Universidade Federal de Mato Grosso do Sul - UFMS
Instituto de Física - INFI
Programa de Pós-Graduação em Ciência dos Materiais - PPGCM

Estabilidade de sólitons de ondas de matéria em condensados de Bose-Einstein atrativos aprisionados pelo potencial de Pöschl-Teller esfericamente simétrico

Lucas Carvalho Pereira

Orientador: Prof. Dr. Valter Aragão do Nascimento

Tese de Doutorado apresentada ao Instituto de Física da Universidade Federal de Mato Grosso do Sul para a obtenção do título de Doutor em Ciência dos Materiais.

Banca Examinadora

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

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

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

Prof. Dr. Arnaldo Gammal (IFUSP-USP)

Prof. Dr. Lauro Tomio (IFT-UNESP)

Campo Grande-MS
2021

Folha de Aprovação

Os componentes da banca de avaliação, abaixo listados, consideram este trabalho aprovado.

Prof. Dr. Valter Aragão do Nascimento - Orientador

Prof. Dr. Bruno Spolon Marangoni

Prof. Dr. João Vítor Batista Ferreira

Prof. Dr. Arnaldo Gammal

Prof. Dr. Lauro Tomio

Data de aprovação: 20 de maio de 2021.

"However difficult life may seem,
there is always something you can do and succeed at.
Where there's life, there's hope."
Stephen Hawking

Agradecimentos

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

Agradeço também à minha esposa Camila e aos meus filhos Miguel e Davi, que foram por muitas vezes a fonte da minha inspiração para terminar esta tese.

Agradeço aos meus pais, Valdiney e Márcia, e ao meu irmão, Breno pelo apoio.

Agradeço ao meu orientador, Valter Aragão, pelos ensinamentos e valiosas ideias para o progresso deste 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 Gonçalves, Cícero Cena, Giuseppe Abíola, Heberton Wender e Samuel Leite pelos ensinamentos em sala de aula.

Aos meus amigos Fernando, Felipe, Eder, Donavan e Dihego.

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

Resumo

Condensados de Bose-Einstein são sistemas macroscópicos excelentes para a observação do comportamento quântico da matéria. Desde sua realização experimental em gases atômicos fracamente interagentes, aprisionados por potenciais externos, diversos fenômenos não lineares relacionados a esse sistema foram intensamente explorados. Nesta tese, nós investigamos a estabilidade de sólitons de ondas de matéria em condensados de Bose-Einstein com interações interatômicas atrativas, confinados pelo potencial hiperbólico de Pöschl-Teller esfericamente simétrico. Para este propósito, utilizamos a equação de Gross-Pitaevskii, dentro do escopo da teoria de campo médio, para descrever o condensado de Bose-Einstein. Com o intuito de resolver a equação de Gross-Pitaevskii, utilizamos duas abordagens distintas: uma analítica (método variacional) e outra numérica (método *split-step* Crank-Nicolson). Em ambas abordagens, utilizamos a função secante-tangente hiperbólica para descrever a função de onda macroscópica referente ao condensado de Bose-Einstein. Os resultados, por intermédio do critério Vakhitov-Kolokov, previram a estabilidade de sólitons tridimensionais e, ademais, predizeram o comportamento do número crítico de átomos em função do comprimento de espalhamento interatômico. Na perspectiva de eventuais aplicações, acreditamos que os resultados obtidos podem ser relevantes no âmbito da óptica não linear e da física da matéria condensada.

Palavras-chave: condensados de Bose-Einstein; equação de Gross-Pitaevskii; potencial de Pöschl-Teller; sólitons de ondas de matéria; método variacional; método numérico.

Abstract

Bose-Einstein condensates are excellent macroscopic systems for observing the quantum behavior of matter. Since its experimental performance in weakly interacting atomic gases, trapped by external potentials, several non-linear phenomena related to this system have been intensively explored. In this thesis, we investigate the stability of matter-wave solitons in Bose-Einstein condensates with attractive interatomic interactions, confined by the spherically symmetrical Pöschl-Teller potential. For this purpose, we use the Gross-Pitaevskii equation, within the scope of the mean-field theory, to describe the Bose-Einstein condensate. In order to solve the Gross-Pitaevskii equation, we used two different approaches: one analytical (variational method) and the other numeric (split-step Crank-Nicolson method). In both approaches, we use the hyperbolic secant-tangent function to describe the macroscopic wave function for the Bose-Einstein condensate. The results, using the Vakhitov-Kolokov criterion, predicted the stability of three-dimensional solitons and, in addition, they predicted the behavior of the critical number of atoms as a function of the interatomic scattering length. From the perspective of possible applications, we believe that the results obtained may be relevant in the context of nonlinear optics and condensed matter physics.

