

Universidade Federal de Mato Grosso do Sul - UFMS
Instituto de Física - INFI

Dinâmica de sólitons em Condensados de Bose-Einstein submetidos a potenciais periódicos

Lucas Carvalho Pereira

Orientador: Prof. Dr. Valter Aragão do Nascimento

Dissertação de Mestrado apresentada
ao Instituto de Física da Universidade
Federal de Mato Grosso do Sul para a obtenção
do título de Mestre em Ciências.

Banca Examinadora

Prof. Dr. Valter Aragão do Nascimento (FAMED-UFMS)

Prof. Dr. Valter Luiz Líbero (IFSC-USP)

Prof. Dr. João Vítor Batista Ferreira (INFI-UFMS)

Prof. Dr. Bruno Spolon Marangoni (INFI-UFMS)

Campo Grande-MS

2019

*“Se eu vi mais longe,
foi por estar sobre ombros de gigantes”*

Isaac Newton

Agradecimentos

Agradeço primeiramente a Deus por me dar a capacidade para realizar este trabalho.

Agradeço também à minha esposa Camila que esteve presente comigo desde o início dessa jornada e ao meu filho Miguel, que veio ao mundo na metade dessa jornada e que foi por muitas vezes a fonte da minha inspiração para terminar essa dissertação.

Agradeço ao meu orientador, professor Valter Aragão, pelos ensinamentos e valiosas ideias para o progresso desse trabalho.

Também ao professor João Vítor por basicamente me acompanhar desde a graduação e pelo incentivo a continuar na academia.

Aos professores Bruno Marangoni, Anderson Caires, Diogo Reis, Além-Mar e Samuel Leite pelos ensinamentos em sala de aula.

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

Resumo

O objetivo principal nesta dissertação foi verificar a dinâmica e a estabilidade de átomos ultrafrios diluídos e interagentes, isto é, Condensados de Bose-Einstein, sujeitos a um potencial periódico (rede óptica). As ondas de matéria foram descritas por *gap* sólitons iluminados, estudados através do Método Variacional e simulações numéricas da Equação de Gross-Pitaevskii utilizando uma miscelânea de métodos numéricos usuais na busca de soluções de equações diferenciais não lineares. Consideramos o caso de um condensado constituído por átomos onde as interações entre eles são do tipo atrativas. Observou-se que *gap*s sólitons iluminados são estáveis diante de pequenas oscilações da rede óptica e diante de uma rede óptica em movimento.

Palavras-chave: Condensados de Bose-Einstein, Equação de Gross-Pitaevskii, sólitons, redes ópticas

Abstract

The main objective of this dissertation was to verify the dynamics and stability of diluted ultracold and interacting atoms, i.e., Bose-Einstein condensates, subject to a periodic potential (optical lattices). Matter waves were described by bright gap solitons, studied through the Variational Method and numerical simulations of the Gross-Pitaevskii Equation using a miscellany of usual numerical methods in the search for solutions of nonlinear differential equations. We consider the case of a condensate constituted by atoms where the interactions between them are of the attractive type. It has been observed that gap solitons are stable in the presence of small oscillations of the optical lattices and in front of a moving optical lattice.

Keywords: Bose-Einstein condensates, Gross-Pitaevskii equation, solitons, optical lattices

Sumário

1	Motivação e objetivos	9
2	Introdução	11
2.1	Propriedades de sistemas quânticos	11
2.1.1	A função de onda e a fase	11
2.1.2	Princípio de exclusão de Pauli e mecânica estatística quântica	12
2.2	O condensado de Bose-Einstein	13
2.3	Um breve hitórico sobre a realização experimental do CBE	15
2.4	Teoria do campo médio	17
2.5	Equação de Gross-Pitaevskii	19
2.5.1	Coefficiente de não linearidade	19
2.5.2	Potenciais de confinamento	20
2.5.3	Massa, energia e potencial químico	21
2.5.4	EGP independente do tempo	21
2.6	Sólitons e <i>gaps</i> sólitons	22
2.7	Redes ópticas	23
2.8	Equação de Mathieu	26
3	Metodologia	28
3.1	Método Variacional	28
3.1.1	Teoria de Campos na Forma Lagrangiana	28
3.1.2	Teoria de Campos na Forma Hamiltoniana	32
3.1.3	Método Variacional	32
3.1.4	Método Variacional aplicado à Teoria de Campos	34
3.2	Métodos Numéricos	35
3.2.1	Método de Newton-Raphson	36
3.2.2	Método das Diferenças Finitas	37
3.2.3	Método de Crank-Nicolson	45
3.2.4	Método Split-Step	49
3.2.5	Propagação de tempo imaginário	54

4	Resultados	57
4.1	EGP linear	57
4.2	EGP não linear	59
	Resultados estacionários	60
4.2.1	Resultados Variacionais	60
4.2.2	Resultados Numéricos	63
	Resultados dinâmicos	66
4.2.3	Resultados variacionais	66
4.2.4	Resultados numéricos	74
5	Discussão dos Resultados	80
6	Conclusão	81
	Bibliografia	82

1 Motivação e objetivos

Desde a realização experimental da Condensação de Bose-Einstein em 1995, constata-se que este tema tem sido abordado de forma praticamente constante na grande maioria dos periódicos internacionais [1]. É importante destacar que tanto os esforços teóricos quanto os experimentais empregados para a realização deste grande feito contribuíram de forma excepcional em diversas áreas da Física. Podemos citar vários trabalhos atuais que corroboram a disseminação dos proventos obtidos com a Condensação de Bose-Einstein.

O modelo matemático que rege o comportamento do condensado é uma equação diferencial parcial não linear (Equação de Gross-Pitaevskii). Este tipo de equação, em geral, não possui solução analítica devido ao elevado grau de dificuldade para resolvê-la. Trabalhos atuais abordam métodos com a finalidade de reduzir a complexidade destas equações [2] cooperando nas áreas da Física Matemática e Física Computacional.

Soluções solitônicas ocorrem tipicamente em equações diferenciais não lineares pertencentes à classe que descreve o condensado. Com o advento deste, modelos de excitações não lineares em sistemas complexos em física e em estruturas celulares vivas [3], como por exemplo o DNA [4, 5], tem sido abordados com mais frequência, e assim, coadjuvando com as ciências biológicas.

As equações para as ondas eletromagnéticas também podem, sob determinadas condições, ser descritas por uma equação diferencial não linear (Equação de Schrödinger não linear). Assim, os fótons tendem a ganhar potencial quando estão condensados numa região. Como resultado, temos pacotes de ondas formando pulsos de luz que viajam conservando sua forma, sem dissipação, ao longo do meio de propagação, ou seja, sólitons. Um meio capaz de gerar tais condições é a fibra óptica [6, 7, 8, 9]. Ao se desenvolver um material tal que a Equação de Schrödinger não linear seja satisfeita, pode-se garantir que o sinal de saída seja exatamente o mesmo que o de entrada, o que é de grande interesse tecnológico e econômico possibilitando um grande aumento na velocidade de comunicações e na extensão dos enlaces ópticos.

Estudos sobre buracos negros descritos por um Condensado de Bose-Einstein de grávitons [10, 11] e a ideia de que o espaço-tempo também são formados por condensados [12] contribuem nas áreas da Cosmologia e Astrofísica.

Em suma, são muito atuais e variados os trabalhos envolvendo teorias sobre a condensação de gases quânticos ultrafrios aprisionados; e por ser um objeto macroscópico, ela, a condensação, permite a observação direta de efeitos quânticos em larga escala, podendo ser manipulada diretamente, o que a torna excepcionalmente atraente.

O objetivo geral desta dissertação é analisar o comportamento dinâmico e a estabilidade de sólitons em Condensados de Bose-Einstein (CBE) sujeitos a potenciais periódicos (redes

ópticas) descritos pela Equação de Gross-Pitaevskii (EGP) unidimensional

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x, t) + V_{ext}(x) \Psi(x, t) + g |\Psi(x, t)|^2 \Psi(x, t), \quad (1)$$

sendo esta uma Equação de Schrödinger (ES) com não linearidade cúbica. Entende-se como sólitons estáveis aqueles que mantêm a sua forma ao longo da evolução temporal.

Este trabalho será realizado através do Método Variacional e uma miscelânea de métodos numéricos (Método das Diferenças Finitas, Método de Newton-Raphson, Método de Crank-Nicolson, Método Split-Step, Método de Relaxamento ou de propagação do tempo imaginário, etc.)

Buscaremos soluções na forma de sólitons iluminados [13, 14]. Isto corresponde a interações atrativas entre os átomos do CBE como ocorre com condensados de ^{87}Rb e ^{23}Na .

A escolha do potencial de confinamento periódico descrevendo uma rede óptica baseou-se primeiramente em abordagens atuais envolvendo condensados descritos pelo Hamiltoniano de Bose-Hubbard [15] e condensados fermiônicos [16], e pelo fato das redes ópticas terem sido amplamente utilizadas na física atômica como forma de resfriar, aprisionar e controlar átomos [17]. Nos últimos anos, os átomos ultrafrios em redes ópticas tornaram-se um ponto de encontro único para descrever propriedades físicas através de simulações de materiais em estado sólido [18, 19, 20], sendo esta uma das principais motivações para a realização deste trabalho e por fim, contribuir de forma expressiva no programa de pós graduação em Ciência dos Materiais do Instituto de Física da Universidade Federal de Mato Grosso do Sul.

O sistema estudado nessa dissertação consiste em um sólito unidimensional sujeito a uma rede óptica. Esse sistema pode ser modelado matematicamente como uma solução da EGP. Supomos o sólito como tendo um formato inicial (*ansatz*) do tipo secante hiperbólica. O estudo dessas soluções foi feito numericamente, por meio do método *split-step* Crank-Nicolson, e de modo analítico, através de uma análise variacional.

Discutimos a estabilidade dos sólitons, comparando os resultados obtidos pela análise variacional e pelo método numérico. Na introdução procuramos esclarecer alguns pontos principais sobre os aspectos teóricos que alicerçam a pesquisa realizada. Discorreremos sobre sólitons e sobre a dinâmica de ondas de matéria em CBEs. Esta seção explana alguns dos conceitos utilizados para o desenvolvimento deste trabalho.

O trabalho deste mestrado tem início na seção dos resultados, onde estudamos a dinâmica de sólitons de onda de matéria em redes ópticas. Na conclusão do trabalho, fechamos uma análise final dos resultados das cseções anteriores e apresentamos algumas possibilidades de estudos futuros em torno deste tema.

2 Introdução

2.1 Propriedades de sistemas quânticos

Nesta seção exibiremos uma breve visão geral dos importantes resultados da mecânica quântica que serão primordiais para a compreensão do CBE.

2.1.1 A função de onda e a fase

Ao considerarmos uma partícula descrita pela mecânica clássica, basta descrevermos sua posição e momento e prevemos sua evolução usando as leis de Newton [21]. O mesmo não pode ser dito para partículas quânticas. A mecânica quântica nos diz que as partículas são representadas por uma função denominada função de onda, $\Psi(\mathbf{r}, t)$, que é, em geral, uma função complexa que depende da posição e do tempo. Para uma única partícula, define-se a probabilidade, $P(\mathbf{r}, t)$, para encontrar a partícula na posição $\mathbf{r}$ e tempo t de acordo com

$$P(\mathbf{r}, t) \equiv |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 d^3\mathbf{r}. \quad (2)$$

Contudo, quando estamos considerando várias partículas, a quantidade $|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2$ descreve a densidade de partículas, $n(\mathbf{r}, t)$, via

$$n(\mathbf{r}, t) \equiv |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 \quad (3)$$

que integrando em todo o espaço, obtemos o número total de partículas, N , isto é,

$$N = \int |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 d^3\mathbf{r}. \quad (4)$$

A função de onda também contém propriedades relacionadas à *fase* dos sistemas. A fase é melhor explicada através de um exemplo [22]. Se considerarmos um sistema de átomos com momentos de dipolo magnético, no qual o norte magnético de cada átomo estiver apontando em uma direção aleatória, conclui-se que a soma do momento magnético em todo o sistema será praticamente nula. Nesse sistema, dizemos que essas partículas estão *fora de fase*. No entanto, se tivermos um sistema com cada momento de dipolo magnético voltado para a mesma direção, a soma será fortemente magnética e as partículas estarão *em fase*. Deste modo, quando esfriamos um sistema até alcançarmos a condensação de Bose-Einstein, as partículas passam por uma *transição de fase* tal que elas ficam em fase. Caso uma partícula seja perturbada nessa configuração, todas as outras reagem de forma coletiva como se fossem uma única partícula. É essa propriedade do CBE que lhe dá uma ligação inerente ao *laser*. *Lasers* são um fluxo de fótons que estão em fase. É essa semelhança que fornece ao CBE a

reputação de ser um *laser de átomos* [22]. Podemos definir a fase tomando a definição da densidade de partículas dada pela Eq. 3 e reorganizá-la em termos da função de onda

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \sqrt{n(\mathbf{r}, t)} e^{i\theta(\mathbf{r}, t)} \quad (5)$$

onde $\theta(\mathbf{r}, t)$ é a fase do sistema. Podemos reorganizar esta equação usando a fórmula de Euler para $\exp(i\theta(\mathbf{r}, t))$ e separando as partes real e imaginária da função de onda para obter

$$\theta(\mathbf{r}, t) = \arctan\left(\frac{\text{Im}(\Psi(\mathbf{r}, t))}{\text{Re}(\Psi(\mathbf{r}, t))}\right) \quad (6)$$

2.1.2 Princípio de exclusão de Pauli e mecânica estatística quântica

Na natureza, as partículas existem em duas categorias distintas, definidas pelo seu *spin* (momento angular intrínseco da partícula): *bósons* (partículas com *spin* inteiro, por exemplo, fótons, fônons, mágnons, átomos de ^4He) e *férmions* (partículas com *spin* semi-inteiro, por exemplo, elétrons, prótons, nêutrons, átomos de ^3He). Os bósons são ilimitados em sua capacidade de ocupar um único estado de energia. Férmions, no entanto, são limitados a apenas uma partícula por estado pelo *princípio de exclusão de Pauli*, como descoberto pelo físico austríaco Wolfgang Pauli em 1925. Assim, a condensação de Bose-Einstein ocorre, como o próprio nome sugere, apenas para bósons, de modo que todas as partículas possam existir no mesmo estado e se comportarem como uma única partícula.

É possível pegar um par de férmions (chamado par de Cooper), onde o *spin* será então inteiro, e criar um condensado de maneira semelhante, isto é, um *condensado fermiônico* [23, 24].

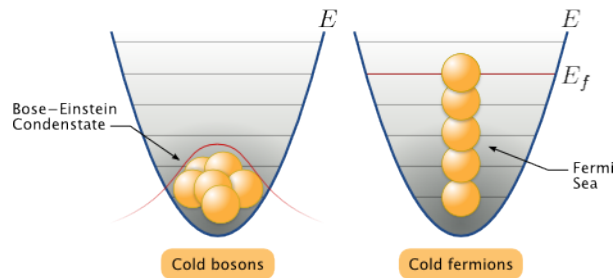


Figura 1: Em cada diagrama as linhas horizontais representam os níveis de energia em uma armadilha harmônica simples. O diagrama à esquerda mostra um sistema de bósons não interagentes em $T = 0$ ocupando o nível de energia mais baixo e o diagrama à direita mostra o mesmo sistema de férmions onde E_f é a energia de Fermi.

A mecânica estatística é usada para descrever um sistema formado por um grande número de átomos, onde não é possível determinar com precisão a posição e o momento de cada

átomo. Na mecânica estatística quântica os bósons obedecem à *estatística de Bose-Einstein* e os férmions, à *estatística de Fermi-Dirac*. O número médio de ocupação de bósons em um determinado estado com energia ε_i é dado por

$$N(\varepsilon_i) = \frac{1}{e^{(\varepsilon_i - \mu)/k_B T} - 1} = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_i - \mu)} - 1} \quad (7)$$

onde k_B é a constante de Boltzmann, T é a temperatura de equilíbrio do sistema, $\beta = 1/k_B T$ e μ é o potencial químico representando a energia necessária para adicionar ou remover partículas do sistema. O termo “ -1 ” no denominador surge do fato de que as partículas são *indistinguíveis* uma da outra.

Caso $\varepsilon_i \rightarrow \mu$, observa-se que $N(\varepsilon_i) \rightarrow \infty$. Assim, à medida que abaixamos a energia do nosso sistema, o número de partículas em um nível de energia mais baixo diverge. Isso significa que os bósons têm a capacidade de ocupar o menor nível de energia em grande número. É importante ressaltar que a Eq. 7 só tem validade para $\varepsilon_i - \mu > 0$, isto é, para um potencial químico estritamente negativo¹, $\mu < 0$.

Para temperaturas muito altas (isto é, no limite clássico), é fácil verificar que o potencial químico é sempre negativo [25]. No contexto quântico, com o número de partículas fixo, à medida que a temperatura diminui o potencial químico aumenta e pode eventualmente se anular dando origem ao fenômeno da Condensação de Bose-Einstein [26].

Isto está em contraste com a estatística Fermi-Dirac, onde o número médio de ocupação de férmions em um determinado estado com energia ε_i é dado por

$$N(\varepsilon_i) = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_i - \mu)} + 1} \quad (8)$$

e que se reduzirmos a energia de um sistema tal que $\varepsilon_i \rightarrow 0$, observa-se que $N(\varepsilon_i) \rightarrow 1$, ou seja, apenas um átomo por estado.

2.2 O condensado de Bose-Einstein

A estatística de Bose-Einstein nos mostra que a ocupação do estado fundamental é ilimitada à medida que a energia do sistema diminui. Para sistemas diluídos, isto pode ser alcançado reduzindo a temperatura de um sistema abaixo de alguma *temperatura crítica* T_c , de modo que as partículas tendem a estar no estado de mais baixa energia. Para um gás de partículas livres de massa m , não interagentes, em três dimensões, esta temperatura crítica é dada por [22]

¹É importante ressaltar que a energia ε_i é negativa por ser energia de ligação.

$$T_c = \frac{2\pi\hbar^2}{mk_B} \left(\frac{n(\mathbf{r}, t)}{\zeta(3/2)} \right)^{2/3}, \quad (9)$$

onde ζ é a função zeta de Riemann definida como

$$\zeta(s) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^s}, \quad (10)$$

e $\zeta(3/2) \approx 2.612$. Abaixo da temperatura crítica, inicia-se a Condensação de Bose-Einstein.

No universo quântico, como mencionado antes, uma partícula é deslocalizada (espalhada) sobre uma região do espaço como um pacote de ondas. Quando ocorre a diminuição da temperatura de um sistema, esses pacotes de ondas (cujo tamanho típico é dado pelo *comprimento de onda de De Broglie*) aumentam de tamanho e começam a se sobrepor, comportando-se como uma onda gigante de matéria. Podemos derivar o comprimento de onda térmico de Broglie equacionando a energia cinética quântica de partículas livres, $E_c = \pi k_B T$, com a energia cinética em termos do momentum, $E_c = p^2/2m$, e usando o comprimento de onda de De Broglie padrão $\lambda_{DB} = 2\pi\hbar/p$ obtemos

$$\lambda_{DB} = \sqrt{\frac{2\pi\hbar^2}{mk_B T}}, \quad (11)$$

onde $\lambda_{DB} \propto 1/\sqrt{T}$, ou seja, o comprimento de onda de De Broglie aumenta a medida que a temperatura diminui.

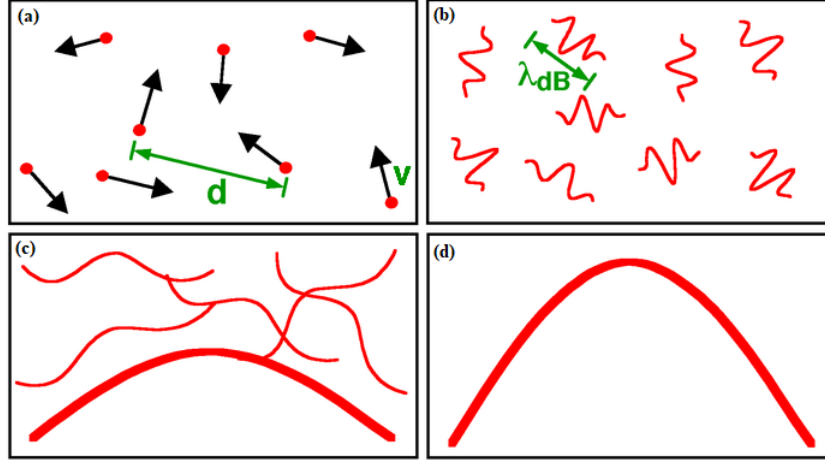


Figura 2: Critério para Condensação de Bose-Einstein [27]. Em altas temperaturas (a), um gás de interação fraca pode ser tratado como um sistema de "bolas de bilhar". Em uma descrição quântica simplificada, os átomos podem ser considerados como pacotes de ondas (b) com um tamanho de seu comprimento de onda de De Broglie, λ_{DB} . Na temperatura de transição, $T = T_c$, para o CBE, λ_{DB} torna-se comparável à distância entre átomos e a sobreposição das ondas de matéria (c) toma a forma de um condensado. À medida que a temperatura se aproxima de zero (d), a nuvem térmica desaparece dando origem a uma onda de matéria gigante, isto é, um CBE puro.

Note que usando a Eq. 9 em termos de λ_{DB} podemos escrever

$$n\lambda_{DB}^3 \propto nT_c^{-3/2} \approx 2.612. \quad (12)$$

É importante destacar que para que a Condensação de Bose-Einstein ocorra, essa relação deve ser satisfeita. Percebe-se na Eq. 12 que para temperaturas críticas elevadas a densidade de partículas também será elevada, e é assim que se espera que sistemas como estrelas de nêutrons contenham CBE's porque tanto a densidade quanto a temperatura são muito maiores [22]. Indicamos o exercício 5.36 da Ref. [21] como exemplo de condensação a altíssimas temperaturas.

Os sistemas com os quais vamos lidar são condensados atômicos diluídos e fracamente interagentes. O termo "diluídos" refere-se à baixa densidade atômica, o que significa que necessitamos de baixas temperaturas. Uma característica importante dos CBE's diluídos, que usaremos praticamente em todo este trabalho, é que sua dinâmica à temperatura nula pode ser regida pela denominada Equação de Gross-Pitaevskii.

2.3 Um breve hitórico sobre a realização experimental do CBE

Sem sombra de dúvidas, o CBE foi uma das maiores descobertas da física estatística, que de maneira simplista pode ser entendido como a tendência dos constituintes de um gás de bósons em ocupar o seu menor estado de energia a baixas temperaturas [28].

Os CBEs foram primeiramente previstos teoricamente pelo físico indiano Satyendra Nath Bose (1894-1974). Bose estava trabalhando em problemas estatísticos na mecânica quântica e enviou suas ideias a Albert Einstein (1879-1955). Einstein achou-as importantes o bastante para publicá-las. Mais importante, Einstein observou que a matemática de Bose — mais tarde conhecida como estatística de Bose-Einstein — poderia ser aplicada tanto aos átomos como à luz.

O primeiro “verdadeiro” CBE foi criado por Eric Cornell, Carl Wieman e colegas no Instituto Conjunto do Laboratório de Astrofísica em 5 de junho de 1995. Este feito foi conseguido arrefecendo um vapor diluído de aproximadamente 2000 átomos de ^{87}Rb até atingir temperaturas abaixo dos 170 nK usando uma combinação de arrefecimento a *laser* (uma técnica que valeu aos seus inventores Steven Chu, Claude Cohen-Tannoudji e William D. Phillips o Prêmio Nobel da Física em 1997) e arrefecimento por evaporação magnética [29].

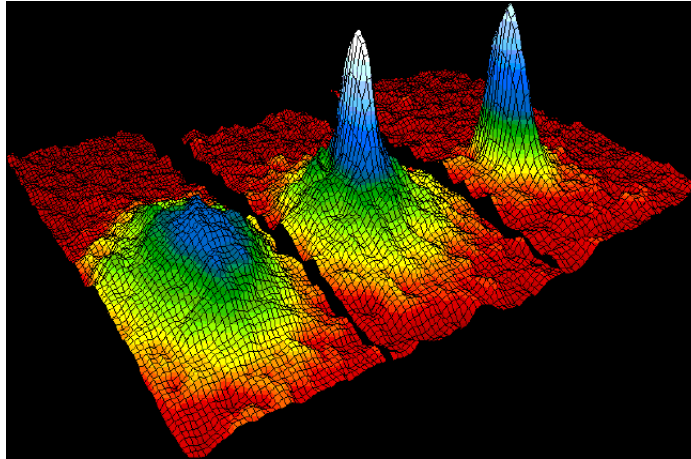


Figura 3: Dados de distribuição de velocidade para um gás de átomos de ^{87}Rb , confirmando a descoberta de uma nova fase da matéria, o condensado de Bose-Einstein [29]. Esquerda: Logo antes do aparecimento do condensado de Bose-Einstein. Centro: No instante do aparecimento do condensado. Direita: após a rápida evaporação, deixando amostras puras do condensado. As cores artificiais representam o número de átomos em cada velocidade, indicando o vermelho menos átomos e o branco mais átomos. As áreas em que aparecem branco e azul claro são velocidades menores. O pico não é infinitamente estreito devido ao Princípio da Incerteza de Heisenberg: quando um átomo é retido numa região específica do espaço a sua distribuição de velocidade possui necessariamente uma certa largura mínima. Os dados experimentais originais são uma imagem sombreada em preto e branco bidimensional, mas essas imagens foram convertidas em três dimensões e recebem contornos de densidade de cores falsas.

Cerca de quatro meses depois, um projeto independente conduzido por Wolfgang Ketterle no MIT criou um condensado formado por ^{23}Na [30]. O condensado de Ketterle era constituído por trezentas vezes mais átomos, o que lhe permitiu obter vários resultados

importantes como a observação de interferência quantum-mecânica entre dois condensados diferentes. Cornell, Wieman e Ketterle ganharam o Prêmio Nobel em 2001 pelo seu trabalho.

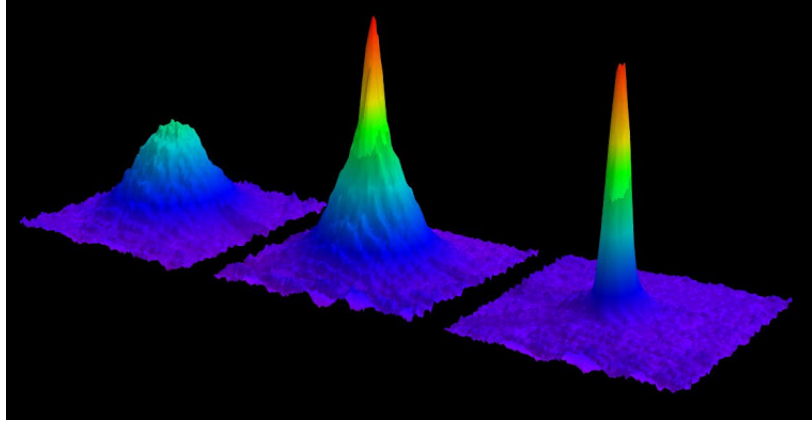


Figura 4: Observação da condensação de Bose-Einstein por imagem de absorção [31]. Contempla-se a absorção *vs* duas dimensões espaciais. A imagem da esquerda mostra uma nuvem em expansão resfriada até um pouco acima do ponto de transição; centro: logo após o condensado aparecer; direita: depois de mais resfriamento evaporativo deixou um condensado quase puro. O número total de átomos na transição de fase é de cerca de 7×10^5 e a temperatura no ponto de transição é de $2 \mu K$.

2.4 Teoria do campo médio

Do ponto de vista teórico, e de uma ampla gama de condições experimentalmente relevantes, a dinâmica de um CBE pode ser descrita por meio da Teoria do Campo Médio (TCM). A principal ideia da TCM é substituir todas as interações interatômicas por um corpo com uma interação média ou efetiva. Isso reduz qualquer problema de muitos corpos em um problema efetivo de um só corpo. Esta abordagem é muito mais simples do que tratar o Hamiltoniano de muitos corpos

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \left(\frac{\hat{\mathbf{p}}_i^2}{2m} + \hat{V}_{ext}(\mathbf{r}_i) \right) + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i}^N \hat{V}_{int}(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|) \quad (13)$$

e pode descrever com bastante precisão as propriedades estáticas e dinâmicas dos CBEs [32]. A Eq. 13 representa o Hamiltoniano de um sistema de N bósons interagentes de massa m com momentum linear $\hat{\mathbf{p}} \rightarrow -i\hbar\nabla$ sujeitos a um potencial externo $\hat{V}_{ext}$. O termo $\hat{V}_{int}$ descreve o potencial de interação e o fator “1/2” é necessário para evitar a contagem de interações entre as partículas duas vezes.

Um CBE, como já foi descrito na Sec. 2.2, é obtido a partir de uma coleção de bósons no estado fundamental a temperaturas muito baixas. O Hamiltoniano de muitos corpos geral

que descreve tal sistema formado por N bósons interagentes de massa m confinados por um potencial externo $V_{ext}(\mathbf{r})$ é dado na forma de *segunda quantização* por

$$\hat{H} = \int d\mathbf{r} \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}, t) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{ext}(\mathbf{r}) \right] \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) + \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}', t) V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \hat{\Psi}(\mathbf{r}', t) \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) \quad (14)$$

onde $\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t)$ e $\hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}, t)$ são os operadores de campo de aniquilação e criação de bósons respectivamente, e $V(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ é o potencial interatômico entre dois bósons.

