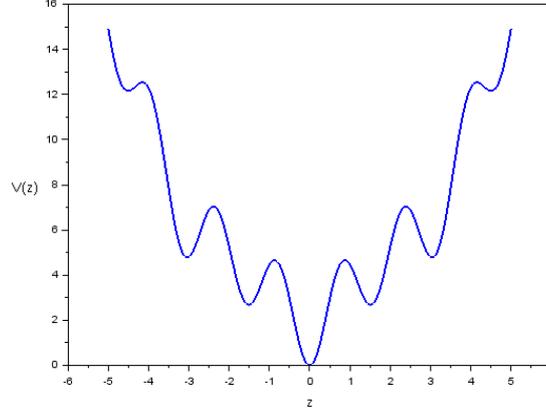


Figura 10: Potencial de aprisionamento gerado pela equação (4.29) quando $\varepsilon=0.3$, $\gamma=2$ e $U=1$. As dimensões espaciais da rede óptica estão dadas em unidades de $1\mu\text{m}$.

Para estudar analiticamente sólitons em um condensado constituído por partículas com interação dipolo-dipolo, nós utilizamos o seguinte *ansatz* [116]:

$$\varphi(\vec{r}) = \frac{\pi^{3/4}}{WV^{1/2}} e^{-\frac{x^2+y^2}{2W^2} - \frac{z^2}{2V^2}} \quad (4.30)$$

Ao inserirmos o parâmetro de ordem $\Psi(\vec{r}, t) = e^{-i\mu t/\hbar} \varphi(\vec{r})$ na equação (4.29) e integrando a densidade lagrangeana em relação às dimensões x, y e z, como na equação (4.17), obtemos a lagrangiana efetiva do sistema:

$$\begin{aligned} L = & \mu - 0.5W^{-2} - 0.25V^{-2} - 0.25V^2 \\ & - 0.25U[\varepsilon(1 - e^{-V^2}) + (1 - \varepsilon)(1 - e^{-\gamma^2 V^2})] \\ & - \frac{N}{\sqrt{2\pi}W^2V} [a - a_{\text{daf}}(k)] \end{aligned} \quad (4.31)$$

Ao aplicarmos a equação de Euler-Lagrange na lagrangiana efetiva, equação (4.31), isto é, ao derivarmos a lagrangiana efetiva em relação à W e V, obtemos:

$$\frac{\partial L}{\partial W} = W^{-3} + \frac{N}{\sqrt{2\pi W^2 V}} [2a - a_{dd}g(k)] \quad (4.32)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial L}{\partial V} = & 0.5V^{-3} - 0.5V - 0.5U[\varepsilon V e^{-V^2} + (1 - \varepsilon)\gamma^2 V e^{-\gamma^2 V^2}] \\ & + \frac{N}{\sqrt{2\pi W^2 V^2}} [a - a_{dd}h(k)] \end{aligned} \quad (4.33)$$

As equações (4.32) e (4.33) permitem relacionar as dimensões do sóliton com as quantidades fundamentais que descrevem as interações presentes no condensado e com os parâmetros da rede óptica. Quando as equações (4.33) e (4.34) são solucionáveis, a equação (4.35) fornece ainda a possibilidade de estimar o valor do potencial químico:

$$\begin{aligned} \mu = & 0.5W^{-2} + 0.25V^{-2} + 0.25V^2 + 0.25U[\varepsilon(1 - e^{-V^2}) + (1 - \varepsilon)(1 - e^{-\gamma^2 V^2})] \\ & + \frac{N}{\sqrt{2\pi W^2 V}} [a - a_{dd}f(k)] \end{aligned} \quad (4.34)$$

Esse conjunto de equações não-lineares, equações (4.32) e (4.33) podem ser resolvidas utilizando o método de Newton-Raphson [118, 119]. A equação (4.34) permite estimar o valor para o potencial químico quando as equações não-lineares são solucionáveis. A contribuição das interações entre os dipolos exige a adoção das seguintes identidades:

$$f(k) = \frac{1 + 2k^2 - 3k^3 d(k)}{1 - k^2} \quad (4.35)$$

$$g(k) = \frac{2 - 7k^2 - 4k^4 + 9k^4 d(k)}{(1 - k^2)^2} \quad (4.36)$$

$$h(k) = \frac{1 + 10k^2 - 2k^2 - 9k^2 d(k)}{(1 - k^2)^2} \quad (4.37)$$

$$d(k) = \frac{\tanh^{-1} \sqrt{1 - k^2}}{\sqrt{1 - k^2}} \quad (4.38)$$

Nestas equações $k=W/V$. Nosso estudo começa considerando valores fixos para a força de interação de dipolo e para o comprimento de espalhamento – baseado nos valores

empregados em outro estudo [31] -- o estudo supracitado demonstrou a possibilidade de se obter sólitons estáveis em um condensado com interação dipolo-dipolo atrativa, para tal utilizou-se quantidades para o comprimento de espalhamento menores que a força de interação dipolar em um modelo unidimensional. Nosso estudo, por outro lado, considera interações repulsivas e em três dimensões. A partir de então, determinamos os valores necessários das dimensões do sóliton e da amplitude da rede óptica quase periódica para aprisionar o condensado.

As equações (4.35-4.37) assumem valores assintóticos, como mostra a Figura 11, considerando que, no caso de condensados com interação dipolo-dipolo, a Aproximação Variacional é um método de aproximação excessiva. Isto se deve ao fato de que, em um condensado com interação anisotrópica de longo alcance repulsiva, as dimensões do sóliton no plano x-y é muito superior à dimensão do sóliton na direção z. Note que $k = W/V$. Consequentemente, k tende ao infinito, mas isso é um artifício matemático porque as dimensões do sóliton não podem ser infinitas entre si, podem ser muito maiores ou muito menores, mas jamais infinita.

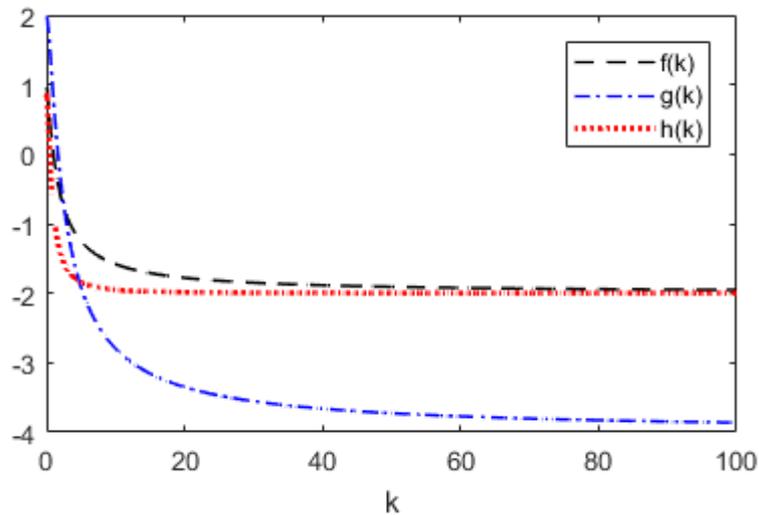


Figura 11: Valores assintóticos das funções (4.35-4.38).

Quando a interação dipolo-dipolo que estudamos é repulsiva -- como mostra o quadro (c) da figura 8 e o quadro (a) da figura 9 -- significa que k é muito grande. Como k é a razão entre a dimensão W e V, isto é o mesmo que dizer que W é muito grande ou que V é muito pequeno. No caso repulsivo, que é o único caso estudado nesta dissertação,

isso significa matematicamente que a equação $f(k)$ e $h(k)$, equações (4.35) e (4.37) respectivamente, tendem a -2 (quando k é muito grande) e a equação $g(k)$ tende a -4 (quando k é muito grande). Em virtude disto, podemos reescrever as equações (4.32-4.34) em função do comprimento de espalhamento efetivo, isto é, a interação dipolo-dipolo reduzir-se-á à afirmação: $a_{efetivo} = a + 2a_{dd}$. Em outras palavras, substituindo $g(k \rightarrow \infty) = -4$ a equação (4.32) fica:

$$\frac{\partial L}{\partial W} = W^{-3} + \frac{N}{\sqrt{2\pi}W^2V} [2a - a_{dd}(-4)] \quad (4.39)$$

$$\frac{\partial L}{\partial W} = W^{-3} + \frac{N}{\sqrt{2\pi}W^2V} [2a + 4a_{dd}] = W^{-3} + \frac{2N}{\sqrt{2\pi}W^2V} [a + 2a_{dd}] \quad (4.40)$$

Quando $h(k \rightarrow \infty) = -2$

$$\begin{aligned} \frac{\partial L}{\partial V} = 0.5V^{-3} - 0.5V - 0.5U[\varepsilon V e^{-V^2} + (1 - \varepsilon)\gamma^2 V e^{-\gamma^2 V^2}] \\ + \frac{N}{\sqrt{2\pi}W^2V^2} [a - a_{dd}(-2)] \end{aligned} \quad (4.41)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial L}{\partial V} = 0.5V^{-3} - 0.5V - 0.5U[\varepsilon V e^{-V^2} + (1 - \varepsilon)\gamma^2 V e^{-\gamma^2 V^2}] \\ + \frac{N}{\sqrt{2\pi}W^2V^2} [a + 2a_{dd}] \end{aligned} \quad (4.42)$$

Do mesmo modo, a equação (4.34), quando $f(k \rightarrow \infty) = -2$, é escrita como:

$$\begin{aligned} \mu = 0.5W^{-2} + 0.25V^{-2} + 0.25V^2 + 0.25U[\varepsilon(1 - e^{-V^2}) + (1 - \varepsilon)(1 - e^{-\gamma^2 V^2})] \\ + \frac{N}{\sqrt{2\pi}W^2V} [a + 2a_{dd}] \end{aligned} \quad (4.43)$$

4.3 EQUAÇÃO HIDRODINÂMICA DE CAMPO MÉDIO

Nesta seção abordamos uma descrição teórica análoga à Equação de Gross-Pitaevskii com interação dipolo-dipolo. Ao contrário dos modelos até aqui abordados, um

gás degenerado de Fermi com interação dipolo-dipolo é descrito em termos da energia de Fermi – em contraste com o comprimento de espalhamento que é a quantidade fundamental que descreve a interação de contato entre bósons.

Um estudo que leva em conta os efeitos das interações dipolares em um gás degenerado de férmions possui a notabilíssima vantagem de ser mais estável. Um condensado de bósons geralmente é mais frágil e de curta duração [19]. Por outro lado, o estudo com gases degenerados de bósons possui a vantagem de possuir um parâmetro de ordem simples. Uma descrição microscópica de um gás degenerado de férmions é mais trabalhosa devido à assimetria intrínseca de um sistema de muitos férmions – dificultando a implementação de um parâmetro de ordem. Devido à complexidade em descrever um sistema com muitos férmions, aproximações são frequentemente usadas [125-130]. Existem estudos que exploram diferentes métodos de aproximações [123, 131-133]. Entretanto, para o estudo de observáveis macroscópicas, uma descrição hidrodinâmica, frequentemente em acordo com resultados experimentais não requer uma descrição exata e/ou precisa da assimetria do sistema [19].

Apresentamos uma equação tridimensional similar à equação de Gross-Pitaevskii na presença de um potencial de aprisionamento unidimensional na direção z , nesta seção uma descrição teórica aproximada para gases quânticos degenerados de férmions através do modelo hidrodinâmico. Uma descrição análoga à equação de Gross-Pitaevskii pode ser dada por [19]:

$$\begin{aligned} \mu\sqrt{n(\vec{r})} = & -\frac{\hbar^2}{8m}\nabla^2\sqrt{n(\vec{r})} + V(\vec{r})\sqrt{n(\vec{r})} + \frac{\hbar^2}{2m}[6\pi^2Nn(\vec{r})]^{2/3}\sqrt{n(\vec{r})} \\ & + \frac{3a_{dd}\hbar^2N}{m}\left\{\int\frac{1-3\cos^2\theta}{|\vec{r}-\vec{r}'|^3}n(\vec{r}')d\vec{r}'\right\}\sqrt{n(\vec{r})} \end{aligned} \quad (4.44)$$

O termo que contém ∇^2 corresponde ao termo quântico de pressão, $V(\vec{r})$ é o potencial, a_{dd} é a força de interação dipolar, N é o número de átomos presente no condensado, $n(r)$ é uma função análoga ao parâmetro de ordem, o ângulo θ corresponde ao ângulo entre os dipolos, o termo $|\vec{r}-\vec{r}'|$ equivale à distância entre os dipolos. Os efeitos da assimetria é incluindo aproximadamente através de uma densidade de lagrangiana apropriada ou através da densidade de energia do sistema [134-136]. Em uma temperatura suficientemente baixa, o gás de férmions entra no regime degenerado. A

maioria das propriedades, como o formato do sóliton, densidade atômica e o potencial químico, podem ser determinados através das equações hidrodinâmicas de Landau. Estes resultados só são válidos quando a força de interação dipolar é relativamente fraca. Uma discrepância ocorre quando este modelo é aplicado ao estudo de férmions com dipolos interagindo fortemente. Entretanto, o modelo pode ainda ser expandido acrescentando termos que contribuem para a deformação da superfície de Fermi. O que significa, na prática, acrescentar os seguintes termos à equação hidrodinâmica de campo médio, equação (4.44) [18]:

$$\mu_0 = -\frac{28\hbar^2}{135m}(6\pi^2)^{1/3}(3a_{dd})^2\{Nn(\vec{r})\}^{4/3} - \frac{14\hbar^2}{9m}(3a_{dd})^2\{Nn(\vec{r})\}^{4/3} \quad (4.45)$$

O primeiro termo na equação (4.45) corresponde à segunda parte da correção de Hartree-Fock [137, 138] e o segundo termo é a correção de Brueckner-Goldstone [137, 139, 140]. Como nosso estudo se restringe a átomos de ^{161}Dy – que são caracterizados por uma interação de dipolo relativamente fraca de $130a_0$, assim como Adhikari [19], também desprezaremos as correções de Hartree-Fock e Brueckner-Goldstone. A força de interação dipolar adotada está em unidades do raio atômico de Bohr a_0 .

Para estudarmos sólitons moveis no plano x-y, nós consideramos o seguinte potencial de aprisionamento externo [57, 58, 60, 117], o mesmo utilizado na seção anterior:

$$V(\vec{r}) = \frac{1}{2}z^2 + U[\varepsilon\sin^2z + (1 - \varepsilon)\sin^2\gamma z] \quad (4.46)$$

Assim como no caso bosônico, a estabilidade do sistema depende essencialmente de três fatores, além do formato do potencial de aprisionamento externo: energia de Fermi (comprimento de espalhamento no caso dos bósons); força de interação dipolo-dipolo e a quantidade de partículas que constituem o sistema. A equação (4.44) pode ser reescrita como uma densidade de lagrangiana adimensional como [19]:

$$\begin{aligned} \mathcal{L} = \mu n(\vec{r}) - \frac{1}{8} \left| \nabla \sqrt{n(\vec{r})} \right|^2 - V(\vec{r})n(\vec{r}) - \frac{3}{10} (6\pi^2 N)^{2/3} [n(\vec{r})]^{5/3} \\ - \frac{3a_{dd}N}{2} \left\{ \int \frac{1 - 3\cos^2\theta}{|\vec{r} - \vec{r}'|^3} n(\vec{r}') d\vec{r}' \right\} n(\vec{r}) \end{aligned} \quad (4.47)$$

Utilizando o seguinte *ansatz* [19]:

$$n(\vec{r}) = \frac{\pi^{3/2}}{W^2 V} e^{-\frac{x^2+y^2}{W^2} - \frac{z^2}{V^2}} \quad (4.48)$$

Ao inserirmos a equação (4.48) na equação (4.47) e integrarmos em relação à x, y e z (intervalo de integração de $-\infty$ a $+\infty$), obtemos:

$$\begin{aligned} L = & \mu - 0.125W^{-2} - 0.0625V^{-2} - 0.25V^2 \\ & - 0.25U[\varepsilon(1 - e^{-V^2}) + (1 - \varepsilon)(1 - e^{-\gamma^2 V^2})] \\ & - \sqrt{\frac{3}{5}} \frac{9}{50\hbar} (6\pi^2 N)^{2/3} W^{-4/3} V^{-2/3} + \frac{a_{dd} f(k)}{\sqrt{2\pi}} NW^{-2} V^{-1} \end{aligned} \quad (4.49)$$

Através da lagrangiana efetiva do sistema, equação (4.49), podemos obter um conjunto de equações não-lineares que relacionam as dimensões do sóliton às quantidades fundamentais que descrevem o sistema, como por exemplo, amplitude da rede óptica, força de interação dipolar, energia de Fermi. Derivando a Eq. (4.49) em relação a W (bidimensional) ou seja, $\partial L/\partial W = 0$, e $(\partial L/\partial V = 0)$ em relação a V (largura unidimensional), obtemos as equações (4.50) e (4.51):

$$\frac{\partial L}{\partial W} = 0.25W^{-3} + \sqrt{\frac{3}{5}} \frac{6}{25\hbar} (6\pi^2 N)^{2/3} W^{-7/3} V^{-2/3} - \frac{a_{dd} g(k)}{\sqrt{2\pi}} NW^{-3} V^{-1} \quad (4.50)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial L}{\partial V} = & 0.125V^{-3} - 0.5V - 0.5U[\varepsilon V e^{-V^2} + (1 - \varepsilon)\gamma^2 V e^{-\gamma^2 V^2}] \\ & + \sqrt{\frac{3}{5}} \frac{6}{50\hbar} (6\pi^2 N)^{2/3} W^{-4/3} V^{-5/3} - \frac{a_{dd} h(k)}{\sqrt{2\pi}} NW^{-2} V^{-2} \end{aligned} \quad (4.51)$$

Quando as equações (4.50) e (4.51) são solucionáveis, podemos estimar o valor do potencial químico através da seguinte equação:

$$\begin{aligned}
\mu = & 0.125W^{-2} + 0.0625V^{-2} + 0.25V^2 \\
& + 0.25U[\varepsilon(1 - e^{-V^2}) + (1 - \varepsilon)(1 - e^{-\gamma^2V^2})] \\
& + \sqrt{\frac{3}{5}} \frac{9}{50\hbar} (6\pi^2N)^{2/3}W^{-4/3}V^{-2/3} - \frac{2a_{dd}f(k)}{\sqrt{2\pi}}NW^{-2}V^{-1}
\end{aligned} \tag{4.52}$$

As funções $f(k)$, $g(k)$ e $h(k)$ são as mesmas definidas pelas equações (4.35-4.37). Cabe salientar que elas são convenientemente introduzidas em decorrência da interação dipolo-dipolo, isto é, são identidades matemáticas utilizadas nesse contexto.

4.4 MÉTODO DE NEWTON-RAPHSON PARA EQUAÇÕES NÃO-LINEARES

Neste capítulo abordaremos qualitativamente o método numérico de Newton-Raphson [110]. Nesta dissertação utilizaremos o método de Newton-Raphson para solução as equações não-lineares. As equações que relacionam as dimensões do sóliton ao comprimento de espalhamento e aos parâmetros da rede óptica, como as equações (4.20) e (4.21), são equações não-lineares que formam um sistema de equações não-lineares com duas equações e duas incógnitas, a resolução destas equações são utilizadas na equação (4.16) e permitem prever a forma do sóliton, bem como estimar o valor do potencial químico através da equação (4.23). O mesmo ocorre para o condensado com interação dipolo-dipolo através das equações não-lineares descritas nas equações (4.31) e (4.32) e para o gás degenerado de Fermi através das equações (4.50) e (4.51). Em virtude dessa demanda, abordaremos qualitativamente o Método de Newton Raphson para resolver estas equações.

As equações não-lineares, em geral, são funções que não podem ser expressas em termos analíticos – isto é, não pode-se escrever uma variável em função de outra de forma explícita ou simplesmente não admitem soluções exatas – por exemplo, considere a equação (4.20) e perceba que não se pode explicitar W em função dos demais parâmetros e vice-versa. Portanto, é necessário recorrer ao uso de ferramentas computacionais.

Seja $f(x)$ uma função contínua e diferenciável, o Método de Newton-Raphson nos permite obter uma solução numérica de equações não-lineares da forma $f(x) = 0$. A

estimativa inicial da solução começa atribuindo um valor inicial x_1 . A segunda estimativa é dada a partir do cruzamento da reta tangente à função $f(x)$ no ponto $(x_1, f(x_1))$ com o eixo x. A terceira estimativa, por sua vez, é o cruzamento da reta tangente $f(x)$ no ponto $(x_2, f(x_2))$, e assim por diante, como ilustra a Figura 12. A primeira iteração é dada matematicamente pela equação da reta tangente:

$$f'(x_1) = \frac{f(x_1) - 0}{x_1 - x_2} \quad (4.53)$$

Resolvendo para x_2 , obtém-se:

$$x_2 = x_1 - \frac{f(x_1)}{f'(x_1)} \quad (4.54)$$

Este resultado pode ser generalizado:

$$x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)}{f'(x_i)} \quad (4.55)$$

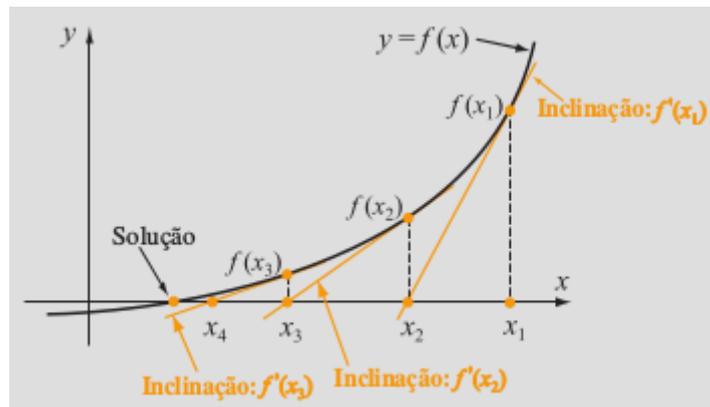


Figura 12: Exemplo da aplicação do Método de Newton-Raphson. (Figura extraída da referência [101].)