Keywords: Bose-Einstein condensates; Gross-Pitaevskii equation; Pöschl-Teller potential; matter-wave solitons; variational method; numerical method.

Sumário

1 Introdução **11**

1.1 Motivação e objetivos . . . 11

1.2 Mecânica Quântica . . . 13

1.2.1 Comutadores e o princípio da incerteza de Heisenberg . . . 13

1.2.2 A função de onda e a fase . . . 14

1.2.3 Equação de Schrödinger esfericamente simétrica . . . 15

1.2.3.1 Equação angular . . . 17

1.2.3.2 Equação radial . . . 18

1.3 Mecânica Estatística Quântica . . . 19

1.3.1 Gás ideal de bósons . . . 19

1.3.2 A condensação de Bose-Einstein . . . 21

1.3.3 Realização experimental . . . 23

2 Teoria de campo médio para condensados de Bose-Einstein **26**

2.1 Equação de Gross-Pitaevskii . . . 26

2.2 Comprimento de espalhamento . . . 31

2.3 Ressonância de Feshbach . . . 31

2.4 O potencial de Pöschl-Teller . . . 33

2.5 Sólitons . . . 36

2.6 Critério VK . . . 38

3 Metodologia **39**

3.1 O modelo . . . 39

3.2 Formulação variacional . . . 40

3.3 Discretização numérica . . . 42

3.3.1 Método *split-step* . . . 42

4 Resultados e discussão **47**
4.1 Resultados variacionais 47
4.1.1 Equações de Euler-Lagrange 47
4.1.2 Energia por átomo 49
4.1.3 Número crítico de átomos 50
4.1.4 Potencial químico, raio quadrático médio e estabilidade 54
4.2 Resultados numéricos 58
4.3 Resultados numéricos versus resultados variacionais 66

5 Conclusões e considerações finais **71**

Apêndice **80**
A Teorema do Virial em condensados de Bose-Einstein 80
B Polinômios associados de Legendre 83
C Método Variacional 84
C.1 Teoria de Campos na Forma Lagrangiana 84
C.2 Teoria de Campos na Forma Hamiltoniana 88
C.3 Método Variacional 88
D Métodos numéricos 92
D.1 Método de Newton-Raphson 92
D.2 Método das diferenças finitas 94
D.3 Método de Crank-Nicolson 99
D.4 Método *split-step* 103

Referências Bibliográficas **108**

Abreviações

1D	-	unidimensional
3D	-	tridimensional
CBE	-	condensado de Bose-Einstein
EGP	-	equação de Gross-Pitaevskii
PPT	-	potencial de Pöschl-Teller
ESL	-	equação de Schrödinger (linear)
ESNL	-	equação de Schrödinger não linear
ELS	-	equação de Lippmann-Schwinger
VK	-	Vakhitov-Kolokov
TCM	-	teoria de campo médio
SSCN	-	*split-step* Crank-Nicolson
dB	-	de Broglie
PAL	-	polinômios associados de Legendre

Notações

Coordenadas cartesianas

vetor posição: $\mathbf{r} \equiv (x, y, z)$

integral: $\int d\mathbf{r} \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} dxdydz$

Laplaciano: $\nabla^2 \equiv \dfrac{\partial^2}{\partial x^2} + \dfrac{\partial^2}{\partial y^2} + \dfrac{\partial^2}{\partial z^2}$

Coordenadas esféricas

vetor posição: $\mathbf{r} \equiv (r, \theta, \phi)$

integral: $\int d\mathbf{r} \equiv \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} \int_0^{\infty} r^2 \mathrm{sen}\,(\theta)\, drd\theta d\phi$

Laplaciano: $\nabla^2 \equiv \dfrac{1}{r^2}\dfrac{\partial}{\partial r}\left(r^2 \dfrac{\partial}{\partial r}\right) + \dfrac{1}{r^2 \mathrm{sen}\,(\theta)}\dfrac{\partial}{\partial \theta}\left(\mathrm{sen}\,(\theta)\,\dfrac{\partial}{\partial \theta}\right) + \dfrac{1}{r^2 \mathrm{sen}^2\,(\theta)}\left(\dfrac{\partial^2}{\partial \phi^2}\right)$

Constantes fundamentais

constante de Boltzmann: $k_B = 1.38 \times 10^{-23}\,\mathrm{J/K}$

constante reduzida de Planck: $\hbar = 1.05 \times 10^{-34}\,\mathrm{J \cdot s}$

raio de Bohr: $a_0 = 0.053\,\mathrm{nm}$

Capítulo 1

Introdução

1.1 Motivação e objetivos

O advento da condensação de Bose-Einstein abriu o caminho para uma melhor compreensão do comportamento dinâmico de átomos ultrafrios confinados por potenciais externos [1, 2, 3]. As propriedades dinâmicas e estáticas dos condensados de Bose-Einstein (CBE) diluídos e fracamente interagentes no regime de temperaturas ultrafrias podem ser descritas por meio de uma teoria de campo médio (TCM) [4], resultando em um modelo regido pela equação de Gross-Pitaevskii (EGP) [5, 6]. A EGP é a equação de Schrödinger (ESL) acrescida de um termo não linear referente às interações interatômicas [7].