Na situação de temperaturas extremamente baixas, a presença de uma grande quantidade de bósons em um só estado (estado condensado) permite que utilizemos a *aproximação de Bogoliubov* [33, 34, 35], que consiste em substituir o operador $\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t)$ pelo campo clássico $\Psi(\mathbf{r}, t)$. Com o intuito de determinar a equação que descreve o CBE, usaremos a equação de Heisenberg [32] para o campo $\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t)$

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) &= [\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t), \hat{H}] \\ &= \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{ext}(\mathbf{r}) + \int d\mathbf{r}' \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}') V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \hat{\Psi}(\mathbf{r}') \right] \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) \end{aligned} \quad (15)$$

Na tentativa de simplificar o potencial de interação interatômico, considera-se o caso relevante de um gás ultrafrio diluído com colisões binárias elásticas (onde “binárias elásticas” significa que estamos assumindo colisões do tipo “bolas de bilhar” e que não há perda de energia nessas colisões) a baixa energia, pelas ondas s (s -wave)² de comprimento de dispersão a_s . Neste limite, o potencial interatômico pode ser substituído por um potencial interatômico efetivo (potencial de contato) que é bem descrito por uma função Delta de Dirac:

$$V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = V_{ef} = g\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (16)$$

onde g é uma constante.

Utilizando a propriedade da filtragem da função Delta [36]

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x - a) f(x) dx = f(a) \quad (17)$$

e substituindo o operador de campo $\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t)$ pelo campo clássico $\Psi(\mathbf{r}, t)$, chega-se na equação

²Na teoria do espalhamento quântico, imaginamos uma onda plana incidente (com o número quântico de momento angular, $l = 0, 1, 2, \dots$, definido) que se move numa determinada direção e encontra um potencial de espalhamento produzindo uma onda esférica de saída [21]. Em espalhamentos de baixas energias, como no caso da condensação de Bose-Einstein, consideramos apenas o caso $l = 0$ ($l = 0, 1, 2, \dots \rightarrow l = s, p, d, \dots$), isto é, apenas as ondas s participarão do processo de espalhamento.

que descreve o CBE:

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

2.5 Equação de Gross-Pitaevskii

Os comportamentos (propriedades estáticas e dinâmicas) dos CBEs puros constituídos de átomos diluídos e ultrafrios são regidos pela equação hidrodinâmica de campo médio. Esta equação é conhecida como Equação de Gross-Pitaevskii (EGP)

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\mathbf{r}, t) + V_{ext}(\mathbf{r}, t) \Psi(\mathbf{r}, t) + g |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 \Psi(\mathbf{r}, t), \quad (18)$$

onde $i = \sqrt{-1}$ é a unidade imaginária, $\hbar$ é a constante de Planck, h , dividida por 2π , m é a massa de cada átomo do condensado, ∇^2 é o operador laplaciano, $V_{ext}(\mathbf{r}, t)$ é o potencial externo responsável pelo aprisionamento (armadilha) no qual o sistema está submetido, g é o coeficiente de não linearidade e o termo não linear $|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2$ é a densidade atômica $n(\mathbf{r}, t)$ que já foi apresentada na Sec. 2.1.1.

Nesta equação, $\Psi(\mathbf{r}, t)$ é a função de onda ³ (também chamada de *parâmetro de ordem* ou de *função de onda macroscópica*) do CBE e a normalização é dada por

$$\int |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 d^3\mathbf{r} = N, \quad (19)$$

onde N representa o número de átomos do condensado [37].

2.5.1 Coeficiente de não linearidade

O coeficiente g , que define a força de não linearidade, é o parâmetro que mede as interações atômicas dado por

$$g = \frac{4\pi\hbar^2 a_s}{m}. \quad (20)$$

O termo a_s é o *comprimento de espalhamento das ondas s*, uma quantidade usada em física atômica para caracterizar as interações entre os átomos no limite de baixa energia [38]. Para as duas espécies atômicas de condensados mais comuns, ^{87}Rb e ^{23}Na , $a_s = 5.8$ e 2.8nm , respectivamente. Enquanto o verdadeiro potencial de interação entre dois átomos é mais complicado, sua forma detalhada não é importante, desde que $a_s \ll d$, onde d é a

³No caso tridimensional, o operador laplaciano e a função de onda são dados, respectivamente, por $\nabla^2 \equiv \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$ e $\Psi(\mathbf{r}, t) \equiv \Psi(x, y, z, t)$ em coordenadas cartesianas.

distância média entre as partículas (ou, equivalentemente, $na_s^3 \ll 1$). Além disso, dentro desta situação, a condição para interações fracas é $a_s \ll \lambda_{DB}$ [39].

É possível controlar a interação interatômica, alterando o limiar da dinâmica de colisão e, consequentemente, alterar o sinal ou a magnitude do comprimento de espalhamento através da *ressonância de Feshbach*. Isso pode ser feito com a aplicação de um campo magnético externo B que controla o comprimento de espalhamento devido à rápida variação nas propriedades de colisão [39]. A partir da teoria de espalhamento de mecânica quântica, pode-se determinar que o comprimento de espalhamento como uma função do campo magnético é dado por

$$a_s = a_{bg} \left(1 - \frac{\Delta B}{B - B_0} \right), \quad (21)$$

onde ΔB indica a largura ou a força da ressonância, B_0 é o valor do campo magnético no qual o *detuning* é nulo e a_{bg} é o comprimento de dispersão do *background*. Para uma análise detalhada sobre a técnica da *ressonância de Feshbach* indicamos as Refs [38, 40, 41].

É importante ressaltar que o comprimento de espalhamento das ondas s , e consequentemente o coeficiente de não linearidade, pode ter valores positivos ou negativos. Para $g > 0$ as interações interatômicas são *repulsivas* (por exemplo, para CBE de ^{87}Rb ou ^{23}Na), para $g < 0$ as interações são *atrativas* (por exemplo, para CBE de ^7Li [42]) e para $g = 0$ não há interações e a EGP se reduz à Equação de Schrödinger (ES).

2.5.2 Potenciais de confinamento

Os CBEs são tipicamente confinados por potenciais harmônicos que podem, em geral, ser anisotrópicos no espaço [43]. No caso de armadilhas magnéticas (*magnetic trap*) o potencial externo $V_{ext}(\mathbf{r})$ assume a forma harmônica típica [44, 45, 41, 46]

$$V_{MT}(x, y, z) = \frac{1}{2}m(\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2), \quad (22)$$

onde, em geral, as frequências da armadilha, ω_x, ω_y e ω_z , ao longo das três direções são diferentes.

Há também outros potenciais de confinamento, como os potenciais periódicos de redes ópticas (*optical lattices*) [47, 48, 49, 50, 51, 18, 17]:

$$V_{OL}(x, y, z) = V_0 [\cos^2(k_x x + \phi_x) + \cos^2(k_y y + \phi_y) + \cos^2(k_z z + \phi_z)] \quad (23)$$

2.5.3 Massa, energia e potencial químico

A massa total do CBE é $M = mN$ onde N provém da condição de normalização dada pela Eq. 19. A energia total E do CBE é dada pela expressão

$$E = \int \left[\frac{\hbar^2}{2m} |\nabla \Psi(\mathbf{r}, t)|^2 + V_{ext} |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 + \frac{g}{2} |\Psi(\mathbf{r}, t)|^4 \right] d\mathbf{r} = E_{cin} + E_{pot} + E_{int}. \quad (24)$$

Os termos representam a energia cinética E_{cin} , energia potencial E_{pot} e a energia de interação E_{int} . Desde que o potencial V_{ext} seja *independente do tempo*, pode-se afirmar que a energia $E = E_{cin} + E_{pot} + E_{int}$ é conservada durante a evolução temporal do condensado [43].

2.5.4 EGP independente do tempo

É possível extrair soluções estacionárias tomando

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r}) e^{-i\mu t/\hbar}, \quad (25)$$

onde $\psi(\mathbf{r})$ é a função de onda independente do tempo e μ é o *potencial químico* que aparece na distribuição de Bose-Einstein dada pela Eq. 7. Inserindo a Eq. 25 na Eq. 18 obtemos a EGP independente do tempo

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\mathbf{r}) + V_{ext}(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) + g |\psi(\mathbf{r})|^2 \psi(\mathbf{r}) = \mu \psi(\mathbf{r}). \quad (26)$$

Note que o potencial V_{ext} deve ser independente do tempo, a função $\psi(\mathbf{r})$ é a *autofunção* e o potencial químico é o *autovalor*. As soluções da EGP independente do tempo são soluções estacionárias do sistema, sendo a solução de energia mais baixa o estado fundamental do CBE, e a integração direta nos leva à expressão ⁴

$$\mu N = \int \left[\frac{\hbar^2}{2m} |\nabla \Psi(\mathbf{r}, t)|^2 + V_{ext}(\mathbf{r}) |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 + g |\Psi(\mathbf{r}, t)|^4 \right] d\mathbf{r} = E_{cin} + E_{pot} + 2E_{int}. \quad (27)$$

Na ausência de interações, a Eq. 27 se reduz à energia por partícula, consistente com o autovalor da ES independente do tempo.

⁴Geralmente, o potencial químico é definido como $\mu = \partial E / \partial N$ [52].

2.6 Sólitons e *gaps* sólitons

Em 1834, J. Scott Russell observou e acompanhou um pulso de onda criado pela proa de um barco sendo puxado por dois cavalos em um canal de Glasgow. A embarcação parou abruptamente, e Russel acompanhou aquela onda se propagando por cerca de duas milhas de distância do ponto de parada. A velocidade do pulso de onda era de aproximadamente 9 milhas por hora, conforme o próprio Russel relatou. Durante todo o percurso, o pulso de onda manteve sua forma e velocidade praticamente inalteradas.

Posteriormente, em 1895, Korteweg e de Vries encontraram a equação diferencial que descrevia o problema, essa equação ficou conhecida como equação KdV:

$$\frac{\partial u}{\partial t} - 6u \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} = 0. \quad (28)$$

Porém, foi em 1965 que Zabusky e M. Kruskal estudando as soluções de D.J. Korteweg e G. de Vries definiram tal efeito como ondas solitárias ou sólitons. Os sólitons correspondem a soluções particulares de algumas equações não lineares, descrevendo a propagação de excitações ou pacotes de ondas em meios contínuos envolvendo efeitos de dispersão e não linearidade permitindo que ele mantenha sua forma à medida que evolui [53].

Geralmente existem dois tipos de sólitons: os sólitons iluminados ou brilhantes (Fig. 5 (a)), que são pacotes de ondas localizados que não perdem a sua forma durante a propagação, ou seja, a sua amplitude mantém-se constante durante um longo tempo de evolução temporal e espacial; e os sólitons escuros (Fig. 5 (b)), que são buracos se movendo em um fundo de matéria, neste caso, a sua amplitude também mantém-se constante durante uma evolução temporal e espacial.

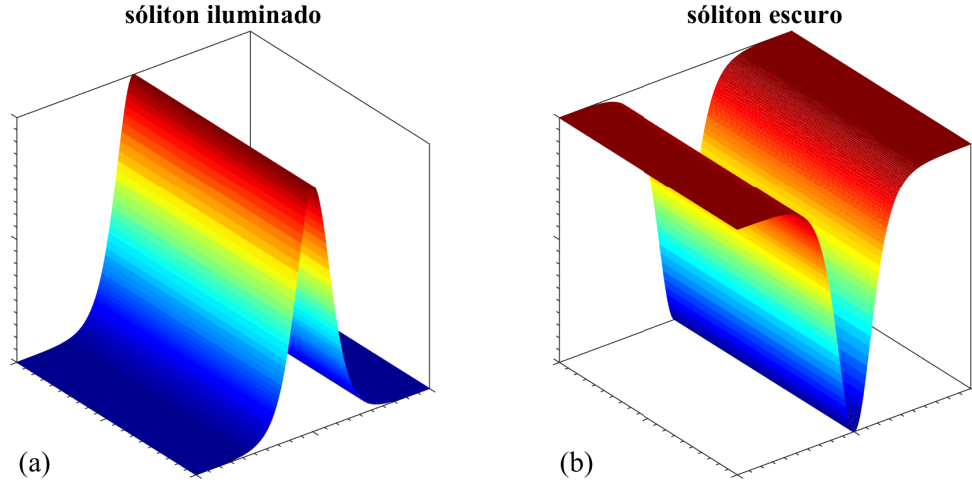


Figura 5: Exemplo ilustrativo de um sóliton iluminado (a) e um sóliton escuro (b).

Os dois exemplos de sólitons apresentados na Fig. 5 são meramente ilustrativos, entretanto, os sólitons podem ser soluções de uma equação não linear do tipo Schrödinger (ESNL, EGP, etc.) aplicada a sistemas de gases quânticos [54, 55, 47, 48] ou fibras ópticas [56, 57, 58].

Dependendo do fenômeno e das condições físicas, os sólitons são denominados de *gaps* sólitons. Na física do estado sólido, são denominados de *gaps* a descontinuidade no espectro de energia de elétrons livres em um cristal sujeito a um potencial periódico [59, 60], ou seja, regiões espectrais onde não existe a propagação de ondas. Entretanto, quando a não linearidade permite a localização de ondas dentro de uma banda de *gaps* linear, formam-se *gaps* sólitons [50].

A EGP na presença de um potencial periódico possui soluções do tipo *gaps* sólitons iluminados quando as interações atômicas são atrativas, e quando as interações são repulsivas, as soluções são *gaps* sólitons escuros.

Experimentalmente, um potencial periódico unidimensional de aprisionamento de átomos frios é obtido utilizando a interação de dois *lasers*. Neste caso, similar ao que ocorre na física do estado sólido, funções de ondas localizadas tomam a forma de sólitons dentro de *gaps* proibidos do espectro da banda-lacuna, sendo também denominados de *gaps* sólitons [61].

2.7 Redes ópticas

As redes ópticas são “cristais artificiais de luz” criados por interferências entre lasers [51]. Quando os átomos são iluminados com laser, o campo elétrico do laser induz um momento de dipolo nos átomos que, por sua vez, interage com o campo elétrico. Essa interação modifica a energia dos estados internos dos átomos de uma maneira que depende tanto da intensidade

da luz quanto da frequência do laser. Uma intensidade espacialmente dependente induz uma energia potencial espacialmente dependente que pode ser usada para confinar os átomos.

A geometria da rede é determinada pela configuração dos feixes de laser usados para criar a rede e a profundidade da rede é ajustável pela intensidade do laser. Existe até flexibilidade no controle do espaçamento da estrutura, modificando o ângulo de interferência entre os feixes de laser [62].

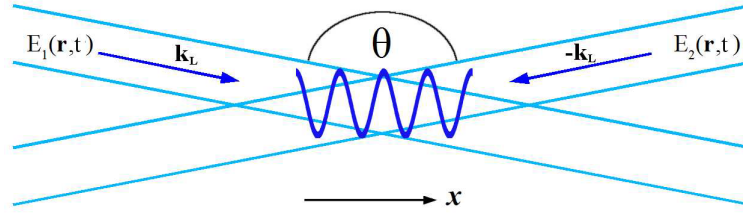


Figura 6: Rede óptica unidimensional criada pela intersecção de dois feixes de lasers na direção x , com vetores de ondas $\mathbf{k}_L$ e $-\mathbf{k}_L$ [53, 63].

Como as configurações das redes ópticas se assemelham aos arranjos geométricos dos átomos em sólidos cristalinos, eles podem ser usados para estudar comportamentos atômicos em um ambiente altamente controlado [18, 17]. O potencial de rede óptica imita a rede cristalina em um sólido e os átomos presentes na rede imitam os elétrons de valência. Os átomos se movem na rede como os elétrons de valência fazem na presença de potenciais periódicos gerados pelos íons carregados positivamente em um cristal sólido.

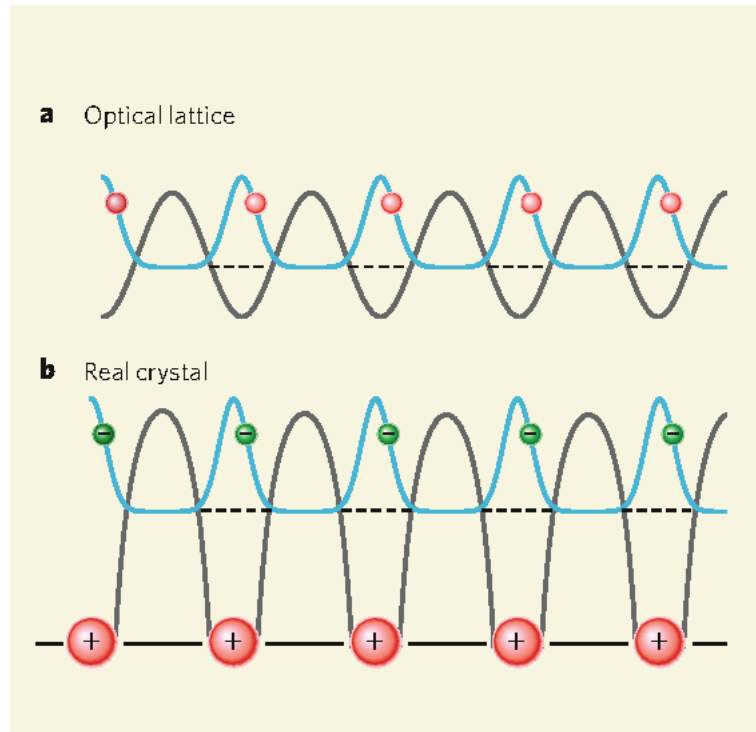


Figura 7: Simulação de cristal [64]. Átomos ultrafrios em uma rede óptica podem simular fenômenos de matéria condensada que normalmente ocorrem apenas no "gás de elétrons" de um cristal de estado sólido. Em uma rede óptica (a), os átomos são aprisionados em um potencial sinusoidal (cinza) criado por um feixe de laser de ondas estacionárias. As funções de onda dos átomos (azul) correspondem àquelas dos elétrons de valência em um cristal real (b). Aqui, o potencial periódico é causado pela força eletrostática atrativa entre os elétrons (-) e os íons (+) formando o cristal. O movimento e a interação das partículas, sejam átomos ultrafrios ou elétrons, determinam a física do material. Assim, por exemplo, a superfluidez em um gás de átomos ultrafrios corresponde à supercondutividade em um gás de elétrons.

Há, no entanto, algumas diferenças importantes entre os cristais de estado sólido e a rede óptica que são relevantes para enfatizar [65].

Primeiramente, as escalas de energia são muito diferentes. Enquanto a distância típica da rede em sistemas de átomos frios é da ordem de $1\ \mu\text{m}$, em cristais de estado sólido é em torno de $0,1\ \text{nm}$.

Em sistemas atômicos ultrafrios é possível seguir a dinâmica dos átomos nas escalas de tempo de milissegundos ou até segundos. Além disso, ao contrário dos elétrons, que são partículas carregadas e fortemente acopladas ao complexo ambiente de estado sólido, os átomos são neutros e quase completamente desacoplados de seu ambiente.

Em contraste com os materiais reais onde a desordem, vibrações de rede e defeitos estruturais são inevitáveis, os cristais feitos pela luz são rígidos (sem vibrações), livres de defeitos e totalmente controláveis.

Graças a todos esses atributos, os átomos ultrafrios presentes na rede óptica tornam-se um ambiente perfeito para a investigação de fenômenos não lineares, transições de fase quântica

e dinâmica de não equilíbrio.

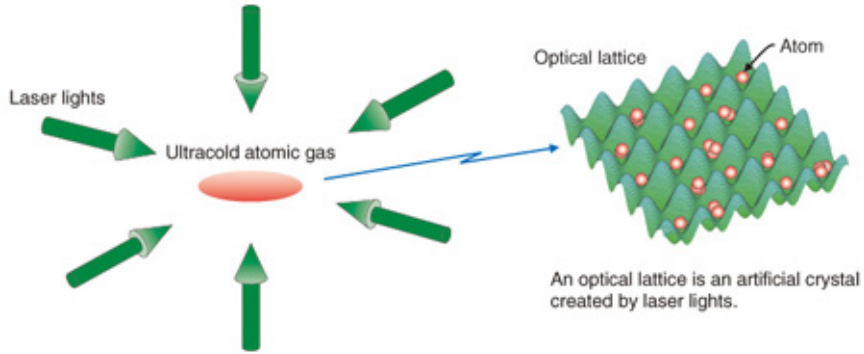


Figura 8: Esquema de uma rede óptica [66]. Uma rede óptica é criada aplicando feixes de laser contrapropagantes no gás atômico ultrafrio, conforme representado esquematicamente na figura acima. Aqui, o comprimento de onda da luz do laser é “desafinado” (*detuning*) e está longe do comprimento de onda de ressonância dos átomos. Nesta situação, os átomos não absorvem os fótons do laser. Portanto, o aquecimento dos átomos não ocorre. Os feixes de laser contrapropagantes formam uma onda estacionária de modo a produzir um potencial semelhante a uma rede cristalina que muda periodicamente com a posição espacial. Uma rede óptica corresponde a este potencial periódico com átomos confinados no interior. Quando os feixes de laser iluminam um gás atômico de seis direções a estrutura de rede torna-se uma cúbica simples e a distância da rede é exatamente igual à metade do comprimento de onda do laser.

2.8 Equação de Mathieu

O propósito dessa dissertação é, de um modo geral, avaliar o comportamento dinâmico de sólitons em átomos ultrafrios submetidos a uma rede óptica. A rede óptica é modelada matematicamente por funções periódicas e ao considerarmos a EGP-1D linearizada ($g = 0$), esta pode ser reescrita como uma Equação de Hill que tem como caso particular a Equação de Mathieu. Sendo assim, é fundamental, para o desenvolvimento desse trabalho, uma breve abordagem sobre as equações supracitadas.

A Equação de Hill

$$\frac{d^2}{dx^2}y(x) + P(x)y(x) = 0 \quad (29)$$

é uma equação diferencial ordinária linear de segunda ordem na qual o termo $P(x)$ é uma função periódica. Ela foi introduzida por George William Hill em 1886. A Equação de Hill é um importante exemplo na compreensão de equações diferenciais periódicas. Casos especiais desta equação inclui a Equação de Mathieu, que aparece em problemas envolvendo geometria elíptica, oscilações paramétricas e na Equação de Schrödinger para potenciais periódicos; e a Equação de Meissner, que foi inicialmente utilizada para estudar problemas envolvendo ressonância e aparece na área na biologia evolutiva.

Émile Léonard Mathieu, um matemático francês, obteve a equação diferencial que hoje leva seu nome em 1868 estudando oscilações livres em uma membrana elíptica.

A equação de Mathieu

$$\frac{d^2}{dx^2}y(x) + [\alpha + \beta \cos(x)]y(x) = 0, \quad (30)$$

tem aparecido na física teórica em muitos contextos diferentes como por exemplo na área de átomo ultrafrios (CBE em redes ópticas)[63, 53, 62]. Podemos usar o Teorema de Floquet para estudar a equação de Mathieu e encontrar as suas regiões de estabilidade através do determinante de Hill [67]. É importante ressaltar que as soluções são ditas instáveis quando uma perturbação infinitesimal inicia uma crescente oscilação. Neste trabalho, buscamos soluções solitônicas, isto é, soluções que mantenham a sua forma ao longo da evolução temporal mesmo com perturbações infinitesimais.

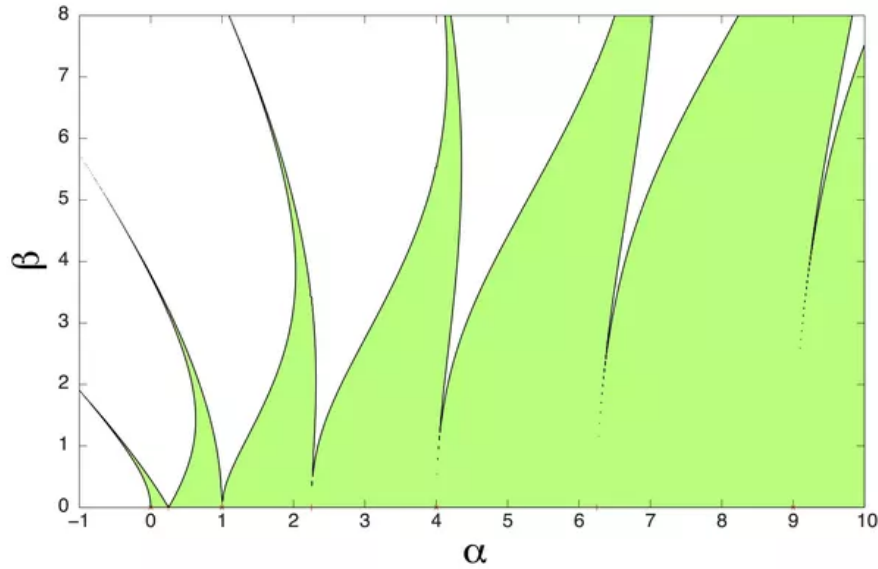


Figura 9: Diagrama de estabilidade da equação de Mathieu $y''(x) + [\alpha + \beta \cos(x)]y(x) = 0$ [68]. As regiões hachuradas (verde) indicam estabilidade enquanto as regiões em branco indicam instabilidade. Regiões instáveis para $\alpha > 0$ correspondem à ressonância paramétrica. Regiões estáveis para $\alpha < 0$ correspondem à estabilização oscilatória. O gráfico é simétrico em relação ao eixo α . Este diagrama é produzido através do determinante infinito de Hill [67].

3 Metodologia

O modelo matemático que rege o comportamento do condensado, como já citado, é a Equação de Gross-Pitaevskii, sendo esta uma equação diferencial parcial não linear. Este tipo de equação, em geral, não possui solução analítica. Assim, torna-se essencial buscarmos métodos para resolver esse tipo de equação. Observa-se que resolver a EGP torna-se o principal objetivo deste trabalho. Isto posto, apresentam-se nas próximas subseções alguns métodos aqui utilizados para resolver esta equação.

3.1 Método Variacional

3.1.1 Teoria de Campos na Forma Lagrangiana

Sistemas contínuos possuem um número infinito de graus de liberdade e são descritos por campos [69]. É fato notável que praticamente todas as teorias de campos de interesse físico podem ser descritas pelos formalismos de Lagrange e Hamilton.

Um sistema mecânico com um número finito de graus de liberdade é descrito pelas coordenadas generalizadas $q_k(t)$. O sistema contínuo mais simples é descrito por uma coordenada $\psi_{\mathbf{x}}(t)$ associada a cada ponto $\mathbf{x}$ do espaço, ou seja, o índice discreto k é substituído pelo índice contínuo $\mathbf{x}$. Por simplicidade, consideraremos inicialmente campos em uma dimensão espacial e, em vez de utilizar a coordenada espacial como subscrito, usaremos a notação tradicional $\psi(x, t)$.