Embora, as iterações devessem cessar quando a solução exata fosse alcançada, geralmente equações não-lineares não admitem soluções exatas. Uma solução exata significa que a solução de x é tal que $f(x) = 0$. Portanto, geralmente, as iterações são interrompidas quando um erro estimado for menor que um valor previamente determinado [110]:

- Erro relativo estimado: quando o erro relativo estimado é menor que um valor específico ε :

$$\left| \frac{x_{i+1} - x_i}{x_i} \right| \leq \varepsilon \quad (4.56)$$

- Tolerância: quando o valor absoluto de $f(x_i)$ é menor que o número δ :

$$f(x_i) \leq \delta \quad (4.57)$$

4.4.1 SISTEMA DE EQUAÇÕES NÃO-LINEARES

Um sistema de equações não-lineares é constituído de duas ou mais equações não-lineares que são solucionadas simultaneamente, ou seja, são equações acopladas. Podemos estender o Método de Newton-Raphson para um sistema de n-equações e n-incógnitas, mas primeiro, vamos estudar um sistema de duas equações e duas incógnitas:

$$f(x, y) = 0 \quad (4.58)$$

$$g(x, y) = 0 \quad (4.59)$$

Expandindo-as em séries de Taylor, temos:

$$f(x, y) = f(x_i, y_i) + f_x(x_i, y_i)(x - x_i) + f_y(x_i, y_i)(y - y_i) + \dots \quad (4.60)$$

$$g(x, y) = g(x_i, y_i) + g_x(x_i, y_i)(x - x_i) + g_y(x_i, y_i)(y - y_i) + \dots \quad (4.61)$$

Em que definimos:

$$f_x(x_i, y_i) = \left. \frac{\partial f(x, y)}{\partial x} \right|_{(x_i, y_i)} \quad (4.62)$$

$$f_y(x_i, y_i) = \left. \frac{\partial f(x, y)}{\partial y} \right|_{(x_i, y_i)} \quad (4.63)$$

$$g_x(x_i, y_i) = \left. \frac{\partial g(x, y)}{\partial x} \right|_{(x_i, y_i)} \quad (4.64)$$

$$g_y(x_i, y_i) = \left. \frac{\partial g(x, y)}{\partial y} \right|_{(x_i, y_i)} \quad (4.65)$$

Como (x_i, y_i) estão relativamente próximos da solução, podemos desprezar os termos de ordem mais elevada na equação (4.60) e na equação (4.61). Consequentemente, $f(x, y) = 0$ e $g(x, y) = 0$. Podemos escrever:

$$f_x(x_i, y_i)(x - x_i) + f_y(x_i, y_i)(y - y_i) = -f(x_i, y_i) \quad (4.66)$$

$$g_x(x_i, y_i)(x - x_i) + g_y(x_i, y_i)(y - y_i) = -g(x_i, y_i) \quad (4.67)$$

Escrevendo na forma matricial, temos:

$$\begin{bmatrix} f_x(x_i, y_i) & f_y(x_i, y_i) \\ g_x(x_i, y_i) & g_y(x_i, y_i) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} dx_i \\ dy_i \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -f(x_i, y_i) \\ -g(x_i, y_i) \end{bmatrix} \quad (4.68)$$

Os valores são obtidos utilizando o seguinte esquema iterativo:

$$\begin{bmatrix} x_{i+1} \\ y_{i+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_i \\ y_i \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} dx_i \\ dy_i \end{bmatrix} \quad (4.69)$$

O método pode ainda ser generalizado para um sistema de n-equações e n-
incógnitas:

$$f_1(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0 \quad (4.70)$$

$$f_2(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0 \quad (4.71)$$

$$\dots \tag{4.72}$$

$$f_n(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0 \tag{4.73}$$

Após expandi-las em série de Taylor, obtemos sua forma matricial:

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \dots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n} \\ \dots & \dots & \dots \\ \frac{\partial f_n}{\partial x_1} & \dots & \frac{\partial f_n}{\partial x_n} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} dx_1 \\ \dots \\ dx_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -f_1 \\ \dots \\ -f_n \end{bmatrix} \tag{4.74}$$

Assim que a primeira estimativa é calculada, a nova solução aproximada é dada por:

$$x_{1,i+1} = x_{1,i} + dx_{1,i} \tag{4.75}$$

$$\dots \tag{4.76}$$

$$x_{n,i+1} = x_{n,i} + dx_{n,i} \tag{4.77}$$

O primeiro termo do lado esquerdo da equação (4.74) é denominado Matriz Jacobiana e sua determinante não nula é uma das condições para o método ser válido. O método converge apenas quando as seguintes condições são satisfeitas[110]:

- I. As funções e suas respectivas derivadas devem ser contínuas.
- II. O determinante da Matriz Jacobiana, isto é, o determinante da matriz quadrada composta por derivadas, deve ser diferente de zero.
- III. A estimativa inicial deve estar relativamente próxima da solução.

Nesta dissertação utilizamos um programa escrito em linguagem MATLAB para solucionar essas equações. Para mais detalhes consultar o apêndice E.

4.5 TRANSIÇÕES QUÂNTICAS DE FASE

Nesta seção apresentaremos o modelo de transições quânticas de fases que ocorrem nos estudos de átomos frios aprisionados. Na subseção 4.5.1 apresentaremos o modelo homogêneo de Bose-Hubbard adequado à rede óptica periódica. Na subseção 4.5.2 apresentaremos o modelo não homogêneo adequado à rede óptica quase periódica. Quando a profundidade da rede óptica é tal que mantém as partículas muito próximas umas das outras e o regime se encontra na primeira banda de Bloch, podemos descrever esse sistema através do modelo de Bose-Hubbard [9], como proposto por Jakschet *al.* [50]. Em um condensado típico descrito em termos da equação de Gross-Pitaevskii, os átomos estão deslocalizados, isto é, o comportamento macroscópico do sistema se sobrepõe ao comportamento individual das partículas. Após a fase de condensação, entretanto, o sistema pode sofrer uma transição de fase e entrar em um regime ainda mais interessante, onde o comportamento individual das partículas ganha o protagonismo. Neste caso, os átomos estão muito próximos um dos outros e o sistema passa a ser descrito em termos microscópicos, como ilustra a Figura 13.

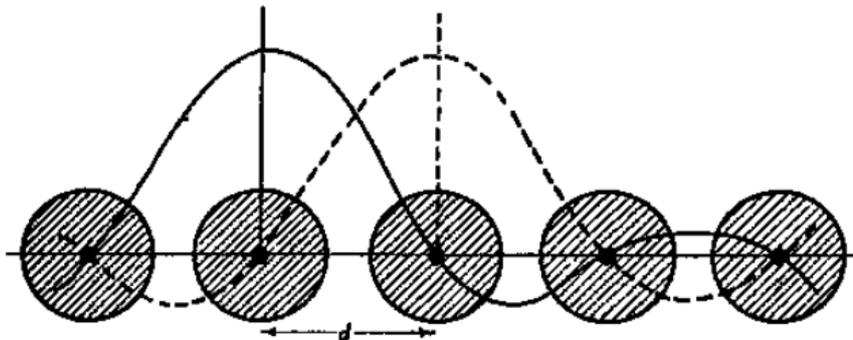


Figura 13: Funções de Wannier. (Figura extraída da referência[141].)

A figura 13 relaciona a distância entre os átomos com uma função que descreve o seu comportamento. Nessa situação, a ferramenta matemática mais adequada são as funções de Wannier [142] que foram propostas originalmente no contexto da Física do Estado Sólido como uma alternativa às funções de onda convencionais.

Portanto, podemos expandir o operador de campo usando as funções de Wannier [143]:

$$\hat{\Psi}(\vec{r}, t) = \sum_i \hat{a}_i \omega(\vec{r} - \vec{r}_i) \quad (4.78)$$

\hat{a}_i é o operador de aniquilação de bósons no i -ésimo sítio da rede e $\omega(\vec{r} - \vec{r}_i)$ é a função de Wannier localizada neste sítio. Substituindo a equação (4.78) no Hamiltoniano para muitos bósons em segunda quantização, equação (4.1), temos [9]:

$$\hat{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j + \sum_i (\varepsilon_i - \mu) \hat{n}_i + \frac{1}{2} U \sum_i \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1) \quad (4.79)$$

Em contraste com o parâmetro de ordem da equação de Gross-Pitaevskii, as funções de Wannier, equação (4.78), descrevem o comportamento de partículas em um único sítio da rede óptica tridimensional. O modelo de Bose-Hubbard, simplifica através da Equação (4.79), advém de considerarmos uma rede óptica suficientemente profunda, de modo que a função de Wannier, equação (4.78), mostrada na Figura 13, que representa os átomos nos sítios da rede, não ultrapasse a extensão do parâmetro de rede, em outras palavras, apenas a interação entre átomos do mesmo sítio são consideradas. Além disso, restringimos a ocupação dos átomos à primeira banda de Bloch.

A Figura 14(a) mostra a distribuição de partículas na rede óptica em uma fase isoladora de Mott. Como a tendência de todo sistema físico é alcançar o equilíbrio em que a sua energia é minimizada, na fase isolante de Mott a interação é muito maior que o tunelamento (energia cinética), conseqüentemente, as partículas só se movem na rede quando há um desequilíbrio na distribuição de partículas. Em outras palavras, na fase isolante de Mott as partículas se distribuem uniformemente ao longo da rede óptica de modo que o número médio de partículas por sítio seja um número inteiro.

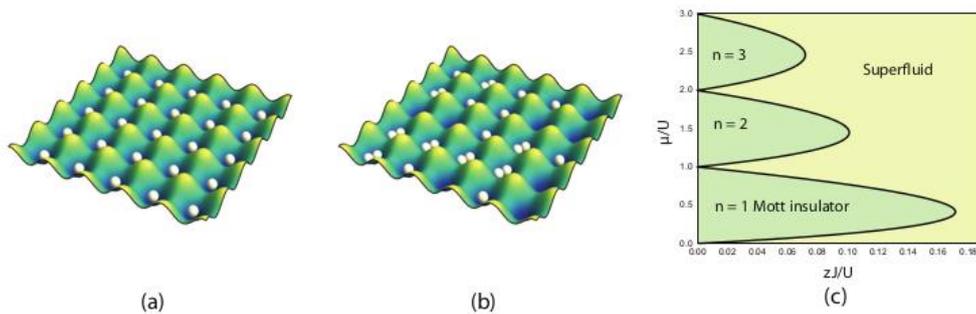


Figura 14: Contraste entre o comportamento microscópico entre uma fase superfluida e uma fase isoladora de Mott. (Figura extraída da referência [144].)

Em contraste com a fase isolante de Mott, a Fig.14.b exibe o comportamento das partículas na fase superfluida. No caso superfluido, a interação entre as partículas é menor que o termo de tunelamento (energia cinética), conseqüentemente, as partículas movem-

se livremente na rede óptica e não faz sentido falarmos em número médio de partículas porque o sistema é dito deslocalizado.

Na Fig.14.c exibe o diagrama de fases para a transição isolante de Mott para superfluido. Observa-se que quanto maior for a quantidade do número médio de partículas por sítio, menor deverá ser o movimento de átomos no sítio. A convenção adotada nesse diagrama de fases explicita o potencial químico e o termo de tunelamento para cada número médio de partículas por sítio considerando que a energia de interação seja mantida constante.

4.5.1 HAMILTONIANO DE BOSE-HUBBARD HOMOGÊNEO

Nesta subseção apresentaremos o modelo de Bose-Hubbard homogêneo, adequado à descrição teórica de átomos aprisionados em uma rede óptica periódica muito profunda. Este modelo é responsável por fornecer o diagrama de fase da transição entre superfluida e isolante de Mott presente no condensado. Como citamos anteriormente, o potencial através do qual as partículas são aprisionadas é gerado através da interferência de lasers contrapropagantes. A rede óptica permite o controle da dinâmica do condensado, ou seja, o condensado pode ser manipulado alterando a intensidade, frequência ou diferença de fase dos lasers. Em um condensado típico, apenas interações fracas são relevantes e o sistema pode ser perfeitamente descrito através da equação de Gross-Pitaevskii ou de uma equação hidrodinâmica de campo médio. Entretanto, quando as partículas estão em uma rede óptica muito profunda e sujeita a primeira banda de Bloch o sistema é descrito através do modelo de Bose-Hubbard. O hamiltoniano para o modelo homogêneo de Bose-Hubbard em uma dimensão pode ser expresso como [104]:

$$\hat{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j + \sum (\varepsilon_i - \mu) \hat{n}_i + \frac{1}{2} U \sum \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1) \quad (4.80)$$

Para o caso homogêneo, $\varepsilon_i = 0$. Note que \hat{a}_i é o operador de aniquilação de campos de bósons no sítio i , $\hat{n}_i = \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i$ é o operador de número de bósons no sítio i , U é a interação entre as partículas e J é o termo que corresponde ao movimento dos bósons. A competição entre o movimento dos bósons e a interação entre as partículas caracteriza a

transição de fase quântica. Quando o movimento dos bósons for muito maior que a interação entre as partículas, o sistema se encontra em uma fase superfluida e os átomos são ditos deslocalizados, quando por outro lado, a interação entre as partículas for muito maior que a tunelamento o sistema estará em uma fase isolante de Mott. No caso repulsivo ($U > 0$) o termo de interação impõe que cada sítio seja ocupado e os bósons sejam incapazes de se mover sem fornecer energia U .

Iniciamos a solução para o caso homogêneo através da Aproximação de Campo Médio [145]. Basicamente, os operadores de aniquilação e criação de campo de Bose são reescritos como:

$$\hat{a}_i = \langle \hat{a}_i \rangle + \delta \hat{a}_i = \varphi_i + \delta \hat{a}_i \quad (4.81)$$

$$\hat{a}_i^\dagger = \langle \hat{a}_i^\dagger \rangle + \delta \hat{a}_i^\dagger = \varphi_i^* + \delta \hat{a}_i^\dagger \quad (4.82)$$

$$\hat{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} (\varphi_i^* \hat{a}_j - \varphi_i^* \varphi_j + \hat{a}_i^\dagger \varphi_j) - \sum \mu \hat{n}_i + \frac{1}{2} U \sum \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1) \quad (4.83)$$

O índice j pode ser absorvido introduzindo o número de bósons vizinhos z :

$$\hat{H} = -Jz \sum_i (\varphi \hat{a}_i - \varphi^2 + \hat{a}_i^\dagger \varphi) - \sum \mu \hat{n}_i + \frac{1}{2} U \sum \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1) \quad (4.84)$$

Reorganizando os termos, a equação fica:

$$\hat{H} = -Jz\varphi \sum_i (\hat{a}_i + \hat{a}_i^\dagger) + \sum_i [Jz\varphi^2 - \mu \hat{n}_i + \frac{1}{2} U \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1)] \quad (4.85)$$

Iniciamos agora a segunda fase da resolução do hamiltoniano. Em decorrência da Teoria da Perturbação de Rayleigh-Schrödinger [146], podemos decompor o hamiltoniano em dois operadores menores:

$$\beta_i = Jz\varphi^2 - \mu \hat{n}_i + \frac{1}{2} U \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1) \quad (4.86)$$

$$\alpha_i = Jz(\hat{a}_i + \hat{a}_i^\dagger) \quad (4.87)$$

O hamiltoniano de Bose-Hubbard para um único sítio da rede óptica, então, adquire o seguinte formato:

$$\hat{H}_i = \varphi \hat{\alpha}_i + \hat{\beta}_i \quad (4.88)$$

Ainda em decorrência da Teoria da Perturbação, o operador α_i será considerado como uma perturbação sobre o operador β_i . Expandindo a equação de Schrödinger até a segunda ordem, temos:

$$E_n |n\rangle = \hat{H}_i |n\rangle = (\varphi \hat{\alpha}_i + \hat{\beta}_i) |n\rangle \quad (4.89)$$

$$\langle E_n \rangle = \langle \beta_i \rangle + \varphi \langle n | \hat{\alpha}_i | n \rangle + \varphi^2 \sum_{m \neq n} \frac{|\langle m | \hat{\alpha}_i | n \rangle|^2}{\langle \beta_n \rangle - \langle \beta_m \rangle} + O(\varphi^3) \dots \quad (4.90)$$

Adotando a álgebra dos operadores escada, chegaremos ao seguinte resultado:

$$\langle E_n \rangle = -\mu n + \frac{1}{2} U n(n-1) + (Jz)\varphi^2 + \varphi^2 (Jz)^2 \left\{ \frac{n}{U(n-1) - \mu} + \frac{n+1}{\mu - Un} \right\} + O(\varphi^3) \dots \quad (4.91)$$

Por fim, expandimos a energia do sistema em função de uma série de potência da função de onda microscópica que descreve o condensado [147]. Esta série é conhecida como expansão de Landau.

$$\langle E_n \rangle = a_0(n, U, \mu) + a_2(n, U, \mu)\varphi^2 + O(\varphi^4) \dots \quad (4.92)$$

Comparando as equações (4.91) e (4.92), fica evidente que:

$$a_2(n, U, \mu)\varphi^2 = (Jz)\varphi^2 + \varphi^2 (Jz)^2 \left\{ \frac{n}{U(n-1) - \mu} + \frac{n+1}{\mu - Un} \right\} \quad (4.93)$$

A transição quântica de fase ocorrerá efetivamente quando $a_2(n, U, \mu) = 0$, ou seja:

$$1 + Jz \left\{ \frac{n}{U(n-1) - \mu} + \frac{n+1}{\mu - Un} \right\} = 0 \quad (4.94)$$

n é o número médio de bósons por sítio da rede óptica.

4.5.2 MODELO NÃO-HOMOGÊNIO DE BOSE-HUBBARD EM UMA REDE ÓPTICA QUASE PERIÓDICA

Nesta subseção apresentaremos o modelo não homogêneo de Bose-Hubbard em uma rede óptica quase periódica, nosso objetivo é investigar a transição quântica de fase em uma rede óptica quase periódica. Ao contrário da subseção anterior (subseção 4.5.1), este modelo permite observar um diagrama de fases mais rico e mais complexo em virtude de as possibilidades de preenchimento da rede serem muito maiores. Para um gás de bósons aprisionados em uma rede óptica quase periódica na primeira banda de Bloch e com uma profundidade relativa muito grande, o hamiltoniano do sistema é [104]:

$$\hat{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle \sigma} \hat{a}_{i\sigma}^{\dagger} \hat{a}_{j\sigma} + \frac{1}{2} U \sum_{i\sigma} \hat{n}_{i\sigma} (\hat{n}_{i\sigma} - 1) + V \sum_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} - \sum_{i\sigma} (\mu_{\sigma} - \Delta_i) \hat{n}_{i\sigma} \quad (4.95)$$

Onde $\langle i,j \rangle$ denota os sítios vizinhos mais próximo, J é o tunelamento (movimento dos bósons), a interação entre os bósons em um mesmo sítio é dada por U , a interação entre bósons vizinhos é representada por V , μ_{σ} é o potencial químico, $\hat{n}_{i\sigma} = \hat{a}_{i\sigma}^{\dagger} \hat{a}_{i\sigma}$ é o operador de número de bósons, $\sigma = \uparrow, \downarrow$ representa os dois estados internos do condensado e Δ_i é a barreira de potencial entre dois sítios dentro de uma supercélula.

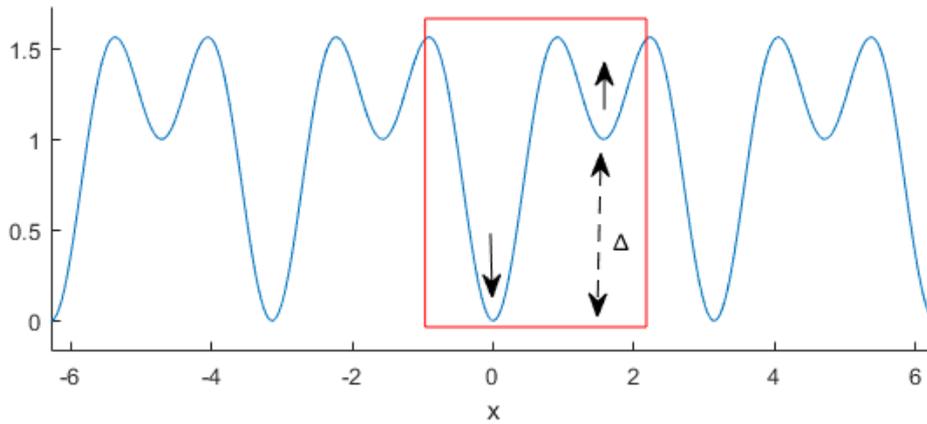


Figura 15: Definição de uma supercélula em uma rede óptica. O potencial é gerado através da seguinte configuração da rede óptica: $U[\varepsilon \sin^2 x + (1 - \varepsilon) \sin^2 \gamma x]$, em que adotamos: $U=1$, $\gamma=2$ e $\varepsilon=0.3$.

Assim como no caso homogêneo, iniciamos nossa solução reescrevendo os operadores de criação (aniquilação) de campos de bósons usando o argumento da Aproximação de Campo Médio:

$$\hat{a}_{i\sigma}^+ \hat{a}_{j\sigma} = \langle \hat{a}_{i\sigma}^+ \rangle \hat{a}_{j\sigma} + \hat{a}_{i\sigma}^+ \langle \hat{a}_{j\sigma} \rangle - \langle \hat{a}_{i\sigma}^+ \rangle \langle \hat{a}_{j\sigma} \rangle \quad (4.96)$$

Deste modo, o hamiltoniano adquire a seguinte forma:

$$\begin{aligned} \hat{H} = & -Jz \sum_{i\sigma} \varphi_{i\sigma} (\hat{a}_{i\sigma} + \hat{a}_{i\sigma}^+) + Jz \sum_{i\sigma} \varphi_{i\sigma}^2 + \frac{1}{2} U \sum_{i\sigma} \hat{n}_{i\sigma} (\hat{n}_{i\sigma} - 1) + V \sum_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} \\ & - \sum_{i\sigma} (\mu_\sigma - \Delta_i) \hat{n}_{i\sigma} \end{aligned} \quad (4.97)$$

Note que novamente o número de bósons vizinhos próximos z foi usado para eliminar o somatório relativo ao índice j . Decompondo o hamiltoniano em dois operadores [146], teremos:

$$\hat{H} = \sum_{i\sigma} \{ \varphi_{i\sigma} \alpha_{i\sigma} + \beta_{i\sigma} \} \quad (4.98)$$

Onde, definimos:

$$\hat{\alpha}_{i\sigma} = -Jz(\hat{a}_{i\sigma} + \hat{a}_{i\sigma}^+) \quad (4.99)$$

$$\hat{\beta}_{i\sigma} = Jz\varphi_{i\sigma}^2 + \frac{1}{2} U \hat{n}_{i\sigma} (\hat{n}_{i\sigma} - 1) + V \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} - (\mu_\sigma - \Delta_i) \hat{n}_{i\sigma} \quad (4.100)$$

Ainda em decorrência da Teoria das Perturbações, o operador $\hat{\alpha}_{i\sigma}$ será considerado como uma perturbação sobre $\hat{\beta}_{i\sigma}$:

$$\langle E_n \rangle = \langle \beta_{i\sigma} \rangle + \sum_i \varphi_{i\sigma} \langle n | \hat{\alpha}_{i\sigma} | n \rangle + \sum_i \sum_{m \neq n} \varphi_{i\sigma}^2 \frac{|\langle m | \hat{\alpha}_{i\sigma} | n \rangle|^2}{\langle \beta_{n\sigma} \rangle - \langle \beta_{m\sigma} \rangle} + O(\varphi^3) \dots \quad (4.101)$$

Novamente, recorrendo à álgebra dos operadores escada obtemos:

$$\begin{aligned} \langle E_n \rangle = & \sum_i \left\{ Jz\varphi_{i\sigma}^2 + \frac{1}{2} U g_{i\sigma} (g_{i\sigma} - 1) + V g_{i\uparrow} g_{i\downarrow} - (\mu_\sigma - \Delta_i) g_{i\sigma} \right\} \\ & + \sum_i (Jz)^2 \varphi_{i\sigma}^2 \left\{ \frac{g_{i\sigma} + 1}{V(1 - g_{i\uparrow} - g_{i\downarrow}) - U g_{i\sigma} + (\mu_\sigma - \Delta_i)} \right. \\ & \left. + \frac{g_{i\sigma}}{U(g_{i\sigma} - 1) + V(g_{i\uparrow} + g_{i\downarrow} - 1) - (\mu_\sigma - \Delta_i)} \right\} \end{aligned} \quad (4.102)$$

A expansão de Landau para esse sistema é ligeiramente diferente:

$$\langle E_n \rangle = a_0(n, U, \mu) + a_2(n, U, \mu)\varphi_{i\sigma}^2 + O(\varphi_{i\sigma}^4)\dots \quad (4.103)$$

A comparação entre as equações (4.102) e (4.103) resulta na igualdade:

$$a_2(n, U, \mu)\varphi_{i\sigma}^2 = \sum_i \left\{ Jz\varphi_{i\sigma}^2 + (Jz)^2\varphi_{i\sigma}^2 \left\{ \frac{g_{i\sigma} + 1}{V(1 - g_{i\uparrow} - g_{i\downarrow}) - Ug_{i\sigma} + (\mu_\sigma - \Delta_i)} + \frac{g_{i\sigma}}{U(g_{i\sigma} - 1) + V(g_{i\uparrow} + g_{i\downarrow} - 1) - (\mu_\sigma - \Delta_i)} \right\} \right\} \quad (4.104)$$

As transições quânticas de fase ocorrem quando o coeficiente $a_2(n, U, \mu)$ é nulo, ou seja:

$$1 + (Jz) \sum_i \left\{ \frac{g_{i\sigma} + 1}{V(1 - g_{i\uparrow} - g_{i\downarrow}) - Ug_{i\sigma} + (\mu_\sigma - \Delta_i)} + \frac{g_{i\sigma}}{U(g_{i\sigma} - 1) + V(g_{i\uparrow} + g_{i\downarrow} - 1) - (\mu_\sigma - \Delta_i)} \right\} = 0 \quad (4.105)$$

Ao contrário do caso homogêneo, o caso não homogêneo apresenta partículas em estados quânticos diferentes, deste modo, teremos pelo menos 4 possibilidades de preenchimento: $(g_{1\uparrow}, g_{1\downarrow}, g_{2\uparrow}, g_{2\downarrow})$. O $g_{1\uparrow}$ representa o número médio de bósons com orientação do spin \uparrow no primeiro sítio da supercélula. Por sua vez, definimos $g_{1\downarrow}$ como o número médio de bósons no primeiro sítio da supercélula com orientação do spin \downarrow . Do mesmo modo, $g_{2\uparrow}$ representa o número médio de bósons com orientação do spin \uparrow no segundo sítio da supercélula. Finalmente, definimos $g_{2\downarrow}$ como o número médio de bósons no segundo sítio da supercélula com orientação do spin \downarrow . Adotamos $\Delta=V=1$, e a barreira de potencial ficou definida como:

$$\Delta_i = \begin{cases} 0, & \text{se } i \text{ for ímpar.} \\ \Delta, & \text{se } i \text{ for par.} \end{cases} \quad (4.106)$$

5 RESULTADOS E DISCUSSÕES

Neste capítulo apresentaremos os resultados fornecidos através da aplicação do Método de Aproximação Variacional para condensados constituídos de átomos de hidrogênio, ^{52}Cr , ^{164}Dy , ^{168}Er e ^{161}Dy e os resultados fornecidos através do modelo teórico de Bose-Hubbard.