A lagrangiana de um sistema discreto envolve uma soma sobre todos os graus de liberdade, de modo que a lagrangiana de um sistema contínuo deve ser expressa em termos da integral espacial de uma função $\mathcal{L}$, chamada de *densidade lagrangiana*. A densidade lagrangiana deve conter um termo cinético, logo deve depender de $\dot{\psi}(x, t) \equiv \partial\psi/\partial t$. Em contraste com a ideia de ação à distância, suporemos que um campo interage somente com seus vizinhos infinitesimais, de modo que $\mathcal{L}$ deve depender de $\psi(x, t)$ e $\psi(x + dx, t)$. Alternativamente, em vez desta última quantidade é melhor usar $\psi'(x, t) \equiv \partial\psi/\partial x$. Admitindo uma possível dependência explícita em x e t , a ação mais geral para uma teoria de campos unidimensional tem a forma

$$S = \int_{t_1}^{t_2} \int_{x_1}^{x_2} \mathcal{L}(\psi, \psi', \dot{\psi}, x, t) dx dt \quad (31)$$

A integral temporal da Lagrangiana é chamada de ação e é denotada pela letra S . Na teoria de campo, ocasionalmente é feita uma distinção entre a Lagrangiana L , da qual a integral no tempo é a ação

$$S = \int_{t_1}^{t_2} L dt,$$

e a densidade lagrangiana $\mathcal{L}$, da qual a integral no espaço é a lagrangiana:

$$L = \int_{x_1}^{x_2} \mathcal{L}(\psi, \psi', \dot{\psi}, x, t) dx. \quad (32)$$

A equação de Lagrange para ψ decorre do princípio de Hamilton

$$\delta S = \delta \int_{t_1}^{t_2} \int_{x_1}^{x_2} \mathcal{L}(\psi, \psi', \dot{\psi}, x, t) dx dt = 0. \quad (33)$$

onde a variação do campo deve anular-se não apenas nos extremos temporais mas também nos extremos espaciais:

$$\delta\psi(x, t_1) = \delta\psi(x, t_2) = 0, \quad (34)$$

$$\delta\psi(x_1, t) = \delta\psi(x_2, t) = 0. \quad (35)$$

Aplicando a variação da ação na Eq.33 resulta

$$\delta S = \int_{t_1}^{t_2} \int_{x_1}^{x_2} \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi} \delta\psi + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}} \delta\dot{\psi} + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi'} \delta\psi' \right] dx dt = 0. \quad (36)$$

Usando

$$\delta\dot{\psi} = \delta \left(\frac{\partial \psi}{\partial t} \right) = \frac{\partial}{\partial t} (\delta\psi),$$

$$\delta\psi' = \delta \left(\frac{\partial \psi}{\partial x} \right) = \frac{\partial}{\partial x} (\delta\psi),$$

e utilizando o método da integral por partes, segue que

$$\delta S = \int_{t_1}^{t_2} \int_{x_1}^{x_2} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi} \delta\psi dx dt + \int_{t_1}^{t_2} \int_{x_1}^{x_2} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}} \delta\dot{\psi} dx dt + \int_{t_1}^{t_2} \int_{x_1}^{x_2} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi'} \delta\psi' dx dt$$

onde

$$\begin{aligned} \int_{t_1}^{t_2} \int_{x_1}^{x_2} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}} \frac{\partial}{\partial t} (\delta\psi) dx dt &= \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}} (\delta\psi) \Big|_{t_1}^{t_2} - \int_{t_1}^{t_2} \int_{x_1}^{x_2} \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}} \right) (\delta\psi) dx dt \\ &= - \int_{t_1}^{t_2} \int_{x_1}^{x_2} \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}} \right) (\delta\psi) dx dt \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \int_{t_1}^{t_2} \int_{x_1}^{x_2} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi'} \frac{\partial}{\partial x} (\delta \psi) dx dt &= \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi'} (\delta \psi) \Big|_{x_1}^{x_2} - \int_{t_1}^{t_2} \int_{x_1}^{x_2} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi'} \right) (\delta \psi) dx dt \\ &\quad - \int_{t_1}^{t_2} \int_{x_1}^{x_2} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi'} \right) (\delta \psi) dx dt \end{aligned}$$

Substituindo os resultados acima na Eq. 36 , o princípio de Hamilton torna-se

$$\int_{t_1}^{t_2} \int_{x_1}^{x_2} \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi} - \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}} \right) - \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi'} \right) \right] \delta \psi dx dt = 0.$$

Assim, obtém-se a Equação de Euler-Lagrange

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi'} \right) - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi} = 0 \quad (37)$$

No caso de um sistema de N campos em três dimensões espaciais, representados coletivamente por $\psi = (\psi_1, \dots, \psi_N)$, as equações de Lagrange resultantes do princípio de Hamilton

$$\delta S = \delta \int_{t_1}^{t_2} \int_V \mathcal{L}(\psi, \nabla \psi, \dot{\psi}, \mathbf{x}, t) d\mathbf{x} dt = 0$$

onde $\int_V d\mathbf{x} = \int_{z_1}^{z_2} \int_{y_1}^{y_2} \int_{x_1}^{x_2} dx dy dz$, escrevem-se

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}_\alpha} \right) + \nabla \cdot \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\nabla \psi_\alpha)} \right) - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi_\alpha} = 0, \quad \alpha = 1, \dots, N. \quad (38)$$

Com o intuito de demonstrar este resultado, consideremos

$$\delta S = \int_{t_1}^{t_2} \int_V \sum_{\alpha=1}^N \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi_\alpha} \delta \psi_\alpha + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}_\alpha} \delta \dot{\psi}_\alpha + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\nabla \psi_\alpha)} \cdot \delta (\nabla \psi_\alpha) \right] d\mathbf{x} dt = 0. \quad (39)$$

onde as variações dos ψ_α são mutuamente independentes e anulam-se nos extremos de integração temporal e na superfície que limita a região tridimensional V . Usando $\delta \dot{\psi}_\alpha = \partial (\psi_\alpha) / \partial t$, uma integração por partes como no caso unidimensional fornece

$$\int_{t_1}^{t_2} \int_V \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}_\alpha} \delta \dot{\psi}_\alpha d\mathbf{x} dt = - \int_{t_1}^{t_2} \int_V \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}_\alpha} \right) \delta \psi_\alpha d\mathbf{x} dt. \quad (40)$$

Usando agora $\delta (\nabla \psi_\alpha) = \nabla (\delta \psi_\alpha)$ e lançando mão da identidade

$$\nabla \cdot (\mathbf{A}\mathbf{B}) = (\nabla \cdot \mathbf{A}) \mathbf{B} + \mathbf{A} (\nabla \cdot \mathbf{B}), \quad (41)$$

podemos efetuar uma integração por partes com a ajuda do teorema da divergência para obter

$$\begin{aligned} \int_{t_1}^{t_2} \int_V \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\nabla \psi_\alpha)} \cdot \delta (\nabla \psi_\alpha) d\mathbf{x} dt &= \int_{t_1}^{t_2} \left\{ \oint_{\partial V} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\nabla \psi_\alpha)} \delta \psi_\alpha \cdot d\mathbf{a} - \int_V \nabla \cdot \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\nabla \psi_\alpha)} \right) \delta \psi_\alpha d\mathbf{x} \right\} dt = \\ &= - \int_{t_1}^{t_2} \int_V \nabla \cdot \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\nabla \psi_\alpha)} \right) \delta \psi_\alpha d\mathbf{x} dt \end{aligned} \quad (42)$$

pois as variações $\delta \psi_\alpha$ anulam-se na superfície ∂V que limita a região espacial V . Introduzindo a Eq. 40 e a Eq. 42 na Eq. 39, o princípio de Hamilton obtém a forma

$$\delta S = \int_{t_1}^{t_2} \int_V \sum_{\alpha=1}^N \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi_\alpha} - \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}_\alpha} \right) - \nabla \cdot \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\nabla \psi_\alpha)} \right) \right] d\mathbf{x} dt = 0, \quad (43)$$

donde resultam imediatamente as equações de Euler-Lagrange.

Algumas teorias demandam a utilização de campos complexos. Um campo complexo é equivalente a dois campos reais independentes. Equivalentemente, em lugar das partes real e imaginária de um campo complexo, podemos considerar o próprio campo e seu complexo conjugado como campos independentes. Assim sendo, para cada campo complexo teremos um par de equações de Euler-Lagrange da forma da Eq. 38 tomando primeiro $\psi_\alpha = \psi$ e em seguida $\psi_\alpha = \psi^*$.

Exemplo: densidade lagrangiana de Gross-Pitaevskii

A densidade lagrangiana de Gross-Pitaevskii pode ser dada por [70]

$$\mathcal{L} = i\hbar \Psi^* \dot{\Psi} - \frac{\hbar^2}{2m} (\nabla \Psi^*) \cdot (\nabla \Psi) - V \Psi^* \Psi - \frac{g}{2} (\Psi^* \Psi)^2 \quad (44)$$

representando um sistema de dois campos (Ψ^* e Ψ) em três dimensões espaciais (x, y, z) . Tomando $\Psi_1 = \Psi^*$ e $\Psi_2 = \Psi$ e substituindo a Eq. 44 na Eq. 43 obtemos

$$\sum_{\alpha=1}^2 \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \Psi_\alpha} - \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\Psi}_\alpha} \right) - \nabla \cdot \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\nabla \Psi_\alpha)} \right) \right] = 0, \quad (45)$$

onde as derivadas foram calculadas na sequência.

$$\Psi_1 = \Psi^* \rightarrow \begin{cases} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \Psi^*} = i\hbar \dot{\Psi} - V \Psi - g (\Psi^* \Psi) \Psi \\ \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\Psi}^*} = 0 \\ \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\nabla \Psi^*)} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla \Psi \Rightarrow \nabla \cdot \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\nabla \Psi^*)} \right) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi \end{cases} \quad (46)$$

$$\Psi_2 = \Psi \rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \Psi} = -V\Psi^* - g(\Psi^*\Psi)\Psi^* \\ \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\Psi}} = i\hbar\Psi^* \Rightarrow \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\Psi}} \right) = i\hbar\dot{\Psi}^* \\ \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\nabla \Psi)} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla\Psi^* \Rightarrow \nabla \cdot \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\nabla \Psi)} \right) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi^* \end{array} \right. \quad (47)$$

Substituindo os resultados apresentados nas Eq's 46 e 47 na Eq. 45 obtemos

$$\begin{aligned} i\hbar\dot{\Psi} &= -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi + V\Psi + g|\Psi|^2\Psi, \\ -i\hbar\dot{\Psi}^* &= -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi^* + V\Psi^* + g|\Psi|^2\Psi^*. \end{aligned}$$

3.1.2 Teoria de Campos na Forma Hamiltoniana

O momento canonicamente conjugado a $\psi_\alpha(x)$, denotado por $\pi^\alpha(x)$, é dado por:

$$\pi^\alpha = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}}.$$

Sendo assim, a *densidade hamiltoniana* $\mathcal{H}$ definida por

$$\mathcal{H} = \sum_{\alpha} \pi^\alpha \dot{\psi}_\alpha - \mathcal{L}, \quad (48)$$

pode ser expressa em termos de π^α , ψ_α e seus gradientes.

A ação na forma hamiltoniana escreve-se

$$S = \int_{t_1}^{t_2} \int_V \left\{ \sum_{\alpha} \pi^\alpha \dot{\psi}_\alpha - \mathcal{H}(\psi_\alpha, \nabla \psi_\alpha, \pi^\alpha, \nabla \pi^\alpha) \right\} d\mathbf{x} dt$$

e as equações de Hamilton decorrem do princípio variacional $\delta S = 0$, sendo que a Hamiltoniana

$$H = \int_V \mathcal{H}(\psi_\alpha, \nabla \psi_\alpha, \pi^\alpha, \nabla \pi^\alpha) d\mathbf{x}.$$

Em todas as teorias de interesse físico fundamental, $\mathcal{H}$ não depende dos gradientes dos π^α .

3.1.3 Método Variacional

O método variacional está atrelado na Mecânica Quântica junto à teoria de perturbação como alternativa a soluções exatas da Equação de Schrödinger independente do tempo de cer-

tos Hamiltonianos. Embora esse método não consiga fornecer todas as autofunções e energias dos autoestados do sistema, muitas vezes a informação que realmente precisamos se resume à energia do estado fundamental $E_{gs}(\textit{ground state})$. É através do princípio variacional que se possibilita obter, não necessariamente o valor exato, mas, um limite superior para E_{gs} , que frequentemente é muito próximo do valor exato [21].

Este método consiste em escolher uma função de onda teste ψ que dependa de um ou mais parâmetros variacionais, e determinar os valores destes parâmetros em função da minimização do valor esperado do Hamiltoniano $\langle H \rangle$, ou seja, quando a energia relativa ao $\langle H \rangle$ for a menor possível. A função de onda obtida pela substituição dos parâmetros variacionais, cujos valores foram determinados pela minimização, será uma aproximação da função de onda do estado fundamental, e a energia relativa ao valor esperado do Hamiltoniano neste estado será um majorante para a energia do estado fundamental

$$E_{gs} \leq \langle H \rangle \equiv \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle. \quad (49)$$

A função de onda teste é conhecida na literatura como *ansatz*, que do alemão significa palpite. O *ansatz* pode ser qualquer função desde que esta pertença ao chamado espaço de Hilbert. De outro modo, o *ansatz* deve ser quadrado-integrável, garantindo, assim, a normalização da função.

Para calcular o valor esperado de qualquer quantidade Q calcula-se a integral

$$\langle Q \rangle \equiv \langle \psi | \hat{Q} | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) \hat{Q} \psi(x) dx \quad (50)$$

onde $\hat{Q}$ é o operador referente ao observável Q . Como todas as variáveis dinâmicas clássicas podem ser expressas em função da posição x e do momento p , podemos obter o operador $\hat{Q}$ através da substituição canônica

$$p \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}. \quad (51)$$

Pode-se demonstrar a desigualdade na Eq. 49 expressando, primeiramente, ψ como uma combinação linear das autofunções(desconhecidas) do hamiltoniano

$$\psi = \sum_n c_n \psi_n,$$

pois estas formam um conjunto completo.

Sendo $\hat{H}\psi_n = E_n\psi_n$, ψ normalizada e supondo que as autofunções ψ_n tenham sido ortonormalizadas, ou seja, $\langle \psi_m | \psi_n \rangle = \delta_{mn}$; segue que

$$1 = \langle \psi | \psi \rangle = \left\langle \sum_m c_m \psi_m \left| \sum_n c_n \psi_n \right. \right\rangle = \sum_m \sum_n c_m^* c_n \langle \psi_m | \psi_n \rangle = \sum_n |c_n|^2. \quad (52)$$

Enquanto isso

$$\langle H \rangle = \left\langle \sum_m c_m \psi_m \left| \hat{H} \right| \sum_n c_n \psi_n \right\rangle = \sum_m \sum_n c_m^* E_n c_n \langle \psi_m | \psi_n \rangle = \sum_n E_n |c_n|^2. \quad (53)$$

Não obstante, a energia do estado fundamental é, por definição, o menor autovalor de H , de modo que $E_{gs} \leq E_n$ e, assim,

$$\langle H \rangle \geq E_{gs} \sum_n |c_n|^2 = E_{gs}.$$

Uma vez escolhido o *ansatz* ψ , tal que este dependa de pelo menos um parâmetro variacional b , deve-se calcular o valor esperado do hamiltoniano $\langle H \rangle$. Se o sistema for relativamente simples, podemos escrever $\langle H \rangle$ como

$$\langle H \rangle = \langle T \rangle + \langle V \rangle,$$

onde $\langle T \rangle$ e $\langle V \rangle$ são os valores esperados da energia cinética e da energia potencial respectivamente.

De acordo com a Eq. 49, esse resultado excede E_{gs} para qualquer parâmetro variacional b . Sendo assim, para obter o valor mais adequado do parâmetro b , minimiza-se $\langle H \rangle$:

$$\frac{d \langle H \rangle}{db} = 0 \Rightarrow b_{min}. \quad (54)$$

Substituindo o parâmetro b_{min} em $\langle H \rangle$, finalmente determinamos um majorante E_0 para a energia do estado fundamental E_{gs}

$$\langle H \rangle_{min} = E_{min} \equiv E_0. \quad (55)$$

Se porventura E_0 for igual a E_{gs} , então significa que o *ansatz* é exatamente a função de onda do estado fundamental do sistema estudado.

3.1.4 Método Variacional aplicado à Teoria de Campos

Na ótica da Teoria de Campos, aplica-se o processo de minimização, não só na hamiltoniana, mas também na lagrangiana. Observa-se que a lagrangiana propriamente dita é dada pela integral da densidade lagrangiana

$$L = \int_V \mathcal{L}(\psi, \nabla\psi, \dot{\psi}, \mathbf{x}, t) d\mathbf{x}$$

e a hamiltoniana propriamente dita é dada pela integral da densidade hamiltoniana

$$H = \int_V \mathcal{H}(\psi, \nabla\psi, \pi) d\mathbf{x}.$$

como mencionado, respectivamente, na Sec. 3.1.1 e na Sec. 3.1.2.

Como o Método Variacional descrito na Sec. 3.1.3 se aplica à Equação de Schrödinger independente do tempo, a derivada temporal $\dot{\psi}$, e consequentemente o momento conjugado π , se anulam. Assim, a menos de um sinal, contempla-se, através da Eq. 48, a equivalência entre $\mathcal{L}$ e $\mathcal{H}$:

$$\mathcal{H} = \pi\dot{\psi} - \mathcal{L} \rightarrow \mathcal{H} = -\mathcal{L}.$$

É importante ressaltar que utiliza-se geralmente $\mathcal{L}$ ao invés de $\mathcal{H}$, pois do primeiro, podemos extrair as equações de Euler-Lagrange.

Quanto ao *ansatz*, depois de escolhido, o mesmo é substituído na densidade lagrangiana. No contexto do Método Variacional, denomina-se de *lagrangiana efetiva*, por exemplo no caso tridimensional,

$$L_{ef} = \iiint_{-\infty}^{+\infty} \mathcal{L}(\psi, \nabla\psi, x, y, z) dx dy dz$$

a lagrangiana propriamente dita L .

3.2 Métodos Numéricos

Na vasta área das Equações Diferenciais, um Problema de Valor de Contorno (PVC) é conhecido por ser uma equação diferencial ordinária munida de um conjunto de restrições chamadas de condições de contorno ou condições de fronteira. De forma prática, podemos dizer que as condições de contorno são valores conhecidos da função que se deseja encontrar. Um exemplo comum dos PVC's é a própria Equação de Schrödinger independente do tempo. Porém, são poucas as soluções analíticas exatas conhecidas da ES.

Surge então, a necessidade da busca por meios alternativos para solucionarmos essas equações. E um desses meios é o Cálculo Numérico: uma coletânea de métodos numéricos que consiste em uma poderosa ferramenta que nos auxilia na obtenção de soluções numéricas, em geral aproximadas.

A Equação de Gross-Pitaevskii, principal objeto estudado nesse trabalho, pertence à classe dos PVC's desprovidas de soluções analíticas exatas uma vez que a EGP é classificada como uma Equação Diferencial Parcial Não Linear de Segunda Ordem; fazendo com que a análise do problema convergissem ao estudo de um dos métodos mais utilizados para resolvermos PVC's: o Método das Diferenças Finitas (MDF).

3.2.1 Método de Newton-Raphson

O método de Newton (ou Método de Newton-Raphson), desenvolvido por Isaac Newton e Joseph Raphson, tem o objetivo de estimar as raízes de uma função. Para isso, escolhe-se uma aproximação inicial para esta. Após isso, calcula-se a equação da reta tangente (derivada) da função nesse ponto e a interseção dela com o eixo das abscissas, a fim de encontrar uma melhor aproximação para a raiz.

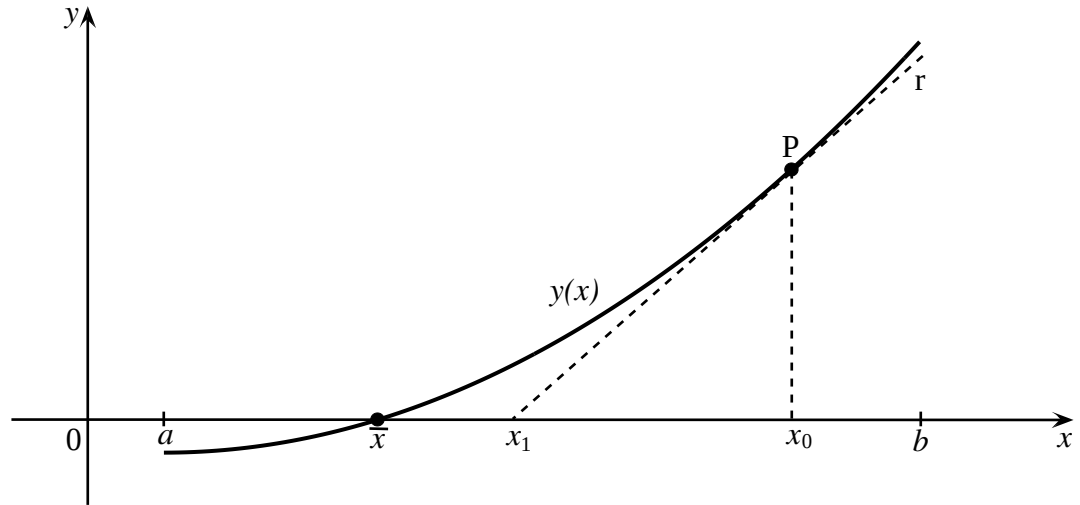


Figura 10: A figura acima representa de forma esquemática a aplicação do método de Newton-Raphson. $\bar{x}$ é a raiz da função $y(x)$

$$y(x) = y(x_0) + y'(x_0)(x - x_0) + \frac{y''(x_0)}{2!}(x - x_0)^2 + \dots$$

a diferença $|\bar{x} - x_0|$ deve ser pequena para a convergência do método e para desprezar o termo quadrático da série.

Como $\bar{x}$ é a solução da equação $y(x) = 0$, ou seja

$$y(\bar{x}) = y(x_0) + y'(x_0)(\bar{x} - x_0) + \frac{y''(x_0)}{2!}(\bar{x} - x_0)^2 + \dots$$

$$y(\bar{x}) \approx y(x_0) + y'(x_0)(\bar{x} - x_0)$$

Como $y(\bar{x}) \approx 0$, isolando $\bar{x}$, obtemos:

$$\bar{x} \approx x_0 - \frac{y(x_0)}{y'(x_0)}$$

Repetindo-se o processo, cria-se um método iterativo para encontrarmos a raiz da função. Em notação matemática, o método de Newton é dado pela seguinte sequência recursiva:

$$x_{n+1} = x_n - \frac{y(x_n)}{y'(x_n)} \quad (56)$$

onde x_0 é uma aproximação inicial dada, n indica a n -ésima iteração do algoritmo e $y'(x_n)$ é a derivada da função y no ponto x_n .

3.2.2 Método das Diferenças Finitas

A ideia básica do Método das Diferenças Finitas (MDF) é transformar o problema de resolver uma equação diferencial ordinária ou parcial, linear ou não linear, num problema de resolver um sistemas de equações algébricas [71], usando para isto a discretização do domínio da função e a substituição das derivadas presentes na equação diferencial por aproximações envolvendo somente valores numéricos da função, por diferenças finitas.

Em geral, as equações diferenciais a serem resolvidas são PVC's sendo que a forma mais geral dos PVC's é dada por:

$$\begin{cases} y''(x) = f(x, y(x), y'(x)) & a < x < b \\ y(a) = \alpha \\ y(b) = \beta \end{cases} \quad (57)$$

Obtém-se as fórmulas de aproximações através da série de Taylor da função. Uma série de Taylor é uma expansão em série de potências de uma função $y(x)$ em torno de um ponto $x = \epsilon$, isto é, uma representação de uma função como uma soma infinita de termos que são calculados dos valores das derivadas da função no ponto $x = \epsilon$.

$$y(x) = y(\epsilon) + y'(\epsilon)(x - \epsilon) + \frac{y''(\epsilon)}{2!}(x - \epsilon)^2 + \dots + \frac{y^{(k)}(\epsilon)}{k!}(x - \epsilon)^k + \dots = \sum_{k=0}^{+\infty} \frac{y^{(k)}(\epsilon)}{k!}(x - \epsilon)^k. \quad (58)$$

A discretização do domínio ocorre ao dividirmos o intervalo $[a, b]$ em $m + 1$ partes iguais

de comprimento h dado por

$$h = \frac{b - a}{m + 1}. \quad (59)$$

O intervalo sendo dividido em $m + 1$ partes implica numa discretização de $m + 2$ pontos dos quais denotaremos os extremos do domínio por $x_0 = a$, $x_{m+1} = b$.

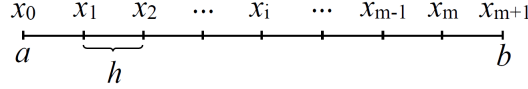


Figura 11: Esquema de discretização do domínio $[a, b]$ em partes de tamanho h . De acordo com a literatura, o termo h da Eq. 59 é conhecido como passo (*step*) e quanto menor for valor do passo mais preciso será a aproximação, porém, a quantidade de equações também aumenta influenciando significativamente no tempo de processamento.

Assim, um ponto qualquer do domínio poderá ser representado pela expressão

$$x_i = x_0 + ih, \quad i = 0, 1, \dots, m + 1, \quad (60)$$

e utilizaremos a notação y_i para representar o valor da função y calculada no ponto x_i :

$$y_i \rightarrow y(x_i) = y(x_0 + ih), \quad i = 0, 1, \dots, m + 1. \quad (61)$$

A série de Taylor para a função $y(x)$ em torno de um ponto x_i desprezando os termos de ordem superior a 2 é dada por:

$$y(x) = y(x_i) + y'(x_i)(x - x_i) + \frac{y''(x_i)}{2}(x - x_i)^2 \quad (62)$$

Ao fazermos as substituições $x \rightarrow x_{i+1} = x_i + h$ e $x \rightarrow x_{i-1} = x_i - h$ obtemos respectivamente:

$$y(x_{i+1}) = y(x_i) + y'(x_i)h + \frac{y''(x_i)}{2}h^2 \quad (63)$$

$$y(x_{i-1}) = y(x_i) - y'(x_i)h + \frac{y''(x_i)}{2}h^2 \quad (64)$$

Isolando o termo $y'(x_i)$ nas Eq's. 63 e 64 chega-se em:

$$y'(x_i) = \frac{y(x_{i+1}) - y(x_i)}{h} + \mathcal{O}(h) \quad (65)$$

$$y'(x_i) = \frac{y(x_i) - y(x_{i-1})}{h} + \mathcal{O}(h) \quad (66)$$

Em contrapartida, subtraindo a Eq. 63 da Eq. 64 e isolando o termo $y'(x_i)$ obtém-se

$$y'(x_i) = \frac{y(x_{i+1}) - y(x_{i-1}))}{2h} + \mathcal{O}(h^2) \quad (67)$$

As Eq's 65, 66 e 67 são as fórmulas de aproximações mais utilizadas para derivadas de primeira ordem no ponto x_i :

$$y'(x_i) \approx \frac{y(x_{i+1}) - y(x_i)}{h} \equiv \text{diferença avançada} \quad (68)$$

$$y'(x_i) \approx \frac{y(x_i) - y(x_{i-1}))}{h} \equiv \text{diferença atrasada} \quad (69)$$

$$y'(x_i) \approx \frac{y(x_{i+1}) - y(x_{i-1}))}{2h} \equiv \text{diferença centrada} \quad (70)$$

Quando aplicamos essas fórmulas, inevitavelmente cometemos um erro. Esse erro nas fórmulas da diferença avançada e na diferença atrasada é da ordem $\mathcal{O}(h)$. Já na diferença centrada, o erro é da ordem $\mathcal{O}(h^2)$ implicando em uma aproximação mais precisa do que as outras, uma vez que $h < 1$.

De forma análoga ao que foi desenvolvido até aqui nesta seção, deduziremos a seguir a fórmula de aproximação para a derivada de segunda ordem utilizando novamente a série de Taylor da função $y(x)$ em torno de x_i desprezando os termos de ordem superior a 4 e fazendo as substituições $x \rightarrow x_{i+1} = x_i + h$ e $x \rightarrow x_{i-1} = x_i - h$ obtemos respectivamente:

$$y(x_{i+1}) = y(x_i) + y'(x_i)h + \frac{y''(x_i)}{2}h^2 + \frac{y'''(x_i)}{6}h^3 + \frac{y^{(4)}(x_i)}{24}h^4 \quad (71)$$

$$y(x_{i-1}) = y(x_i) - y'(x_i)h + \frac{y''(x_i)}{2}h^2 - \frac{y'''(x_i)}{6}h^3 + \frac{y^{(4)}(x_i)}{24}h^4 \quad (72)$$

Adicionado as Eq's. 71 e 72 e isolando o termo $y''(x_i)$ obtemos:

$$y''(x_i) = \frac{y(x_{i-1}) - 2y(x_i) + y(x_{i+1}))}{h^2} + \mathcal{O}(h^2). \quad (73)$$

Nota-se que o erro obtido é da ordem $\mathcal{O}(h^2)$. Assim, obtemos a fórmula de aproximação para a derivada de segunda ordem no ponto x_i :

$$y''(x_i) \approx \frac{y(x_{i+1}) - 2y(x_i) + y(x_{i-1}))}{h^2} \equiv \text{diferença centrada} \quad (74)$$

Sendo assim, nosso problema de resolver um PCV como na Eq. 57 se transforma em:

$$\begin{cases} \frac{y(x_{i+1}) - 2y(x_i) + y(x_{i-1}))}{h^2} = f\left(x_i, y_i, \frac{y(x_{i+1}) - y(x_{i-1}))}{2h}\right) \\ y(x_0) = \alpha \\ y(x_{m+1}) = \beta \end{cases} \quad (75)$$

Aplicação do MDF na Equação de Schrödinger

Nesta seção, aplicaremos o MDF à Equação de Schrödinger independente do tempo para um potencial unidimensional $V(x)$. Podemos encarar esta seção como um tutorial para resolvermos qualquer ES independente do tempo sujeitas a potenciais unidimensionais também independentes do tempo, desde que a ES seja linear e unidimensional. Como a ES independente do tempo é um PVC, nossa tarefa se resume em resolver o problema:

$$\begin{cases} -\frac{1}{2}\psi''(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x) & a < x < b \\ \psi(a) = \alpha \\ \psi(b) = \beta \end{cases} \quad (76)$$

A Eq. 76 equivale a uma equação de autovalores para o operador hamiltoniano $\hat{H}$:

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V. \quad (77)$$

onde $\hat{T}$ é o operador energia cinética e $\hat{V}$ é o operador energia potencial. Os estados estacionários do sistema físico são representados pelas autofunções $\psi(x)$ do operador hamiltoniano, ou seja, funções que satisfazem:

$$\hat{H}\psi_n(x) = E_n\psi_n(x). \quad (78)$$

Os autovalores E_n correspondem aos valores de energia do sistema.

Fixado m , o espaçamento h será $\frac{b-a}{m+1}$ e o intervalo $[a, b]$ será dividido em $x_0 = a$, $x_1 = x_0 + h$, $x_2 = x_0 + 2h$, ..., $x_i = x_0 + ih$, ..., $x_{m-1} = x_0 + (m-1)h$, $x_m = x_0 + mh$ e $x_{m+1} = b$ como exibido na Fig. 11. Como conhecemos os valores de ψ_n nos extremos do domínio, determinados pelas condições de contorno $\psi(x_0) = \psi(a) = \alpha$ e $\psi(x_{m+1}) = \psi(b) = \beta$, teremos como incógnitas $\psi_n(x_1), \psi_n(x_2), \dots, \psi_n(x_m)$ e assim, para cada $i = 1, 2, \dots, m$ usaremos a aproximação obtida na Eq. 74:

$$\psi''(x_i) \approx \frac{\psi(x_{i-1}) - 2\psi(x_i) + \psi(x_{i+1}))}{h^2}.$$

Para cada i a Eq. 76 discretizada fica:

$$-\frac{1}{2} \frac{\psi_n(x_{i-1}) - 2\psi_n(x_i) + \psi_n(x_{i+1}))}{h^2} + V(x_i)\psi_n(x_i) = E_n\psi_n(x_i), \quad (79)$$

ou seja

$$-\frac{1}{2h^2}\psi_n(x_{i-1}) + \left[\frac{1}{h^2} + V(x_i) \right] \psi_n(x_i) - \frac{1}{2h^2}\psi_n(x_{i+1}) = E_n\psi_n(x_i). \quad (80)$$

Agora, fazendo $i = 1$ na Eq. 80 obtemos

$$-\frac{1}{2h^2}\psi_n(x_0) + \left[\frac{1}{h^2} + V(x_1) \right] \psi_n(x_1) - \frac{1}{2h^2}\psi_n(x_2) = E_n\psi_n(x_1).$$

Analogamente para $i = m$, a Eq. 80 torna-se

$$-\frac{1}{2h^2}\psi_n(x_{m-1}) + \left[\frac{1}{h^2} + V(x_m) \right] \psi_n(x_m) - \frac{1}{2h^2}\psi_n(x_{m+1}) = E_n\psi_n(x_m).$$

O resultado é um sistema linear algébrico de m equações e m incógnitas com solução única [72]:

$$\begin{cases} -\frac{1}{2h^2}\alpha + \left[\frac{1}{h^2} + V(x_1) \right] \psi_n(x_1) - \frac{1}{2h^2}\psi_n(x_2) = E_n\psi_n(x_1) \\ -\frac{1}{2h^2}\psi_n(x_{i-1}) + \left[\frac{1}{h^2} + V(x_i) \right] \psi_n(x_i) - \frac{1}{2h^2}\psi_n(x_{i+1}) = E_n\psi_n(x_i) & 2 \leq i \leq (m-1) \\ -\frac{1}{2h^2}\psi_n(x_{m-1}) + \left[\frac{1}{h^2} + V(x_m) \right] \psi_n(x_m) - \frac{1}{2h^2}\beta = E_n\psi_n(x_m) \end{cases} \quad (81)$$

Este sistema pode ser convenientemente expresso na forma matricial, se escrevermos a função $\psi_n(\mathbf{x})$ como um vetor:

$$\psi_n(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} \psi_n(x_1) \\ \psi_n(x_2) \\ \vdots \\ \psi_n(x_i) \\ \vdots \\ \psi_n(x_{m-1}) \\ \psi_n(x_m) \end{pmatrix}. \quad (82)$$

Com isso, o sistema 81 assume a seguinte forma:

$$\begin{pmatrix} F(x_1) & -\frac{1}{2h^2} & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ -\frac{1}{2h^2} & F(x_2) & -\frac{1}{2h^2} & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \cdots & -\frac{1}{2h^2} & F(x_i) & -\frac{1}{2h^2} & \cdots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & 0 & -\frac{1}{2h^2} & F(x_{m-1}) & -\frac{1}{2h^2} \\ 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{2h^2} & F(x_m) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_n(x_1) \\ \psi_n(x_2) \\ \vdots \\ \psi_n(x_i) \\ \vdots \\ \psi_n(x_{m-1}) \\ \psi_n(x_m) \end{pmatrix} = E_n \begin{pmatrix} \psi_n(x_1) \\ \psi_n(x_2) \\ \vdots \\ \psi_n(x_i) \\ \vdots \\ \psi_n(x_{m-1}) \\ \psi_n(x_m) \end{pmatrix} \quad (83)$$

onde $F(x) = \frac{1}{h^2} + V(x)$.

Observa-se que a matriz tridiagonal da Eq. 83 $m \times m$ é simétrica e real; isto significa que podemos diagonalizá-la através da equação

$$\det(\hat{H} - E_n I) = 0. \quad (84)$$

Assim, obtemos o conjunto de autovalores resolvendo o determinate:

$$\begin{vmatrix}
F(x_1) - E_n & -\frac{1}{2h^2} & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\
-\frac{1}{2h^2} & F(x_2) - E_n & -\frac{1}{2h^2} & 0 & 0 & \dots & 0 \\
0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 & \dots & 0 \\
0 & \dots & -\frac{1}{2h^2} & F(x_i) - E_n & -\frac{1}{2h^2} & \dots & 0 \\
0 & \dots & 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\
0 & \dots & 0 & 0 & -\frac{1}{2h^2} & F(x_{m-1}) - E_n & -\frac{1}{2h^2} \\
0 & \dots & 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{2h^2} & F(x_m) - E_n
\end{vmatrix} = 0 \quad (85)$$

Para se obter as autofunções, basta substituir cada autovalor nas Eq. 81 e resolver o sistema linear correspondente.

É importante ressaltar que obter a solução da Eq. 85 utilizando os pacotes computacionais atuais tornou-se uma tarefa relativamente simples pois, diferente das linguagens compiladas como C++, *fortran*,...que são mais complicadas, as linguagens de *script* como Matlab, Scilab, Octave, R, ... já vem com uma coleção muito rica de bibliotecas com numerosos algoritmos em um ambiente de desenvolvimento agradável.

Exemplo: poço infinito unidimensional e oscilador harmônico unidimensional

Nesta seção, aplicaremos o MDF à Equação de Schödinger independente do tempo para os potenciais do poço infinito unidimensional

$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{se } 0 < x < L \\ \infty, & \text{caso contrário} \end{cases} \quad (86)$$

e do oscilador harmônico unidimensional

$$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2x^2 \quad (87)$$

com o intuito de avaliar o método aplicando-o a duas equações que possuem soluções analíticas exatas.

A solução dessa equação é bem conhecida na literatura. O espectro de energia é discreto:

$$E_n = \frac{\hbar^2\pi^2n^2}{2mL^2}, n = 1, 2, 3, \dots \quad (88)$$

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (89)$$

e a função de onda normalizada do estado fundamental de ambos os potenciais são :

$$\psi_1(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi}{L}x\right) \quad (90)$$

$$\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right). \quad (91)$$

Para resolvermos este problema utilizando o MDF, vamos propor como domínio o intervalo $[-4, 5; 4, 5]$, utilizando um passo de tamanho $h = 0,02$, sujeito às condições de contorno de Dirichlet $\psi(\pm 4, 5) = 0$. Também adotaremos $m = \hbar = \omega = 1.0$. O algoritmo foi implementado no software MatLab e os resultados numéricos obtidos se apresentam nas figuras abaixo.

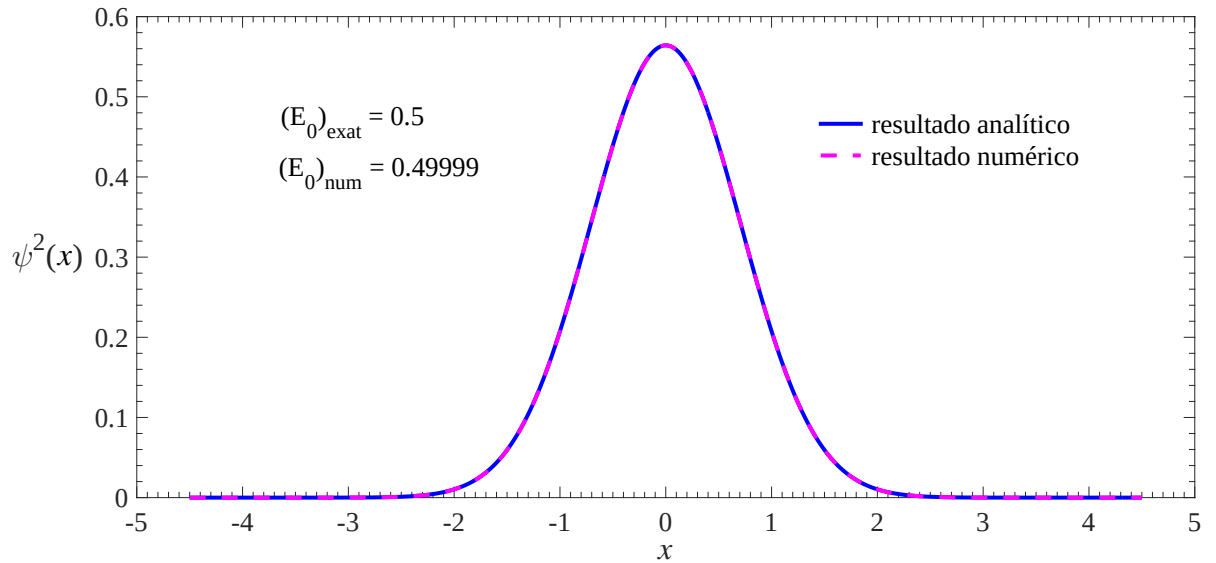


Figura 12: Estado fundamental do oscilador harmônico obtido analiticamente e numericamente. Nesta figura o gráfico foi plotado considerando $m = \hbar = \omega = 1.0$.

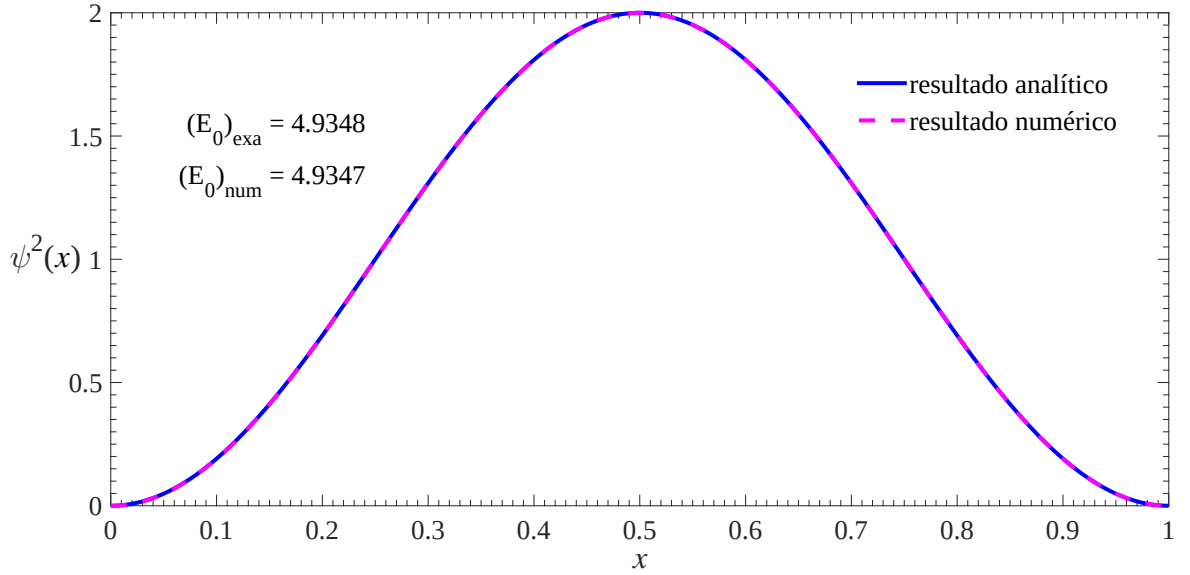


Figura 13: Estado fundamental do poço infinito obtido analiticamente e numericamente. Nesta figura o gráfico foi plotado considerando $m = \hbar = \omega = 1.0$.

3.2.3 Método de Crank-Nicolson

O Método de Crank-Nicolson (MCN), desenvolvido por John Crank e Phyllis Nicolson na metade do século XX, é um método das diferenças finitas usado para resolver numericamente equações que modelam problemas de difusão (equação do calor e equações diferenciais parciais similares). O MCN é uma combinação dos métodos explícito e implícito utilizando a fórmula de diferença atrasada para a derivada temporal e uma combinação ponderada de diferenças avançadas e diferenças atrasadas para o restante da equação e tem erro $\mathcal{O}(h^2) + \mathcal{O}(k^2)$.

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{\Psi_{j,k+1} - \Psi_{j,k}}{h} + \mathcal{O}(h^2) \quad (92)$$

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = \frac{1}{2} \left[\frac{\Psi_{j-1,k+1} - 2\Psi_{j,k+1} + \Psi_{j+1,k+1}}{h^2} + \frac{\Psi_{j-1,k} - 2\Psi_{j,k} + \Psi_{j+1,k}}{h^2} \right] + \mathcal{O}(h^2) \quad (93)$$

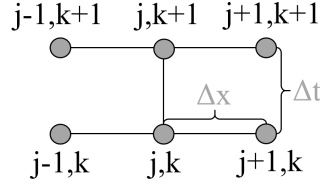


Figura 14: Esquema da malha (discretização do domínio espacial e temporal) para aplicação das fórmulas relativas às aproximações de diferenças finitas utilizada no Método de Crank-Nicolson. O ponto rotulado j,k corresponde à $(x,t) = (x_j, t_k)$. As quantidades Δx e Δt são os passos espacial e temporal, respectivamente.

Exemplo: partícula livre

A equação de Schödinger que descreve um partícula livre de massa m

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x, t) \quad (94)$$

é semelhante à equação da difusão $\partial_t u(x, t) = D \partial_{xx} u(x, t)$ sendo D o coeficiente de difusão. Assim, reescrevendo a Eq. 94 como segue abaixo

$$\frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = \frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x, t) \quad (95)$$

e aplicando a discretização de Crank-Nicolson na Eq. 95 obtemos

$$\frac{\Psi_j^{k+1} - \Psi_j^k}{\Delta t} = \frac{i\hbar}{4m} \left[\frac{\Psi_{j+1}^{k+1} - 2\Psi_j^{k+1} + \Psi_{j-1}^{k+1}}{\Delta x^2} + \frac{\Psi_{j+1}^k - 2\Psi_j^k + \Psi_{j-1}^k}{\Delta x^2} \right]. \quad (96)$$

onde $\Psi_j^k \equiv \Psi(x_j, t_k)$. Após algumas manipulações algébricas podemos reescrever a Eq. 96 tomando $\sigma = \frac{i\hbar \Delta t}{m \Delta x^2}$ da seguinte maneira

$$-\sigma \Psi_{j+1}^{k+1} + (4 + 2\sigma) \Psi_j^{k+1} - \sigma \Psi_{j-1}^{k+1} = \sigma \Psi_{j+1}^k + (4 - 2\sigma) \Psi_j^k + \sigma \Psi_{j-1}^k. \quad (97)$$

A discretização relativa à Eq. 97 juntamente com as condições iniciais e condições de contorno, fornece-nos, para cada instante de tempo $k+1$, o valor de Ψ , que pode ser escrito na forma matricial

$$\mathbf{A} \Psi^{k+1} = \mathbf{B} \Psi^k, \quad (98)$$

onde as matrizes

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 4+2\sigma & -\sigma & \cdots & \cdots & 0 \\ -\sigma & 4+2\sigma & -\sigma & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & \cdots & -\sigma & 4+2\sigma & -\sigma \\ 0 & \cdots & \cdots & -\sigma & 4+2\sigma \end{pmatrix} \quad (99)$$

$$\mathbf{B} = \begin{pmatrix} 4-2\sigma & \sigma & \cdots & \cdots & 0 \\ \sigma & 4-2\sigma & \sigma & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & \cdots & -\sigma & 4-2\sigma & \sigma \\ 0 & \cdots & \cdots & \sigma & 4-2\sigma \end{pmatrix} \quad (100)$$

são matrizes tridiagonais e os vetores

$$\Psi^{k+1} = \begin{pmatrix} \Psi_1^{k+1} \\ \vdots \\ \Psi_j^{k+1} \\ \vdots \\ \Psi_N^{k+1} \end{pmatrix} \quad (101)$$

$$\Psi^k = \begin{pmatrix} \Psi_1^k \\ \vdots \\ \Psi_j^k \\ \vdots \\ \Psi_N^k \end{pmatrix} \quad (102)$$

Para equações de difusão (e muitas outras), pode-se provar que o método de Crank-Nicolson é incondicionalmente estável [73], isso significa que não existem restrições a escolha do passo espacial Δx e do passo temporal Δt . Contudo, as soluções aproximadas podem ainda conter oscilações significativas caso a razão entre o passo de tempo e o quadrado do passo de espaço for grande.

Enfim, como condição inicial para a ES que descreve a partícula livre, utilizaremos a gaussiana normalizada e as condições de contorno de Dirichlet para representar $\lim_{x \rightarrow \pm\infty} \Psi(x, t) = 0$. Assim

$$\begin{cases} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x, t) \\ \Psi(x, 0) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2\right) \\ \lim_{x \rightarrow \pm\infty} \Psi(x, t) = 0 \end{cases}$$

↓ discretização

$$\begin{cases} \frac{\Psi_j^{k+1} - \Psi_j^k}{\Delta t} = \frac{i\hbar}{4m} \left[\frac{\Psi_{j+1}^{k+1} - 2\Psi_j^{k+1} + \Psi_{j-1}^{k+1}}{\Delta x^2} + \frac{\Psi_{j+1}^k - 2\Psi_j^k + \Psi_{j-1}^k}{\Delta x^2} \right] \\ \Psi_j^0 = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar} x_j^2\right) \\ \Psi_0^k = \Psi_{m+1}^k = 0 \end{cases}$$

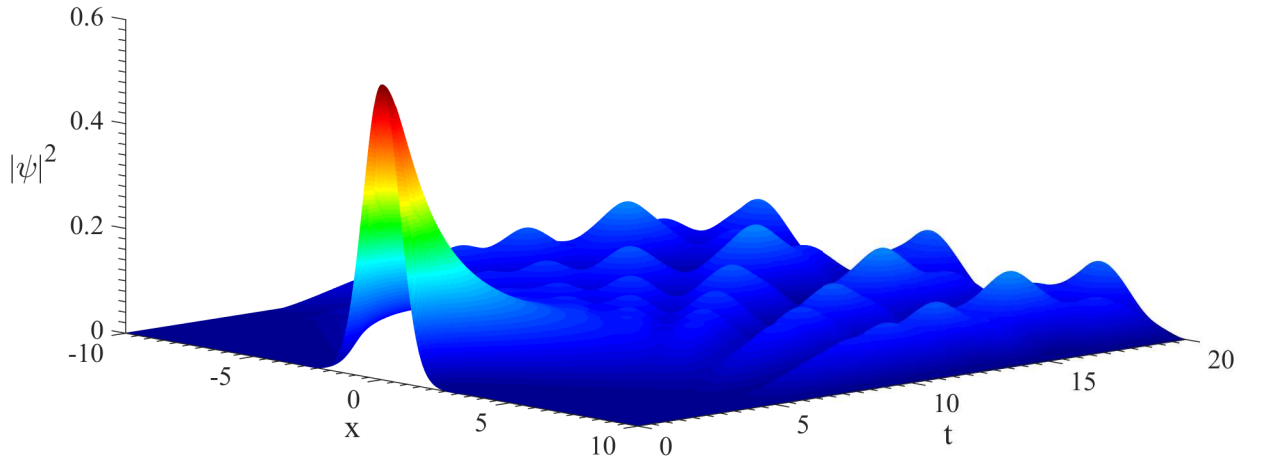


Figura 15: Pacote de onda gaussiano. Observa-se que a medida que o tempo aumenta $|\psi|^2$ se achata e amplia. Isso ocorre devido à dispersão do pacote de onda gaussiano, sendo este formado pela combinação linear de infinitas ondas planas com diferentes momentos, $p = \hbar k$, com $k \equiv \pm\sqrt{2mE}/\hbar$. O resultado acima está de acordo com a solução analítica [21], porém, por conveniência, adotamos $m = \omega = \hbar = 1$. Parâmetros: domínio espacial: $-10 \leq x \leq 10$, $\Delta x = 0.02$; domínio temporal: $0 \leq t \leq 20$, $\Delta t = 0.02$.

3.2.4 Método Split-Step

O Método Split-Step é um método numérico que possibilita a solução de uma equação diferencial parcial não linear. Pode-se dizer que este método numérico complementa o método de Crank-Nicolson, permitindo a solução de uma equação diferencial parcial de segunda ordem sujeita a um potencial. Além disso, partindo do mesmo princípio, podemos tratar um termo não linear como um “potencial” e, utilizando o mesmo procedimento, determinar soluções de equações diferenciais parciais não lineares como a Equação de Schrödinger não linear (ESNL), EGP, equação KdV, etc.

A ES 1D é dada por

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = \hat{H} \Psi(x, t). \quad (103)$$

O Hamiltoniano $\hat{H}$ pode ser expresso por $\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}$, sendo $\hat{T} \equiv -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$ o operador energia cinética e $\hat{V} \equiv V(x)$ o operador energia potencial.

A Eq. 103 pode ser resolvida de forma exata integrando no tempo t_0 até t

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = (\hat{T} + \hat{V}) \Psi(x, t) \Rightarrow \int_{t_0}^t \frac{1}{\Psi} d\Psi = -\frac{i}{\hbar} (\hat{T} + \hat{V}) \int_{t_0}^t dt \quad (104)$$

obtendo, assim, a solução

$$\Psi(x, t) = e^{-i(\hat{T} + \hat{V}) \frac{\Delta t}{\hbar}} \Psi(x, t_0). \quad (105)$$

sendo $\Delta t = t - t_0$.

Pelo fato de não conhecermos o operador $e^{-i(\hat{T} + \hat{V}) \frac{\Delta t}{\hbar}}$, é preciso separá-los em um produto dos operadores $e^{-i\hat{T}\Delta t/\hbar} e^{-i\hat{V}\Delta t/\hbar}$. Entretanto, devido ao fato dos operadores $\hat{T}$ e $\hat{V}$ não comutarem, utilizaremos uma aproximação baseada na demonstração da Fórmula de Campbell-Baker-Hausdorff, sendo esta dada por

$$e^{\hat{A}} e^{\hat{B}} = e^{\hat{A} + \hat{B} + \frac{1}{2}[\hat{A}, \hat{B}] + \frac{1}{12}([\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] + [\hat{B}, [\hat{B}, \hat{A}]] + \dots)}. \quad (106)$$

A partir das expansões abaixo

$$\begin{aligned} e^{\lambda(\hat{A} + \hat{B})} &= 1 + \lambda(\hat{A} + \hat{B}) + \frac{\lambda^2}{2!}(\hat{A} + \hat{B})^2 + \dots \\ &= 1 + \lambda(\hat{A} + \hat{B}) + \frac{\lambda^2}{2!}(\hat{A}^2 + \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A} + \hat{B}^2) + \dots \end{aligned} \quad (107)$$

$$\begin{aligned}
e^{\lambda\hat{A}}e^{\lambda\hat{B}} &= \left[1 + \lambda\hat{A} + \frac{\lambda^2}{2!}\hat{A}^2 + \dots\right] \left[1 + \lambda\hat{B} + \frac{\lambda^2}{2!}\hat{B}^2 + \dots\right] \\
&= 1 + \lambda(\hat{A} + \hat{B}) + \frac{\lambda^2}{2!}(\hat{A}^2 + 2\hat{A}\hat{B} + \hat{B}^2) + \dots
\end{aligned} \tag{108}$$

podemos subtrair a Eq. 107 da Eq. 108 e obter

$$e^{\lambda(\hat{A}+\hat{B})} - e^{\lambda\hat{A}}e^{\lambda\hat{B}} = -\frac{\lambda^2}{2!}\hat{A}\hat{B} + \frac{\lambda^2}{2!}\hat{B}\hat{A} + \mathcal{O}(\lambda^3). \tag{109}$$

Reescrevendo a Eq. 109 é possível verificar que

$$e^{\lambda(\hat{A}+\hat{B})} = e^{\lambda\hat{A}}e^{\lambda\hat{B}} - \frac{\lambda^2}{2!}[\hat{A}, \hat{B}] + \mathcal{O}(\lambda^3), \tag{110}$$

que, caso os operadores $\hat{A}$ e $\hat{B}$ não comutem, possui um erro da ordem de λ^2 . Com o intuito de melhorar essa aproximação podemos reescrever a exponencial da seguinte forma:

$$e^{\lambda\frac{\hat{A}}{2}}e^{\lambda\hat{B}}e^{\lambda\frac{\hat{A}}{2}} = \left[1 + \lambda\frac{\hat{A}}{2} + \frac{\lambda^2}{2!}\left(\frac{\hat{A}}{2}\right)^2 + \dots\right] \left[1 + \lambda\hat{B} + \frac{\lambda^2}{2!}\hat{B}^2 + \dots\right] \left[1 + \lambda\frac{\hat{A}}{2} + \frac{\lambda^2}{2!}\left(\frac{\hat{A}}{2}\right)^2 + \dots\right]. \tag{111}$$

Comparando as Eqs. 107 e 111 constatamos que esta apresenta um erro da ordem de λ^3 na aproximação. Tomando $\hat{A} = \hat{V}$, $\hat{B} = \hat{T}$ e $\lambda = -i\Delta t/\hbar$ obtemos:

$$e^{-i(\hat{T}+\hat{V})\frac{\Delta t}{\hbar}} = e^{-i\frac{\hat{V}}{2}\frac{\Delta t}{\hbar}}e^{-i\hat{T}\frac{\Delta t}{\hbar}}e^{-i\frac{\hat{V}}{2}\frac{\Delta t}{\hbar}} + \mathcal{O}(\Delta t^3), \tag{112}$$

que nos fornece um erro relativamente pequeno para o “split-step”, da ordem de Δt^3 . Agora a solução da equação de Schrödinger para o potencial $V(x)$

$$\Psi(x, t) = e^{-i\frac{\hat{V}}{2}\frac{\Delta t}{\hbar}}e^{-i\hat{T}\frac{\Delta t}{\hbar}}e^{-i\frac{\hat{V}}{2}\frac{\Delta t}{\hbar}}\Psi(x, t_0) \tag{113}$$

é calculada numericamente em três etapas que serão descritas a seguir, sendo $\Psi(x, t) = \Psi(x, t_0 + \Delta t)$ a solução após uma evolução temporal de um instante de tempo Δt .

Com o intuito de resolver a equação de Gross-Pitaevskii, isto é, uma equação diferencial parcial de segunda ordem não linear (sendo este tipo equação, em geral, de elevado grau de dificuldade para a obtenção de solução analítica), buscamos apresentar nessa dissertação o algoritmo para a obtenção da solução numérica usufruindo do método de Crank-Nicolson Split-Step abordado na seção anterior.

A equação de Gross-Pitaevskii 1D é dada por

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = \hat{H}_{GP} \Psi(x, t). \quad (114)$$

O Hamiltoniano $\hat{H}_{GP}$ pode ser expresso por $\hat{H}_{GP} = \hat{T} + \hat{V}$, sendo $\hat{T} \equiv -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$ o operador energia cinética e $\hat{V} \equiv V(x) + V_{NL}$ o operador energia potencial. O termo V_{NL} representa o termo não linear da EGP que, como foi comentado acima, será tratado como um potencial.

A solução da Eq. 114

$$\Psi(x, t) = e^{-i\frac{\hat{V}}{2} \frac{\Delta t}{\hbar}} e^{-i\hat{T} \frac{\Delta t}{\hbar}} e^{-i\frac{\hat{V}}{2} \frac{\Delta t}{\hbar}} \Psi(x, t_0) \quad (115)$$

é calculada numericamente em três etapas [74]:

Primeiramente, obtém-se $\Psi^* = e^{-i\frac{\hat{V}}{2} \frac{\Delta t}{\hbar}} \Psi(x, t_0)$ aplicando o operador $e^{-i\frac{\hat{V}}{2} \frac{\Delta t}{\hbar}}$. Como conhecemos o valor do potencial $V(x)$ em qualquer ponto do espaço, aplicar este operador nada mais é que simplesmente multiplicar o valor da função $\Psi(x, t_0)$ em cada ponto do espaço por $e^{-i\frac{\hat{V}}{2} \frac{\Delta t}{\hbar}}$, que possui um valor específico para cada ponto do espaço. Na segunda etapa, resolve-se $\Psi^{**} = e^{-i\hat{T} \frac{\Delta t}{\hbar}} \Psi^*$. Aplicar $e^{-i\hat{T} \frac{\Delta t}{\hbar}}$ à função Ψ^* é o mesmo que evoluir a função Ψ^* por um intervalo de Δt . Utilizamos aqui, para a evolução temporal, o método de Crank-Nicolson. Enfim, obtemos o resultado final $\Psi(x, t)$ por outra simples multiplicação do operador $e^{-i\frac{\hat{V}}{2} \frac{\Delta t}{\hbar}}$ pela função Ψ^{**} . Este procedimento é válido pelo fato de que $\Psi(x, t)$ varia lentamente para este caso.

O método é chamado de “Split-Step” pois o potencial é resolvido em dois passos separados, antes e depois de se aplicar o operador correspondente ao método de Crank-Nicolson (Método de Crank-Nicolson Split-Step).

Pode-se dizer que no processo de implementação deste método, primeiramente separamos a EGP em uma parte linear e uma parte não linear:

$$\begin{array}{ccc}
 & & i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = \hat{T} \Psi(x, t) \\
 & \nearrow & \\
 i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = (\hat{T} + \hat{V}) \Psi(x, t) & & \\
 & \searrow & \\
 & & i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = \hat{V} \Psi(x, t)
 \end{array} \quad (116)$$

A aplicação do operador $e^{-i\hat{T} \frac{\Delta t}{\hbar}}$ para evolução temporal é obtida ao resolver o subproblema linear

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x, t) \quad (117)$$

através do método de Crank-Nicolson pois a Eq. 117 é a equação da difusão e a aplicação do operador $e^{-i\frac{\hat{V}}{2}\frac{\Delta t}{\hbar}}$ é obtida ao resolver o subproblema não linear

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t) = V(x)\Psi(x,t) + V_{NL}\Psi(x,t) \quad (118)$$

de forma exata, isto é, integrando a Eq. 118 como foi feito na Eq. 104.