5.1 SÓLITONS ILUMINADOS EM UM CONDENSADO DE BÓSONS COM INTERAÇÃO DE CONTATO

Nesta seção apresentaremos os resultados obtidos através da aplicação do Método de Aproximação Variacional em um condensado de bósons constituído por átomos de hidrogênio. A condensação de átomos de hidrogênio foi realizada em 1998 [148] e, apesar de possuir semelhanças com os átomos alcalinos, o condensado de hidrogênio oferece a vantagem de sofrer condensação em uma temperatura relativamente alta de $50\ \mu\text{K}$, enquanto que a maioria dos outros átomos possuem uma temperatura de transição da ordem de nK, ou seja, uma temperatura muito menor.

O estado fundamental do hidrogênio em uma armadilha magnética depende da interação entre o momento magnético do próton com o momento magnético do elétron (interação hiperfina) e depende também da interação do momento magnético do elétron e do próton com o momento magnético (interação Zeeman). Apesar da interação hiperfina e da interação Zeeman, a condensação foi alcançada experimentalmente através de armadilha magnética que estabeleceu uma frequência mínima de $\omega = 2\pi \times 1\text{KHz}$. O hidrogênio é constituído de um próton e um elétron, cujo os spins podem admitir quatro configurações, como ilustra a Figura 16. Conforme podemos observar na Figura 16, os estados a e b são atraídos para regiões de campo magnético mais intenso, contrastando fortemente com os estados c e de que são expulsos dessa região.

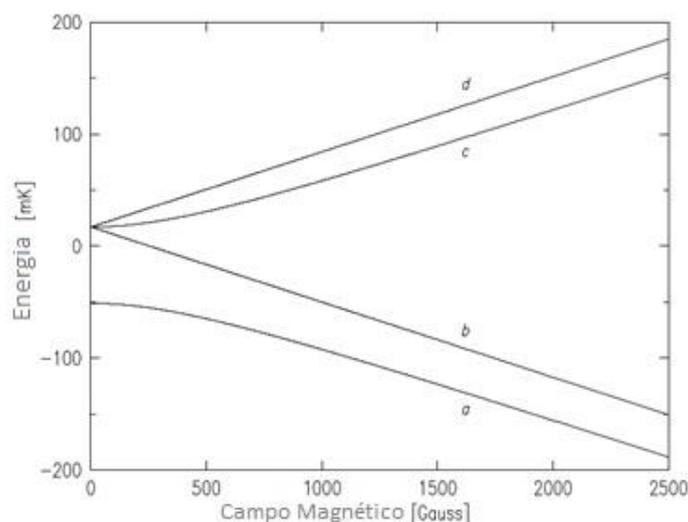


Figura 16: Diagrama Hiperfino-Zeeman do átomo de hidrogênio. (Figura adaptada da referência [148].)

A condensação foi obtida no estado d puro, duplamente polarizado -- isto é, tanto o spin do próton quanto o spin do elétron são polarizados --, usando bobinas supercondutoras descritas por Doyle [149] e Sandberg [150] para criar o campo magnético confinante. Através dessa técnica, átomos no estado a são ditos “anti-aprisionáveis”, b e c não são aprisionáveis, entretanto, o processo de colisão inelástica entre átomos no estado c acaba esgotando esse estado e os átomos restantes constituem uma amostra duplamente polarizada no estado d – o qual é dito aprisionável.

Partindo do pressuposto de que a rede óptica, assim como o confinamento magnético, não acessa os níveis mais internos de energia da estrutura hiperfina do hidrogênio, propomos estudar teoricamente sólitons em um condensado de hidrogênio aprisionado por uma rede óptica quase periódica.

O Método de Aproximação Variacional também pode ser utilizado como alternativa a outros Métodos Numéricos utilizados para prever a primeira banda de Bloch. A banda de Bloch determina os valores segundo os quais a existência de sóliton não é permitida. Em outras palavras, o valor do Potencial Químico para um gás quântico degenerado de bósons interagindo não pode coincidir com esses valores.

A primeira banda de Bloch é obtida quando fazemos o Potencial Químico variar em função da amplitude da rede óptica quando o Comprimento de Espalhamento é nulo. Em outras palavras, as equações não-lineares (4.20) e (4.21) são solucionadas para cada valor da amplitude da rede óptica, U de 0 a 5 e $a = 0$, onde a é o Comprimento de

Espalhamento. As soluções obtidas através da equação (4.20) e (4.21) são substituídas na equação (4.23). A Figura 17 exibe a primeira banda de Bloch.

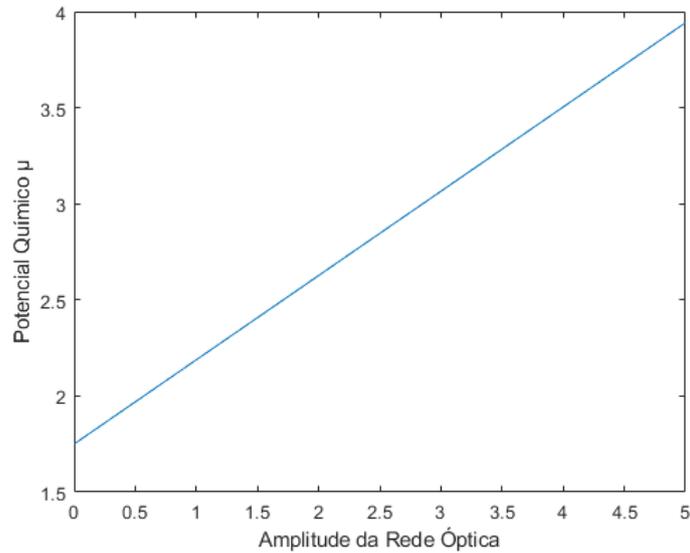


Figura 17: Primeira banda de Bloch. O Potencial Químico está dado em unidades de $\hbar\omega$.

O Método de Aproximação Variacional também possibilita explorar o comportamento do Comprimento de Espalhamento em função do Potencial Químico, como mostra a Figura 18. Novamente, recorreremos às equações (4.20) e (4.21), onde adotamos $U=3.5$ e solucionamos as equações para cada valor do Comprimento de Espalhamento de 0 a $106a_0$, deste modo obtemos simultaneamente a solução para as dimensões do sóliton (W e V) e, através da equação (4.23), estimamos o valor do Potencial Químico.

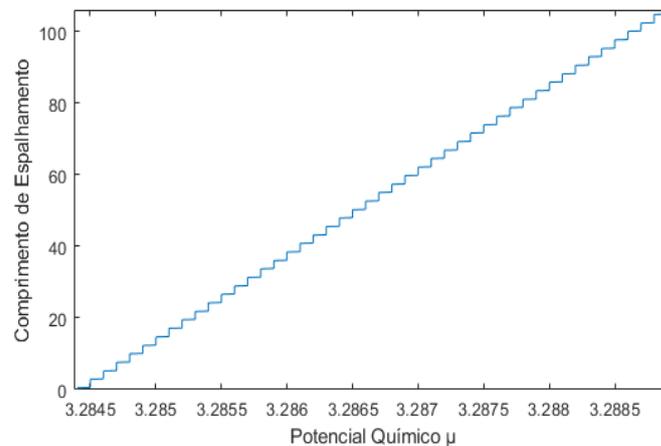


Figura 18: Comprimento de Espalhamento em função do Potencial Químico. O Comprimento de Espalhamento está dado em unidades de a_0 e o Potencial Químico está dado em unidades de $\hbar\omega$.

O comprimento de espalhamento para um condensado constituído por átomos de hidrogênio no estado singleto é $0.41a_0$ [151] e no estado tripleto $1.2a_0$ [152], onde $a_0 = 4\pi\epsilon_0\hbar^2/me^2 \approx 5.29 \times 10^{-11}m$. Atente-se para o fato de que, nesse estudo, usamos o potencial duplamente periódico. Para obtermos um potencial duplamente periódico a partir da equação (4.13) adotamos $\gamma = 2$ e $\varepsilon = 0.3$. A adoção desses parâmetros nas equações (4.20) e (4.21) fornece facilmente soluções através do método de Newton-Raphson, como descrito no capítulo 4.4 e no apêndice E. As soluções obtidas com o método de Newton-Raphson são substituídas na equação (4.16), a qual nos fornece o formato do sóliton através da relação $|\Psi(\vec{r}, t)|^2 = \varphi(\vec{r})^2$ e na equação (4.22) que nos revela o valor estimado do potencial químico.

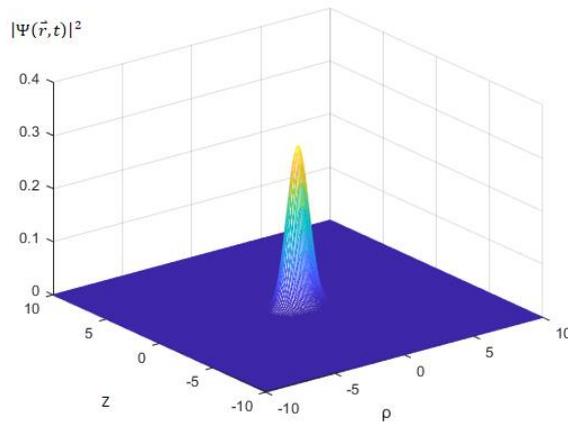


Figura 19: Sóliton iluminado em um condensado de hidrogênio. Amplitude da rede óptica $U=5$. Potencial químico $\mu = 3.9421\hbar\omega$. Comprimento de espalhamento $a = 0.41a_0$. As dimensões espaciais do sóliton estão dadas em unidades de $1\mu m$.

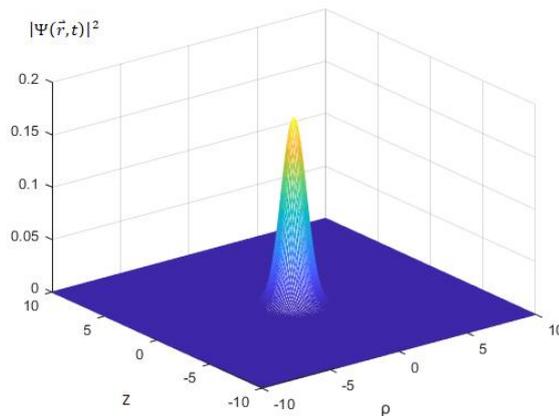


Figura 20: Sóliton iluminado em um condensado de hidrogênio. Amplitude da rede óptica $U=3$. Potencial químico $\mu = 3.0653\hbar\omega$. Comprimento de espalhamento $a = 1.2a_0$. As dimensões espaciais do sóliton estão dadas em unidades de $1\mu m$.

O comportamento do Potencial Químico em função da amplitude da rede óptica, exibido na Figura 17, coincide com um estudo numérico que utiliza um potencial harmônico [65]. O comportamento do Comprimento de Espalhamento em função do Potencial Químico, exibido pela Figura 18, apresenta um comportamento não-linear análogo àquele descrito por uma trajetória do movimento oscilatório forçado (ou ressonância) [153], por outro lado, globalmente, o comportamento do Comprimento de Espalhamento possui uma componente linear que coincide neste aspecto com outros trabalhos que exploram potenciais periódicos [154, 155].

A Figura 19 e a Figura 20 exibem sólitons iluminados estáveis constituídos por átomos de hidrogênio no estado singleto e tripleto, respectivamente. De acordo com Adhikari [18, 62], um sóliton é dito estável quando as equações não-lineares, ou seja, quando as equações (4.20) e (4.21) são solucionáveis. Os valores que adotamos para a amplitude da rede óptica $U=5$ para um condensado de átomos de hidrogênio no estado singleto e $U=3$ para átomos de hidrogênio no estado tripleto se baseia em valores utilizados em outro estudo [88]. O formato e as dimensões do sóliton parecem corroborar (e ser corroborado) por estudos que exploram o comportamento de gases degenerados interagindo fracamente [154, 155].

5.2 SÓLITONS ESTAVÉIS EM CONDENSADOS DE BÓSONS COM INTERAÇÃO DIPOLO-DIPOLO REPULSIVA

Nesta seção apresentaremos os resultados obtidos através do Método de Aproximação Variacional aplicado ao estudo de gases quânticos degenerados de bósons com interação dipolo-dipolo constituídos de átomos de ^{52}Cr [24], ^{164}Dy [34, 156] e ^{168}Er [27]. Como vimos no Capítulo 2 e no Capítulo 4 (mais especificamente nas seções 4.1 e 4.2), a estabilidade do sóliton em um condensado levando em consideração apenas a interação de contato depende do Comprimento de Espalhamento ser maior que zero ($a>0$), contudo, sólitons em condensados com interação dipolo-dipolo depende, além disto, da geometria da potencial confinante e do número de átomos no sistema.

5.2.1 CONDENSADO DE ÁTOMOS DE ^{52}Cr

Nesta subsecção consideraremos um condensado de bósons constituído de átomos de ^{52}Cr [24] com interação de contato e com interação dipolo-dipolo. Aplicamos o Método de Aproximação Variacional para determinar a primeira banda de Bloch em um condensado de ^{52}Cr bem como prever o comportamento do Comprimento de Espalhamento em função do Potencial Químico e as dimensões do sóliton.

A primeira banda de Bloch é obtida quando fazemos o Potencial Químico variar em função da amplitude da rede óptica quando o Comprimento de Espalhamento é nulo. Em outras palavras, as equações não-lineares (4.32) e (4.33) são solucionadas para cada valor da amplitude da rede óptica, U de -3 a -1.4 e $a = 0$, onde a é o Comprimento de Espalhamento. As soluções obtidas através da equação (4.32) e (4.33) são substituídas na equação (4.34). A Figura 21 exibe a primeira banda de Bloch. Note que a força de interação dipolar, $a_{dd} = 15a_0$, por ser um valor intrínseco que depende do momento de dipolo magnético não pode ser nulo.

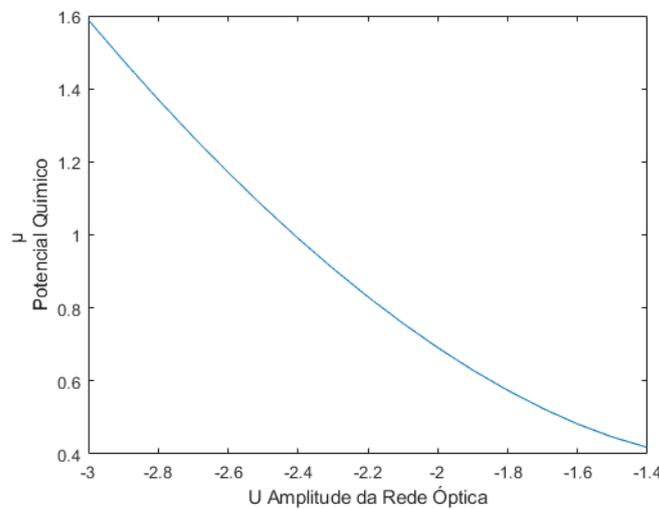


Figura 21: Primeira banda de gaps. O Potencial Químico está dado em unidades de $\hbar\omega$. 800 átomos no sistema.

O Método de Aproximação Variacional também possibilita explorar o comportamento do Comprimento de Espalhamento em função do Potencial Químico, como mostra a Figura 22. Novamente, recorreremos às equações (4.32) e (4.33), onde adotamos $U = -5$ e solucionamos as equações para cada valor do Comprimento de Espalhamento de $9a_0$ a $11a_0$, deste modo obtemos simultaneamente a solução para as

dimensões do sóliton (W e V) e através da equação (4.34) estimamos o valor do Potencial Químico. A Figura 22 também evidencia a estabilidade da gaussiana, isto é, a isodensidade (*isodensity*) relativa ao sóliton. Conforme o comportamento do Comprimento de Espalhamento e o Potencial Químico variam, o formato do sóliton altera quantitativamente, mas qualitativamente, em outras palavras, o sóliton permanece com o seu formato característico de disco.

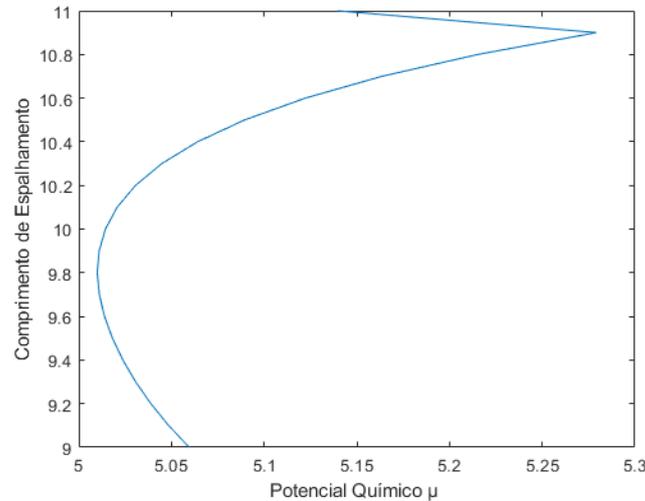


Figura 22: Comprimento de Espalhamento em função do potencial químico. O Comprimento de Espalhamento está dado em unidades de a_0 e Potencial Químico está dado em unidades de $\hbar\omega$. 800 átomos no sistema.

Para estudar a formação de sólitons em condensados com interação dipolo-dipolo repulsiva, nós aplicamos o método de Newton-Raphson sobre as equações (4.32) e (4.33). Para átomos de ^{52}Cr adotamos os seguintes valores: $U = 1.5$, $a_{\text{dd}} = 15a_0$, $a = 10a_0$, $\gamma = 2$ e $\varepsilon = 0.3$. Utilizamos o algoritmo apresentado no apêndice E onde variamos o número de átomos N de 1 a 1000. Ao contrário de um condensado com interação puramente de contato, os condensados com interação dipolo-dipolo dependem do número de átomos N no sistema [18]. As equações (4.32) e (4.33) são solucionáveis quando o número de átomos no sistema é igual a 800. Isso significa que para os parâmetros que adotamos na rede óptica e para os valores que adotamos para as interações, encontraremos sólitons estáveis quando o sistema possui 800 átomos – esta quantidade de átomos é estimada pelo programa descrito no Apêndice E, além disto, coincide com valores próximos utilizados na referência [60]. As soluções encontradas através das equações (4.32) e (4.33) são substituídos na equação (4.30) que descreve o formato do sóliton como podemos ver na

Figura 23 através da seguinte relação $|\Psi(\vec{r}, t)|^2 = \varphi(\vec{r})^2$. Do mesmo modo, as soluções fornecidas nas equações (4.32) e (4.33) são substituídas na equação (4.34) e obtemos uma estimativa para o potencial químico $\mu = 1.1709\hbar\omega$.

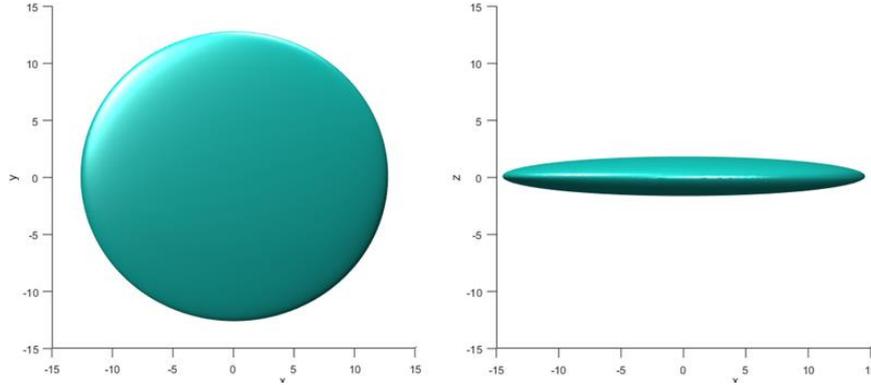


Figura 23: Sóliton em um condensado de ^{52}Cr . Amplitude da rede óptica $U=1.5$. Potencial químico $\mu = 1.1709\hbar\omega$. 800 átomos no sistema. Onde a força de interação dipolar e o comprimento de espalhamento são, respectivamente: $a_{dd} = 15a_0$ e $a = 10a_0$. As dimensões espaciais do sóliton estão dadas em unidades de $1\mu\text{m}$.

Em contraste com outros estudos, que utilizam a rede óptica quase periódica sem interação dipolo-dipolo e sem a contribuição do potencial harmônico, como a referência [58], o comportamento do potencial químico em função da amplitude da rede óptica – primeira banda de Bloch, observado na Figura 21 –, possui um comportamento decrescente. Este comportamento coincide com trabalhos que exploram a rede óptica periódica com interação dipolo-dipolo [157] e sem interação dipolo-dipolo [154, 155]. As dimensões do sóliton, observado na Figura 23, por sua vez, coincide aproximadamente com um estudo numérico [60] que leva em conta um potencial periódico.

5.2.2 CONDENSADO DE ÁTOMOS DE ^{164}Dy

Nesta subseção consideraremos um condensado de bósons constituídos de átomos de ^{164}Dy [34, 156] com interação de contato e interação dipolo-dipolo. Aplicamos o Método de Aproximação Variacional para determinar a primeira banda de Bloch em um condensado de ^{164}Dy bem como prever o comportamento do Comprimento de Espalhamento em função do Potencial Químico e as dimensões do sóliton.

A primeira banda de Bloch é obtida quando fazemos o Potencial Químico variar em função da amplitude da rede óptica quando o Comprimento de Espalhamento é nulo. Em outras palavras, as equações não-lineares (4.32) e (4.33) são solucionadas para cada valor da amplitude da rede óptica, U de -7 a -2 e $a = 0$, onde a é o Comprimento de Espalhamento. As soluções obtidas através da equação (4.32) e (4.33) são substituídas na equação (4.34). A Figura 24 exhibe a primeira banda de Bloch. Note que a força de interação dipolar, $a_{dd} = 132.7a_0$, por ser um valor intrínseco que depende do momento de dipolo magnético não pode ser nulo.

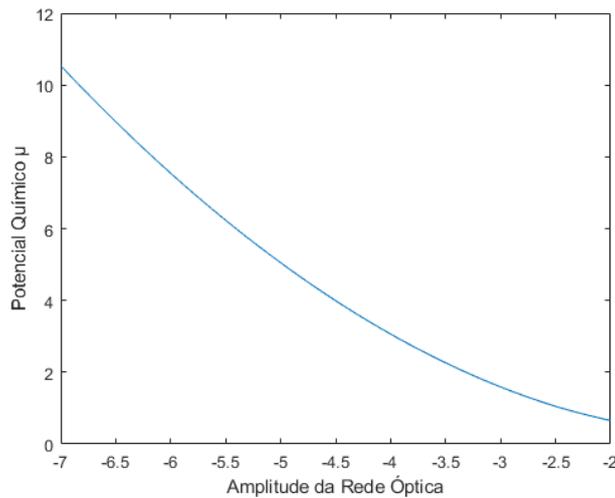


Figura 24: Primeira banda de gaps. O Potencial Químico está dado em unidades de $\hbar\omega$. 100 átomos no sistema.

O Método de Aproximação Variacional também possibilita explorar o comportamento do Comprimento de Espalhamento em função do Potencial Químico, como mostra a Figura 25. Novamente, recorreremos às equações (4.32) e (4.33), onde adotamos $U=1.5$ e solucionamos as equações para cada valor do Comprimento de Espalhamento de $119a_0$ a $121a_0$, deste modo obtemos simultaneamente a solução para as dimensões do sóliton (W e V) e através da equação (4.34) estimamos o valor do Potencial Químico. A Figura 25 também evidencia a estabilidade da gaussiana, isto é, a isodensidade (*isodensity*) relativa ao sóliton. Conforme o comportamento do Comprimento de Espalhamento e o Potencial Químico variam, o formato do sóliton varia muito pouco, preservando suas propriedades fundamentais, como por exemplo, o formato do sóliton permanece sendo caracterizado por um disco e isto não altera a natureza da interação dipolo-dipolo repulsiva presente no condensado.

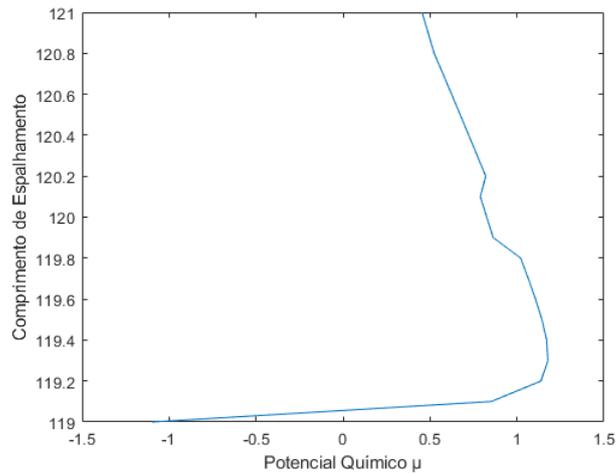


Figura 25: Comprimento de Espalhamento em função do Potencial Químico. O Comprimento de Espalhamento está dado em unidades de a_0 e o Potencial Químico está dado em unidades de $\hbar\omega$. 100 átomos no sistema.

Assim como fizemos na Para estudar a formação de sólitons em condensados com interação dipolo-dipolo repulsiva, nós aplicamos o método de Newton-Raphson sobre as equações (4.32) e (4.33). Para átomos de ^{164}Dy adotamos os seguintes valores: $U=1$, $a_{dd} = 132.7a_0$, $a = 120a_0$, $\gamma = 2$ e $\varepsilon = 0.3$. Utilizamos o algoritmo apresentado no apêndice E.2 onde variamos o número de átomos N de 1 a 1000. As soluções encontradas através das equações (4.32) e (4.33) são substituídos na equação (4.30) que descreve o formato do sóliton através da relação $|\Psi(\vec{r}, t)|^2 = \varphi(\vec{r})^2$, como podemos ver na Figura 26.

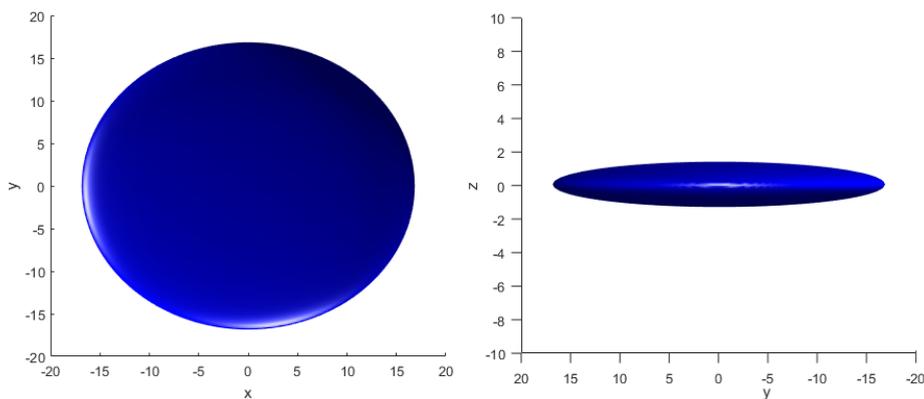


Figura 26: Sóliton em um condensado de ^{164}Dy com 100 átomos no sistema. Amplitude da rede óptica $U=1$. Potencial químico $\mu = 0.84857\hbar\omega$. A força de interação dipolar e o comprimento de espalhamento são, respectivamente: $a_{dd} = 132.7a_0$ e $a = 120a_0$. As dimensões espaciais do sóliton estão dadas em unidades de $l\mu\text{m}$.

Do mesmo modo, as soluções fornecidas nas equações (4.32) e (4.33) são substituídas na equação (4.34) e obtemos uma estimativa para o potencial químico $\mu = 0.84857\hbar\omega$. Ao contrário de um condensado com interação puramente de contato, os condensados com interação dipolo-dipolo dependem do número de átomos N no sistema. As equações (4.32) e (4.33) são solucionáveis quando o número de átomos no sistema é igual a 100. Isso significa que para os parâmetros que adotamos na rede óptica e para os valores que adotamos para as interações, encontraremos sólitons estáveis quando o sistema possui 100 átomos.

Em contraste com outros estudos, que utilizam a rede óptica quase periódica sem interação dipolo-dipolo e sem a contribuição do potencial harmônico, como a referência [58], o comportamento do potencial químico em função da amplitude da rede óptica – primeira banda de Bloch, observado na Figura 24 –, possui um comportamento decrescente. Este comportamento coincide com trabalhos que exploram a rede óptica periódica com interação dipolo-dipolo [157] e sem interação dipolo-dipolo [154, 155]. As dimensões do sóliton, observado na Figura 26, por sua vez, coincide aproximadamente com um estudo numérico [60] que leva em conta um potencial periódico.

5.2.3 CONDENSADO DE ÁTOMOS DE ^{168}Er

Nesta subseção consideraremos um condensado de bósons constituídos de átomos de ^{168}Er [27] com interação de contato e interação dipolo-dipolo. Aplicamos o Método de Aproximação Variacional para determinar a primeira banda de Bloch em um condensado de ^{168}Er bem como prever o comportamento do Comprimento de Espalhamento em função do Potencial Químico e as dimensões do sóliton.

A primeira banda de Bloch é obtida quando fazemos o Potencial Químico variar em função da amplitude da rede óptica quando o Comprimento de Espalhamento é nulo. Em outras palavras, as equações não-lineares (4.32) e (4.33) são solucionadas para cada valor da amplitude da rede óptica, U de 0 a 4 e $a = 0$, onde a é o Comprimento de Espalhamento. As soluções obtidas através da equação (4.32) e (4.33) são substituídas na equação (4.34). A Figura 27 exhibe a primeira banda de Bloch. Note que a força de

interação dipolar, $a_{dd} = 66.6a_0$, por ser um valor intrínseco que depende do momento de dipolo magnético não pode ser nulo.

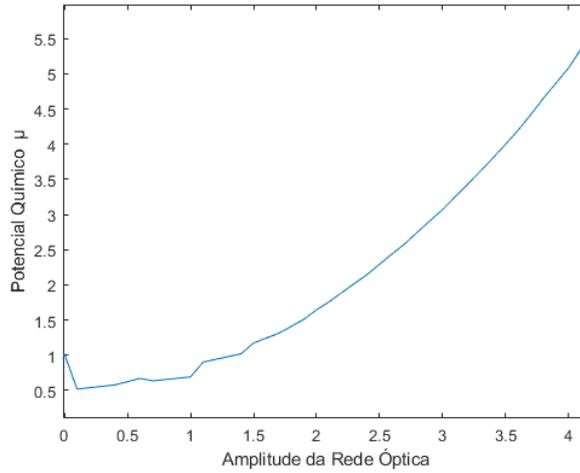


Figura 27: Primeira banda de gap. O Potencial Químico está dado em unidades de $\hbar\omega$. 686 átomos no sistema.

O Método de Aproximação Variacional também possibilita explorar o comportamento do Comprimento de Espalhamento em função do Potencial Químico, como mostra a Figura 28. Novamente, recorreremos às equações (4.32) e (4.33), onde adotamos $U = 1$ e solucionamos as equações para cada valor do Comprimento de Espalhamento de $49a_0$ a $51a_0$, deste modo obtemos simultaneamente a solução para as dimensões do sóliton (W e V) e através da equação (4.34) estimamos o valor do Potencial Químico.

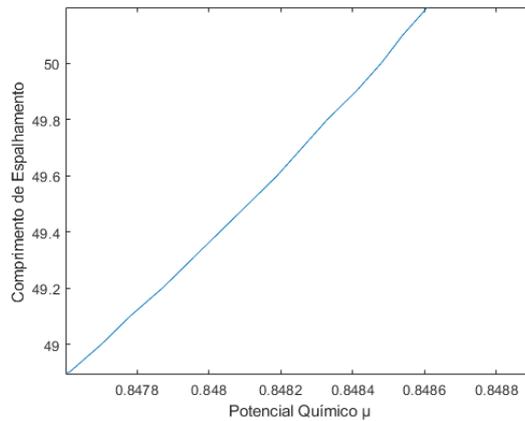


Figura 28: Comprimento de Espalhamento em função do potencial químico. O Comprimento de Espalhamento está dado em unidades de a_0 e o Potencial Químico está dado em unidades de $\hbar\omega$. 686 átomos no sistema.

Para estudar a formação de sólitons em condensados com interação dipolo-dipolo repulsiva, nós aplicamos o método de Newton-Raphson sobre as equações (4.32) e (4.33). Para átomos de ^{168}Er adotamos os seguintes valores: $U = 5.82$, $a_{dd} = 66.6a_0$, $a = 50a_0$, $\gamma = 2$ e $\varepsilon = 0.3$. Utilizamos o algoritmo apresentado no apêndice E onde variamos o número de átomos N de 1 a 1000. Ao contrário de um condensado com interação puramente de contato, os condensados com interação dipolo-dipolo dependem do número de átomos N no sistema. As equações (4.32) e (4.33) são solucionáveis quando o número de átomos no sistema é igual a 686. Isso significa que para os parâmetros que adotamos na rede óptica e para os valores que adotamos para as interações, encontraremos sólitons estáveis quando o sistema possui 686 átomos. As soluções encontradas através das equações (4.32) e (4.33) são substituídos na equação (4.30) que descreve o formato do sóliton através da seguinte relação $|\Psi(\vec{r}, t)|^2 = \varphi(\vec{r})^2$, como podemos ver na Figura 29. Do mesmo modo, as soluções fornecidas nas equações (4.32) e (4.33) são substituídas na equação (4.34) e obtemos uma estimativa para o potencial químico $\mu = 9.9239 \hbar\omega$.

A Figura 29, a seguir exibe o formato característico de um sóliton em um condensado com interação dipolo-dipolo repulsiva, porém percebemos que, à medida que a dimensão de W não é muito maior que V , o Método de Aproximação pode, eventualmente, torna-se excessivo. Isto é, como mostra Adhikari em seu trabalho sobre a estabilidade de sólitons em gases quânticos [18], em alguns casos a solução analítica fornecida pelo Método Variacional pode divergir consideravelmente de resultados numéricos.

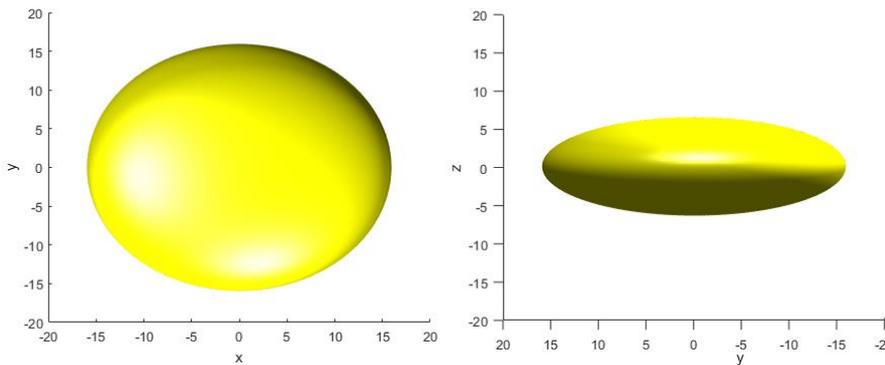


Figura 29: Sóliton de um condensado de ^{168}Er com 686 átomos no sistema. Amplitude da rede óptica $U=5.82$. Potencial químico $\mu = 9.9239 \hbar\omega$. A força de interação dipolar e o comprimento de espalhamento são, respectivamente: $a_{dd} = 66.6a_0$ e $a = 50a_0$. As dimensões espaciais do sólition estão dadas em unidades de $1\mu\text{m}$.

Em contraste com os outros condensados considerados neste trabalho, um condensado de ^{168}Er possui um comportamento próximo ao observado em outros estudos que não levam em consideração a interação dipolo-dipolo e sem a contribuição do

potencial harmônico, como a referência [58], o comportamento do potencial químico em função da amplitude da rede óptica – primeira banda de Bloch, observado na Figura 27 –, possui um comportamento crescente. Este comportamento coincide com trabalhos que exploram a rede óptica periódica com interação dipolo-dipolo [157] e sem interação dipolo-dipolo [154, 155]. As dimensões do sóliton, observado na Figura 26, por sua vez, coincide aproximadamente com um estudo numérico [60] que leva em conta um potencial periódico. Além disso, este condensado parece diferir em relação aos condensados constituídos de átomos de ^{52}Cr e ^{164}Dy , abordados nas subseções anteriores, em virtude do comportamento do Comprimento de Espalhamento em função do Potencial Químico. Enquanto que este condensado exibe um comportamento crescente do Comprimento de Espalhamento em função do Potencial Químico, observado na Figura 25 e em acordo com outros estudos [57, 58, 63, 65, 154, 155, 157].

5.3 SÓLITON ESTÁVEL DE ^{161}DY

Nesta subseção consideraremos um condensado de férmions constituídos de átomos de ^{161}Dy [25, 156] com interação dipolo-dipolo. Aplicamos o Método de Aproximação Variacional para determinar as dimensões de um sóliton constituído de átomos de ^{161}Dy bem como prever o comportamento do Potencial Químico em função da amplitude da rede óptica.

O condensado de ^{161}Dy é um gás degenerado de Fermi com interação dipolo-dipolo e, ao contrário dos bósons, depende da energia de Fermi e não do comprimento de espalhamento. Embora existam estudos que exploram a existência de bandas de Bloch, o nosso modelo – baseado na referência [19] –, não permite explorar esta possibilidade, entretanto, podemos realizar o mesmo procedimento descrito nas seções anteriores para explicitar o comportamento do Potencial Químico em função da amplitude da rede óptica. Entretanto, devemos enfatizar que não se trata de prever a primeira banda de Bloch e sim de explorar a estabilidade da gaussiana – esta sim, perfeitamente compatível como nosso modelo.

Assim como nas seções anteriores, solucionamos as equações não-lineares (4.50) e (4.51) para valor possível da amplitude da rede óptica no intervalo de $U=-20$ a $U=5$ e o

resultado é adicionado na equação (4.52). A Figura 30 exibe o comportamento do Potencial Químico em função da amplitude da rede óptica para um gás degenerado de Fermi constituído de átomos de ^{161}Dy com 100 átomos no sistema.

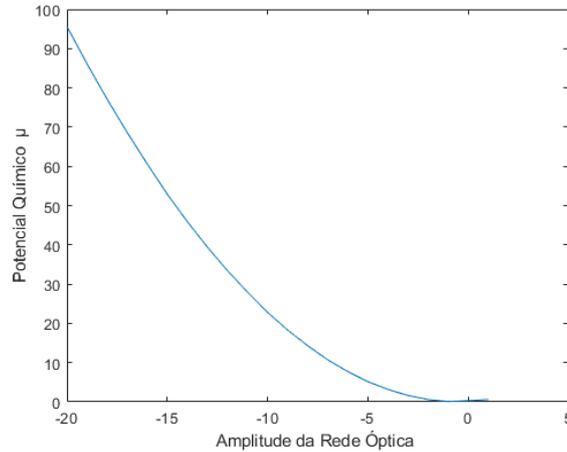


Figura 30: Primeira banda de gaps. O Potencial Químico está dado em unidades de $\hbar\omega$. 100 átomos no sistema.

Para estudar a formação de sólitons em um gás degenerado de Fermi com interação dipolo-dipolo repulsiva, nós aplicamos o método de Newton-Raphson sobre as equações (4.50) e (4.51). Para átomos de ^{161}Dy adotamos os seguintes valores: $U=-19$, $a_{dd} = 130a_0$, $\gamma = 2$ e $\varepsilon = 0.3$. Novamente, apresentamos um sóliton do tipo disco, o qual é característico de um sóliton em um condensado com interação dipolo-dipolo repulsiva, como podemos observar na Figura 31, abaixo.

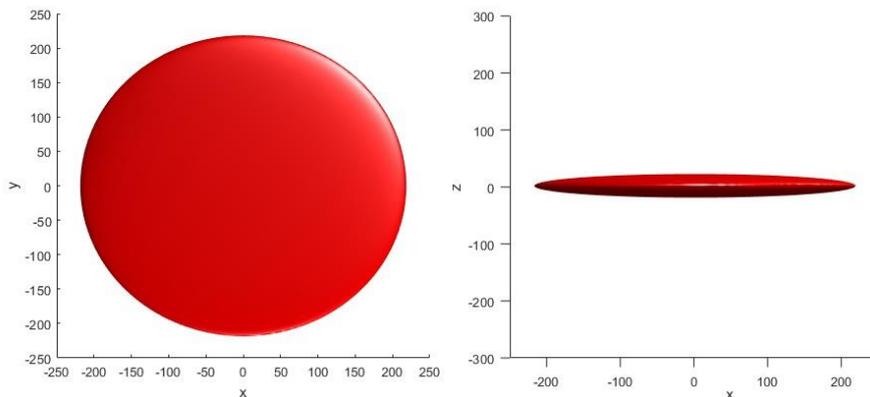


Figura 31: Sóliton de um condensado de ^{161}Dy com 100 átomos no sistema. Amplitude da rede óptica $U=-19$. Potencial químico $\mu = 86.1277 \hbar\omega$. A força de interação dipolar é: $a_{dd} = 130a_0$. As dimensões espaciais do sóliton estão dadas em unidades de $1\mu\text{m}$.

Utilizamos o algoritmo apresentado no apêndice E onde variamos o número de átomos N de 1 a 1000. As equações (4.50) e (4.51) são solucionáveis quando o número de átomos no sistema é igual a 100. Isso significa que para os parâmetros que adotamos na rede óptica e para os valores que adotamos para as interações, encontraremos sólitons estáveis quando o sistema possui 100 átomos. As soluções encontradas através das equações (4.50) e (4.51) são substituídos na equação (4.48) que descreve o formato do sóliton como podemos ver na Figura 31. Do mesmo modo, as soluções fornecidas nas equações (4.32) e (4.33) são substituídas na equação (4.52) e obtemos uma estimativa para o potencial químico $\mu = 86.1277 \hbar\omega$.

O comportamento do Potencial Químico em função da amplitude da rede óptica, exibido na Figura 30, está em acordo com outros estudos que não levam em consideração a interação dipolo-dipolo [154, 155] e com um estudo que leva em consideração a interação dipolo-dipolo em um potencial harmônico [19]. As dimensões do sóliton exibido pela Figura 31 estão em acordo com a referência [19].

5.4 TRANSIÇÕES QUÂNTICAS DE FASE

5.4.1 HAMILTONIANO DE BOSE-HUBBARD HOMOGÊNEO

Nesta subseção apresentamos os diagramas de fases obtidos através do modelo considerado na subseção 4.5.1.

A equação (4.94) fornece através de uma função nativa do software MATLAB [110] as Figuras 32 e 33. Na Figura 32 podemos observar os chamados lóbulos de Mott. Cada lóbulo de Mott corresponde a um número médio de átomos n por sítio da rede óptica periódica. O eixo horizontal corresponde ao termo de tunelamento Jz , enquanto que o eixo vertical corresponde ao potencial químico μ . Note que tanto o termo de tunelamento quanto o potencial químico são normalizados em função da interação entre bósons, isto é, Jz/U e μ/U . Isso significa que, considerando que a interação entre bósons seja constante, o potencial químico para um número médio de n átomos por sítio varia em função do termo de tunelamento. Por outro lado, a Figura 33 exibe o mesmo diagrama, com a diferença que a Figura 32 está normalizada em função da interação enquanto que a Figura

33 está normalizada em função do termo de tunelamento Jz . A Figura 32 mostra que, quando o termo μ/U aumenta ao mesmo tempo que Jz/U diminui em uma rede óptica, o sistema sofre uma transição quântica de fase e, quanto maior for o número médio de bósons, maior deverá ser o termo μ/U e menor deverá ser o termo Jz/U para que a transição ocorra. Outro modo de estudar o diagrama de fases está na convenção adotada na Figura 33, onde, basicamente, o sistema é normalizado em função do movimento entre os bósons (Jz).

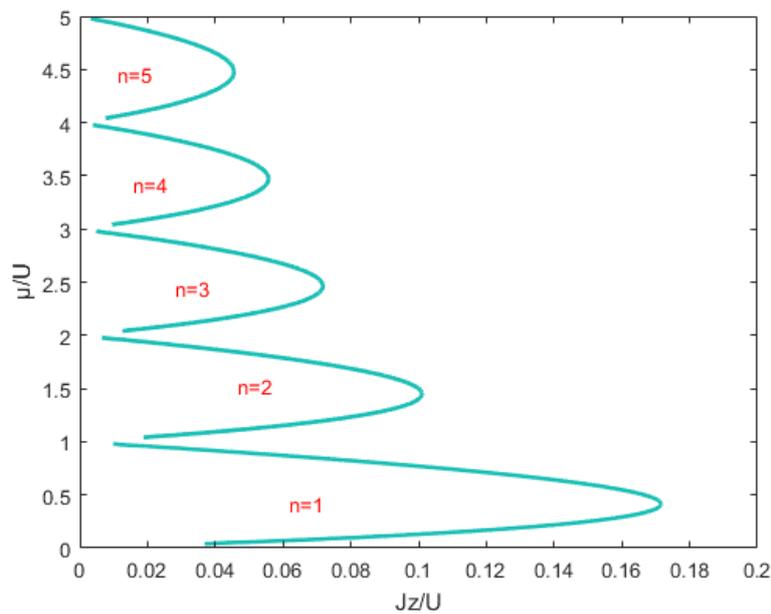


Figura 32: Diagrama de fases do modelo homogêneo. A área correspondente à fase de isolante de Mott varia de acordo com o número médio de bósons por sítio da rede.

A Figura 33 mostra que, quando o termo μ/Jz aumenta ao mesmo tempo que U/Jz em uma rede óptica, o sistema sofre uma transição quântica de fase e, quanto maior for o número médio de bósons, maior deverá ser o termo μ/Jz e maior deverá ser o termo U/Jz para que a transição ocorra.

Na Figura 33, o eixo horizontal corresponde à interação entre os bósons na rede óptica periódica normalizado em função do termo de tunelamento U/Jz , enquanto que o eixo vertical corresponde ao potencial químico μ/Jz . Onde n é o número médio de bósons por sítio da rede óptica.