Implementação do algoritmo

O algoritmo [75, 74, 76, 77] para a aplicação do método está na sequência:

$$\begin{cases} i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t) = \hat{H}_{GP}\Psi(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x,t) + V(x)\Psi(x,t) + V_{NL}\Psi(x,t) \\ \Psi(x,0) = \psi^0(x) \\ \Psi(a,t) = \Psi(b,t) = 0 \end{cases} \quad (119)$$

Se escolhermos o passo espacial $\Delta x > 0$ com $\Delta x = (b - a)/M$ para M inteiro positivo e o passo temporal $\Delta t > 0$, os pontos da malha passam a ser

$$\begin{cases} x_j := a + j\Delta x & j = 1, \dots, M \\ t_k := k\Delta t & k = 0, 1, 2, \dots \end{cases} \quad (120)$$

Utilizaremos a notação simplificada Ψ_j^k para denotar $\Psi(x_j, t_k)$.

$$\Psi_j^* = e^{-i(V_j + V_{NL_j})\frac{k}{2\hbar}}\Psi_j^k, \quad j = 0, \dots, M + 1$$

$$i\hbar\frac{\Psi_j^{**} - \Psi_j^*}{\Delta t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{\Psi_{j+1}^{**} - 2\Psi_j^{**} + \Psi_{j-1}^{**}}{2h^2} + \frac{\Psi_{j+1}^* - 2\Psi_j^* + \Psi_{j-1}^*}{2h^2}\right], \quad j = 1, \dots, M$$

$$\Psi_0^{**} = \Psi_{M+1}^{**} = 0$$

$$\Psi_j^{k+1} = e^{-i(V_j + V_{NL_j})\frac{k}{2\hbar}}\Psi_j^{**}, \quad j = 0, \dots, M + 1$$

Exemplo: oscilador harmônico

Um bom teste para aplicação do método Split-Step é propor que uma função de onda de uma partícula se inicie em uma combinação linear de apenas dois estados estacionários. Assim, para efeito de verificação e teste do método, aplicamos este método em sistema sujeito ao potencial do oscilador harmônico ($m = \omega = \hbar = 1$) e a condição inicial como uma combinação linear do estado fundamental $\psi_0(x)$ com o primeiro estado excitado $\psi_1(x)$ do sistema.

$$\begin{cases} i \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x, t) + \frac{1}{2} x^2 \Psi(x, t). \\ \Psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2}} \psi_0(x) + \frac{1}{\sqrt{2}} \psi_1(x) \\ \Psi(a, t) = \Psi(b, t) = 0 \end{cases} \quad (121)$$

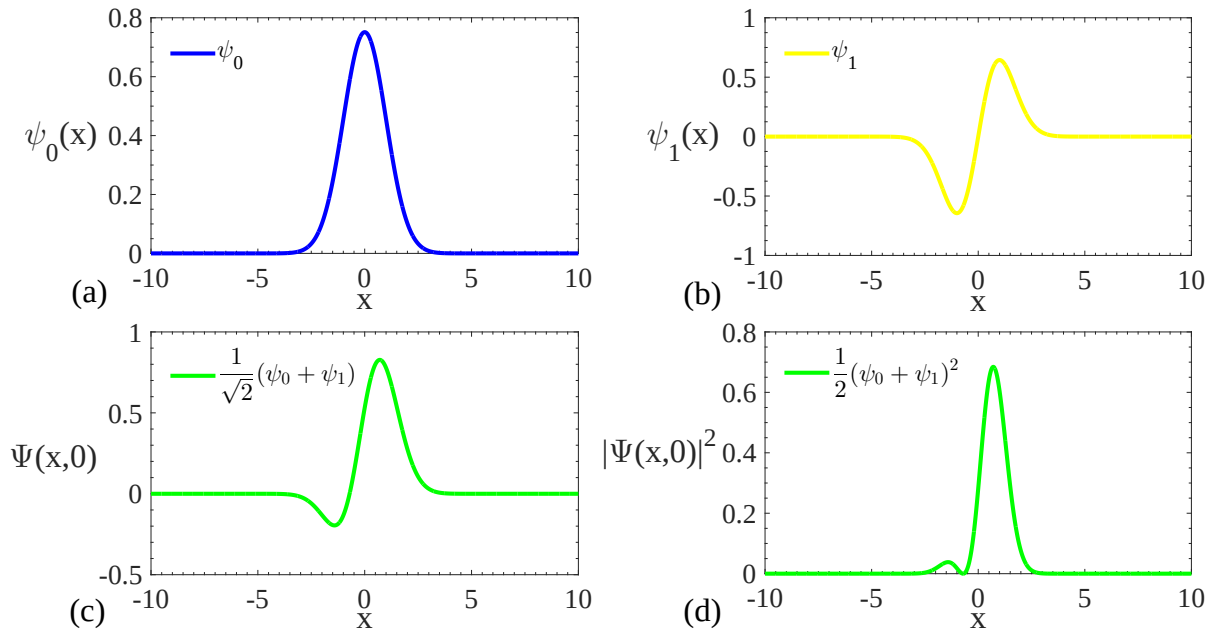


Figura 16: (a) é estado fundamental $\psi_0(x) = \pi^{-1/4}e^{-x^2/2}$, (b) é o primeiro estado excitado $\psi_1(x) = \sqrt{2}\pi^{-1/4}xe^{-x^2/2}$, (c) é a combinação linear de $\psi_0(x)$ com $\psi_1(x)$ dada por $\pi^{-1/4} \left[\frac{1}{\sqrt{2}} + x \right] e^{-x^2/2}$ e (d) é a densidade de probabilidade.

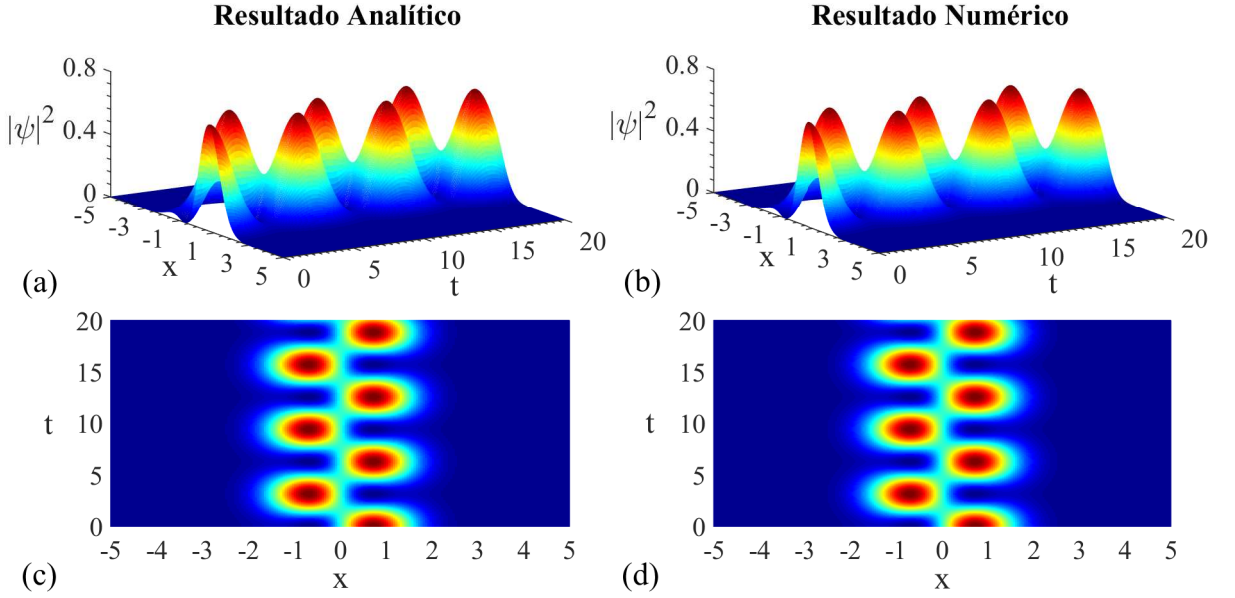


Figura 17: Comparação entre solução analítica (a,c) e solução numérica (b,d). Parâmetros: domínio espacial: $-10 \leq x \leq 10$, $\Delta x = 0.02$; domínio temporal: $0 \leq t \leq 20$, $\Delta t = 0.02$.

3.2.5 Propagação de tempo imaginário

Para o estado fundamental estacionário, a função de onda é essencialmente real e o método da *propagação do tempo imaginário* (método de relaxação) que trata de variáveis reais parece ser conveniente [76]. A ideia básica da propagação do tempo imaginário é substituir a variável temporal t da EGP

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = \hat{H}_{GP} \Psi(x, t) \quad (122)$$

pela variável temporal imaginária $-it$:

$$t \rightarrow -it \quad (123)$$

A evolução temporal sobre a Eq. 122 pode ser escrita em termos dos autoestados $\psi_n(x)$, que são definidos por $\hat{H}_{GP} \psi_n(x) = \mu_n \psi_n(x)$ com autovalores μ_n :

$$\Psi(x, t) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \psi_n(x) e^{-i\mu_n t/\hbar}, \quad (124)$$

onde é importante perceber que cada próximo autoestado tem uma energia maior que o autoestado anterior ($E_{n+1} > E_n$) e os coeficientes c_n são definidos pela expansão da condição inicial

$$\Psi(x, 0) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \psi_n(x). \quad (125)$$

A propagação da Eq. 122 no tempo imaginário altera a evolução temporal dada pela Eq. 124 para

$$\Psi(x, -it) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \psi_n(x) e^{-\mu_n t/\hbar}, \quad (126)$$

Assim, todas as autofunções irão decair exponencialmente com o tempo. No entanto, todos os estados excitados com μ_n maior irão decair exponencialmente mais rápido em comparação com o estado fundamental com o menor valor de μ_n . Consequentemente, após algum tempo, apenas o estado fundamental sobrevive. Ou seja, este procedimento irá convergir à solução do estado fundamental de mais baixa energia $\psi_0(x)$ [41].

$$\Psi(x, t) \xrightarrow{-it} \psi_0(x) \quad (127)$$

Isto pode ser facilmente observado colocando o termo $\exp(-\mu_0 t/\hbar)$ da eq. 126 em evidência:

$$\Psi(x, -it) = e^{-\mu_0 t/\hbar} [c_0 \psi_0(x) + c_1 \psi_1(x) e^{-(\mu_1 - \mu_0)t/\hbar} + c_2 \psi_2(x) e^{-(\mu_2 - \mu_0)t/\hbar} + \dots]. \quad (128)$$

Entretanto, como o termo $\exp(-\mu_0 t/\hbar)$ também está tendendo a zero com $t \rightarrow \infty$ temos que limitar o número de simulações no tempo imaginário antes de perdermos o condensado também.

A propagação em tempo real do método SSCN preserva a normalização da função de onda, enquanto a propagação do tempo imaginário do método SSCN não preserva a normalização. Este problema pode ser contornado restaurando a normalização da função de onda após cada operação de propagação de Crank-Nicolson. Uma vez feito isso, o método de propagação do tempo imaginário para problemas estacionários no estado fundamental produz resultados muito precisos a baixo custo computacional.

Implementação do algoritmo

O algoritmo [75, 74, 76, 77] para a aplicação do método está na sequência:

$$\left\{ \begin{array}{l} \hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = \hat{H}_{GP} \Psi(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x, t) + V(x) \Psi(x, t) + V_{NL} \Psi(x, t). \\ \Psi(x, 0) = \psi^0(x) \\ \Psi(a, t) = \Psi(b, t) = 0 \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} a \leq x \leq b \\ \\ t > 0 \end{array} \quad (129)$$

Se escolhermos o passo espacial $\Delta x > 0$ com $\Delta x = (b - a)/M$ para M inteiro positivo e o passo temporal $\Delta t > 0$, os pontos da malha passam a ser

$$\left\{ \begin{array}{l} x_j := a + j\Delta x \quad j = 1, \dots, N \\ t_k := k\Delta t \quad k = 0, 1, 2, \dots \end{array} \right. \quad (130)$$

Utilizaremos a notação simplificada Ψ_j^k para denotar $\Psi(x_j, t_k)$.

$$\Psi_j^* = e^{-(V_j + V_{NL_j}) \frac{k}{2\hbar}} \Psi_j^n, \quad j = 0, \dots, N + 1$$

$$\hbar \frac{\Psi_j^{**} - \Psi_j^*}{\Delta t} = \frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{\Psi_{j+1}^{**} - 2\Psi_j^{**} + \Psi_{j-1}^{**}}{2h^2} + \frac{\Psi_{j+1}^* - 2\Psi_j^* + \Psi_{j-1}^*}{2h^2} \right], \quad j = 1, \dots, N$$

$$\Psi_0^{**} = \Psi_{N+1}^{**} = 0$$

$$\int_a^b \Psi_j^{**} dx = M \Rightarrow \tilde{\Psi}_j^{**} = \frac{1}{\sqrt{M}} \Psi_j^{**}$$

$$\Psi_j^{n+1} = e^{-(V_j + V_{NL_j}) \frac{k}{2\hbar}} \tilde{\Psi}_j^{**}, \quad j = 0, \dots, N + 1$$

4 Resultados

Apresentamos nesta seção os resultados variacionais e numéricos obtidos da EGP-1D adimensional ($\hbar = m = 1$) para o caso linear e não linear, ou seja, $g = 0$ e $g \neq 0$, respectivamente. O potencial utilizado foi $V(x) = V_0 \cos(2x)$ [47, 78, 79], periódico, referente à rede óptica. A amplitude, V_0 , é adimensional sendo que $V_0 = E_0/E_{rec}$, onde $E_{rec} = (\pi\hbar^2/md^2)$ é a energia de recuo da rede, E_0 é a profundidade do potencial periódico e d é o período da rede em nm [80].

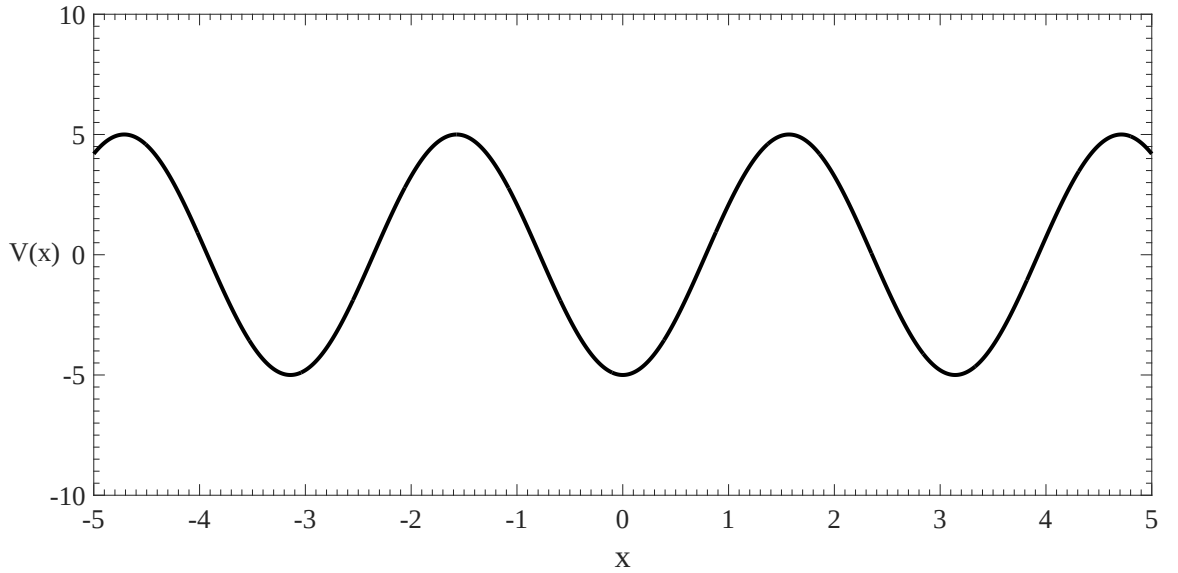


Figura 18: Potencial periódico com amplitude $V_0 = -5,0$ [47, 78, 79] e período π . A amplitude da rede óptica é considerada negativa para fixar um mínimo local do potencial no ponto $x = 0$, onde o centro do sóliton será colocado.

4.1 EGP linear

Para alcançar a linearidade em um CBE, é necessário que a força de interação seja próxima de zero ($g \rightarrow 0$) ou que a densidade atômica ρ seja baixa o suficiente para que o termo não linear na Eq. 1 possa ser considerado insignificante. Sendo assim, a dinâmica das ondas de matéria no caso de um gás de bósons ultrafrios não interagentes submetidos a uma rede óptica passa a ser governada pela versão linearizada da EGP

$$i \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x, t) + V_0 \cos(2x) \Psi(x, t). \quad (131)$$

De acordo com a teoria de Bloch-Floquet, existem soluções estacionárias para a Eq. 131, $\Psi(x, t)$, na seguinte forma

$$\Psi(x, t) = \phi_{k,n}(x) e^{-i\mu t} = u_{k,n}(x) e^{ikx} e^{-i\mu t}$$

onde $u_{k,n}(x)$ é uma função complexa periódica com a propriedade especial que $u_{k,n}(x + Lp) = u_{k,n}(x)$ onde L é um inteiro e p é o período. Se k é real (o fato de k ser real ou não dependerá das condições de contorno), então $\Psi(x, t)$ existe como onda de Bloch.

Se k é real, então $\Psi(x, t)$ existe como uma onda de amplitude infinitamente prolongada, conhecida como onda de Bloch. As regiões espectrais onde existem ondas de Bloch são conhecidas como “bandas” (*bands*). Se $Im(k) \neq 0$ então as ondas Bloch não podem existir e estas regiões espectrais são conhecidas como “lacunas” (*gaps*). Para CBEs em redes ópticas, as ondas de matéria lineares propagam-se apenas dentro das bandas [53].

Reescrevendo a Eq. 131 como segue abaixo

$$\psi''(x) + [2\mu - 2V_0 \cos(2x)] \psi(x) = 0, \quad (132)$$

constata-se que a mesma é a Equação de Mathieu que foi descrita na Sec. 2.8 onde $\alpha = 2\mu$ e $\beta = -2V_0$. Utilizamos o algoritmo disponibilizado pela Ref. [81] adaptado para os parâmetros da Eq. 132 e obtemos o diagrama de estabilidade para nosso problema:

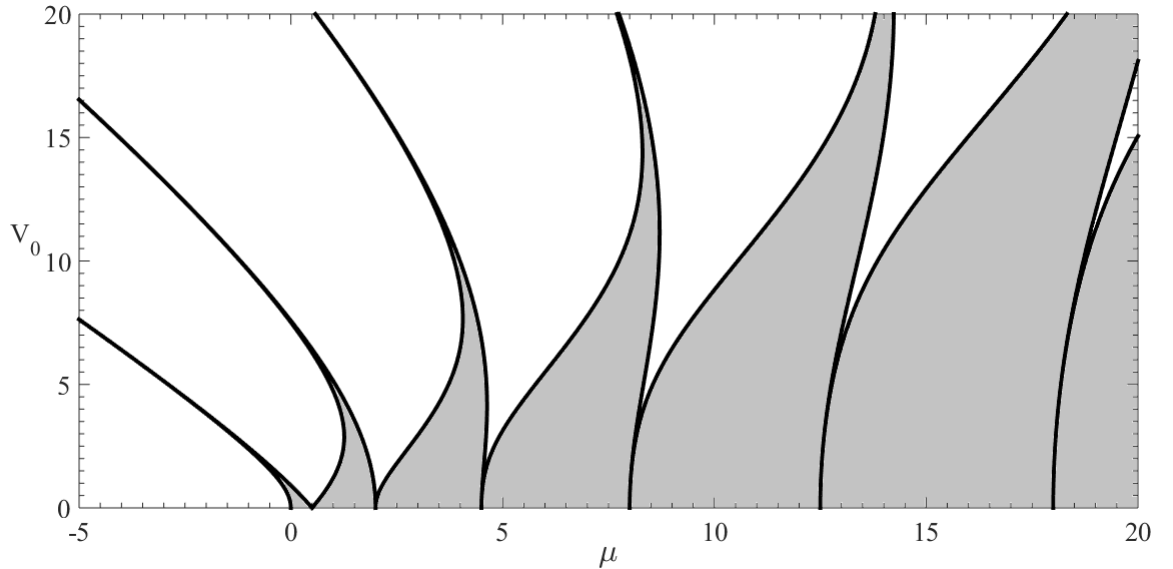


Figura 19: Diagrama de estabilidade da EGP estacionária e linearizada $\psi''(x) + [2\mu - 2V_0 \cos(2x)] \psi(x) = 0$, obtido através do algoritmo disponibilizado em [81]. O gráfico é simétrico em relação ao eixo μ .

Como descrito na Sec. 2.8, as regiões escuras representam estabilidades e as regiões claras representam instabilidade. É muito comum na literatura, principalmente em Física do

Estado Sólido, denominarmos o diagrama da Fig. 19 como espectro banda-lacuna (*band-gap*) [82]. Esses *gaps* representam as energias proibidas; eles são separados por bandas de energias permitidas denominadas por bandas de Bloch [59]. Esse tipo de espectro é contemplado em sistemas quânticos submetidos a potenciais periódicos [21].

Diagrama de estabilidade

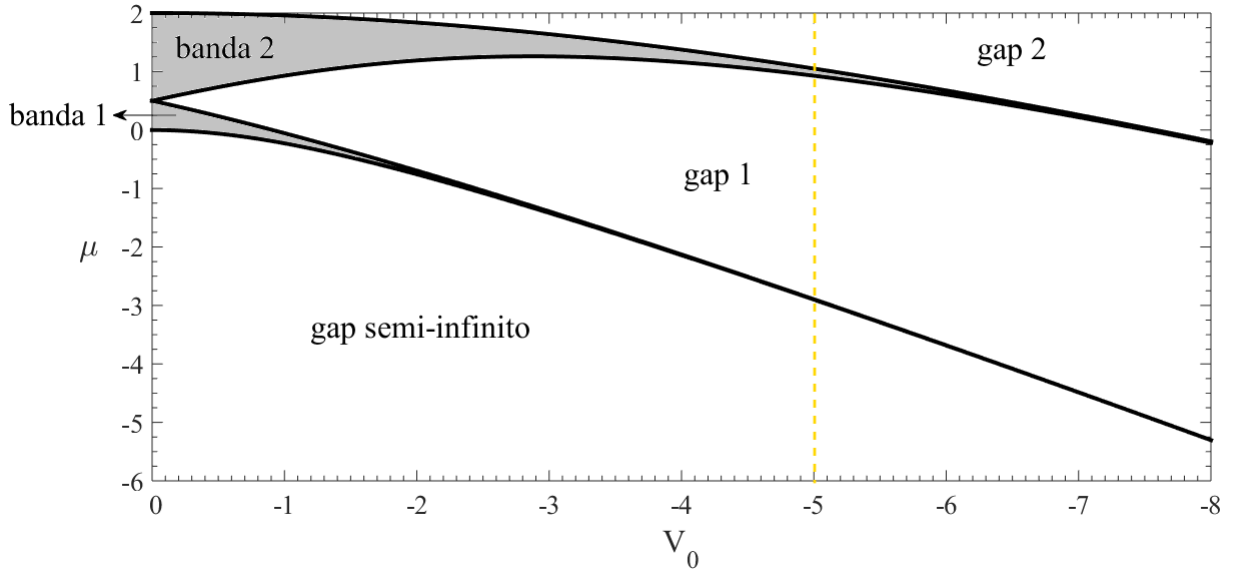


Figura 20: Região de interesse do diagrama de estabilidade de banda-lacuna (*band-gap*) da versão linearizada da equação de Gross-Pitaevskii (Fig. 19). Regiões estreitas (cinza) entre as lacunas representam as bandas de Bloch. Amplitude $V_0 = -5$ [47, 78, 79]

4.2 EGP não linear

Nesta seção apresentaremos os resultados variacionais e numéricos relativos à EGP não linear adimensional ($m = \hbar = 1$)

$$i \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x, t) + V(x) \Psi(x, t) + g |\Psi(x, t)|^2 \Psi(x, t).$$

Consideramos o coeficiente de não linearidade negativo ($g < 0$), que corresponde a interações atrativas entre os átomos no condensado. É importante ressaltar que na ausência do potencial externo ($V(x) = 0$) e tomando $g = -1$ a equação acima possui solução solitônica do tipo sóliton iluminado [83]:

$$\Psi(x, t) = A \operatorname{sech}[A(x - \xi(t))] \exp(i\Theta), \quad \Theta(x, t) = \frac{1}{2}(A^2 - \xi^2)t + vx + \varphi, \quad v = \frac{d\xi}{dt},$$

onde A , ξ , v , φ são a amplitude, posição do centro de massa, velocidade e fase do sóliton, respectivamente. A função teste, isto é, o *ansatz* da aproximação variacional e a condição inicial utilizada nos métodos numéricos, será assumida como sendo desta forma. Isso significa que a forma do sóliton permanece próxima da forma da função secante hiperbólica, embora sua amplitude e largura possam mudar significativamente durante todo o período de evolução temporal [83].

Resultados estacionários

4.2.1 Resultados Variacionais

Aplicamos o Método Variacional apresentado na Sec. 3.1.3 com o intuito de resolvermos a EPG-1D não linear independente do tempo:

$$-\frac{1}{2}\psi'' + V_0 \cos(2x)\psi + g|\psi|^2\psi = \mu\psi. \quad (133)$$

A Eq 133 pode ser obtida pela densidade lagrangiana:

$$\mathcal{L} = -\frac{1}{2}|\psi'|^2 - V_0 \cos(2x)|\psi|^2 - \frac{g}{2}|\psi|^4 + \mu|\psi|^2. \quad (134)$$

A lagrangiana efetiva é dada pela integral:

$$L_{ef} = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathcal{L} dx - \mu \quad (135)$$

Sendo assim, obtemos:

$$L_{ef} = \int_{-\infty}^{+\infty} \left\{ -\frac{1}{2}|\psi'|^2 - V_0 \cos(2x)|\psi|^2 - \frac{g}{2}|\psi|^4 + \mu|\psi|^2 \right\} dx - \mu. \quad (136)$$

Soluções variacionais para a equação acima são obtidas ao assumirmos um *ansatz* simétrico para sólitons na forma secante hiperbólica:

$$\psi(x) = A \operatorname{sech}\left(\frac{x}{a}\right), \quad (137)$$

sendo a amplitude A e a largura a os parâmetros variacionais do sóliton. Ressaltamos que a normalização do *ansatz* $\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi|^2 = 2A^2a = N$ representa o número de átomos N do condensado.

Ao substituírmos a Eq. 137 na Eq. 136 e após realizar algumas manipulações algébricas na expressão da lagrangiana efetiva, obtemos as seguintes integrais:

$$\begin{aligned}
L_{ef} = & -\underbrace{\frac{A^2}{2a^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \operatorname{sech}^2\left(\frac{x}{a}\right) \tanh^2\left(\frac{x}{a}\right) dx}_{\frac{2a}{3}} - \underbrace{V_0 A^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \cos(2x) \operatorname{sech}^2\left(\frac{x}{a}\right) dx}_{2a^2 \pi \cos(2\xi) \operatorname{cossech}(\pi a)} \\
& - \underbrace{\frac{g}{2} A^4 \int_{-\infty}^{+\infty} \operatorname{sech}^4\left(\frac{x}{a}\right) dx}_{\frac{4a}{3}} + \underbrace{\mu A^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \operatorname{sech}^2\left(\frac{x}{a}\right) dx}_{2a} - \mu.
\end{aligned} \tag{138}$$

Sabendo que $A^2 = \frac{N}{2a}$ a lagrangiana efetiva assume a forma

$$L_{ef} = -\frac{N}{6a^2} - \pi V_0 N a \operatorname{cossech}(\pi a) - \frac{gN^2}{6a} + \mu(N-1). \tag{139}$$

As equações de evolução para parâmetros variacionais podem ser obtidas das equações de Euler-Lagrange

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) - \frac{\partial L}{\partial q_i} = 0, \tag{140}$$

onde q_i são as coordenadas generalizadas $q_i = \{a, \mu, N\}$:

$$\frac{\partial L}{\partial a} = 0 \Rightarrow \frac{1}{3a^3} + \pi V_0 \operatorname{cossech}(\pi a) [\pi a \coth(\pi a) - 1] + \frac{gN}{6a} = 0 \quad \text{(I)}$$

$$\frac{\partial L}{\partial \mu} = 0 \Rightarrow N - 1 = 0 \tag{II} \tag{141}$$

$$\frac{\partial L}{\partial N} = 0 \Rightarrow -\frac{1}{6a^2} - \pi V_0 a \operatorname{cossech}(\pi a) - \frac{gN}{6a} + \mu = 0 \tag{III}$$

A Eq. 141-II determina o valor de N , que nesse caso obtemos $N = 1$. Ao substituir esse valor nas Eq.s 141-I e 141-III seguidas de manipulações algébricas, obtemos um sistema de equações diferenciais ordinárias não lineares acopladas para a largura a e potencial químico μ do sóliton:

$$\begin{cases} \frac{1}{3a^3} + \pi V_0 \operatorname{cosech}(\pi a) [\pi a \coth(\pi a) - 1] + \frac{g}{6a} = 0 \\ \mu = \frac{1}{6a^2} + \pi V_0 a \operatorname{cosech}(\pi a) + \frac{g}{3a} \end{cases} \quad (142)$$

Fazendo $g = 0$ na Eq. 142, esta pode ser reescrita isolando a amplitude do potencial em função da largura do sólito ($V_0 = V_0(a)$):

$$V_0 = \frac{\sinh(\pi a)}{3\pi a^3 [1 - \pi a \coth(\pi a)]}. \quad (143)$$

Sendo assim, podemos encontrar o valor máximo de V_0 derivando a Eq. 143 e igualando a zero:

$$\frac{dV_0}{da} = 0 \Rightarrow a \approx \pm 1,3679. \quad (144)$$

Substituindo a Eq. 144 na Eq. 143 encontramos o valor máximo da amplitude V_0 do potencial periódico:

$$(V_0)_{\max} \approx -0,462. \quad (145)$$

Finalmente podemos calcular o valor de a a partir da Eq. 142 utilizando métodos iterativos para vários valores de g e V_0 desde que este satisfaça a Eq. 145, isto é, desde que a amplitude da rede óptica seja menor que $(V_0)_{\max}$. Um dos métodos mais conhecidos e mais utilizados em métodos numéricos é o Método de Newton-Raphson (MNR) que foi descrito na sec. 3.