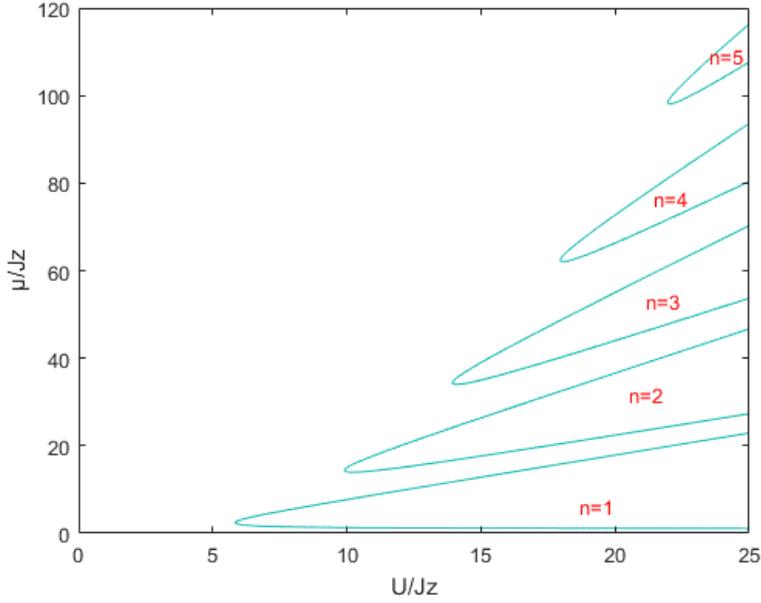


Figura 33: Diagrama de fases do modelo homogêneo no plano (μ, U) . A área correspondente à fase de isolante de Mott varia de acordo com o número médio de bósons por sítio da rede.

O resultado obtido na equação (4.94) e nas Figuras 32 e 33 estão em acordo com outros trabalhos teóricos [10, 108, 109].

5.4.2 MODELO NÃO HOMOGÊNEO DE BOSE-HUBBARD EM UMA REDE ÓPTICA QUASE PERIÓDICA

Ao contrário do caso homogêneo, o caso não-homogêneo de Bose-Hubbard descreve um condensado cujo a menor unidade da rede óptica quase periódica corresponde à supercélula definida na Figura 15 e possui quatro possibilidades de preenchimento: $g_{1\uparrow}$ representa o número médio de bósons com orientação do spin \uparrow no primeiro sítio da supercélula. Por sua vez, definimos $g_{1\downarrow}$ como o número médio de bósons no primeiro sítio da supercélula com orientação do spin \downarrow . Do mesmo modo, $g_{2\uparrow}$ representa o número médio de bósons com orientação do spin \uparrow no segundo sítio da supercélula. Finalmente, definimos $g_{2\downarrow}$ como o número médio de bósons no segundo sítio da supercélula com orientação do spin \downarrow . Sendo assim, a configuração $(0,1,1,0)$, como mostra a Figura 34, corresponde ao número médio de um bóson no primeiro sítio da supercélula com orientação do spin \downarrow e um número médio de um bóson no segundo sítio

da supercélula com orientação do spin \uparrow . O número médio total de bósons por sítio no primeiro lóbulo $(0,1,1,0)$ é igual a 1, isto é $(0+1+1+0)/2$. O primeiro lóbulo corresponde, portanto à fase isoladora de Mott.

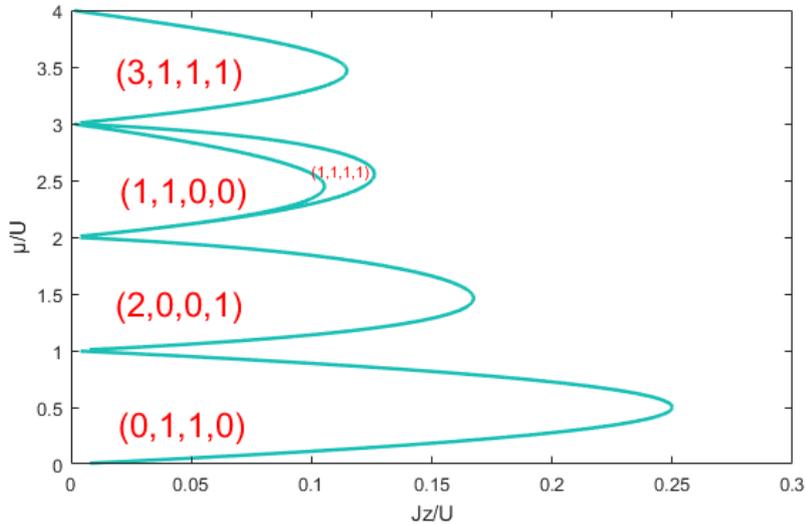


Figura 34: Diagrama de fases no caso não homogêneo e em uma supercélula. O número inteiro de bósons por supercélula corresponde à fase de Mott. O lóbulo correspondente à $(2,0,0,1)$ caracteriza uma fase *Density Waves* e uma fase supersólida em sua extremidade.

Do mesmo modo, o segundo lóbulo da Figura 34, definido como $(2,0,0,1)$ corresponde a um número médio de 2 bósons no primeiro sítio da supercélula com a orientação do spin \uparrow e com o número médio de 1 bóson no segundo sítio com orientação do spin \downarrow . No segundo lóbulo, o número médio de bósons por sítio é $(2+0+0+1)/2=3/2$, o que corresponde à fase *Density Waves* (*Spin Density Waves* ou *Charge Density Waves*). Este lóbulo também corresponde à fase supersólida na extremidade do lóbulo, isto é, para valores relativamente altos do termo de tunelamento para o segundo lóbulo, mas que ainda permanecem dentro da curva do lóbulo.

O terceiro lóbulo, definido como $(1,1,0,0)$ corresponde a um número médio de 1 bóson no primeiro sítio da supercélula com a orientação do spin \uparrow e a um número médio de 1 bósons no primeiro sítio da supercélula com orientação do spin \downarrow , o número médio de bósons na supercélula para o terceiro lóbulo corresponde a $(1+1+0+0)/2=1$ – que corresponde à fase isoladora de Mott.

O quarto lóbulo $(1,1,1,1)$ corresponde a um número médio de 1 bóson no primeiro sítio da supercélula com orientação do spin \uparrow e 1 bóson com orientação \downarrow , no segundo

sítio da supercélula temos um número médio de 1 bóson com orientação do spin \uparrow e 1 bóson com orientação \downarrow . Este lóbulo corresponde à fase isoladora de Mott já que $(1+1+1+1)/2=2$. Um número médio inteiro de bósons por sítio da supercélula corresponde à fase isoladora de Mott.

O quinto lóbulo (3,1,1,1) corresponde a um número médio de 3 bósons no primeiro sítio da supercélula com orientação do spin \uparrow e 1 bóson com orientação \downarrow , no segundo sítio da supercélula temos um número médio de 1 bóson com orientação do spin \uparrow e 1 bóson com orientação \downarrow . Este lóbulo corresponde à fase isoladora de Mott já que $(3+1+1+1)/2=3$. Um número médio inteiro de bósons por sítio da supercélula corresponde à fase isoladora de Mott.

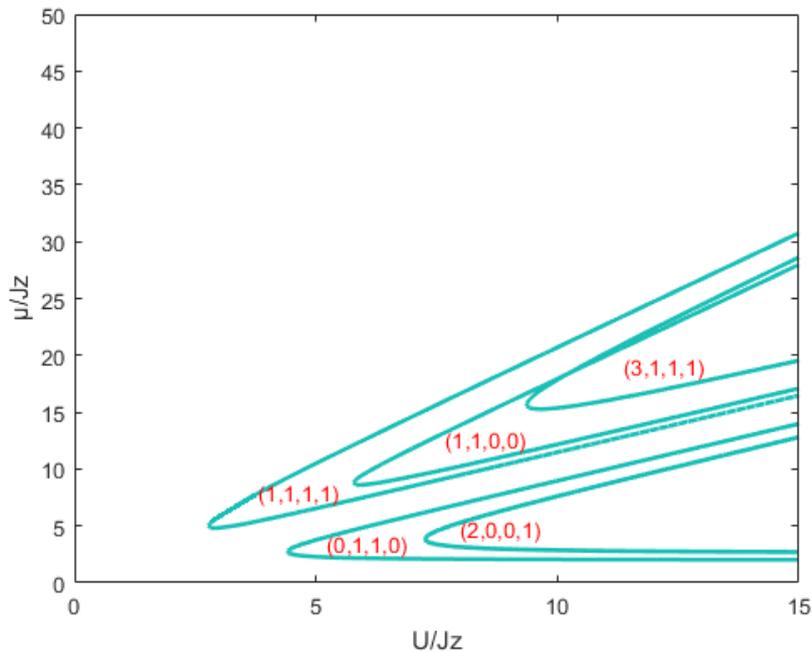


Figura 35: Diagrama de fases do modelo não homogêneo de Bose-Hubbard para bósons interagindo em uma rede óptica quase óptica.

A Figura 35 exibe um diagrama de fases para o modelo não-homogêneo de Bose-Hubbard para gases quânticos aprisionados na rede óptica quase periódica interagindo fortemente. Note que a diferença entre a Figura 34 e a Figura 35 reside na convenção adotada. Na Figura 34 apresentamos o valor do potencial químico em função do termo de tunelamento normalizados em função da interação. A Figura 35 por sua vez apresenta o Potencial Químico em função da interação – normalizados em função do tunelamento (movimento dos átomos).

5.5 POSSÍVEIS APLICAÇÕES DESTE TRABALHO

Nesta seção, discutimos os possíveis desdobramentos deste trabalho em uma perspectiva mais aplicada, tanto no sentido da física básica quanto no sentido tecnológico. Discutimos algumas aplicações gerais e em especial destacamos a litografia atômica. A litografia atômica pode receber um *upgrade* em virtude do potencial quase periódico empregado e considerando átomos com interação dipolo-dipolo em condensação.

Em essência, o movimento de átomos na rede óptica é análogo ao de elétrons em uma rede cristalina. Consequentemente, muitos modelos teóricos foram motivados por sólidos reais, como o modelo de Hubbard que descreve a transição de fase condutora para isolante em metais. Entretanto, o estudo de gases quânticos fornece vantagens que em sólidos reais são inviáveis. Em primeiro lugar, a escala de energia em gases quânticos é muito menor, o que significa, na prática, que a dinâmica do sistema varia muito pouco em função do tempo e isto permite o monitoramento em tempo real do sistema. Recentemente, novas técnicas experimentais, como *high spatial resolution* [158], permitem observar a evolução temporal de um único átomo. Em segundo lugar, os gases quânticos por serem mais acessíveis experimentalmente permitem um controle maior. Em suma, os gases quânticos nada mais são que simuladores quânticos, como proposto por Feynman [159].

Os sólitons em gases quânticos degenerados, por terem uma correspondência com os sólitons em fibras ópticas, podem ser entendidos como simuladores quânticos. Assim como os sólitons em gases quânticos, os sólitons em fibra óptica são descritos em termos de uma Equação de Schrödinger Não Linear e o Método de Aproximação Variacional também é utilizado em estudos analíticos. A propagação de sólitons em fibras ópticas possui um potencial tecnológico muito alto, como por exemplo internet de alta velocidade, da ordem de 1.4 Tbps (*Terabytes* por segundo) [59, 160, 161]. Entretanto, um estudo direto em sólitons em fibras ópticas possui a desvantagem teórica em relação à simetria da fibra óptica – o que significa abrir mão de um potencial mais complexo, como o que foi explorado nesta dissertação, e a dificuldade experimental em controlar e observar tais sólitons. Então, nós temos esse contraste: os sólitons em gases quânticos são relativamente fáceis de observar e prever, embora não possuam aplicações tecnológicas no curto prazo e; os sólitons em fibras ópticas já possuem aplicações tecnológicas imediatas e de altíssima importância, mas seu estudo constitui ainda um desafio. Por outro

lado, a existência de sólitons em condensados de hidrogênio, ^{52}Cr , ^{164}Dy , ^{168}Er e ^{161}Dy podem ampliar consideravelmente as possibilidades em computação quântica a longo prazo.

Do ponto de vista puramente conceitual, a supercondutividade nada mais é que um subproduto da superfluidez, embora seja àquela e não esta que atraia maior interesse. Os gases quânticos degenerados estão em um regime de superfluidez e, graças ao modelo de Bose-Hubbard, podemos observar e prever novas fases quânticas presentes no condensado. O mesmo condensado que está em uma fase superfluida pode sofrer uma transição de fase e entrar em um regime como o isolante de Mott – como descrito e previsto pelo modelo de Bose-Hubbard em uma rede óptica periódica. Do mesmo modo, graças a outros tipos de rede como a rede óptica quase periódica que utilizamos, o sistema pode sofrer outras transições de fase, como a supersólida. A fase supersólida é de longe o fenômeno mais fascinante já previsto em matéria condensada – trata-se de um sólido que exibe comportamento de um superfluido. Nosso estudo limitou-se ao estudo de uma rede duplamente periódica, mas provavelmente, outros tipos de rede podem prever e descrever outros tipos de fases.

No contexto específico da Ciência dos Materiais podemos enfatizar ainda que existem estudos que exploram as propriedades de gases quânticos degenerados para a litografia atômica [162]. Isto é, os átomos aprisionados na rede óptica se acumulam nos nodos do potencial formando uma “grade de difração” de átomos que podem ser depositados na superfície de um substrato [163]. A possibilidade de cultivar nanoestruturas através da litografia atômica com átomos incoerentes (caso não degenerado) também já foi demonstrada [164, 165]. A dopagem estrutural também já foi demonstrada pelo uso simultâneo de um feixe atômico e a matriz de um material homogêneo [166]. A passagem da litografia atômica constituída de átomos em estados quânticos incoerentes (não degenerado) para átomos em estados quânticos coerentes (degenerados) aumenta consideravelmente as possibilidades da litografia atômica. Ou seja, a aplicação de redes óptica quase periódicas no aprisionamento de átomos ultrafrios podem ampliar as possibilidades em litografia atômica. Portanto, podemos propor que a rede quase periódica que utilizamos neste trabalho pode ser empregada na manipulação de átomos degenerados de ^{52}Cr , ^{164}Dy , ^{168}Er e ^{161}Dy de modo que eles sejam depositados em um substrato com o objetivo de construir nanoestruturas de componentes eletrônicos, como semicondutores, transistores etc.

6 CONCLUSÃO

Neste trabalho demonstramos com sucesso e pela primeira vez a possibilidade teórica de gerar sólitons estáveis em condensados constituídos de átomos de hidrogênio, ^{52}Cr , ^{164}Dy , ^{168}Er e ^{161}Dy , utilizando a rede óptica quase periódica. Além disto, demonstramos com riqueza de detalhes a transição quântica de fases em um sistema descrito pelo hamiltoniano de Bose-Hubbard homogêneo e não-homogêneo, em especial demonstramos que a rede óptica quase periódica (caso não-homogêneo) permite prever outras fases quânticas que estão presentes no condensado: isolante de Mott, *Density Waves* e supersólida. Em linhas gerais, nossos resultados coincidem com os nossos objetivos (como está explícito no capítulo 3). Neste capítulo discutiremos nossos resultados e sugerimos algumas perspectivas de novos trabalhos que podem ser ancorados neste.

Para alcançar nosso primeiro objetivo específico, explicitado no capítulo 3 – o qual pode ser resumido em utilizar a Aproximação Variacional para descrever as propriedades macroscópicas de gases quânticos interagindo fracamente, isto é, o comportamento do Comprimento de Espalhamento em função do Potencial Químico (aplicável apenas no caso dos bósons), prever a primeira banda de Bloch do sistema (aplicável apenas no caso dos bósons) e o formato do sólito (aplicável aos bósons e aos férmions) – recorreremos ao auxílio do Método de Newton-Raphson, descrito na seção 4.4, para solucionar o sistema de equações não-lineares que resultam diretamente da aplicação do Método de Aproximação Variacional. Os nossos resultados foram detalhados e discutidos no capítulo 5 – assim como relacionamos nossos resultados com o obtido na literatura.

Do ponto de vista puramente teórico, desenvolvemos uma descrição teórica do comportamento macroscópico e microscópico de gases quânticos degenerados em uma rede óptica quase periódica – o que corresponde aos nossos objetivos gerais. Do ponto de vista macroscópico, nosso estudo se baseia na utilização do Método de Aproximação Variacional para solucionar a Equação de Gross-Pitaevskii e a Equação Hidrodinâmica de Campo Médio (seção 4.3). A abordagem microscópica, por outro lado, se deu através da resolução do Hamiltoniano de Bose-Hubbard – o qual nos permite prever os lóbulos de Mott no caso homogêneo e, no caso não-homogêneo, nos permitiu prever ainda as fases *Density Waves* e supersólida. Teoricamente, o modelo de Bose-Hubbard pode ser válido

para descrever a transição quântica em qualquer condensado que, corresponda à primeira banda de Bloch e, cujo a profundidade da rede óptica seja suficientemente grande.

Em relação aos resultados, o condensado de hidrogênio apresenta resultados coerentes com outros trabalhos que levam em consideração a rede óptica quase periódica. Contudo, devido à complexidade experimental e as controvérsias teóricas em relação à condensação do hidrogênio, uma descrição teórica e experimental completa da condensação do hidrogênio exige seu próprio protagonismo. Em consideração aos bósons com interação dipolo-dipolo, percebemos que o sóliton do condensado de ^{168}Er é o que menos se assemelha a um sóliton do tipo disco, como podemos observar na Figura 29, embora apresente resultados mais coerentes na previsão teórica da primeira banda de Bloch, Figura 27, e no comportamento do comprimento de espalhamento em função do potencial químico, Figura 28. Estes resultados contrastam fortemente com os resultados obtidos nos condensados de ^{52}Cr e ^{164}Dy . Ao contrário do condensado de ^{168}Er , os condensados de ^{52}Cr e ^{164}Dy exibem sólitons mais coerentes, como podemos observar na Figura 23 e na Figura 26, respectivamente, e suas respectivas banda de Bloch exibem um comportamento típico, assim como o comportamento de seus respectivos comprimento de espalhamento em função do potencial químico exibem um comportamento atípico. Isso se deve, em parte, ao fato do Método de Aproximação Variacional ser frequentemente um método de aproximação excessivo quando se trata de condensados com interação dipolo-dipolo, como demonstra Adhikari na referência [18]. O condensado constituído de átomos fermiônicos com interação dipolo-dipolo de átomos de ^{161}Dy apresenta, por sua vez, resultados mais coerentes com trabalhos teóricos como um todo, isto é, além das dimensões do sóliton coincidir com os pressupostos teóricos, o comportamento do potencial químico com a rede óptica quase periódica também corrobora outros trabalhos.

Os resultados que obtivemos através do modelo de Bose-Hubbard podem viabilizar estudos numéricos, teóricos e experimentais. Embora este trabalho corresponda a uma abordagem analítica – o que nos permite conhecer qualitativamente a transição quântica de fases –, esta abordagem é essencial para viabilizar estudos numéricos e experimentais. Mais recentemente, até a conclusão deste trabalho, Léonard *et al.* [98] e Li *et al.* [167] relatam a observação de um comportamento característico de um supersólido. Os autores supracitados prepararam um sistema inicialmente no estado superfluido através de técnicas de resfriamento já consolidadas e em seguida utilizaram um par de lasers para agitar os átomos de forma regular, fazendo com que eles se alinhassem em um padrão de repetição espacial – comportamento este que corresponde à ordem sólida. Para uma

compreensão mais clara do fenômeno, recomendamos que o leitor veja o vídeo presente na referência [168].

Entre as perspectivas e sugestões de trabalhos futuros podemos propor:

1. Um estudo aprofundado da condensação do hidrogênio através do viés teórico e, reproduzir experimentalmente a condensação do hidrogênio através do uso de redes ópticas.
2. Refazer todo este trabalho através de uma abordagem puramente numérica. Um estudo numérico do hidrogênio pode ser realizado fazendo adequações no algoritmo utilizado na referência [169]. Um estudo numérico com condensados de bósons com interação dipolo-dipolo pode ser viabilizado através do algoritmo descrito pela referência [170]. Finalmente, o modelo de Bose-Hubbard pode ser estudado qualitativamente através da abordagem descrita pelo *ALPS project* [171].
3. Refazer este trabalho através de um viés experimental.
4. Aprofundar cada um dos tópicos contemplados neste estudo e encontrar aplicações específicas para cada um deles no contexto da ciência dos materiais, física da matéria condensada e até mesmo a correspondência com fenômenos astrofísicos [78].
5. Expandir teoricamente o escopo deste trabalho de modo a incluir a colisão e/ou decaimento de sólitons.
6. Refazer este estudo de modo que os parâmetros sejam alterados visando soluções que correspondam aos sólitons escuros e aos sólitons do tipo *bright-in-dark*.
7. Estudar microscopicamente o diagrama de fases através do hamiltoniano de Bose-Fermi-Hubbard em uma rede óptica quase periódica [172].
8. Compreender melhor a demanda da computação quântica por redes ópticas [173, 174].

REFERÊNCIAS

1. Bose, S., *A lei de Planck e a hipótese dos quanta de luz*. Revista Brasileira de Ensino de Física, 2005. **27**(3): p. 463-465.
2. Einstein, A., *Teoria quântica do gás ideal monoatômico: segundo tratado*. Revista Brasileira de Ensino de Física, 2005. **27**(1): p. 113-120.
3. Ensher, J.R., *The first experiments with Bose-Einstein condensation of ^{87}Rb* . 1999, University of Colorado.
4. Dalfovo, F., et al., *Theory of Bose-Einstein condensation in trapped gases*. Reviews of Modern Physics, 1999. **71**(3): p. 463.
5. Pitaevskii, L.P. and S. Stringari, *Bose-Einstein condensation*. 2003.
6. Davis, K.B., et al., *Bose-Einstein condensation in a gas of sodium atoms*. Physical review letters, 1995. **75**(22): p. 3969.
7. Greiner, M., *Ultracold quantum gases in three-dimensional optical lattice potentials*. 2003, Imu.
8. Jaksch, D., et al., *Creation of a molecular condensate by dynamically melting a Mott insulator*. Physical review letters, 2002. **89**(4): p. 040402.
9. Fisher, M.P., et al., *Boson localization and the superfluid-insulator transition*. Physical Review B, 1989. **40**(1): p. 546.
10. Greiner, M., et al., *Quantum phase transition from a superfluid to a Mott insulator in a gas of ultracold atoms*. nature, 2002. **415**(6867): p. 39.
11. Anderson, B.P. and M.A. Kasevich, *Macroscopic quantum interference from atomic tunnel arrays*. Science, 1998. **282**(5394): p. 1686-1689.
12. Khaykovich, L., et al., *Formation of a matter-wave bright soliton*. Science, 2002. **296**(5571): p. 1290-1293.
13. Strecker, K.E., et al., *Formation and propagation of matter-wave soliton trains*. Nature, 2002. **417**(6885): p. 150.
14. Cornish, S.L., S.T. Thompson, and C.E. Wieman, *Formation of bright matter-wave solitons during the collapse of attractive Bose-Einstein condensates*. Physical review letters, 2006. **96**(17): p. 170401.

15. Greiner, M., C.A. Regal, and D.S. Jin, *Emergence of a molecular Bose–Einstein condensate from a Fermi gas*. *Nature*, 2003. **426**(6966): p. 537.
16. Zwierlein, M.W., et al., *Observation of Bose-Einstein condensation of molecules*. *Physical review letters*, 2003. **91**(25): p. 250401.
17. Pethick, C.J. and H. Smith, *Bose-Einstein condensation in dilute gases*. 2002: Cambridge university press.
18. Adhikari, S., *Stability of trapped degenerate dipolar Bose and Fermi gases*. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 2013. **46**(11): p. 115301.
19. Adhikari, S.K., *Study of a degenerate dipolar Fermi gas of ^{161}Dy atoms*. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 2012. **45**(23): p. 235303.
20. Kubo, R., *Thermodynamics: an advanced course with problems and solutions*. Vol. 1. 1968: North-Holland.
21. Leggett, A.J., *Bose-Einstein condensation in the alkali gases: Some fundamental concepts*. *Reviews of Modern Physics*, 2001. **73**(2): p. 307.
22. Ketterle, W. *When atoms behave as waves: Bose–Einstein condensation and the atom laser*. in *Symmetry And Modern Physics: Yang Retirement Symposium*. 2003. World Scientific.
23. Jin, D. and C. Regal. *Fermi gas experiments*. in *Proceedings of the International School of Physics ‘Enrico Fermi*. 2006.
24. Griesmaier, A., et al., *Bose-Einstein condensation of chromium*. *Physical Review Letters*, 2005. **94**(16): p. 160401.
25. Lu, M., N.Q. Burdick, and B.L. Lev, *Quantum degenerate dipolar Fermi gas*. *Physical Review Letters*, 2012. **108**(21): p. 215301.
26. Lu, M., S.H. Youn, and B.L. Lev, *Trapping ultracold dysprosium: a highly magnetic gas for dipolar physics*. *Physical review letters*, 2010. **104**(6): p. 063001.
27. Aikawa, K., et al., *Bose-Einstein condensation of erbium*. *Physical review letters*, 2012. **108**(21): p. 210401.
28. Ni, K.-K., et al., *Dipolar collisions of polar molecules in the quantum regime*. *Nature*, 2010. **464**(7293): p. 1324.
29. Ni, K.-K., et al., *A high phase-space-density gas of polar molecules*. *science*, 2008. **322**(5899): p. 231-235.

30. Arimondo, E., M. Inguscio, and P. Violino, *Experimental determinations of the hyperfine structure in the alkali atoms*. *Reviews of Modern Physics*, 1977. **49**(1): p. 31.
31. Chiquillo, E., *Bright solitons in a quasi-one-dimensional reduced model of a dipolar Bose–Einstein condensate with repulsive short-range interactions*. *Laser Physics*, 2014. **24**(8): p. 085502.
32. Koch, T., et al., *Stabilizing a purely dipolar quantum gas against collapse*. arXiv preprint arXiv:0710.3643, 2007.
33. Lahaye, T., et al., *The physics of dipolar bosonic quantum gases*. *Reports on Progress in Physics*, 2009. **72**(12): p. 126401.
34. Lu, M., et al., *Strongly dipolar Bose-Einstein condensate of dysprosium*. *Physical review letters*, 2011. **107**(19): p. 190401.
35. Muruganandam, P. and S.K. Adhikari, *Numerical and variational solutions of the dipolar Gross-Pitaevskii equation in reduced dimensions*. *Laser Physics*, 2012. **22**(4): p. 813-820.
36. Santos, L., et al., *Bose-Einstein condensation in trapped dipolar gases*. *Physical Review Letters*, 2000. **85**(9): p. 1791.
37. Tikhonenkov, I., B. Malomed, and A. Vardi, *Anisotropic solitons in dipolar Bose-Einstein condensates*. *Physical review letters*, 2008. **100**(9): p. 090406.
38. Anderson, M.H., et al., *Observation of Bose-Einstein condensation in a dilute atomic vapor*. *science*, 1995. **269**(5221): p. 198-201.
39. Marangoni, B.S., *Moléculas frias em armadilhas ópticas*. Universidade de São Paulo.
40. Marangoni, B.S., *Colisões heteronucleares em uma armadilha de dipolo*. Universidade de São Paulo.
41. Peil, S., et al., *Patterned loading of a Bose-Einstein condensate into an optical lattice*. *Physical Review A*, 2003. **67**(5): p. 051603.
42. Diener, R.B., et al., *Transition between extended and localized states in a one-dimensional incommensurate optical lattice*. *Physical Review A*, 2001. **64**(3): p. 033416.
43. Becker, C., et al., *Ultracold quantum gases in triangular optical lattices*. *New Journal of Physics*, 2010. **12**(6): p. 065025.

44. Tarruell, L., et al., *Creating, moving and merging Dirac points with a Fermi gas in a tunable honeycomb lattice*. Nature, 2012. **483**(7389): p. 302.
45. Santos, L., et al., *Atomic quantum gases in kagomé lattices*. Physical review letters, 2004. **93**(3): p. 030601.
46. Dalibard, J. and C. Cohen-Tannoudji, *Laser cooling below the Doppler limit by polarization gradients: simple theoretical models*. JOSA B, 1989. **6**(11): p. 2023-2045.
47. Jessen, P., et al., *Observation of quantized motion of Rb atoms in an optical field*. Physical review letters, 1992. **69**(1): p. 49.
48. Anderson, B., T. Gustavson, and M. Kasevich, *Atom trapping in nondissipative optical lattices*. Physical Review A, 1996. **53**(6): p. R3727.
49. Orzel, C., et al., *Squeezed states in a Bose-Einstein condensate*. Science, 2001. **291**(5512): p. 2386-2389.
50. Jaksch, D., et al., *Cold bosonic atoms in optical lattices*. Physical Review Letters, 1998. **81**(15): p. 3108.
51. Stöferle, T., et al., *Transition from a strongly interacting 1d superfluid to a mott insulator*. Physical review letters, 2004. **92**(13): p. 130403.
52. Tolra, B.L., et al., *Observation of reduced three-body recombination in a correlated 1D degenerate Bose gas*. Physical Review Letters, 2004. **92**(19): p. 190401.
53. Kinoshita, T., T. Wenger, and D.S. Weiss, *Observation of a one-dimensional Tonks-Girardeau gas*. Science, 2004. **305**(5687): p. 1125-1128.
54. Kangara, J., et al., *Atom Pairing in Optical Superlattices*. Physical Review Letters, 2018. **120**(8): p. 083203.
55. Bloch, I., *Ultracold quantum gases in optical lattices*. Nature Physics, 2005. **1**(1): p. 23.
56. Morsch, O. and M. Oberthaler, *Dynamics of Bose-Einstein condensates in optical lattices*. Reviews of modern physics, 2006. **78**(1): p. 179.
57. Louis, P.J., et al., *Bose-Einstein condensates in optical lattices: Band-gap structure and solitons*. Physical Review A, 2003. **67**(1): p. 013602.

58. Louis, P.J., E.A. Ostrovskaya, and Y.S. Kivshar, *Matter-wave dark solitons in optical lattices*. Journal of Optics B: Quantum and Semiclassical Optics, 2004. **6**(5): p. S309.
59. Malomed, B.A., *Soliton management in periodic systems*. 2006: Springer Science & Business Media.
60. Adhikari, S., *Two-dimensional bright and dark-in-bright dipolar Bose–Einstein condensate solitons on a one-dimensional optical lattice*. Laser Physics Letters, 2016. **13**(8): p. 085501.
61. Efremidis, N.K. and D.N. Christodoulides, *Lattice solitons in Bose-Einstein condensates*. Physical Review A, 2003. **67**(6): p. 063608.
62. Gubeskys, A., B.A. Malomed, and I.M. Merhasin, *Alternate Solitons: Nonlinearly Managed One-and Two-Dimensional Solitons in Optical Lattices*. Studies in Applied Mathematics, 2005. **115**(2): p. 255-277.
63. Hilligsøe, K.M., M.K. Oberthaler, and K.-P. Marzlin, *Stability of gap solitons in a Bose-Einstein condensate*. Physical Review A, 2002. **66**(6): p. 063605.
64. Kumar, R.K., P. Muruganandam, and B. Malomed, *Vortical and fundamental solitons in dipolar Bose–Einstein condensates trapped in isotropic and anisotropic nonlinear potentials*. Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics, 2013. **46**(17): p. 175302.
65. Ostrovskaya, E.A. and Y.S. Kivshar, *Matter-wave gap solitons in atomic band-gap structures*. Physical review letters, 2003. **90**(16): p. 160407.
66. Porter, M.A., et al., *Dynamics and manipulation of matter-wave solitons in optical superlattices*. Physics Letters A, 2006. **352**(3): p. 210-215.
67. Trombettoni, A. and A. Smerzi, *Discrete solitons and breathers with dilute Bose-Einstein condensates*. Physical Review Letters, 2001. **86**(11): p. 2353.
68. Zobay, O., et al., *Creation of gap solitons in Bose-Einstein condensates*. Physical Review A, 1999. **59**(1): p. 643.
69. Konotop, V. and M. Salerno, *Modulational instability in Bose-Einstein condensates in optical lattices*. Physical Review A, 2002. **65**(2): p. 021602.
70. Nascimento, V., et al., *Método variacional aplicado ao estudo de um gás de átomos de Fermi em um estado superfluido aprisionados por uma rede optica quase periódica*. Caderno Brasileiro de Ensino de Física, 2016. **38**(4).

71. Bradley, C.C., et al., *Evidence of Bose-Einstein condensation in an atomic gas with attractive interactions*. Physical Review Letters, 1995. **75**(9): p. 1687.
72. Pitaevskii, L. and S. Stringari, *Bose-Einstein condensation and superfluidity*. Vol. 164. 2016: Oxford University Press.
73. Regal, C., M. Greiner, and D.S. Jin, *Observation of resonance condensation of fermionic atom pairs*. Physical review letters, 2004. **92**(4): p. 040403.
74. Manfredi, G. and F. Haas, *Self-consistent fluid model for a quantum electron gas*. Physical Review B, 2001. **64**(7): p. 075316.
75. Van Houten, H., et al., *Coherent electron focusing with quantum point contacts in a two-dimensional electron gas*. Physical Review B, 1989. **39**(12): p. 8556.
76. Rokhsar, D.S. and S.A. Kivelson, *Superconductivity and the quantum hard-core dimer gas*. Physical review letters, 1988. **61**(20): p. 2376.
77. Sanchez-Palencia, L. and M. Lewenstein, *Disordered quantum gases under control*. Nature Physics, 2010. **6**(2): p. 87.
78. Chabrier, G., N. Ashcroft, and H. DeWitt, *White dwarfs as quantum crystals*. Nature, 1992. **360**(6399): p. 48.
79. Ku, M.J., et al., *Revealing the superfluid lambda transition in the universal thermodynamics of a unitary Fermi gas*. Science, 2012. **335**(6068): p. 563-567.
80. Shuryak, E.V., *Quark-gluon plasma and hadronic production of leptons, photons and psions*. Physics Letters B, 1978. **78**(1): p. 150-153.
81. Shuryak, E.V., *The role of instantons in quantum chromodynamics:(III). Quark-gluon plasma*. Nuclear Physics B, 1982. **203**(1): p. 140-156.
82. Letessier, J. and J. Rafelski, *QCD equations of state and the quark-gluon plasma liquid model*. Physical Review C, 2003. **67**(3): p. 031902.
83. Shuryak, E., *Physics of strongly coupled quark-gluon plasma*. Progress in Particle and Nuclear Physics, 2009. **62**(1): p. 48-101.
84. Jané, E., et al., *Simulation of quantum dynamics with quantum optical systems*. Quantum Information & Computation, 2003. **3**(1): p. 15-37.
85. Mandel, O., et al., *Controlled collisions for multi-particle entanglement of optically trapped atoms*. Nature, 2003. **425**(6961): p. 937.
86. Hensinger, W.K., et al., *Dynamical tunnelling of ultracold atoms*. Nature, 2001. **412**(6842): p. 52.

87. Alves, C.M. and D. Jaksch, *Multipartite entanglement detection in bosons*. Physical review letters, 2004. **93**(11): p. 110501.
88. Eiermann, B., et al., *Dispersion management for atomic matter waves*. Physical review letters, 2003. **91**(6): p. 060402.
89. Fallani, L., et al., *Optically induced lensing effect on a Bose-Einstein condensate expanding in a moving lattice*. Physical review letters, 2003. **91**(24): p. 240405.
90. Bloch, I., J. Dalibard, and S. Nascimbene, *Quantum simulations with ultracold quantum gases*. Nature Physics, 2012. **8**(4): p. 267.
91. Jaksch, D., et al., *Entanglement of atoms via cold controlled collisions*. Physical Review Letters, 1999. **82**(9): p. 1975.
92. DiVincenzo, D.P., *Two-bit gates are universal for quantum computation*. Physical Review A, 1995. **51**(2): p. 1015.
93. Bennett, C., *Phys. Today 48, 24 (October 1995); DP DiVincenzo*. Science, 1995. **270**(255): p. 1.
94. Barenco, A., et al., *Elementary gates for quantum computation*. Physical review A, 1995. **52**(5): p. 3457.
95. Fortanier, R.M., *Variational approaches to dipolar Bose-Einstein condensates*. 2014.
96. Fallani, L., et al., *Ultracold atoms in a disordered crystal of light: Towards a bose glass*. Physical Review Letters, 2007. **98**(13): p. 130404.
97. Batrouni, G., et al., *Supersolids in the Bose-Hubbard Hamiltonian*. Physical review letters, 1995. **74**(13): p. 2527.
98. Léonard, J., et al., *Supersolid formation in a quantum gas breaking a continuous translational symmetry*. Nature, 2017. **543**(7643): p. 87.
99. Hazzard, K., *Quantum Phase Transitions in Cold Atoms and Low Temperature Solids*. 2010.
100. Buonsante, P., V. Penna, and A. Vezzani, *Fractional-filling loophole insulator domains for ultracold bosons in optical superlattices*. Physical Review A, 2004. **70**(6): p. 061603.
101. Buonsante, P., V. Penna, and A. Vezzani, *Analytical mean-field approach to the phase-diagram of ultracold bosons in optical superlattices*. arXiv preprint cond-mat/0409385, 2004.

102. Buonsante, P. and A. Vezzani, *Phase diagram for ultracold bosons in optical lattices and superlattices*. Physical Review A, 2004. **70**(3): p. 033608.
103. Buonsante, P. and A. Vezzani, *Cell strong-coupling perturbative approach to the phase diagram of ultracold bosons in optical superlattices*. Physical Review A, 2005. **72**(1): p. 013614.
104. Chen, B.-L., et al., *Quantum phases of the Bose-Hubbard model in optical superlattices*. Physical Review A, 2010. **81**(5): p. 053608.
105. Rigol, M., A. Muramatsu, and M. Olshanii, *Hard-core bosons on optical superlattices: Dynamics and relaxation in the superfluid and insulating regimes*. Physical Review A, 2006. **74**(5): p. 053616.
106. Wagner, A., *Spinor condensates in optical superlattices*. 2012, University_of_Basel.
107. Wagner, A., A. Nunnenkamp, and C. Bruder, *Mean-field analysis of spinor bosons in optical superlattices*. Physical Review A, 2012. **86**(2): p. 023624.
108. Kurdestany, J.M., R.V. Pai, and R. Pandit, *The inhomogeneous extended Bose-Hubbard model: A mean-field theory*. Annalen der Physik, 2012. **524**(3-4): p. 234-244.
109. De-Shui, Y. and C. Jing-Biao, *Variational Approach for the Bose-Hubbard Model*. Chinese Physics Letters, 2008. **25**(5): p. 1792.
110. Gilat, A. and V. Subramaniam, *Métodos numéricos para engenheiros e cientistas: uma introdução com aplicações usando o MATLAB*. 2009: Bookman Editora.
111. Baranov, M.A., *Theoretical progress in many-body physics with ultracold dipolar gases*. Physics Reports, 2008. **464**(3): p. 71-111.
112. Sakurai, J.J. and E.D. Commins, *Modern quantum mechanics, revised edition*. 1995, AAPT.
113. Gross, E.P., *Structure of a quantized vortex in boson systems*. Il Nuovo Cimento (1955-1965), 1961. **20**(3): p. 454-477.
114. Pitaevskii, L., *Vortex lines in an imperfect Bose gas*. Sov. Phys. JETP, 1961. **13**(2): p. 451-454.
115. Yunyi, G., *Dimension reduction of the Gross-Pitaevskii equation for Bose-Einstein condensates*. 2005.

116. Perez-Garcia, V.M., et al., *Dynamics of Bose-Einstein condensates: Variational solutions of the Gross-Pitaevskii equations*. Physical Review A, 1997. **56**(2): p. 1424.
117. Sebby-Strabley, J., et al., *Lattice of double wells for manipulating pairs of cold atoms*. Physical Review A, 2006. **73**(3): p. 033605.
118. Newton, I., *De analysi per aequationes numero terminorum infinitas*. 1711.
119. Raphson, J., *Analysis aequationum universalis*. 1702: typis TB prostant venales apud A. & I. Churchill.
120. Stuhler, J., et al., *Observation of dipole-dipole interaction in a degenerate quantum gas*. Physical Review Letters, 2005. **95**(15): p. 150406.
121. Glaum, K. and A. Pelster, *Bose-Einstein condensation temperature of dipolar gas in anisotropic harmonic trap*. Physical Review A, 2007. **76**(2): p. 023604.
122. Glaum, K., et al., *Critical temperature of weakly interacting dipolar condensates*. Physical review letters, 2007. **98**(8): p. 080407.
123. He, L., et al., *Stability and free expansion of a dipolar Fermi gas*. Physical Review A, 2008. **77**(3): p. 031605.
124. Koch, T., et al., *Stabilization of a purely dipolar quantum gas against collapse*. Nature physics, 2008. **4**(3): p. 218.
125. Nygaard, N. and K. Mølmer, *Component separation in harmonically trapped boson-fermion mixtures*. Physical Review A, 1999. **59**(4): p. 2974.
126. Adhikari, S.K., *Mean-field description of a dynamical collapse of a fermionic condensate in a trapped boson-fermion mixture*. Physical Review A, 2004. **70**(4): p. 043617.
127. Adhikari, S.K., *Fermionic bright soliton in a boson-fermion mixture*. Physical Review A, 2005. **72**(5): p. 053608.
128. Capuzzi, P., A. Minguzzi, and M. Tosi, *Collective excitations of a trapped boson-fermion mixture across demixing*. Physical Review A, 2003. **67**(5): p. 053605.
129. Capuzzi, P., A. Minguzzi, and M. Tosi, *Collective excitations in trapped boson-fermion mixtures: From demixing to collapse*. Physical Review A, 2003. **68**(3): p. 033605.
130. Adhikari, S.K., *Nonlinear Schrödinger equation for a superfluid Fermi gas in the BCS-BEC crossover*. Physical Review A, 2008. **77**(4): p. 045602.

131. Zhang, J.-N., et al., *Dynamical properties of a trapped dipolar Fermi gas at finite temperature*. Physical Review A, 2011. **83**(5): p. 053628.
132. Lima, A.R. and A. Pelster, *Collective motion of polarized dipolar Fermi gases in the hydrodynamic regime*. Physical Review A, 2010. **81**(2): p. 021606.
133. Sogo, T., et al., *Dynamical properties of dipolar Fermi gases*. New Journal of Physics, 2009. **11**(5): p. 055017.
134. Giorgini, S., L.P. Pitaevskii, and S. Stringari, *Theory of ultracold atomic Fermi gases*. Reviews of Modern Physics, 2008. **80**(4): p. 1215.
135. Abad, M., A. Recati, and S. Stringari, *Quadrupole oscillation in a dipolar Fermi gas: Hydrodynamic versus collisionless regime*. Physical Review A, 2012. **85**(3): p. 033639.
136. Salasnich, L., *Supersonic and subsonic shock waves in the unitary Fermi gas*. EPL (Europhysics Letters), 2011. **96**(4): p. 40007.
137. Liu, B. and L. Yin, *Correlation energy of a homogeneous dipolar Fermi gas*. Physical Review A, 2011. **84**(5): p. 053603.
138. Ronen, S. and J.L. Bohn, *Zero sound in dipolar Fermi gases*. Physical Review A, 2010. **81**(3): p. 033601.
139. Kohn, W. and J. Luttinger, *Ground-state energy of a many-fermion system*. Physical Review, 1960. **118**(1): p. 41.
140. Lee, T. and C. Yang, *Many-body problem in quantum mechanics and quantum statistical mechanics*. Physical Review, 1957. **105**(3): p. 1119.
141. Ziman, J.M., *Principles of the Theory of Solids*. 1972: Cambridge university press.
142. Wannier, G.H., *The structure of electronic excitation levels in insulating crystals*. Physical Review, 1937. **52**(3): p. 191.
143. Wannier, G.H., *Dynamics of band electrons in electric and magnetic fields*. Reviews of Modern Physics, 1962. **34**(4): p. 645.
144. Bakr, W.S., *Microscopic Studies of Quantum Phase Transitions in Optical Lattices*. 2011: Harvard University.
145. Sheshadri, K., et al., *Superfluid and insulating phases in an interacting-boson model: Mean-field theory and the rpa*. EPL (Europhysics Letters), 1993. **22**(4): p. 257.

146. de Sousa, J.R. and D. Coimbra, *Análise da convergência na Teoria da Perturbação Estacionária*. Revista Brasileira de Ensino de Física, 2004. **26**(2): p. 129-137.
147. Sachdev, S., *Quantum phase transitions*. 2007: Wiley Online Library.
148. Fried, D.G., et al., *Bose-Einstein condensation of atomic hydrogen*. Physical Review Letters, 1998. **81**(18): p. 3811.
149. Doyle, J.M., *Energy distribution measurements of magnetically trapped spin polarized atomic hydrogen: evaporative cooling and surface sticking*. 1991, Massachusetts Institute of Technology.
150. Sandberg, J.C., *Research toward laser spectroscopy of trapped atomic hydrogen*. 1993, Massachusetts Institute of Technology.
151. Jamieson, M., A. Dalgarno, and J. Yukich, *Elastic scattering of hydrogen atoms at low temperatures*. Physical Review A, 1992. **46**(11): p. 6956.
152. Jamieson, M., A. Dalgarno, and M. Kimura, *Scattering lengths and effective ranges for He-He and spin-polarized HH and DD scattering*. Physical Review A, 1995. **51**(3): p. 2626.
153. Marion, J.B., *Classical dynamics of particles and systems*. 2013: Academic Press.
154. Adhikari, S.K. and B.A. Malomed, *Gap solitons in a model of a superfluid fermion gas in optical lattices*. Physica D: Nonlinear Phenomena, 2009. **238**(15): p. 1402-1412.
155. Malomed, B.A., V. Nascimento, and S.K. Adhikari, *Gap solitons in fermion superfluids*. Mathematics and Computers in Simulation, 2009. **80**(4): p. 648-659.
156. Lu, M., *Quantum Bose and Fermi gases of dysprosium: production and initial study*. 2014, Stanford University.
157. Muruganandam, P. and S.K. Adhikari, *Gap solitons in a dipolar Bose-Einstein condensate on a three-dimensional optical lattice*. Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics, 2011. **44**(12): p. 121001.
158. Bakr, W.S., et al., *A quantum gas microscope for detecting single atoms in a Hubbard-regime optical lattice*. Nature, 2009. **462**(7269): p. 74.
159. Feynman, R.P., *Quantum mechanical computers*. Foundations of physics, 1986. **16**(6): p. 507-531.
160. Kath, W.L., *Making waves: solitons and their optical applications*. Siam News, 1998.