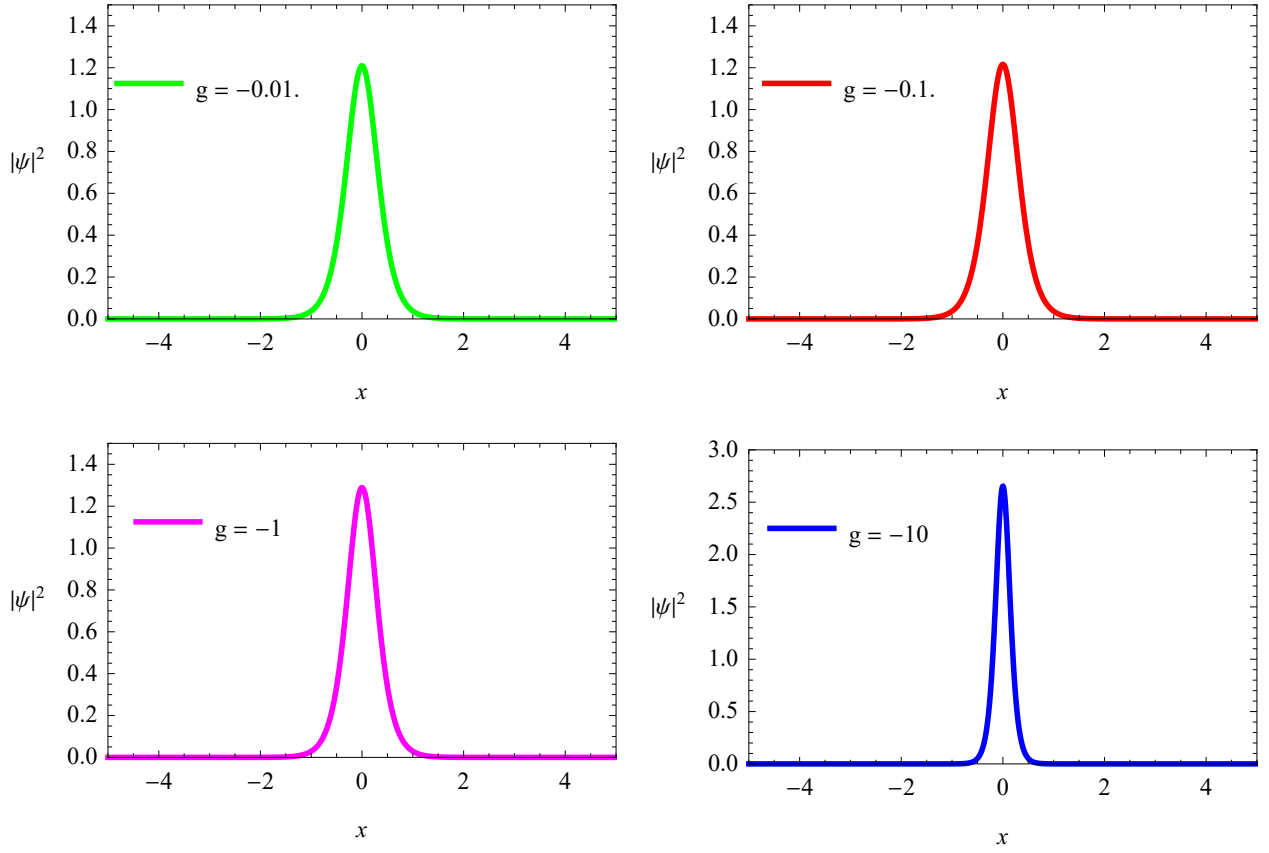


Figura 21: Família de *gaps* sólitons obtidos variacionalmente através da resolução do sistema 142. Solução: $g = -0.01 \rightarrow a = 0.413553, \mu = -2.8619$; $g = -0.1 \rightarrow a = 0.411223, \mu = -2.93477$; $g = -1 \rightarrow a = 0.387967, \mu = -3.69932$; $g = -10 \rightarrow a = 0.188504, \mu = -17.712$.

4.2.2 Resultados Numéricos

Adhikari e colaboradores[76] propuseram um método de Crank-Nicolson de etapa dividida (split-step Crank-Nicolson - SSCN) para resolver a EGP com várias geometrias. A EGP é uma equação diferencial parcial no tempo e no espaço envolvendo uma derivada de primeira ordem no tempo e de segunda ordem no espaço com um termo linear do potencial e um termo não linear:

$$i \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x, t) + V_{ext}(x) \Psi(x, t) + g |\Psi(x, t)|^2 \Psi(x, t).$$

Em geral a EGP não possui solução analítica exata, sendo necessário buscar por soluções numéricas. Além disso, ao projetar esquemas numéricos para a Eq. acima com as seguintes condições iniciais e condições de contorno

$$\begin{cases} \Psi(x, 0) = \psi^0(x) \\ \lim_{x \rightarrow \pm\infty} \Psi = 0 \end{cases}, \quad (146)$$

duas quantidades importantes precisam ser consideradas: a normalização da função de onda [74]

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x, t)| dx = N$$

e a energia

$$E(\Psi) = \int_{-\infty}^{+\infty} \left[\frac{1}{2} \left| \frac{d}{dx} \Psi(x, t) \right|^2 + V_{ext}(x) |\Psi(x, t)|^2 + \frac{g}{2} |\Psi(x, t)|^4 \right] dx. \quad (147)$$

Aplicamos o Método split-step Crank-Nicolson apresentado na Sec. 3.2.4 com o intuito de resolvermos a EPG-1D não linear dependente do tempo. As simulações começaram com uma configuração inicial solitônica

$$\Psi(x, 0) = \Psi_j^0 = \sqrt{\frac{N}{2a}} \operatorname{sech}\left(\frac{x}{a}\right) \quad (148)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = \hat{H}_{GP} \Psi(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x, t) + V(x) \Psi(x, t) + V_{NL} \Psi(x, t). \quad (149)$$

$$\begin{cases} \Psi(x, 0) = \psi^0(x) & \tilde{a} \leq x \leq \tilde{b} \\ \Psi(\tilde{a}, t) = \Psi(\tilde{b}, t) = 0 & t > 0 \end{cases} \quad (150)$$

Se escolhermos o passo espacial $h = \Delta x > 0$ com $h = (\tilde{b} - \tilde{a})/M$ para M inteiro positivo e o passo temporal $k = \Delta t > 0$, os pontos da malha passam a ser

$$x_j := \tilde{a} + jh, \quad t_n := nk, \quad j = 1, \dots, N, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

Utilizaremos a notação simplificada Ψ_j^n para denotar $\Psi(x_j, t_n)$ e o algoritmo está descrito abaixo

$$\Psi_j^* = e^{-i(V_0 \cos(2x_j) + g|\Psi_j^k|^2)\frac{k}{2}} \Psi_j^n, \quad j = 0, \dots, N+1$$

$$i \frac{\Psi_j^{**} - \Psi_j^*}{\Delta t} = -\frac{1}{2} \left[\frac{\Psi_{j+1}^{**} - 2\Psi_j^{**} + \Psi_{j-1}^{**}}{2h^2} + \frac{\Psi_{j+1}^* - 2\Psi_j^* + \Psi_{j-1}^*}{2h^2} \right], \quad j = 1, \dots, N$$

$$\Psi_0^{**} = \Psi_{N+1}^{**} = 0$$

$$\Psi_j^{n+1} = e^{-i(V_0 \cos(2x_j) + g|\Psi_j^{**}|^2) \frac{k}{2}} \Psi_j^{**}, j = 0, \dots, N+1$$

$$\mu(\Psi_j^n) = \int_{-\infty}^{+\infty} \left[\frac{1}{2} \left| \frac{d\Psi_j^n}{dx} \right|^2 + V |\Psi_j^n|^2 + g |\Psi_j^n|^4 \right] dx$$

Observa-se que a cada iteração a energia e o potencial químico são calculados para cada Ψ_j^n .

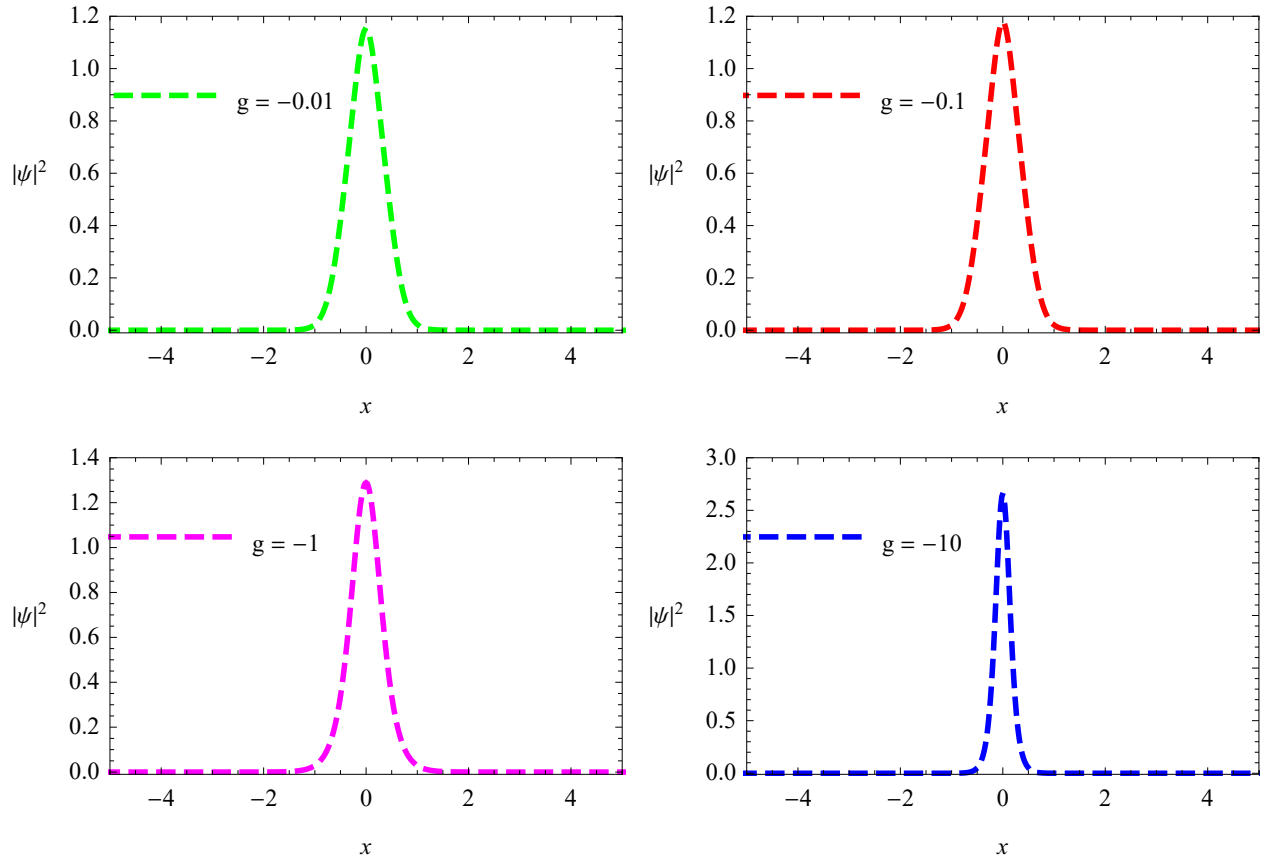


Figura 22: Família de *gaps* sólitons obtidos numericamente através do algoritmo apresentado acima.

Resultados dinâmicos - estabilidade

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x, t) + V_0 \cos(2x) \Psi(x, t) + g |\Psi(x, t)|^2 \Psi(x, t)$$

4.2.3 Resultados variacionais

Aplicamos o Método Variacional apresentado na Sec. 3.1.3 com o intuito de resolvermos a EPG não linear dependente do tempo

$$i\dot{\Psi} = -\frac{1}{2}\Psi'' + V_0 \cos(2x)\Psi + g|\Psi|^2\Psi. \quad (151)$$

Para facilitar a notação tomamos $\Psi(x, t) \rightarrow \Psi$ e utilizamos a notação simplificada $\dot{\Psi} \equiv \frac{\partial \Psi}{\partial t}$ e $\Psi' \equiv \frac{\partial \Psi}{\partial x}$ para indicar derivada temporal e derivada espacial respectivamente. A Eq. 151 pode ser obtida da subsequente densidade lagrangiana

$$\mathcal{L} = \frac{i}{2} (\Psi \dot{\Psi}^* - \Psi^* \dot{\Psi}) + \frac{1}{2} |\Psi'|^2 + V_0 \cos(2x) |\Psi|^2 + \frac{g}{2} |\Psi|^4 - \mu |\Psi|^2. \quad (152)$$

A lagrangiana efetiva é dada pela integral

$$L_{ef} = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathcal{L} dx + \mu \quad (153)$$

Sendo assim, obtemos:

$$L_{ef} = \int_{-\infty}^{+\infty} \left\{ \frac{i}{2} (\Psi \dot{\Psi}^* - \Psi^* \dot{\Psi}) + \frac{1}{2} |\Psi'|^2 + V_0 \cos(2x) |\Psi|^2 + \frac{g}{2} |\Psi|^4 - \mu |\Psi|^2 \right\} dx + \mu. \quad (154)$$

Soluções variacionais para a equação acima são obtidas ao assumirmos um *ansatz* simétrico para sólitons iluminados na forma secante hiperbólica [84][83]

$$\Psi(x, t) = A \operatorname{sech} \left(\frac{x - \xi}{a} \right) e^{i[b(x-\xi)^2 + v(x-\xi) + \varphi]}. \quad (155)$$

onde A, ξ, a, b, v, φ são a amplitude, posição do centro de massa, largura, o “chirp”⁵, velocidade e a fase do sóliton respectivamente. Todos os parâmetros supracitados a princípio são dependentes do tempo e é importante ressaltar que a normalização da função de onda $N = \int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x, t)|^2 = 2aA^2$ é proporcional ao número de átomos do condensado e representa uma quantidade que se conserva.

Substituindo a Eq. 155 na Eq. 154 e após realizar algumas manipulações algébricas

⁵Chirp é um sinal em que a frequência aumenta (*up-chirp*) ou diminui (*down-chirp*) com o tempo. Este parâmetro é responsável pela modulação do sóliton.

na expressão da lagrangiana efetiva, deixando o termo A^2 implícito, obtemos as seguintes integrais:

$$\begin{aligned}
& \underbrace{\left(\dot{b} + 2b^2\right) \int_{-\infty}^{+\infty} (x - \xi)^2 \operatorname{sech}^2\left(\frac{x - \xi}{a}\right) dx}_{\frac{\pi^2}{6}a^3} + \underbrace{\left(\dot{\varphi} - v\dot{\xi} - \mu + \frac{v^2}{2}\right) \int_{-\infty}^{+\infty} \operatorname{sech}^2\left(\frac{x - \xi}{a}\right) dx}_{2a} + \\
& \underbrace{\left(2bv - 2b\dot{\xi}\right) \int_{-\infty}^{+\infty} (x - \xi) \operatorname{sech}^2\left(\frac{x - \xi}{a}\right) dx}_0 + \underbrace{\frac{1}{2a^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \operatorname{sech}^2\left(\frac{x - \xi}{a}\right) \tanh^2\left(\frac{x - \xi}{a}\right) dx}_{\frac{2a}{3}} + \\
& \underbrace{V_0 \int_{-\infty}^{+\infty} \cos(2x) \operatorname{sech}^2\left(\frac{x - \xi}{a}\right) dx}_{2a^2\pi \cos(2\xi) \operatorname{cosech}(\pi a)} + \underbrace{\frac{g}{2}A^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \operatorname{sech}^4\left(\frac{x - \xi}{a}\right) dx}_{\frac{4a}{3}} + \mu
\end{aligned} \tag{156}$$

Sabendo que $A^2 = \frac{N}{2a}$ e $v = \dot{\xi}$ a lagrangiana efetiva assume a forma:

$$L_{ef} = N \left[\frac{\pi^2}{12} a \dot{b} + \frac{\pi^2}{6} a^2 \dot{b}^2 - \frac{1}{2} \dot{\xi}^2 + \dot{\varphi} + \frac{1}{6a^2} + \frac{gN}{6a} + \pi V_0 a \cos(2\xi) \operatorname{cosech}(\pi a) - \mu \right] + \mu. \tag{157}$$

As equações de evolução para parâmetros variacionais podem ser derivadas das equações de Euler-Lagrange

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) - \frac{\partial L}{\partial q_i} = 0 \tag{158}$$

onde q_i são as coordenadas generalizadas dependentes do tempo $q_i = \{\varphi, \xi, b, a, \mu, N\}$.

$$\left\{ \begin{array}{ll} \frac{dN}{dt} = 0 & \text{I} \\ \ddot{\xi} = 2\pi V_0 a \operatorname{cosech}(\pi a) \sin(2\xi) & \text{II} \\ \dot{a} = 2ab & \text{III} \\ \dot{b} = \frac{2}{\pi^2 a^4} - 2b^2 + \frac{gN}{\pi^2 a^3} - \frac{6V_0}{\pi a} \cos(2\xi) \operatorname{cosech}(\pi a) [1 - \pi a \coth(\pi a)] & \text{IV} \\ N = 1 & \text{V} \\ \mu = \frac{\pi^2}{12} a \dot{b} + \frac{\pi^2}{6} a^2 b^2 - \frac{1}{2} \dot{\xi}^2 + \dot{\varphi} + \frac{1}{6a^2} + \frac{gN}{3a} + \pi V_0 a \cos(2\xi) \operatorname{cosech}(\pi a) & \text{VI} \end{array} \right. \quad (159)$$

A Eq. 159-I se reduz a $\frac{dN}{dt} = 0$ e ilustra a conservação da norma da função de onda ou o número de átomos do condensado. A Eq. 159-V determina o valor de N que nesse caso obtemos $N = 1$. Com relação a Eq. 159-III adquirimos duas relações

$$\begin{array}{ccc} & \nearrow & \dot{b} = \frac{a\ddot{a} - \dot{a}^2}{2a^2} \\ \dot{a} = 2ab & & \\ & \searrow & b^2 = \frac{\dot{a}^2}{4a^2} \end{array} \quad (160)$$

que substituindo-as nas Eq's. 159-II, 159-IV e 159-VI seguidas de manipulações algébricas, obtemos, sem suma, um sistema de equações diferenciais ordinárias não lineares acopladas para a largura a , posição do centro de massa ξ , potencial químico μ e a fase φ do sóliton

$$\begin{cases}
\ddot{a} = \frac{4}{\pi^2 a^3} + \frac{2gN}{\pi^2 a^2} - \frac{12}{\pi} V_0 \cos(2\xi) \operatorname{cossech}(\pi a) [1 - \pi a \coth(\pi a)] & \text{I} \\
\ddot{\xi} = 2\pi V_0 a \operatorname{cossech}(\pi a) \sin(2\xi) & \text{II} \\
\mu = \frac{\pi^2}{12} a \dot{b} + \frac{\pi^2}{6} a^2 b^2 - \frac{1}{2} \dot{\xi}^2 + \dot{\varphi} + \frac{1}{6a^2} + \frac{g}{3a} + \pi V_0 a \cos(2\xi) \operatorname{cossech}(\pi a) & \text{II}
\end{cases} \quad (161)$$

O sistema foi resolvido usando o procedimento de Runge-Kutta de 5^a ordem [83] através do *software* Mathematica e as seguintes condições iniciais:

$$\begin{cases}
\xi(0) = 0 & \xi'(0) = v = 0 \\
a(0) = a_0 & a'(0) = a_0
\end{cases} \quad (162)$$

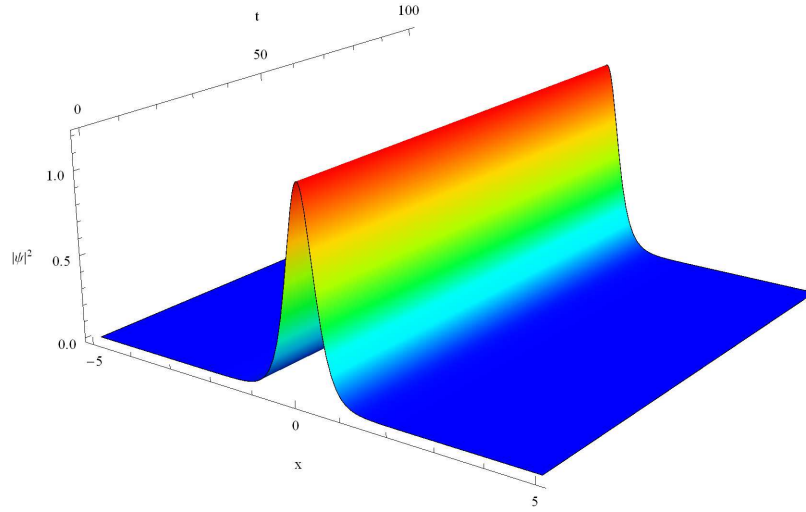


Figura 23: Resultado variacional da evolução temporal do s3lton $A\text{sech}\left(\frac{x-\xi}{a}\right)\exp\left(ib(x-\xi)^2 + iv(x-\xi) + i\varphi\right)$ atrav3s do sistema (161) e as condi33es iniciais (162). Parâmetros: $a_0 = 0.413553, V_0 = -5, g = -0.01$

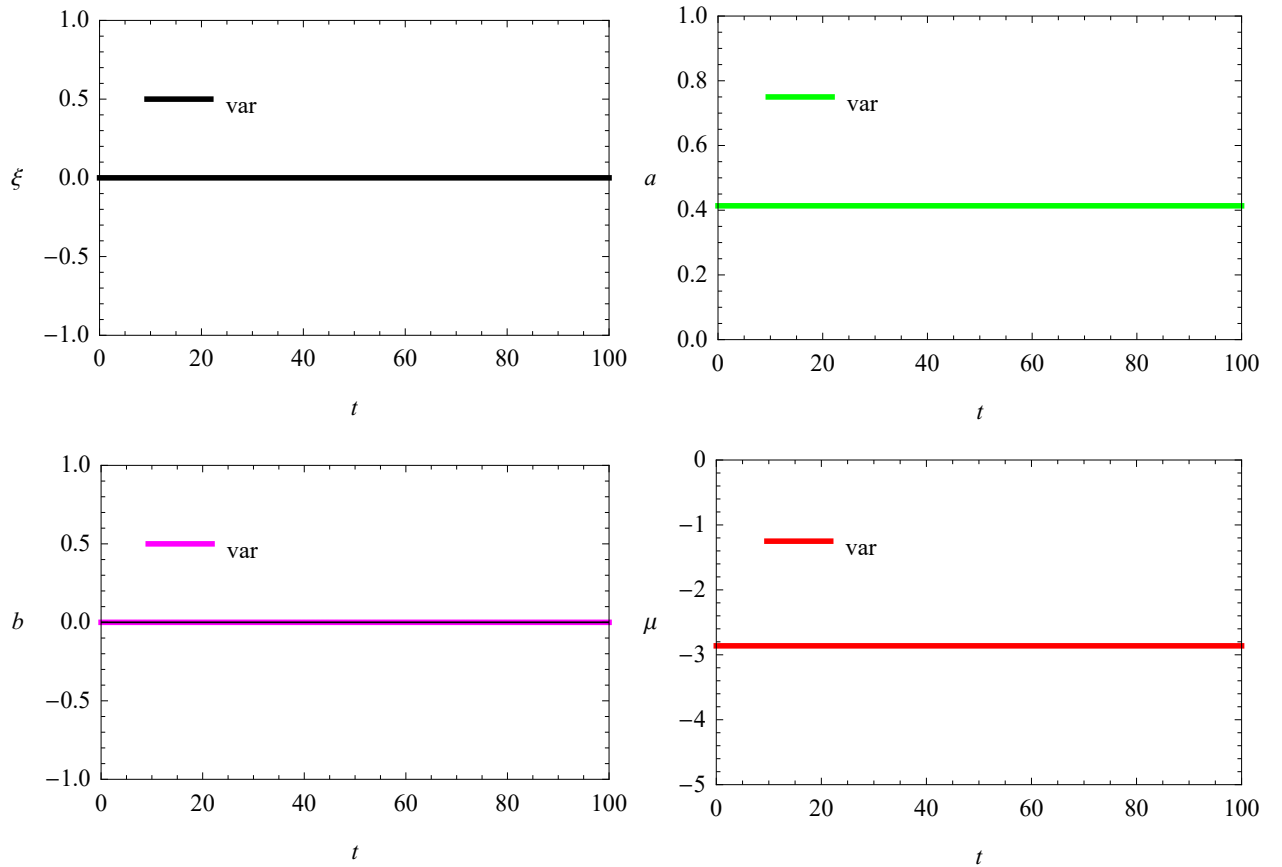


Figura 24: Evolu33o da posi33o do centro de massa (preto), largura (verde), chirp (magenta) e potencial qu3mico (vermelho) do s3lton $A\text{sech}\left(\frac{x-\xi}{a}\right)\exp\left(ib(x-\xi)^2 + iv(x-\xi) + i\varphi\right)$ submetido ao potencial peri3dico (rede 33ptica) $V(x) = V_0 \cos(2x)$ de acordo com o sistema 161. Parâmetros: $g = -0.01, V_0 = -5, a_0 = 0.413553, \xi_0 = 0, v = 0, \varphi = 0$.

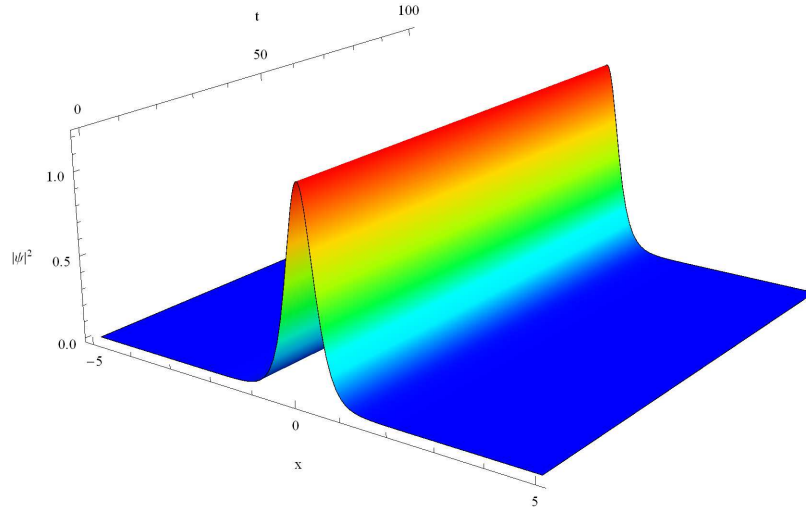


Figura 25: Resultado variacional da evolução temporal do sóliton $A\text{sech}\left(\frac{x-\xi}{a}\right) \exp\left(ib(x-\xi)^2 + iv(x-\xi) + i\varphi\right)$ através do sistema (161) e as condições iniciais (162). Parâmetros: $a_0 = 0.411223, V_0 = -5, g = -0.1$

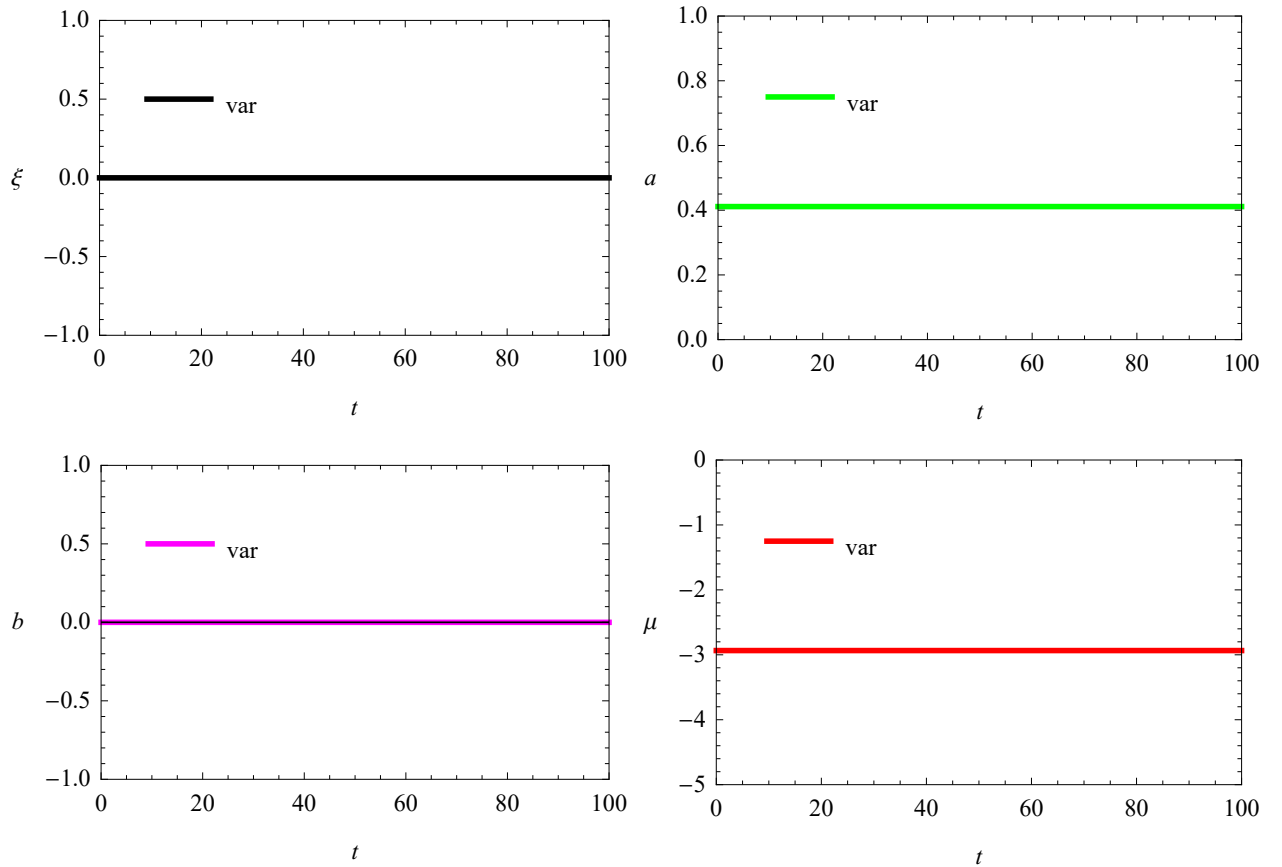


Figura 26: Evolução da posição do centro de massa (preto), largura (verde), chirp (magenta) e potencial químico (vermelho) do sóliton $A\text{sech}\left(\frac{x-\xi}{a}\right) \exp\left(ib(x-\xi)^2 + iv(x-\xi) + i\varphi\right)$ submetido ao potencial periódico (rede óptica) $V(x) = V_0 \cos(2x)$ de acordo com o sistema 161. Parâmetros: $g = -0.1, V_0 = -5, a_0 = 0.411223, \xi_0 = 0, v = 0, \varphi = 0$.