161. Mollenauer, L.F. and J.P. Gordon, *Solitons in optical fibers: fundamentals and applications*. 2006: Academic Press.
162. Alves, M.V., *Manipulação transversal de feixes atômicos para possível uso em litografia atômica*. 1997, Universidade de São Paulo.
163. Oberthaler, M.K. and T. Pfau, *One-, two-and three-dimensional nanostructures with atom lithography*. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2003. **15**(6): p. R233.
164. McClelland, J.J., et al., *Laser-focused atomic deposition*. *Science*, 1993. **262**(5135): p. 877-880.
165. Drodofsky, U., et al., *Hexagonal nanostructures generated by light masks for neutral atoms*. *Applied Physics B: Lasers and Optics*, 1997. **65**(6): p. 755-759.
166. Schulze, T., et al., *Structured doping with light forces*. *Applied Physics Letters*, 2001. **78**(12): p. 1781-1783.
167. Li, J.-R., et al., *A stripe phase with supersolid properties in spin-orbit-coupled Bose-Einstein condensates*. *Nature*, 2017. **543**(7643): p. 91.
168. Voss, D., *Supersolid Discoverer's New Experiments Show No Supersolid*. *Physics Online Journal*, 2012. **5**.
169. Muruganandam, P. and S.K. Adhikari, *Fortran programs for the time-dependent Gross-Pitaevskii equation in a fully anisotropic trap*. *Computer Physics Communications*, 2009. **180**(10): p. 1888-1912.
170. Kumar, R.K., et al., *Fortran and C programs for the time-dependent dipolar Gross-Pitaevskii equation in an anisotropic trap*. *Computer Physics Communications*, 2015. **195**: p. 117-128.
171. Bauer, B., et al., *The ALPS project release 2.0: open source software for strongly correlated systems*. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, 2011. **2011**(05): p. P05001.
172. Stasyuk, I., T. Mysakovych, and V. Krasnov, *Phase diagrams of the Bose-Fermi-Hubbard model: Hubbard operator approach*. *Condensed Matter Physics*, 2010.
173. Foot, C.J., *Atomic physics*. Vol. 7. 2005: Oxford University Press.
174. Brennen, G.K., et al., *Quantum logic gates in optical lattices*. *Physical Review Letters*, 1999. **82**(5): p. 1060.

APÊNDICES

A PARÂMETRO DE ORDEM E POTENCIAL QUÍMICO

Neste apêndice abordaremos a função que descreve o condensado, o parâmetro de ordem. O parâmetro de ordem desempenha na Equação de Gross-Pitaevskii um papel análogo à função de onda na Equação de Schrödinger. De fato, ambas as equações possuem uma forma semelhante e quando não há interação entre partículas, a Equação de Gross-Pitaevskii reduz-se à Equação de Schrödinger. Em virtude dessa correspondência, podemos dizer que a Equação de Gross-Pitaevskii é uma versão estendida da Equação de Schrödinger ou simplesmente dizer que é uma Equação Não-linear de Schrödinger (NLSE – *Non Linear Schrödinger Equation*). Entretanto, ao contrário da função de onda, o parâmetro de ordem descreve a dinâmica de um sistema de muitos corpos e é regida em termos do potencial químico e não em função da energia.

Como o valor esperado do parâmetro de ordem é um valor médio por partícula e como o condensado é em essência um sistema de muito corpos, podemos assumir que, quando o número de partículas é relativamente muito alto, a adição ou a subtração de uma única partícula não altera as propriedades físicas do condensado. Em outras palavras:

$$|N\rangle = |N + 1\rangle = |N - 1\rangle \quad (\text{A.1})$$

Onde $|N\rangle$ é o estado de N partículas. Reescrevendo o operador de campo de bósons, temos:

$$\langle \hat{\Psi}(\vec{r}, t) \rangle = \langle N | e^{\frac{i\hat{H}(N-1)t}{\hbar}} \Psi(\vec{r}) e^{-\frac{i\hat{H}(N)t}{\hbar}} | N \rangle \quad (\text{A.2})$$

$$\langle \hat{\Psi}(\vec{r}, t) \rangle = \langle N - 1 | e^{\frac{i\hat{H}(N-1)t}{\hbar}} \Psi(\vec{r}) e^{-\frac{i\hat{H}(N)t}{\hbar}} | N \rangle \quad (\text{A.3})$$

$$\langle \hat{\Psi}(\vec{r}, t) \rangle = \langle N - 1 | e^{\frac{iE(N-1)t}{\hbar}} \Psi(\vec{r}) e^{-\frac{iE(N)t}{\hbar}} | N \rangle \quad (\text{A.4})$$

$$\langle \hat{\Psi}(\vec{r}, t) \rangle = e^{\frac{iE(N-1)t}{\hbar}} e^{-\frac{iE(N)t}{\hbar}} \Psi(\vec{r}) \langle N-1|N \rangle \quad (\text{A.5})$$

$$\langle \hat{\Psi}(\vec{r}, t) \rangle = e^{\frac{i[E(N-1)-E(N)]t}{\hbar}} \Psi(\vec{r}) \langle N-1|N \rangle \quad (\text{A.6})$$

$$\langle \hat{\Psi}(\vec{r}, t) \rangle = e^{-\frac{i[E(N)-E(N-1)]t}{\hbar}} \Psi(\vec{r}) \langle N-1|N \rangle \quad (\text{A.7})$$

$$E(N) - E(N-1) \approx \frac{\partial E}{\partial N} \quad (\text{A.8})$$

A equação (A.8) é uma conhecida relação da termodinâmica, a variação da energia em relação ao número de partículas estabelece uma grandeza conhecida como potencial químico.

$$\langle \hat{\Psi}(\vec{r}, t) \rangle = e^{-i\mu t/\hbar} \Psi(\vec{r}) \langle N-1|N \rangle \quad (\text{A.9})$$

De acordo com a equação (A.1), a equação (A.9) pode ser escrita como

$$\langle \hat{\Psi}(\vec{r}, t) \rangle = e^{-i\mu t/\hbar} \Psi(\vec{r}) \quad (\text{A.10})$$

A evolução temporal do parâmetro de ordem não é descrita pela energia, mas sim em termos do potencial químico.

B REDUÇÃO DIMENSIONAL

Neste apêndice, nós abordaremos a redução dimensional da equação de Gross-Pitaevskii, equação (4.26), descrita como:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\vec{r}, t) + V(\vec{r}) \Psi(\vec{r}, t) + \frac{4\pi \hbar^2 a N}{m} |\Psi(\vec{r}, t)|^2 \Psi(\vec{r}, t) + \frac{\mu_0 \tilde{\mu}^2 N}{4\pi} \left\{ \int \frac{1 - \cos^2 \theta}{|\vec{r} - \vec{r}'|^3} |\Psi(\vec{r}', t)|^2 d\vec{r}' \right\} \Psi(\vec{r}, t) \quad (\text{B.1})$$

O processo de redução dimensional, *Nondimensionalization*, consiste em multiplicar cada termo da equação (B.1) por:

$$\frac{1}{m\omega^2 \ell_0^{1/2}} \quad (\text{B.2})$$

Onde, ℓ_0 é o comprimento do oscilador harmônico e está relacionado com a frequência do laser e com a massa da partícula por:

$$\ell_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \quad (\text{B.3})$$

Multiplicando o primeiro termo da equação (B.1) pela equação (B.2), temos:

$$\begin{aligned} \left\{ \frac{1}{m\omega^2 \ell_0^{1/2}} \right\} i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} &= \left\{ \frac{1}{(m\omega)\omega \ell_0^{1/2}} \right\} i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} \\ &= \left\{ \left(\frac{\ell_0^2}{\hbar} \right) \frac{1}{\omega \ell_0^{1/2}} \right\} i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = i \frac{\ell_0^{3/2}}{\omega} \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} \end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

Em decorrência da equação (B.3), não é difícil provar que $m\omega = \hbar/\ell_0^2$. Daqui em diante, adotaremos:

$$\tilde{r} = \frac{\vec{r}}{\ell_0}, \tilde{t} = t\omega, \tilde{\Psi}(\tilde{r}, \tilde{t}) = \ell_0^{3/2} \Psi(\vec{r}, t), r \in \mathbb{R}^3 \quad (\text{B.5})$$

Conseqüentemente,

$$i \frac{\ell_0^{3/2}}{\omega} \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = i \ell_0^{3/2} \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial(\omega t)} = i \frac{\partial \tilde{\Psi}(\vec{r}, \tilde{t})}{\partial \tilde{t}} \quad (\text{B.6})$$

Repetindo o processo no segundo termo da equação (B.1), temos:

$$\left\{ \frac{1}{m\omega^2 \ell_0^{1/2}} \right\} \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\vec{r}, t) \right\} = - \left\{ \frac{\hbar^2}{2m^2 \omega^2 \ell_0^{1/2}} \right\} \nabla^2 \Psi(\vec{r}, t) \quad (\text{B.7})$$

Novamente, recorreremos à equação (B.3)

$$\ell_0^2 = \frac{\hbar}{m\omega} \rightarrow \hbar = \ell_0^2 m \omega \rightarrow \hbar^2 = \ell_0^4 m^2 \omega^2 \quad (\text{B.8})$$

A equação (B.8) essencialmente culmina na expressão da constante reduzida de Planck em função do comprimento e da frequência do oscilador harmônico e da massa da partícula. Inserindo a equação (B.8) à equação (B.7), chegaremos à equação (B.9):

$$\left\{ \frac{\hbar^2}{2m^2 \omega^2 \ell_0^{1/2}} \right\} \nabla^2 \Psi(\vec{r}, t) = \left\{ \frac{\ell_0^4 m^2 \omega^2}{2m^2 \omega^2 \ell_0^{1/2}} \right\} \nabla^2 \Psi(\vec{r}, t) = \frac{\ell_0^{7/2}}{2} \nabla^2 \Psi(\vec{r}, t) \quad (\text{B.9})$$

Por outro lado:

$$\tilde{\nabla} = \frac{\partial}{\partial \tilde{x}} + \frac{\partial}{\partial \tilde{y}} + \frac{\partial}{\partial \tilde{z}} = \frac{\partial}{\partial(x/\ell_0)} + \frac{\partial}{\partial(y/\ell_0)} + \frac{\partial}{\partial(z/\ell_0)} = \ell_0 \left\{ \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial z} \right\} = \ell_0 \nabla \quad (\text{B.10})$$

Elevando a equação (B.10) ao quadrado chegaremos ao resultado: $\tilde{\nabla}^2 = \ell_0^2 \nabla^2$. *Quod erat demonstrandum*. Retornando à equação (B.9), fazemos algumas manipulações:

$$\ell_0^{7/2} \nabla^2 \Psi(\vec{r}, t) = \ell_0^2 \ell_0^{3/2} \nabla^2 \Psi(\vec{r}, t) \rightarrow \ell_0^2 \nabla^2 \left[\ell_0^{3/2} \Psi(\vec{r}, t) \right] = \tilde{\nabla}^2 \tilde{\Psi}(\vec{r}, \tilde{t}) \quad (\text{B.11})$$

Aplicando o método ao seguinte potencial de aprisionamento externo

$$V(\vec{r}) = \frac{m\omega^2}{2} (x^2 + y^2) + UE_r [\varepsilon \sin^2 \left(\frac{2\pi}{\lambda} z \right) + (1 - \varepsilon) \sin^2 \left(\frac{2\pi}{\lambda} \gamma z \right)] \quad (\text{B.12})$$

Temos,

$$V(\vec{r}) = \frac{1}{2} (\tilde{x}^2 + \tilde{y}^2) + U [\varepsilon \sin^2(\tilde{z}) + (1 - \varepsilon) \sin^2(\gamma \tilde{z})] \quad (\text{B.13})$$

Onde, no caso da rede óptica, o comprimento é expresso em unidades de $\ell_0 = 2\pi/\lambda$ e a energia em $E_r = \hbar^2/(m\lambda^2)$, onde λ é o comprimento de onda do laser. No caso do oscilador harmônico, o comprimento é expresso em unidades de $\ell_0 = \sqrt{\hbar/m\omega}$, equação (B.3). A energia, por sua vez, é expressa em unidades de $\hbar\omega$. Do mesmo modo, o segundo potencial utilizado nesta dissertação, é dado por:

$$V(\vec{r}) = \frac{1}{2}\vec{z}^2 + U[\varepsilon\sin^2\vec{z} + (1 - \varepsilon)\sin^2\gamma\vec{z}] \quad (\text{B.14})$$

O quarto termo da equação (B.1) fica:

$$\left\{ \frac{1}{m\omega^2\ell_0^{1/2}} \right\} \frac{4\pi\hbar^2 a}{m} = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m^2\omega^2\ell_0^{1/2}} = 4\pi a\ell_0^{7/2} = 4\pi \left(\frac{a}{\ell_0} \right) \ell_0^{9/2} \quad (\text{B.15})$$

Resultando em:

$$\left\{ \frac{1}{m\omega^2\ell_0^{1/2}} \right\} \frac{4\pi\hbar^2 a}{m} |\Psi(\vec{r}, t)|^2 \Psi(\vec{r}, t) = 4\pi \left(\frac{a}{\ell_0} \right) \ell_0^{9/2} |\Psi(\vec{r}, t)|^2 \Psi(\vec{r}, t) \quad (\text{B.16})$$

Reorganizando a equação (B.16), temos:

$$\begin{aligned} 4\pi \left(\frac{a}{\ell_0} \right) (\ell_0^3) (\ell_0^{3/2}) |\Psi(\vec{r}, t)|^2 \Psi(\vec{r}, t) \\ = 4\pi \left(\frac{a}{\ell_0} \right) \left| (\ell_0^{3/2} \Psi(\vec{r}, t)) \right|^2 [(\ell_0^{3/2}) \Psi(\vec{r}, t)] \end{aligned} \quad (\text{B.17})$$

Adotando $\tilde{a} = a/\ell_0$ e mais uma vez recorrendo às definições da equação (B.5), a equação (B.17) pode ser expressa como:

$$4\pi \left(\frac{a}{\ell_0} \right) \left| (\ell_0^{3/2} \Psi(\vec{r}, t)) \right|^2 [(\ell_0^{3/2}) \Psi(\vec{r}, t)] = 4\pi\tilde{a} |\tilde{\Psi}(\vec{r}, \tilde{t})|^2 \tilde{\Psi}(\vec{r}, \tilde{t}) \quad (\text{B.18})$$

A equação (B.18) encerra a questão para o caso de gases caracterizados somente pelo comprimento de espalhamento. Para gases com interação dipolo-dipolo, ainda temos:

$$\begin{aligned}
& \left\{ \frac{1}{m\omega^2 \ell_0^{1/2}} \right\} \frac{\mu_0 \tilde{\mu}^2 N}{4\pi} \left\{ \int \frac{1 - \cos^2 \theta}{|\vec{r} - \vec{r}'|^3} |\Psi(\vec{r}', t)|^2 d\vec{r}' \right\} \Psi(\vec{r}, t) \\
& = \left\{ \frac{\mu_0 \tilde{\mu}^2 N}{4\pi m \omega^2 \ell_0^{1/2}} \right\} \left\{ \int \frac{1 - \cos^2 \theta}{|\vec{r} - \vec{r}'|^3} |\Psi(\vec{r}', t)|^2 d\vec{r}' \right\} \Psi(\vec{r}, t)
\end{aligned} \tag{B.19}$$

Da equação (B.3), obtemos a seguinte expressão:

$$\omega^2 = \frac{\hbar^2}{\ell_0^4 m^2} \tag{B.20}$$

Inserindo a equação (B.19) na equação (B.18), temos:

$$\begin{aligned}
& \left\{ \frac{\mu_0 \tilde{\mu}^2 N}{4\pi m \frac{\hbar^2}{\ell_0^4 m^2} \ell_0^{1/2}} \right\} \left\{ \int \frac{1 - \cos^2 \theta}{|\vec{r} - \vec{r}'|^3} |\Psi(\vec{r}', t)|^2 d\vec{r}' \right\} \Psi(\vec{r}, t) \\
& = \left\{ \frac{\mu_0 \tilde{\mu}^2 N m \ell_0^{7/2}}{4\pi \hbar^2} \right\} \left\{ \int \frac{1 - \cos^2 \theta}{|\vec{r} - \vec{r}'|^3} |\Psi(\vec{r}', t)|^2 d\vec{r}' \right\} \Psi(\vec{r}, t)
\end{aligned} \tag{B.21}$$

Por definição, adotamos:

$$a_{dd} = \left\{ \frac{\mu_0 \tilde{\mu}^2 m}{12\pi \hbar^2} \right\} \tag{B.22}$$

Em decorrência da convenção adotada na equação (B.22), a equação (B.21) fica:

$$3a_{dd} N \ell_0^{7/2} \left\{ \int \frac{1 - \cos^2 \theta}{|\vec{r} - \vec{r}'|^3} |\Psi(\vec{r}', t)|^2 d\vec{r}' \right\} \Psi(\vec{r}, t) \tag{B.23}$$

Observe que na equação (B.22), μ_0 é a permissividade magnética do vácuo, $\tilde{\mu}$ é o momento de dipolo magnético e m é a massa da partícula. Reorganizando os termos da equação (B.23), chegaremos à equação (B.24):

$$\begin{aligned}
& 3 \frac{a_{dd}}{\ell_0} N \ell_0^{9/2} \left\{ \int \frac{1 - \cos^2 \theta}{|\vec{r} - \vec{r}'|^3} |\Psi(\vec{r}', t)|^2 d\vec{r}' \right\} \Psi(\vec{r}, t) \\
& = 3 \frac{a_{dd}}{\ell_0} N \ell_0^3 \ell_0^{3/2} \left\{ \int \frac{1 - \cos^2 \theta}{|\vec{r} - \vec{r}'|^3} |\Psi(\vec{r}', t)|^2 d\vec{r}' \right\} \Psi(\vec{r}, t)
\end{aligned} \tag{B.24}$$

Quer por sua vez pode ser escrito como:

$$\begin{aligned}
& 3 \frac{a_{dd}}{\ell_0} N \ell_0^3 \ell_0^{3/2} \left\{ \int \frac{1 - \cos^2 \theta}{|\vec{r} - \vec{r}'|^3} |\Psi(\vec{r}', t)|^2 d\vec{r}' \right\} \Psi(\vec{r}, t) \\
& = 3 \frac{a_{dd}}{\ell_0} N \left\{ \int \frac{1 - \cos^2 \theta}{|\vec{r} - \vec{r}'|^3} |\ell_0^{3/2} \Psi(\vec{r}', t)|^2 d\vec{r}' \right\} \ell_0^{3/2} \Psi(\vec{r}, t)
\end{aligned} \tag{B.25}$$

Adotando $\tilde{a}_{dd} = a_{dd}/\ell_0$ e recorrendo novamente às definições da equação (B.5) é fácil perceber que a equação (B.25) pode ser escrita como:

$$\begin{aligned}
& 3 \frac{a_{dd}}{\ell_0} N \left\{ \int \frac{1 - \cos^2 \theta}{|\vec{r} - \vec{r}'|^3} |\ell_0^{3/2} \Psi(\vec{r}', t)|^2 d\vec{r}' \right\} \ell_0^{3/2} \Psi(\vec{r}, t) \\
& = 3 \tilde{a}_{dd} N \left\{ \int \frac{1 - \cos^2 \theta}{|\vec{r} - \vec{r}'|^3} |\tilde{\Psi}(\vec{r}', \tilde{t})|^2 d\vec{r}' \right\} \tilde{\Psi}(\vec{r}, \tilde{t})
\end{aligned} \tag{B.26}$$

O processo de *nondimensionalization* resulta em:

$$\begin{aligned}
i \frac{\partial \tilde{\Psi}(\vec{r}, \tilde{t})}{\partial \tilde{t}} & = -\frac{1}{2} \tilde{\nabla}^2 \tilde{\Psi}(\vec{r}, \tilde{t}) + \tilde{V}(\vec{r}) \tilde{\Psi}(\vec{r}, \tilde{t}) + 4\pi \tilde{a} N |\tilde{\Psi}(\vec{r}, \tilde{t})|^2 \tilde{\Psi}(\vec{r}, \tilde{t}) \\
& + 3 \tilde{a}_{dd} N \left\{ \int \frac{1 - \cos^2 \theta}{|\vec{r} - \vec{r}'|^3} |\tilde{\Psi}(\vec{r}', \tilde{t})|^2 d\vec{r}' \right\} \tilde{\Psi}(\vec{r}, \tilde{t})
\end{aligned} \tag{C.27}$$

Geralmente, omite-se o índice \sim .

$$\begin{aligned}
i \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = & -\frac{1}{2} \nabla^2 \Psi(\vec{r}, t) + V(\vec{r}) \Psi(\vec{r}, t) + 4\pi a N |\Psi(\vec{r}, t)|^2 \Psi(\vec{r}, t) \\
& + 3a_{dd} N \left\{ \int \frac{1 - \cos^2 \theta}{|\vec{r} - \vec{r}'|^3} |\Psi(\vec{r}', t)|^2 d\vec{r}' \right\} \Psi(\vec{r}, t)
\end{aligned} \tag{C.28}$$

Quod erat demonstrandum.

C BOSE-HUBBARD HOMOGENEO

Neste apêndice apresentamos com mais detalhes o procedimento que conduz à resolução do caso homogêneo do Hamiltoniano de Bose-Hubbard (capítulo 4.5.1). O produto entre as equações (4.81) e (4.82) fornecem:

$$\hat{a}_i^+ \hat{a}_j = (\varphi_i^* + \delta \hat{a}_i^+) (\varphi_j + \delta \hat{a}_j) \quad (\text{C.1})$$

$$\hat{a}_i^+ \hat{a}_j = \varphi_i^* \varphi_j + \varphi_i^* \delta \hat{a}_j + \delta \hat{a}_i^+ \varphi_j + \delta \hat{a}_i^+ \delta \hat{a}_j \quad (\text{C.2})$$

O termo de segunda ordem é simplesmente desprezado por se tratar de flutuações térmicas e quânticas infinitesimais, isto é: $\delta \hat{a}_i^+ \delta \hat{a}_j \approx 0$. Em seguida, reescrevemos essas flutuações em função dos operadores de aniquilação (criação) de campo de bósons e do parâmetro de ordem do condensado.

$$\hat{a}_i = \varphi_i + \delta \hat{a}_i \rightarrow \delta \hat{a}_i = \hat{a}_i - \varphi_i \quad (\text{C.3a})$$

$$\hat{a}_i^+ = \varphi_i^+ + \delta \hat{a}_i^+ \rightarrow \delta \hat{a}_i^+ = \hat{a}_i^+ - \varphi_i^+ \quad (\text{C.3b})$$

$$\hat{a}_i^+ \hat{a}_j = \varphi_i^* \varphi_j + \varphi_i^* \delta \hat{a}_j - \delta \hat{a}_i^+ \varphi_j + \delta \hat{a}_i^+ \delta \hat{a}_j \quad (\text{C.4})$$

$$\hat{a}_i^+ \hat{a}_j = \varphi_i^* \hat{a}_j - \delta \hat{a}_i^+ \varphi_j + \delta \hat{a}_i^+ \delta \hat{a}_j \quad (\text{C.5})$$

Substituindo a equação (C.5) na equação (4.80) obteremos a equação (4.83). Em seguida introduzimos o termo z na equação (4.83) através das seguintes definições:

$$\sum_{\langle i,j \rangle} \varphi_i^* \hat{a}_j = z \sum_i \varphi_i^* \hat{a}_i \quad (\text{C.6a})$$

$$\sum_{\langle i,j \rangle} \hat{a}_i^+ \varphi_j = z \sum_i \hat{a}_i^+ \varphi_i \quad (\text{C.6b})$$

$$\sum_{\langle i,j \rangle} \varphi_i^* \varphi_j = z \sum_i \varphi_i^* \varphi_i = z \sum_i |\varphi_i|^2 \quad (\text{C.6c})$$

Substituindo as equações (C.6a), (C.6b) e (C.6c) na equação (4.83), chegaremos à equação (4.84). Para resolver a equação (4.84), adotamos $\hat{n}_i = \hat{n}$ e usamos a álgebra dos operadores escada:

$$\hat{a}_i^+ |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle \quad (\text{C.7})$$

$$\hat{a}_i|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle \quad (\text{C.8})$$

$$\hat{n}|n\rangle = n|n\rangle \quad (\text{C.9})$$

Assim, teremos:

$$\langle\beta_n\rangle = Jz\varphi^2 - \mu n + \frac{1}{2}Un(n-1) \quad (\text{C.10})$$

$$|\langle m|\alpha_i|n\rangle|^2 = (Jz)^2\{n\delta_{m,n-1} + (n+1)\delta_{m,n+1} + 2\sqrt{n(n+1)}\delta_{m,n-1}\delta_{m,n+1}\} \quad (\text{C.11})$$

$$\langle\beta_m\rangle = Jz\varphi^2 - \mu m + \frac{1}{2}Um(m-1) \quad (\text{C.12})$$

Subtraindo a equação (C.12) da equação (C.10):

$$\langle\beta_n\rangle - \langle\beta_m\rangle = \mu(m-n) + \frac{U}{2}[n(n-1) - m(m-1)] \quad (\text{C.13})$$

Assim, teremos:

$$\begin{aligned} & \sum_{m \neq n} \frac{|\langle m|\hat{\beta}_i|n\rangle|^2}{\langle\beta_n\rangle - \langle\beta_m\rangle} \\ &= \sum_{m \neq n} \frac{(Jz)^2\{n\delta_{m,n-1} + (n+1)\delta_{m,n+1} + 2\sqrt{n(n+1)}\delta_{m,n-1}\delta_{m,n+1}\}}{\mu(m-n) + \frac{U}{2}[n(n-1) - m(m-1)]} \end{aligned} \quad (\text{C.14})$$

A equação (C.14) culmina em:

$$\sum_{m \neq n} \frac{|\langle m|\hat{\beta}_i|n\rangle|^2}{\langle\beta_n\rangle - \langle\beta_m\rangle} = (Jz)^2 \left\{ \frac{n}{U(n-1) - \mu} + \frac{n+1}{\mu - Un} \right\} \quad (\text{C.15})$$

Não é difícil demonstrar que $\langle n|\alpha_i|n\rangle = 0$. Substituindo a equação (C.15) e (C.10) na equação (4.90) obteremos a equação (4.91).