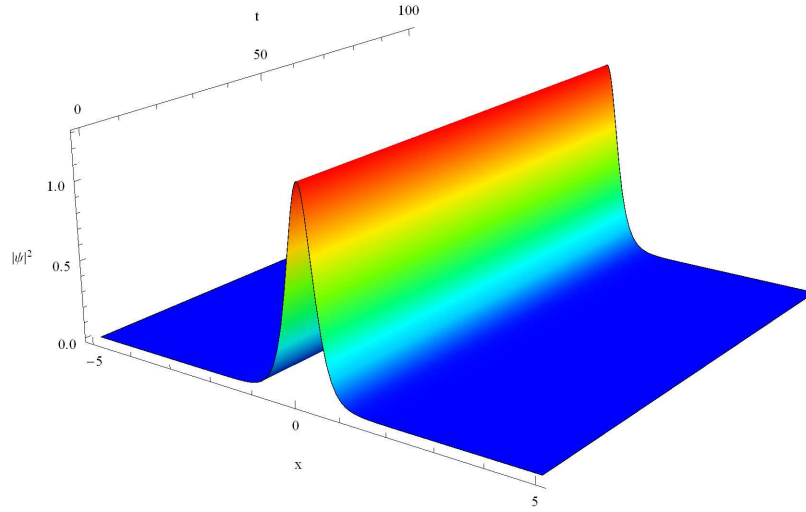


Figura 27: Resultado variacional da evolução temporal do s3l3iton $A\text{sech}\left(\frac{x-\xi}{a}\right)\exp\left(ib(x-\xi)^2 + iv(x-\xi) + i\varphi\right)$ atrav3s do sistema (161) e as condi33es iniciais (162). Parâmetros: $a_0 = 0.387967, V_0 = -5, g = -1$

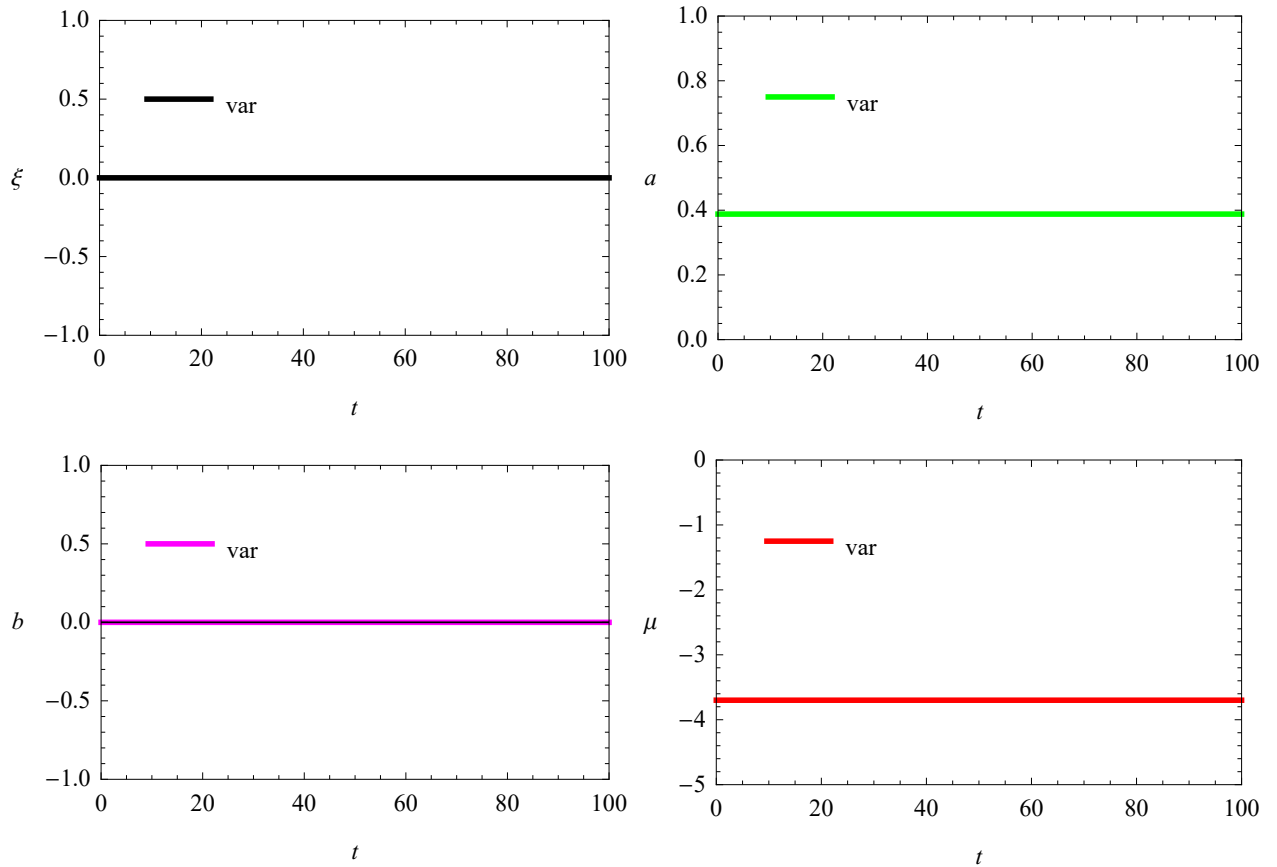


Figura 28: Evolu333o da posi333o do centro de massa (preto), largura (verde), chirp (magenta) e potencial qu3mico (vermelho) do s3l3iton $A\text{sech}\left(\frac{x-\xi}{a}\right)\exp\left(ib(x-\xi)^2 + iv(x-\xi) + i\varphi\right)$ submetido ao potencial peri3dico (rede 33ptica) $V(x) = V_0 \cos(2x)$ de acordo com o sistema 161. Parâmetros: $g = -1, V_0 = -5, a_0 = 0.387967, \xi_0 = 0, v = 0, \varphi = 0$.

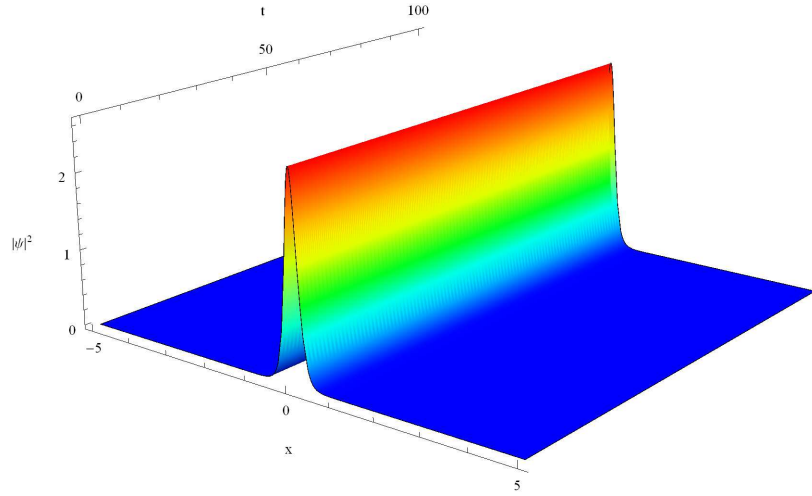


Figura 29: Resultado variacional da evolução temporal do sóliton $A\text{sech}\left(\frac{x-\xi}{a}\right)\exp\left(ib(x-\xi)^2 + iv(x-\xi) + i\varphi\right)$ através do sistema (161) e as condições iniciais (162). Parâmetros: $a_0 = 0.188504, V_0 = -5, g = -10$

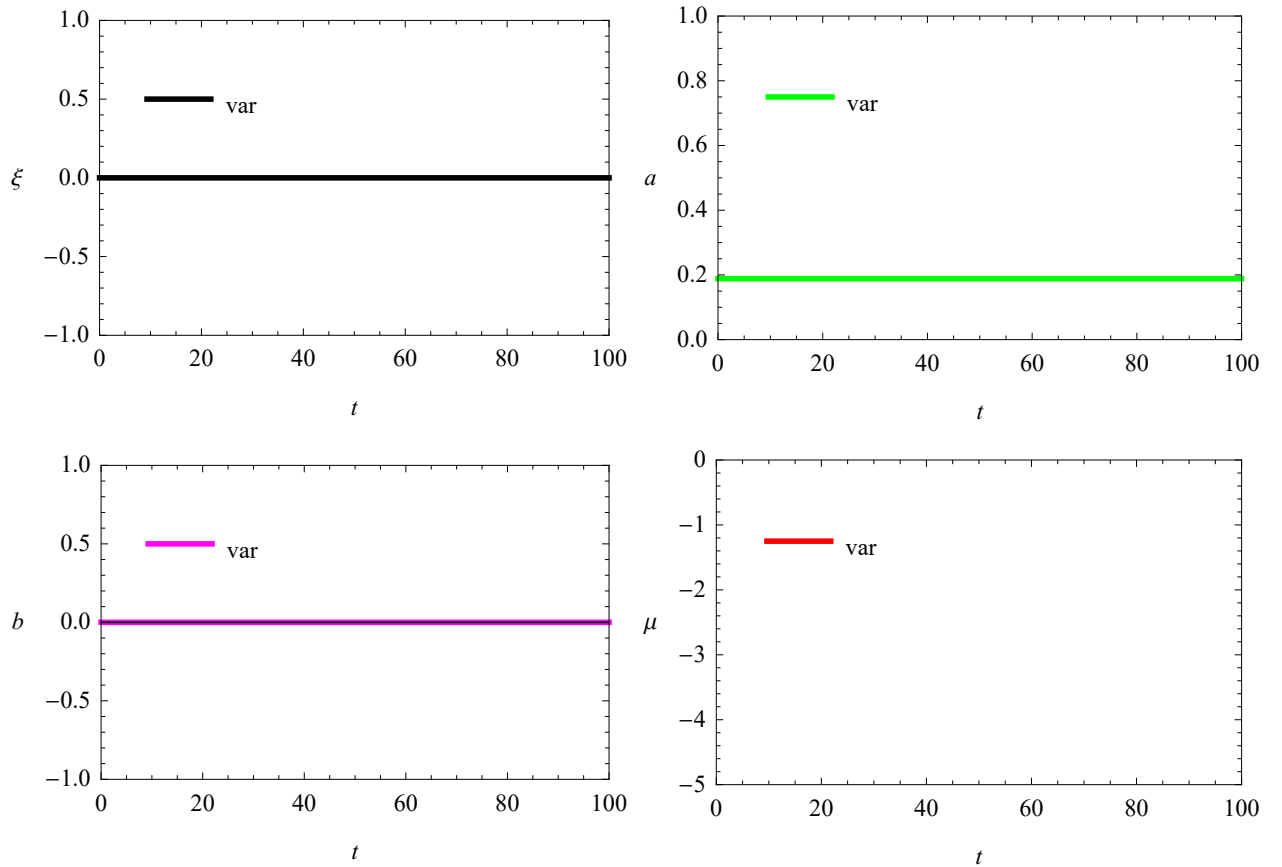


Figura 30: Evolução da posição do centro de massa (preto), largura (verde), chirp (magenta) e potencial químico (vermelho) do sóliton $A\text{sech}\left(\frac{x-\xi}{a}\right)\exp\left(ib(x-\xi)^2 + iv(x-\xi) + i\varphi\right)$ submetido ao potencial periódico (rede óptica) $V(x) = V_0 \cos(2x)$ de acordo com o sistema 161. Parâmetros: $g = -10, V_0 = -5, a_0 = 0.188504, \xi_0 = 0, v = 0, \varphi = 0$.

4.2.4 Resultados numéricos

Aplicamos o Método de Crank-Nicolson Split-Step apresentado na Sec. 3.2.4 com o intuito de resolvermos a EPG não linear dependente do tempo no intervalo $-10 < x < 10$ com passo espacial h e no intervalo $0 < t < 100$ com passo temporal. As simulações começaram com uma configuração inicial solitônica e utilizamos as condições de contorno de Dirichlet para representar o limite $\lim_{x \rightarrow \pm\infty} \Psi(x, t) = 0$.

$$\begin{cases} i \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x, t) + V_0 \cos(2x) \Psi(x, t) + g |\Psi(x, t)|^2 \Psi(x, t) \\ \Psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2a_0}} \operatorname{sech}\left(\frac{x}{a_0}\right) \\ \Psi(-10, t) = \Psi(10, t) = 0 \end{cases} \quad (163)$$

As expressões que descrevem a evolução temporal do centro de massa ξ , largura a e potencial químico μ do sóliton são dadas por

$$\xi(t) = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} x |\Psi(x, t)|^2 dx}{\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx} \quad (164)$$

$$a(t) = \left(\frac{12 \int_{-\infty}^{+\infty} (x - \xi(t))^2 |\Psi(x, t)|^2 dx}{\pi^2 \int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx} \right)^{1/2} \quad (165)$$

$$\mu(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \left[\frac{1}{2} \left| \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, t) \right|^2 + V_0 \cos(2x) |\Psi(x, t)|^2 + g |\Psi(x, t)|^4 \right] dx. \quad (166)$$

e o algoritmo está descrito abaixo

$$\Psi_j^* = e^{-i(V_0 \cos(2x_j) + g |\Psi_j^n|^2) \frac{k}{2h}} \Psi_j^n, \quad j = 0, \dots, N+1$$

$$i \frac{\Psi_j^{**} - \Psi_j^*}{\Delta t} = -\frac{1}{2} \left[\frac{\Psi_{j+1}^{**} - 2\Psi_j^{**} + \Psi_{j-1}^{**}}{2h^2} + \frac{\Psi_{j+1}^* - 2\Psi_j^* + \Psi_{j-1}^*}{2h^2} \right], \quad j = 1, \dots, N$$

$$\Psi_0^{**} = \Psi_{N+1}^{**} = 0$$

$$\Psi_j^{n+1} = e^{-i\left(V_0 \cos(2x_j) + g|\Psi_j^{**}|^2\right)\frac{k}{2h}} \Psi_j^{**}, j = 0, \dots, N+1$$

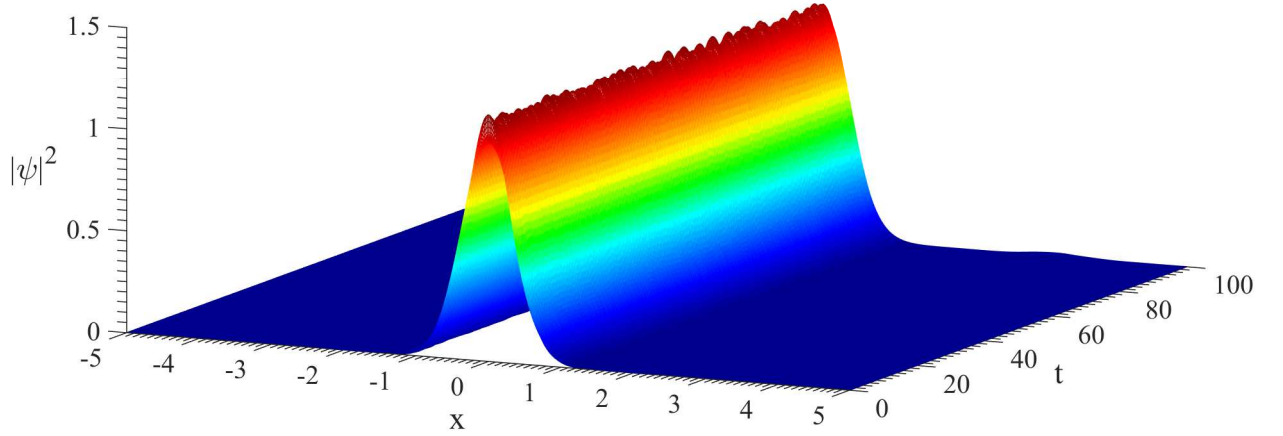


Figura 31: Resultado numérico da evolução temporal do sóliton $\frac{1}{\sqrt{2a_0}}\text{sech}\left(\frac{x}{a_0}\right)$ através do Método de Crank-Nicolson Split-Step submetido ao potencial periódico (rede óptica) $V(x) = V_0 \cos(2x)$. Parâmetros: $a_0 = 0.413553, V_0 = -5, g = -0.01$.

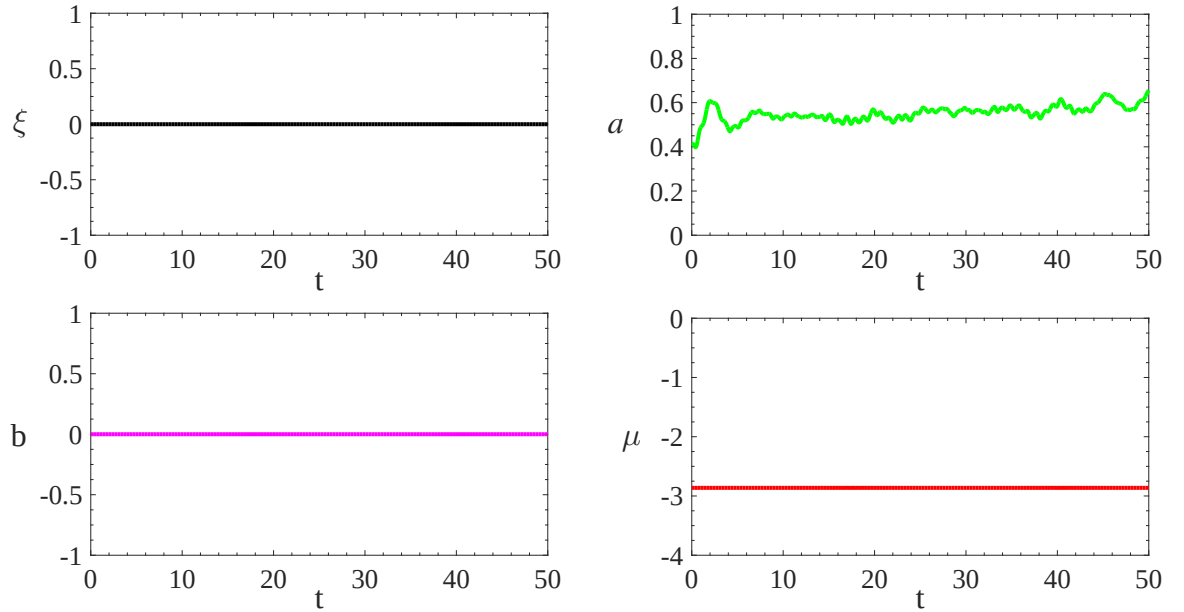


Figura 32: Evolução da posição do centro de massa (preto), largura (verde), chirp (magenta) e potencial químico (vermelho) do sóliton $\frac{1}{\sqrt{2a_0}}\text{sech}\left(\frac{x-\xi}{a_0}\right)$ submetido ao potencial periódico (rede óptica) $V(x) = V_0 \cos(2x)$ de acordo com o algoritmo da Sec. 4.2.4. Parâmetros: $g = -0.01, V_0 = -5, a_0 = 0.413553$.

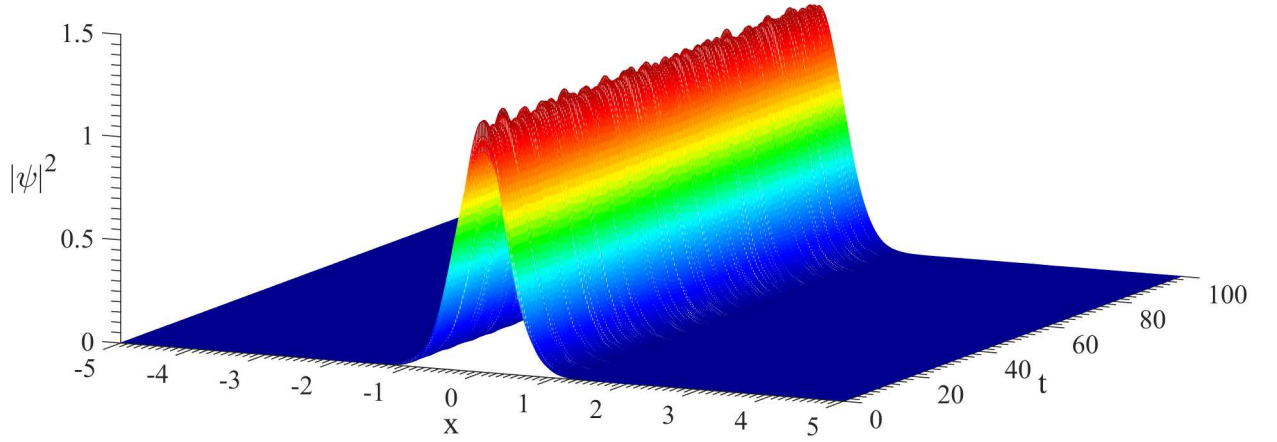


Figura 33: Resultado numérico da evolução temporal do sóliton $\frac{1}{\sqrt{2a_0}}\text{sech}\left(\frac{x}{a_0}\right)$ através do Método de Crank-Nicolson Split-Step submetido ao potencial periódico (rede óptica) $V(x) = V_0 \cos(2x)$. Parâmetros: $a_0 = 0.411223, V_0 = -5, g = -0.1$

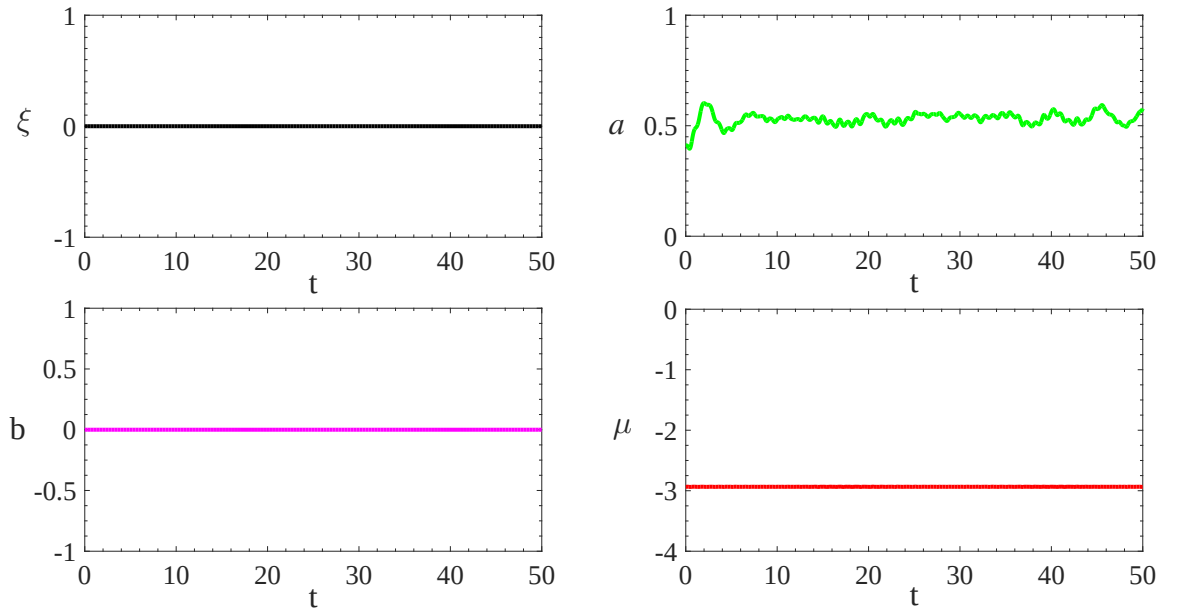


Figura 34: Evolução da posição do centro de massa (preto), largura (verde), chirp (magenta) e potencial químico (vermelho) do sóliton $\frac{1}{\sqrt{2a_0}}\text{sech}\left(\frac{x-\xi}{a_0}\right)$ submetido ao potencial periódico (rede óptica) $V(x) = V_0 \cos(2x)$ de acordo com o algoritmo da Sec. 4.2.4. Parâmetros: $g = -0.1, V_0 = -5, a_0 = 0.411223$.

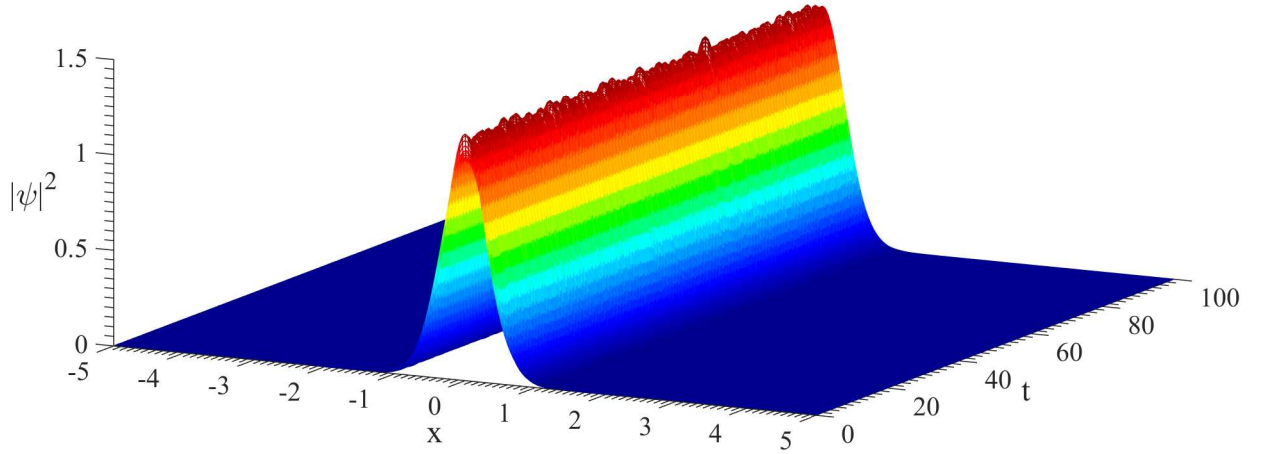


Figura 35: Resultado numérico da evolução temporal do sóliton $\frac{1}{\sqrt{2a_0}} \text{sech}\left(\frac{x}{a_0}\right)$ através do Método de Crank-Nicolson Split-Step submetido ao potencial periódico (rede óptica) $V(x) = V_0 \cos(2x)$. Parâmetros: $a_0 = 0.387967, V_0 = -5, g = -1$.

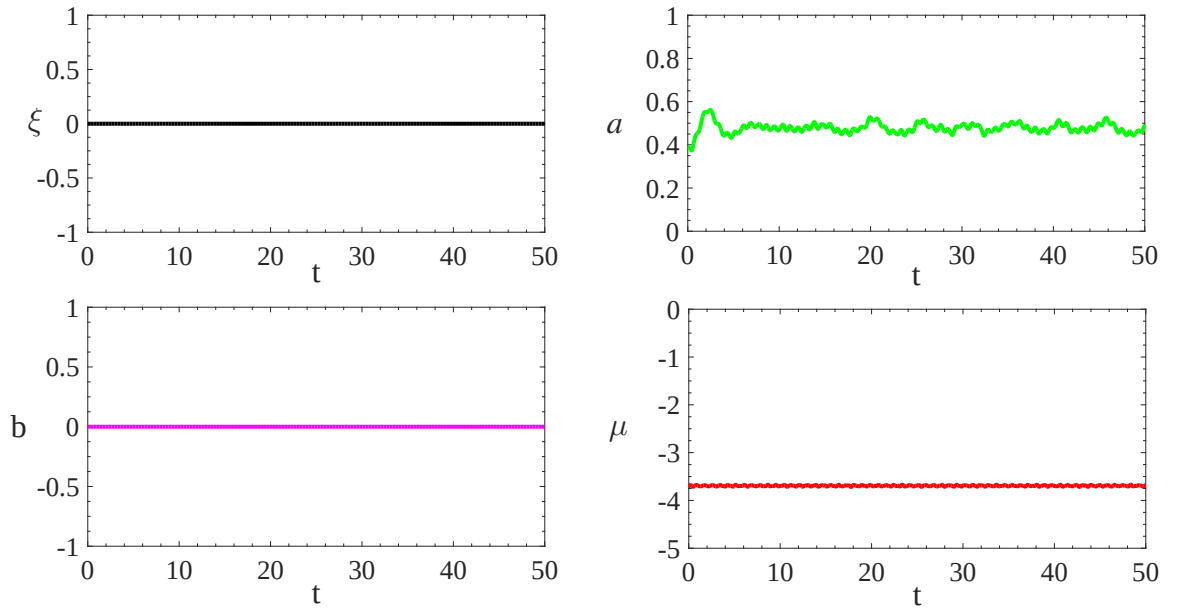


Figura 36: Evolução da posição do centro de massa (preto), largura (verde), chirp (magenta) e potencial químico (vermelho) do sóliton $\frac{1}{\sqrt{2a_0}} \text{sech}\left(\frac{x-\xi}{a_0}\right)$ submetido ao potencial periódico (rede óptica) $V(x) = V_0 \cos(2x)$ de acordo com o algoritmo da Sec. 4.2.4. Parâmetros: $g = -1, V_0 = -5, a_0 = 0.387967$.

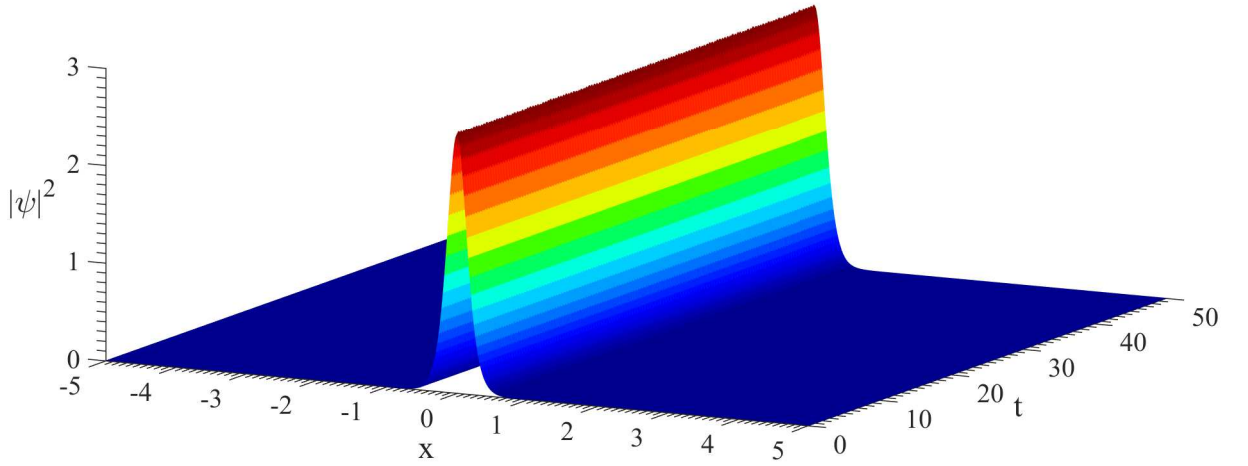


Figura 37: Resultado numérico da evolução temporal do sóliton $\frac{1}{\sqrt{2a_0}}\text{sech}\left(\frac{x}{a_0}\right)$ através do Método de Crank-Nicolson Split-Step submetido ao potencial periódico (rede óptica) $V(x) = V_0 \cos(2x)$. Parâmetros: $a_0 = 0.188504, V_0 = -5, g = -10$.

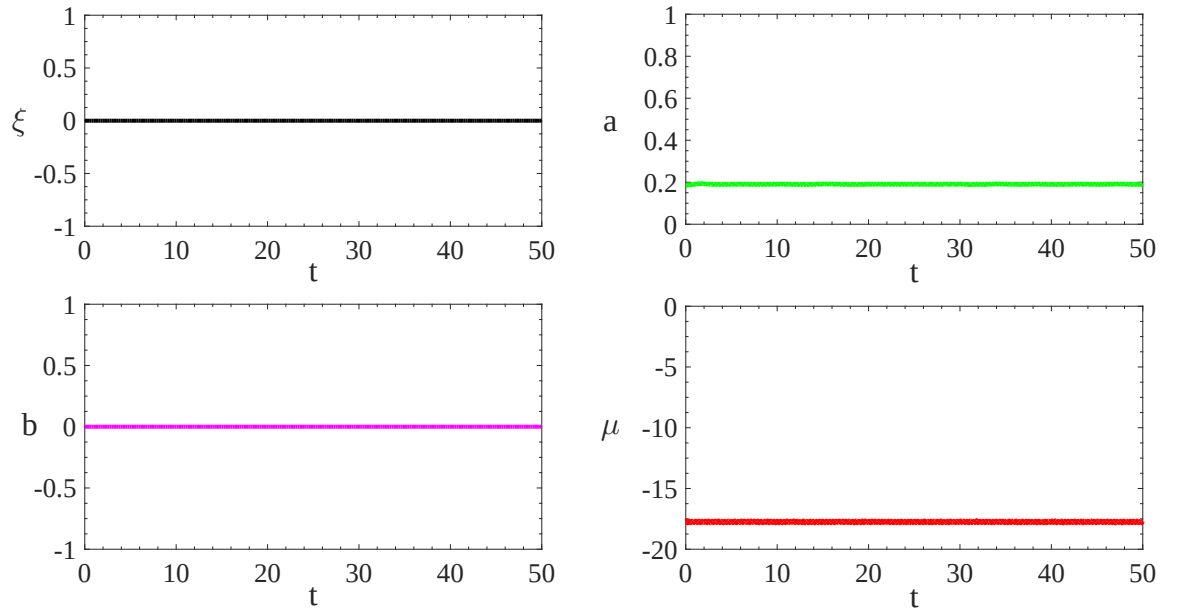


Figura 38: Evolução da posição do centro de massa (preto), largura (verde), chirp (magenta) e potencial químico (vermelho) do sóliton $\frac{1}{\sqrt{2a_0}}\text{sech}\left(\frac{x-\xi}{a_0}\right)$ submetido ao potencial periódico (rede óptica) $V(x) = V_0 \cos(2x)$ de acordo com o algoritmo da Sec. 4.2.4. Parâmetros: $g = -10, V_0 = -5, a_0 = 0.188504$.

5 Discussão dos Resultados

Para efeito de comparação entre os métodos aqui abordados, analisamos os resultados referentes à $g = -1$ simultaneamente na Fig. 39. Observa-se que a posição do centro de massa ξ , chirp b e potencial químico μ obtidos tanto variacional quanto numericamente apresentaram uma evolução temporal praticamente idêntica. Com relação à largura no sóliton a , observamos uma flutuação da evolução temporal numérica em relação à variacional. Porém, mesmo com estas flutuações, o sóliton se manteve estável.

O mesmo pode ser dito sobre os resultados obtidos a partir dos outros valores do coeficiente de não linearidade aqui abordados.

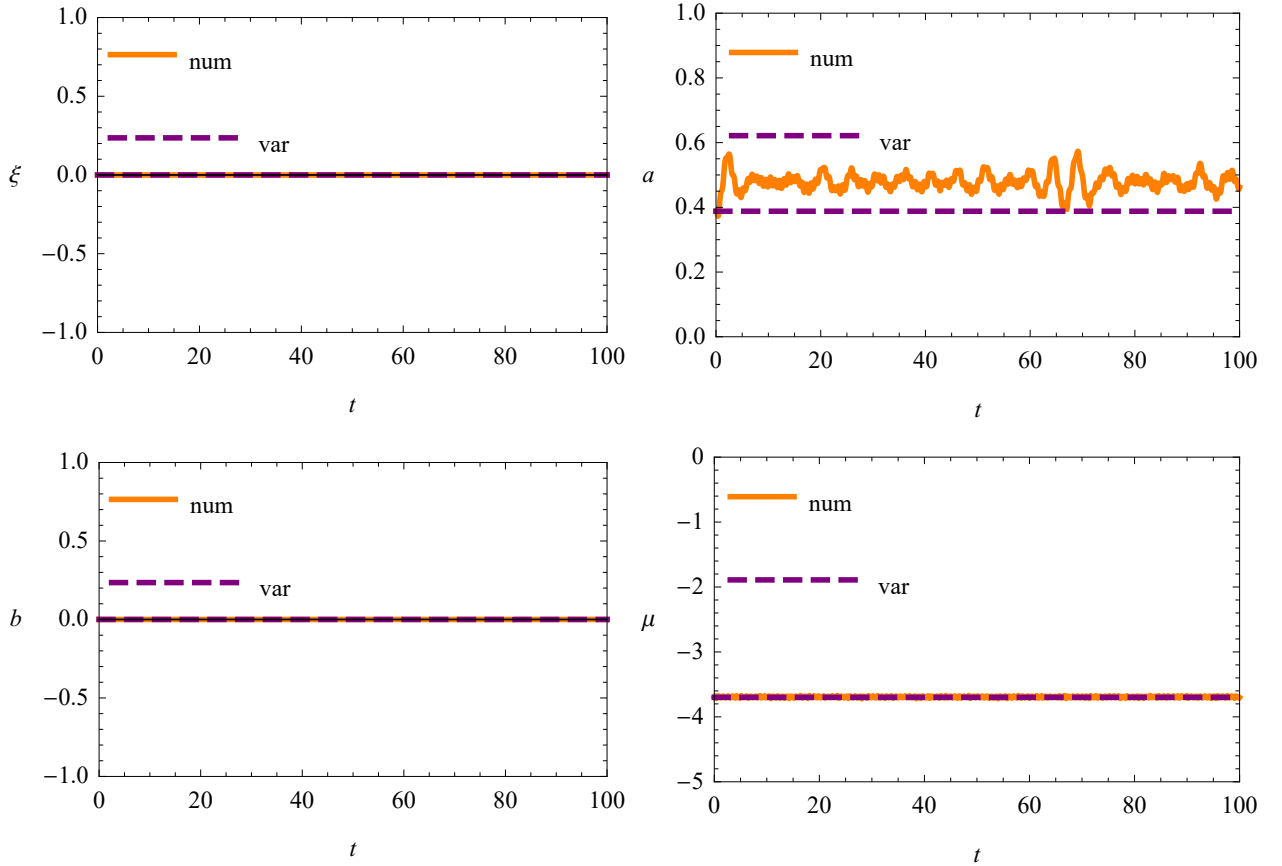


Figura 39: Comparação entre os resultados numéricos e variacionais relativos à evolução temporal do sóliton para $g = -1$.

É interessante ressaltarmos que os resultados obtidos neste trabalho, são provenientes da amplitude da rede óptica $V_0 = -5$ [50], entretanto, outros valores podem ser utilizados com o intuito de extrapolação matemática, uma vez que $V_0 = -5$ representa uma amplitude utilizada experimentalmente [80].

6 Conclusão

Esta dissertação fundamentou-se no estudo da dinâmica e estabilidade de sólitons iluminados de ondas de matéria em condensados de Bose-Einstein submetido a uma rede óptica mediante duas abordagens distintas: uma analítica, através do método variacional, e a outra numérica, através do Método de Crank-Nicolson Split-Step.

A estabilidade das soluções solitônicas foi verificada através da análise dinâmica direta, com a evolução temporal, tanto numérica quanto variacional, dos perfis dos sólitons. De um ponto de vista geral, obtivemos uma boa conformidade entre os resultados variacionais e os resultados numéricos das equações diferenciais parciais associadas aos problemas.

A abordagem proposta pode ser estendida a outras equações de extrema importância, tais como a equação de Schrödinger não linear e a equação não-local de Gross-Pitaevskii para condensados dipolares. Os métodos abordados e os resultados obtidos neste trabalho podem ser úteis no desenvolvimento de novos métodos destinados a sondar a dinâmica de sólitons sujeitos a potenciais exóticos como por exemplo o potencial de Pöschl-Teller.

Pouco se sabe sobre a dinâmica de átomos ultrafrios aprisionados por este potencial. Encontramos na literatura um estudo voltado à dinâmica da Condensação de Bose-Einstein de átomos de ^{39}K não interagentes sujeitos ao potencial de Pöschl-Teller [85] e um trabalho analisando o espalhamento de sólitons através desse potencial [83]. Uma propriedade peculiar desse potencial é o fato dele não apresentar reflexão [85].

Como sugestão para futuros trabalhos, propomos explorar a dinâmica de gases fermiônicos e bosônicos confinados em uma combinação tridimensional de potenciais harmônicos com o potencial de Pöschl-Teller e analisar a influência deste nos condensados e também, analisar o espalhamento de sólitons sujeitos a este potencial e propor possíveis aplicações.

Bibliografia

- [1] A. d. Sousa, V. Bagnato, Gases bosônicos armadilhados, *Revista Brasileira de Ensino de Física* 26 (2004) 43–47.
URL http://www.scielo.br/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S1806-11172004000100007&nrm=iso
- [2] M. Modugno, G. Pagnini, M. Angel Valle Basagoiti, Effective self-similar expansion for the gross-pitaevskii equation, *Physical Review A* 97.
- [3] V. G. Ivancevic, T. Ivancevic, Sine-gordon solitons, kinks and breathers as physical models of nonlinear excitations in living cellular structures, *Journal of Geometry and Symmetry in Physics* 31.
- [4] L. Liu, C. Li, Coupled sine-gordon systems in dna dynamics, *Advances in Mathematical Physics* 2018 (2018) 1–7.
- [5] C. Tabi, A. Mohamadou, T. C. Kofane, *Solitons in DNA and Biological Implications*, 2014.
- [6] L. F. Mollenauer, J. P. Gordon, *Solitons in Optical Fibers*, First Edition: Fundamentals and Applications, Academic Press, Inc., Orlando, FL, USA, 2006.
- [7] M. B. C. Costa, F. de Sousa, J. Oliveira, J. E. de Oliveira, F. Sousa, F. P. da Luz, W. Paschoal Jr, M. B. C. Costa, *Soliton formation in long distance optical fiber communication system*, 2018.
- [8] F. Abdullaev, J. G. Caputo, M. Sørensen, *Propagation and Interaction of Optical Solitons in Fibers with Random Parameters*, Vol. 5, 1998, pp. 1–13.
- [9] O. V. Shtyrina, M. P. Fedoruk, Y. S. Kivshar, S. K. Turitsyn, Coexistence of collapse and stable spatiotemporal solitons in multimode fibers, *Phys. Rev. A* 97 (2018) 013841.
URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.97.013841>
- [10] G. Dvali, C. Gomez, Black hole’s quantum n-portrait, *Fortschritte der Physik* 61.
- [11] F. Cunillera, C. Germani, The gross-pitaevskii equations of a static and spherically symmetric condensate of gravitons, *Classical and Quantum Gravity* 35 (10) (2018) 105006.
URL <http://stacks.iop.org/0264-9381/35/i=10/a=105006>
- [12] S. Gielen, D. Oriti, Cosmological perturbations from full quantum gravity, *Physical Review D* 98.

- [13] L. Salasnich, Bright solitons in ultracold atoms, *Optical and Quantum Electronics* 49 (12) (2017) 409.
URL <https://doi.org/10.1007/s11082-017-1247-5>
- [14] A. Biswas, D. Milovic, Bright and dark solitons of the generalized nonlinear Schrödinger's equation, *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation* 15 (6) (2010) 1473 – 1484.
URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1007570409003608>
- [15] R. P. Paes, V. A. Nascimento, Estudo teórico de transição quântica de fases em gases bosônicos aprisionados por redes ópticas periódica e quase periódica, *Revista Brasileira de Ensino de Física* 41.
URL http://www.scielo.br/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S1806-11172019000100404&nrm=iso
- [16] R. Paes, E. S. P. Melo, R. C. A. Guimarães, V. Nascimento, Gases de átomos fermiônicos aprisionados por uma rede quase periódica e um potencial harmônico bidimensional, *Revista Brasileira de Ensino de Física* 41.
URL http://www.scielo.br/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S1806-11172019000100410&nrm=iso
- [17] C. Gross, I. Bloch, Quantum simulations with ultracold atoms in optical lattices, *Science* 357 (6355) (2017) 995–1001.
URL <http://science.sciencemag.org/content/357/6355/995>
- [18] I. Bloch, Quantum coherence and entanglement with ultracold atoms in optical lattices, *Nature* 453 (2008) 1016–1022.
- [19] J. Simon, W. S. Bakr, R. Ma, M. Eric Tai, P. Preiss, M. Greiner, Quantum simulation of antiferromagnetic spin chains in an optical lattice, *Nature* 472 (2011) 307–12.
- [20] L. Tarruell, L. Sanchez-Palencia, Quantum simulation of the hubbard model with ultracold fermions in optical lattices, *Comptes Rendus Physique* 19 (6) (2018) 365 – 393, quantum simulation / Simulation quantique.
URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1631070518300926>
- [21] D. Griffiths, *Introduction to Quantum Mechanics*, Pearson international edition, Pearson Prentice Hall, 2005.

- [22] T. Bland, Bose-einstein condensation: Non-equilibrium studies of the stochastic gross-pitaevskii equation for ultracold atoms, Master's thesis, School of Mathematics and Statistics, University of Newcastle (5 2014).
- [23] C. A. Regal, M. Greiner, D. S. Jin, Observation of resonance condensation of fermionic atom pairs, *Phys. Rev. Lett.* 92 (2004) 040403.
URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.92.040403>
- [24] S. K. Adhikari, Mean-field description of a dynamical collapse of a fermionic condensate in a trapped boson-fermion mixture, *Phys. Rev. A* 70 (2004) 043617.
URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.70.043617>
- [25] S. Salinas, Introdução a Física Estatística Vol. 09, EDUSP, 1997.
URL <https://books.google.com.br/books?id=cAlP3sc0K44C>
- [26] V. Bagnato, A Condensação de Bose-Einstein, *Revista Brasileira de Ensino de Física* 19 (1).
- [27] W. Ketterle, Nobel lecture: When atoms behave as waves: Bose-einstein condensation and the atom laser, *Rev. Mod. Phys.* 74 (2002) 1131–1151.
URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.74.1131>
- [28] B. Rizzuti, F. Forgerini, Uma interpretação simples para os condensados de Bose-Einstein, *Revista Brasileira de Ensino de Física* 37 (2015) 1316.
URL http://www.scielo.br/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S1806-11172015000101316&nrm=iso
- [29] M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthews, C. E. Wieman, E. A. Cornell, Observation of bose-einstein condensation in a dilute atomic vapor, *Science* 269 (1995) 198 – 201.
- [30] K. B. Davis, M. O. Mewes, M. R. Andrews, N. J. van Druten, D. S. Durfee, D. M. Kurn, W. Ketterle, Bose-einstein condensation in a gas of sodium atoms, *Phys. Rev. Lett.* 75 (1995) 3969–3973.
URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.75.3969>
- [31] D. D. Durfee, W. Ketterle, Experimental studies of bose-einstein condensation, *Optics express* 2 8 (1998) 299–313.
- [32] P. Kevrekidis, D. Frantzeskakis, R. Carretero-González, Emergent Nonlinear Phenomena in Bose-Einstein Condensates: Theory and Experiment, Springer Series on Atomic,

- Optical, and Plasma Physics, Springer Berlin Heidelberg, 2007.
 URL <https://books.google.com.br/books?id=crWuKE0vHN4C>
- [33] C. A. G. Buitrago, Redução dimensional das equações de Gross-pitaevskii e densidade funcional, Master's thesis, Instituto de Física Teórica, São Paulo (8 2009).
- [34] M. Adrioli Caracanhas, Interações em Condensados de Bose-Einstein: Temperatura finita e Gás dipolar, Master's thesis, Instituto de Física de São Carlos, São Carlos (2010).
- [35] E. Evaristo Chiquillo Márquez, Bright solitons in a quasi-one-dimensional dipolar bose-einstein condensate, Master's thesis, Instituto de Física Teórica, São Paulo (2 2014).
- [36] E. Butkov, Física Matemática, Guanabara Dois, 1978.
- [37] J. Rogel-Salazar, The Gross-Pitaevskii equation and Bose-Einstein condensates, European Journal of Physics 34 (2) (2013) 247.
 URL <http://stacks.iop.org/0143-0807/34/i=2/a=247>
- [38] C. J. Pethick, H. Smith, Bose-Einstein Condensation in Dilute Gases, 2nd Edition, Cambridge University Press, 2008.
- [39] H. L. F. da Luz, Dinâmica e estabilidade de condensados de bose-einstein em redes ópticas lineares e não-lineares, Ph.D. thesis, Instituto de Física da Universidade de São Paulo, São Paulo (2013).
- [40] C. Chin, R. Grimm, P. Julienne, E. Tiesinga, Feshbach resonances in ultracold gases, Rev. Mod. Phys. 82 (2010) 1225–1286.
 URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.82.1225>
- [41] M. Inguscio, W. Ketterle, C. Salomon, S. italiana di fisica, Gas Di Fermi Ultrafreddi:, International School of Physics "Enrico Fermi", IOS Press, 2007.
 URL <https://books.google.com.br/books?id=DMSZJlf3GJoC>
- [42] C. Bradley, C. Sackett, R. G. Hulet, Bose-einstein condensation of lithium: Observation of limited condensate number, Physical Review Letters - PHYS REV LETT 78 (1997) 985–989.
- [43] N. Parker, C. Barenghi, A primer on quantum fluids, 2016.
- [44] S. Grossmann, M. Holthaus, On bose-einstein condensation in harmonic traps, Physics Letters A 208 (3) (1995) 188 – 192.
 URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/037596019500766V>

- [45] H. Uncu, D. Tarhan, E. Demiralp, O. E. Mustecaplioglu, Bose-einstein condensate in a harmonic trap decorated with dirac $\hat{I}\hat{Z}$ functions, *Physical Review A* 76.
- [46] A. J. Leggett, Bose-einstein condensation in a harmonic trap: Effect of interactions on tc, *Journal of Statistical Physics* 110 (3-6) (2003) 903–910.
- [47] B. A. M. V. N. S. K. Adhikari, Gap solitons in fermion superfluids, *Mathematics and Computers in Simulation* 80.
- [48] V. Nascimento, (study of quantum gases in an optical lattice using variational approximation), *Revista Brasileira de Ensino de Física* 33 (2) (2011) 2305.
- [49] V. Nascimento, C. Silva, A. Lanoa, V. A. Nascimento, A. Fernandes, P. Cassino, Uma abordagem variacional ao estudo de condensados de bose-einstein aprisionados por redes ópticas, *Revista Brasileira de Ensino de Física* 36 (2014) 01–10.
- [50] V. Nascimento, C. Silva, A. Silva, R. Guimarães, E. Melo, Método variacional aplicado ao estudo de um gás de Átomos de Fermi em um estado superfluido aprisionados por uma rede óptica quase periódica, *Revista Brasileira de Ensino de Física* 38.
URL http://www.scielo.br/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S1806-11172016000400401&nrm=iso
- [51] I. Bloch, Ultracold quantum gases in optical lattices, *Nat. Phys.* 1 (2005) 23–30.
- [52] H. Callen, *Thermodynamics and an Introduction to Thermostatistics*, Wiley, 1985.
URL <https://books.google.com.br/books?id=XJORAQAATAAJ>
- [53] P. J. Y. Louis, Matter-wave solitons in optical lattices and superlattices, Ph.D. thesis, Australian National University, Canberra (5 2005).
- [54] L.-C. Zhao, Beating effects of vector solitons in bose-einstein condensates, *Phys. Rev. E* 97 (2018) 062201.
URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.97.062201>
- [55] T. M. Bersano, V. Gokhroo, M. A. Khamehchi, J. D’Ambroise, D. J. Frantzeskakis, P. Engels, P. G. Kevrekidis, Three-component soliton states in spinor $f = 1$ bose-einstein condensates, *Phys. Rev. Lett.* 120 (2018) 063202.
URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.120.063202>
- [56] H. A. Haus, W. S. Wong, Solitons in optical communications, *Rev. Mod. Phys.* 68 (1996) 423–444.
URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.68.423>

- [57] N. R. Quintero, F. G. Mertens, A. Efimov, A. R. Bishop, Soliton dynamics in optical fibers using the generalized traveling-wave method, *Phys. Rev. E* 93 (2016) 042214.
URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.93.042214>
- [58] P. Rohrmann, A. Hause, F. Mitschke, Two-soliton and three-soliton molecules in optical fibers, *Phys. Rev. A* 87 (2013) 043834.
URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.87.043834>
- [59] N. Ashcroft, N. Mermin, *Solid State Physics*, HRW international editions, Holt, Rinehart and Winston, 1976.
- [60] C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics*, Wiley, 2004.
- [61] A. Ratanavis, *Gap solitons: An introduction*, 2005.
- [62] P. J. Y. Louis, E. Ostrovskaya, C. Savage, Y. Kivshar, Bose-einstein condensates in optical lattices: Band-gap structure and solitons 67.
- [63] P. J. Y. Louis, E. A. Ostrovskaya, C. M. Savage, Y. S. Kivshar, Bose-einstein condensates in optical lattices: Band-gap structure and solitons, *Phys. Rev. A* 67 (2003) 013602.
URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.67.013602>
- [64] M. Greiner, S. Fölling, Condensed-matter physics: Optical lattices, *Nature* 453 (2008) 736–738.
- [65] 1 ultracold atoms in optical lattices.
- [66] Optical lattices, https://www.ntt-review.jp/archive/ntttechnical.php?contents=ntr201209fa5_s.html, acessado em 25/04/2019.
- [67] S. P. Jordan, D.W., *Nonlinear Ordinary Differential Equations: An introduction for Scientists and Engineers*, 4th Edition, Vol. 1993, Oxford, 2007.
- [68] M. Wickramasinghe, J. Berg, Vibrational control of Mathieu’s equation (2013) 686–691.
- [69] N. Lemos, *Mecânica Analítica*, LIVRARIA DA FISICA, 2007.
URL <https://books.google.com.br/books?id=Xp0S2e0dDR4C>
- [70] Z. B. L. X. e. a. Wu, XY., Derivation of Nonlinear Schrödinger Equation, *International Journal of Theoretical Physics* 49 (2010) 2437–2445.
- [71] M. Ruggiero, V. da Rocha Lopes, *Cálculo numérico: aspectos teóricos e computacionais*, Makron Books do Brasil, 1996.

- [72] G. Monerat, L. F. Filho, E. C. Silva, G. Oliveira-Neto, P. Nogueira, A. de Assumpção, Quantização de Sistemas Hamiltonianos via Método de Diferenças Finitas, *Revista Brasileira de Ensino de Física* 32 (1) (2010) 1304.
- [73] C. M. Oishi, J. Y. Yuan, J. A. Cuminato, D. E. Stewart, Stability analysis of crank-nicolson and euler schemes for time-dependent diffusion equations, *BIT Numerical Mathematics* 55 (2) (2015) 487–513.
URL <https://doi.org/10.1007/s10543-014-0509-x>
- [74] H. Wang, Numerical studies on the split-step finite difference method for nonlinear Schrödinger equations, *Applied Mathematics and Computation* 170 (1) (2005) 17 – 35.
URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0096300304008689>
- [75] W. Bao, D. Jaksch, P. A. Markowich, Numerical solution of the gross-pitaevskii equation for bose-einstein condensation, *Journal of Computational Physics* 187 (1) (2003) 318 – 342.
URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999103001025>
- [76] P. Muruganandam, S. Adhikari, Fortran programs for the time-dependent gross-pitaevskii equation in a fully anisotropic trap, *Computer Physics Communications* 180 (1) (2009) 1888 – 1912.
- [77] X. Antoine, W. Bao, C. Besse, Computational methods for the dynamics of the nonlinear schrödinger/gross-pitaevskii equations, *Computer Physics Communications* 184 (12) (2013) 2621 – 2633.
URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0010465513002403>
- [78] S. A. B. Malomed, Tightly bound gap solitons in a fermi gas, *Europhysics Letters*.
- [79] B. M. S. Adhikari, Gap solitons in amodel of a superfluid fermion gas in optical lattices, *arXiv:0807.3495v1 [cond-mat.other]* 22 Jul 2008.
- [80] T. Mayteevarunyoo, B. Malomed, Stability limits for gap solitons in a bose-einstein condensate trapped in a time-modulated optical lattice, *Phys. Rev. A* 74.
- [81] MS Windows NT kernel description, https://www.mathworks.com/matlabcentral/fileexchange/35355-stability-chart#functions_tab, acessado em 22/08/2018.
- [82] G. A. Sekh, Effects of spatially inhomogeneous atomic interactions on Bose-Einstein condensates in optical lattices, *Physics Letters A* 376 (21) (2012) 1740 – 1747.
URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S037596011200343X>

- [83] B. A. Umarov, A. Messikh, N. Regaa, B. Baizakov, Variational analysis of soliton scattering by external potentials, *Journal of Physics Conference Series* 435 (2013) 2024–.
- [84] B. A Umarov, N. Busul Aklan, Soliton scattering on the external potential in weakly nonlocal nonlinear media, *Malaysian Journal of Mathematical Sciences* (2016) 219–226.
- [85] R. Sarath, P. C. Vinodkumar, Bose-Einstein condensation in generalized Pöschl-Teller potential, *Pramana* 85 (1) (2015) 77–89.