D BOSE-HUBBARD NÃO-HOMOGÊNEO

Neste apêndice apresentamos com mais detalhes o procedimento que conduz à resolução do caso não homogêneo do Hamiltoniano de Bose-Hubbard (capítulo 4.5.2).

Assim como no caso homogêneo, começamos aplicando a Aproximação de Campo Médio e adotando o número de bósons vizinhos z .

$$\sum_{\langle i,j \rangle \sigma} \hat{a}_{i\sigma}^+ \hat{a}_{j\sigma} = z \sum_{i\sigma} (\varphi_{i\sigma}^* \hat{a}_{i\sigma} + \hat{a}_{i\sigma}^+ \varphi_{i\sigma} - \varphi_{i\sigma}^* \varphi_{i\sigma}) \quad (\text{D.1})$$

Substituindo a equação (D.1) na equação (4.95) e reorganizando os termos, obteremos a equação (4.97).

Recorremos novamente à álgebra dos operadores escadas, mas novamente, temos uma ligeira diferença em virtude da maior complexidade do sistema:

$$\hat{a}_{i\sigma}^+ |n\rangle = \sqrt{g_{i\sigma} + 1} |n + 1\rangle \quad (\text{D.2})$$

$$\hat{a}_{i\sigma} |n\rangle = \sqrt{g_{i\sigma}} |n - 1\rangle \quad (\text{D.3})$$

$$\hat{n}_{i\sigma} |n\rangle = g_{i\sigma} |n\rangle \quad (\text{D.4})$$

$$\hat{n}_{i\sigma} |m\rangle = h_{i\sigma} |m\rangle \quad (\text{D.5})$$

Aplicando a álgebra dos operadores escadas definidas acima em cada termo da equação (4.101), obteremos:

$$\langle \beta_{i\sigma} \rangle = \langle \beta_{n\sigma} \rangle = \sum_i \langle n | \hat{\beta}_{i\sigma} | n \rangle \quad (\text{D.6})$$

$$= \sum_i Jz\varphi_{i\sigma}^2 + \frac{1}{2}Ug_{i\sigma}(g_{i\sigma} - 1) + Vg_{i\uparrow}g_{i\downarrow} - (\mu_\sigma - \Delta_i)g_{i\sigma}$$

$$\langle \beta_{m\sigma} \rangle = \sum_i \langle m | \hat{\beta}_{i\sigma} | m \rangle = \sum_i Jz\varphi_{i\sigma}^2 + \frac{1}{2}Uh_{i\sigma}(h_{i\sigma} - 1) + Vh_{i\uparrow}h_{i\downarrow} - (\mu_\sigma - \Delta_i)h_{i\sigma} \quad (\text{D.7})$$

$$\begin{aligned} \langle \beta_{n\sigma} \rangle - \langle \beta_{m\sigma} \rangle &= \sum_i \frac{1}{2}Ug_{i\sigma}(g_{i\sigma} - 1) - \frac{1}{2}Uh_{i\sigma}(h_{i\sigma} - 1) + Vg_{i\uparrow}g_{i\downarrow} - Vh_{i\uparrow}h_{i\downarrow} \\ &\quad - (\mu_\sigma - \Delta_i)g_{i\sigma} + (\mu_\sigma - \Delta_i)h_{i\sigma} \end{aligned} \quad (\text{D.8})$$

$$\begin{aligned} & \frac{|\langle m|\hat{\alpha}_{i\sigma}|n\rangle|^2}{\langle\beta_{n\sigma}\rangle - \langle\beta_{m\sigma}\rangle} \\ &= (Jz)^2 \left\{ \frac{g_{i\sigma}\delta_{m,n-1} + (g_{i\sigma} + 1)\delta_{m,n+1} + 2\sqrt{g_{i\sigma}(g_{i\sigma} + 1)}\delta_{m,n-1}\delta_{m,n+1}}{\frac{1}{2}Ug_{i\sigma}(g_{i\sigma} - 1) - \frac{1}{2}Uh_{i\sigma}(h_{i\sigma} - 1) + Vg_{i\uparrow}g_{i\downarrow} - Vh_{i\uparrow}h_{i\downarrow} - (\mu_\sigma - \Delta_i)g_{i\sigma} + (\mu_\sigma - \Delta_i)h_{i\sigma}} \right\} \end{aligned} \quad (\text{D.9})$$

$$\begin{aligned} & \frac{|\langle m|\hat{\alpha}_{i\sigma}|n\rangle|^2}{\langle\beta_{n\sigma}\rangle - \langle\beta_{m\sigma}\rangle} \\ &= (Jz)^2 \left\{ \frac{g_{i\sigma}\delta_{m,n-1} + (g_{i\sigma} + 1)\delta_{m,n+1} + 2\sqrt{g_{i\sigma}(g_{i\sigma} + 1)}\delta_{m,n-1}\delta_{m,n+1}}{\frac{1}{2}[Ug_{i\sigma}(g_{i\sigma} - 1) - Uh_{i\sigma}(h_{i\sigma} - 1)] + V[g_{i\uparrow}g_{i\downarrow} - h_{i\uparrow}h_{i\downarrow}] + (\mu_\sigma - \Delta_i)[h_{i\sigma} - g_{i\sigma}]} \right\} \end{aligned} \quad (\text{D.10})$$

$$\begin{aligned} & \sum_{m \neq n} \varphi_{i\sigma}^2 \frac{|\langle m|\hat{\alpha}_{i\sigma}|n\rangle|^2}{\langle\beta_{n\sigma}\rangle - \langle\beta_{m\sigma}\rangle} = \\ & (Jz)^2 \varphi_{i\sigma}^2 \left\{ \frac{g_{i\sigma} + 1}{V(1 - g_{i\uparrow} - g_{i\downarrow}) - Ug_{i\sigma} + (\mu_\sigma - \Delta_i)} \right. \\ & \quad \left. + \frac{g_{i\sigma}}{U(g_{i\sigma} - 1) + V(g_{i\uparrow} + g_{i\downarrow} - 1) - (\mu_\sigma - \Delta_i)} \right\} \end{aligned} \quad (\text{D.11})$$

Mais uma vez, não é difícil de provar que $\langle n|\hat{\alpha}_{i\sigma}|n\rangle = 0$. A substituição das equações anteriores na equação (4.101) fornecerá como resultado a equação (4.102).

E ALGORITMO DE NEWTON-RAPHSON

Neste apêndice apresentamos o algoritmo de Newton-Raphson empregado na solução do sistema de equações (4.20) e (4.21); (4.32) e (4.33); e (4.50) e (4.51). Na subseção E.1 apresentamos o algoritmo que soluciona as equações (4.20) e (4.21) ao mesmo tempo que estima o Potencial Químico através da equação (4.23). Na subseção E.2 apresentamos o algoritmo empregado para solucionar as equações (4.32) e (4.33) ao mesmo tempo que estima o valor para o potencial químico fornecido pela equação (4.34). Finalmente, na subseção E.3 apresentamos o algoritmo que soluciona as equações (4.50) e (4.51) fornecendo concomitantemente a estimativa para o potencial químico dado pela equação (4.52).

As grandezas descritas por esses algoritmos estão normalizadas de acordo com o procedimento adotado no Apêndice B. O algoritmo descrito na seção E.1 possui duas equações não-lineares fundamentais, f e g , as quais correspondem às equações (4.20) e (4.21), respectivamente. Note que utilizamos x para representar W e y para representar a dimensão de V . Além das equações não-lineares que derivam diretamente do Método de Aproximação Variacional, precisamos recorrer às derivadas parciais (tal como descrito na seção 4.4). Em suma, derivamos a equação (4.20) em relação a W e V (ou seja, x e y), do mesmo modo procedemos com a equação (4.21). A derivada da equação (4.20) em relação a variável W (x no algoritmo) corresponde à função f_x e a derivada de (4.20) em relação a V (y no algoritmo) corresponde à função f_y . A derivada da equação (4.21) em relação a variável W (x no algoritmo) corresponde à função g_x e a derivada de (4.21) em relação a V (y no algoritmo) corresponde à função g_y . A função representada por u no algoritmo corresponde ao Potencial Químico. O procedimento para os átomos com interação dipolo-dipolo é essencialmente o mesmo. Este método para solucionar as equações não-lineares pode parecer trabalhoso (e é mesmo), mas é um método preciso e adequado à situação. Nesses algoritmos, para aplica-los sobre o estudo envolvendo outros condensados, basta alterar o Comprimento de Espalhamento (notação a) e a força de interação dipolar quando necessário (notação a_{dd}). Em termos práticos, basta inserir o Comprimento de Espalhamento e/ou a força de interação dipolar do seguinte modo $a = 1.2a_0$, basta inserir o termo 1.2 ($a_s = 1.2$), o algoritmo acrescenta a grandeza a_0 (comprimento em unidades do raio atômico de Bohr) normalizado de acordo com $\ell_0 = 1\mu m$ (equação (B.13)).

E.1 HIDROGÊNIO

O algoritmo abaixo foi modelado especificamente para o condensado com interação dipolo-dipolo abordado na seção 4.1 desta dissertação. O algoritmo está escrito em linguagem MATLAB e soluciona as equações (4.20) e (4.21) e concomitantemente usa a solução obtida na equação (4.23), ou seja, ele soluciona o sistema de equações não lineares e ao mesmo tempo que obtém a solução utiliza-a para estimar o valor do potencial químico. O algoritmo abaixo gera os dados que foram utilizados para gerar a Figura 17.

```
for U=0:0.1:5;
    x = 1; y = 1; dx = 1; dy = 1;
    i = 0; erro = 0.01; u=0;
    a0=5.2917721067*10^(-11); as=0;
    l0=1*10^(-6); a=as*a0/l0; N=1;

    while abs(dx) > erro & abs(dy) > erro;

        f=N*(x^(-3))-N*x+0.79788*a*(N^2)*(x^(-3))*(y^(-1));
        fx=-3*N*(x^(-4))-N-2.3936*a*(N^2)*(x^(-4))*(y^(-1));
        fy=-0.79788*a*(N^2)*(x^(-3))*(y^(-2));
        g=0.5*N*(y^(-3))-N*U*[0.3*y*exp(-y^2)+...
        2.8*y*exp(-4*y^2)]+a*(N^2)*0.39894228*(x^(-2))*(y^(-2));
        gx=-0.79788*a*(N^2)*(x^(-3))*(y^(-2));
        gy=-1.5*N*y^(-4)-N*U*[(0.3*exp(-y^2))*(1-2*y)+...
        (0.7*exp(-4*y^2))*(1-4*y^2)]-...
        0.79788*a*(N^2)*(x^(-2))*(y^(-3));
        u=0.5*(x^(-2))+0.25*(y^(-2))+x^2+...
        0.5*U*[0.3*(1-exp(-y^2))+0.7*(1-exp(-4*y^2))]+...
        0.79788*a*N*(x^(-2))*(y^(-1));
        A=[fx fy;gx gy];
        b=[-f;-g];
        delta = A\b;
        dx = delta(1);
        dy = delta(2);
        xn = x + dx;
        yn = y + dy;
        x = xn;
        y = yn;
        i = i + 1;
    end

    disp(['i= ' num2str(i) ' x= ' num2str(x) ' y= ' num2str(y)
    ' as= ' num2str(as) ' U= ' num2str(U) ' u= ' num2str(u)
    ' dx= ' num2str(dx) ' dy= ' num2str(dy)]);
end
```

O algoritmo abaixo fornece os dados que foram utilizados para gerar a Figura 18 e os sólitons da Figura 19 e da Figura 20. Observe que o algoritmo resolve o sistema de equações não-lineares descritos pelas equações (4.20) e (4.21) no intervalo em que o Comprimento de Espalhamento varia de zero, ou seja, sem interação, até $106a_0$. A Figura 18 mostra que a estabilidade da gaussiana é tal que podemos utilizar todo este trabalho para aplica-lo a uma gama maior de átomos com interação de contanto.

```

for as=0:0.1:106;
    x = 1; y = 1; dx = 1; dy = 1;
    i = 0; erro = 0.01;u=0; U=3.5;
    a0=5.2917721067*10^(-11);as=0;
    l0=1*10^(-6); a=as*a0/l0;N=1;

    while abs(dx) > erro & abs(dy) > erro;

        f=N*(x^(-3))-N*x+0.79788*a*(N^2)*(x^(-3))*(y^(-1));
        fx=-3*N*(x^(-4))-N-2.3936*a*(N^2)*(x^(-4))*(y^(-1));
        fy=-0.79788*a*(N^2)*(x^(-3))*(y^(-2));
        g=0.5*N*(y^(-3))-N*U*[0.3*y*exp(-y^2)+...
        2.8*y*exp(-4*y^2)]+a*(N^2)*0.39894228*(x^(-2))*(y^(-2));
        gx=-0.79788*a*(N^2)*(x^(-3))*(y^(-2));
        gy=-1.5*N*y^(-4)-N*U*[0.3*exp(-y^2)]*(1-2*y)+...
        (0.7*exp(-4*y^2))*(1-4*y^2)]-...
        0.79788*a*(N^2)*(x^(-2))*(y^(-3));
        u=0.5*(x^(-2))+0.25*(y^(-2))+x^2+...
        0.5*U*[0.3*(1-exp(-y^2))+0.7*(1-exp(-4*y^2))]+...
        0.79788*a*N*(x^(-2))*(y^(-1));
        A=[fx fy;gx gy];
        b=[-f;-g];
        delta = A\b;
        dx = delta(1);
        dy = delta(2);
        xn = x + dx;
        yn = y + dy;
        x = xn;
        y = yn;
        i = i + 1;
    end

    disp(['i= ' num2str(i) ' x= ' num2str(x) ' y= ' num2str(y)
    ' as= ' num2str(as) ' U= ' num2str(U) ' u= ' num2str(u)
    ' dx= ' num2str(dx) ' dy= ' num2str(dy)]);
end

```

E.2 BÓSONS COM INTERAÇÃO DIPOLO-DIPOLO

O algoritmo abaixo foi modelado especificamente para o condensado com interação dipolo-dipolo abordado no capítulo 4.2 desta dissertação. O algoritmo está escrito em linguagem MATLAB e soluciona as equações (4.32) e (4.33) e concomitantemente usa a solução obtida na equação (4.34), ou seja, ele soluciona o sistema de equações não lineares e ao mesmo tempo que obtém a solução utiliza-a para estimar o valor do potencial químico. O algoritmo abaixo adota os valores utilizados no estudo do condensado de ^{52}Cr e gera os dados que foram utilizados para gerar a Figura 21. Quando ajustamos os valores da amplitude da rede óptica, a força de interação dipolar e o número de átomos no sistema, o algoritmo também é responsável por gerar a Figura 24 -- utilizada no estudo do condensado de ^{164}Dy –, e a Figura 27 – utilizada no estudo do condensado de ^{168}Er .

```

for U=-3:0.1:1.4;
    x = 1; y = 1; dx = 1;
    a0=5.2917721067*10^(-11);add=15;
    l0=1*10^(-6); dy = 1;as=0;
    i = 0; erro = 0.01;
    u=0;d=2;a=as*ao/l0+2*add*ao/l0;N=800;
    while abs(dx) > erro & abs(dy) > erro;

        u=0.5*[x^(-2)]+0.25*[y^(-2)]+0.25*[y^(2)]+...
        0.25*U*[0.3*(1-exp(-(y^(2))))+0.7*(1-exp(-(d*y^(2))))]+...
        1.6*N*[x^(-2)]*[y^(-1)]*a;
        f=[x^(-3)]+0.8*N*[x^(-3)]*[y^(-1)]*a;
        fx=-3*[x^(-4)]+2.4*N*[x^(-4)]*[y^(-1)]*a;
        fy=-0.8*N*[x^(-3)]*[y^(-2)]*a;
        g=0.5*[y^(-3)]-0.5*y-0.5*U*[0.3*(1-exp(-(y^(2))))+...
        0.7*(1-y*(d^2)*exp(-(d*y^(2))))]+0.8*N*[x^(-2)]*[y^(-2)]*a;
        gx=-1.6*N*[x^(-3)]*[y^(-2)]*a;
        gy=-1.5*[y^(-4)]-0.5-U*[0.3*(exp(-(y^(2))))*(1-2*y)+...
        0.7*exp(-d*(y^2))*(1-2*(d*y)^2)]-1.6*N*[x^(-2)]*[y^(-3)]*a;

        A=[fx fy;gx gy];
        b=[-f;-g];
        delta = A\b;
        dx = delta(1);
        dy = delta(2);
        xn = x + dx;
        yn = y + dy;
        x = xn;
        y = yn;
        i = i + 1;
    end

    disp(['i= ' num2str(i) ' x= ' num2str(x) ' y= ' num2str(y) ...
    ' N= ' num2str(N) ' U= ' num2str(U) ' u= ' num2str(u)
    ' as= ' num2str(as)
    ' dx= ' num2str(dx) ' dy= ' num2str(dy)]);
end

```

O algoritmo abaixo fornece os dados que foram utilizados para gerar a Figura 22 e o sóliton da Figura 23. Quando ajustamos os valores da força de interação de dipolar, amplitude da rede óptica e o número de átomos no sistema, o algoritmo também fornece

os dados que foram utilizados para gerar as Figuras 25 e 26 – condensado constituído de átomos de ^{164}Dy –, e as Figuras 28 e 29 – condensado de átomos de ^{168}Er .

```

for as=9:0.1:11;
    x = 1; y = 1; dx = 1;
    a0=5.2917721067*10^(-11);add=15;
    l0=1*10^(-6); dy = 1;
    i = 0; erro = 0.01; U=1;
    u=0;d=2;a=as*ao/lo+2*add*ao/lo;N=800;
    while abs(dx) > erro & abs(dy) > erro;

        u=0.5*[x^(-2)]+0.25*[y^(-2)]+0.25*[y^(2)]+...
        0.25*U*[0.3*(1-exp(-(y^2)))+0.7*(1-exp(-(d*y^2)))]+...
        1.6*N*[x^(-2)]*[y^(-1)]*a;
        f=[x^(-3)]+0.8*N*[x^(-3)]*[y^(-1)]*a;
        fx=-3*[x^(-4)]+2.4*N*[x^(-4)]*[y^(-1)]*a;
        fy=-0.8*N*[x^(-3)]*[y^(-2)]*a;
        g=0.5*[y^(-3)]-0.5*y-0.5*U*[0.3*(1-exp(-(y^2)))]+...
        0.7*(1-y*(d^2)*exp(-(d*y^2)))]+0.8*N*[x^(-2)]*[y^(-2)]*a;
        gx=-1.6*N*[x^(-3)]*[y^(-2)]*a;
        gy=-1.5*[y^(-4)]-0.5-U*[0.3*(exp(-(y^2)))*(1-2*y)+...
        0.7*exp(-d*(y^2))*(1-2*(d*y)^2)]-1.6*N*[x^(-2)]*[y^(-3)]*a;

        A=[fx fy;gx gy];
        b=[-f;-g];
        delta = A\b;
        dx = delta(1);
        dy = delta(2);
        xn = x + dx;
        yn = y + dy;
        x = xn;
        y = yn;
        i = i + 1;
    end

    disp(['i= ' num2str(i) ' x= ' num2str(x) ' y= ' num2str(y) ...
    ' N= ' num2str(N) ' U= ' num2str(U) ' u= ' num2str(u)
    ' as= ' num2str(as)
    ' dx= ' num2str(dx) ' dy= ' num2str(dy)]);
end

```

E.3 FÉRMIONS COM INTERAÇÃO DIPOLO-DIPOLO

O algoritmo abaixo foi modelado especificamente para o condensado com interação dipolo-dipolo abordado no capítulo 4.3 desta dissertação. O algoritmo está escrito em linguagem MATLAB e soluciona as equações (4.50) e (4.51) e concomitantemente usa a solução obtida na equação (4.52), ou seja, ele soluciona o sistema de equações não-lineares e ao mesmo tempo que obtém a solução utiliza-a para estimar o valor do potencial químico. O algoritmo abaixo é responsável por gerar os dados que foram utilizados nas Figuras 30 e 31.

```

for U=-20:1:5;

    x = 1; y = 1; dx = 1; dy = 1;
    i = 0; erro = 0.01; u=0; d=2;
    a0=5.2917721067*10^(-11); l0=10^(-6);
    a=130*a0/l0; N=100;
    while abs(dx) > erro & abs(dy) > erro;

        u=0.125*[x^(-2)]+0.0625*[y^(-2)]+0.25*[y^(2)]+...
        0.25*U*[0.3*(1-exp(-(y^(2))))+0.7*(1-exp(-(d*y^(2))))]+...
        0.6743*(N^2/3)*(x^(-4/3))*y^(-2/3)+2*0.79*N*[x^(-2)]*[y^(-1)]*a;
        f=0.25*[x^(-3)]+0.8990*(N^2/3)*(x^(-7/3))*y^(-2/3)...
        +4*0.39*N*[x^(-3)]*[y^(-1)]*a;
        fx=-0.75*[x^(-4)]-2.0977*(N^2/3)*(x^(-10/3))*y^(-2/3)+...
        4*1.19*N*[x^(-4)]*[y^(-1)]*a;
        fy=-0.5993*(N^2/3)*(x^(-7/3))*y^(-5/3)...
        -4*0.39*N*[x^(-3)]*[y^(-2)]*a;
        g=0.125*[y^(-3)]-0.5*y-0.5*U*[0.3*(1-exp(-(y^(2))))]+...
        0.7*(1-y*(d^2)*exp(-(d*y^(2))))+...
        0.4495*(N^2/3)*(x^(-4/3))*y^(-5/3)+...
        2*0.79*N*[x^(-2)]*[y^(-2)]*a;
        gx=-0.5993*(N^2/3)*(x^(-7/3))*y^(-5/3)...
        -2*0.79*N*[x^(-3)]*[y^(-2)]*a;
        gy=-0.375*[y^(-4)]-0.5-U*[0.3*(exp(-(y^(2))))*(1-2*y)+...
        0.7*exp(-d*(y^2))*(1-2*(d*y)^2)]-...
        0.7492*(N^2/3)*(x^(-4/3))*y^(-8/3)-...
        2*0.79*N*[x^(-2)]*[y^(-3)]*a;
        A=[fx fy; gx gy];
        b=[-f; -g];
        delta = A\b;
        dx = delta(1);
        dy = delta(2);
        xn = x + dx;
        yn = y + dy;
        x = xn;
        y = yn;
        i = i + 1;
    end

    disp(['i= ' num2str(i) ' x= ' num2str(x)
    ' y= ' num2str(y) ' N= ' num2str(N) ' U= ' num2str(U) ' u= ' num2str(u)
    ' dx= ' num2str(dx) ' dy= ' num2str(dy)]);
end

```