Os primeiros CBEs foram produzidos por meio de armadilhas magnéticas, que podem ser descritas por potenciais parabólicos/harmônicos [8, 9, 10, 11, 12]. No entanto, existem outros tipos de armadilhas que são usadas em confinamento de átomos ultrafrios. Dentre os potenciais de aprisionamento utilizadas em CBEs, podemos citar os potenciais periódicos [13, 14, 15] conhecidos como redes ópticas [16]. Uma vez que as configurações das redes ópticas são semelhantes aos arranjos geométricos de átomos em sólidos cristalinos, elas podem ser usadas para estudar o comportamento atômico em um ambiente altamente controlado. Assim, os átomos ultrafrios presentes na rede óptica tornam-se um ambiente perfeito para a investigação de fenômenos não lineares relacionados à física do estado sólido [17]. Também existe a possibilidade de que armadilhas magnéticas e/ou ópticas possam ser combinadas experimentalmente em conjunto ou com outros potenciais, como por exemplo, o potencial de poço-duplo [18, 19, 20, 21].

Embora existam diversos trabalhos referentes ao confinamento de átomos ultrafrios por meio dos potenciais externos mencionados acima, é interessante, do ponto de vista teórico e experimental, investigar propriedades dos CBEs confinados por outros potenciais externos. De fato, trabalhos que propuseram, por exemplo, potenciais de confinamento hiperbólicos são limitados. Entretanto, o potencial de Pöschl-Teller (PPT) [22] — potencial hiperbólico — vem despertando

interesse dentro do contexto da condensação de Bose-Einstein. Sarath et al [23] investigaram teoricamente algumas características peculiares do PPT generalizado como um potencial de aprisionamento em CBEs não interagentes constituídos por átomos de ^{39}K. Nath et al [24] realizaram estudos teóricos sobre a dinâmica de CBEs unidimensionais (1D) aprisionados pelo PPT. Mück et al [25] propuseram um estudo de buracos negros descritos como um CBE de grávitons aprisionados pelo PPT através da equação de Klein-Gordon.

Recentemente, Kundu et al [26] contribuíram para o campo das *Rogue waves*, fornecendo um modelo analítico exato da condensação de Bose-Einstein acoplada, sujeita ao PPT; Priyam et al [27] investigaram os efeitos da interação luz-matéria no caso onde dois pulsos de *laser* contrapropagantes e ortogonalmente polarizados incidiram sobre um CBE. Os efeitos das interações luz-matéria e átomo-átomo foram estudados na região estável através da dispersão atômica, revelando a assinatura da formação de estado ligado quando o potencial óptico é do tipo Pöschl-Teller; Borisenko et al [28] observaram evidências diretas (experimentais) acerca da estabilidade espacial de CBEs de mágnons confinados por um potencial de aprisionamento aparentemente similar ao PPT.

Além disso, em qualquer configuração experimental, verifica-se que os potenciais de aprisionamento realistas são, de fato, finitos nas bordas da armadilha. Assim, potenciais de aprisionamento podem ser descritos por potenciais finitos do tipo Pöschl-Teller [29], o que nos motivou fortemente a investigar, do ponto de vista teórico, a possibilidade de se criar CBEs estáveis confinados pelo PPT. Ademais, o PPT é um potencial óptico, isto é, pode ser criado e manipulado através de *lasers* [30].

Portanto, propomos nesta tese um estudo sobre a existência e estabilidade de sólitons de ondas de matéria em CBEs com interações interatômicas atrativas, aprisionados pelo PPT esfericamente simétrico. Optamos por investigar CBEs atrativos devido ao fato de que nesse regime o CBE pode eventualmente colapsar. Utilizamos a EGP, dentro do escopo da TCM, para descrever o CBE. Com o intuito de resolver a EGP, utilizamos duas abordagens distintas: uma analítica (método variacional) [31, 32] e outra numérica (método *split-step* Crank-Nicolson) [33, 34]. Em ambas abordagens, utilizamos a função secante-tangente hiperbólica para descrever a função de onda macroscópica referente ao CBE. A estabilidade foi analisada através do critério Vakhitov-Kolokov (VK) [35, 36] comparando os resultados variacionais com os resultados numéricos.

Esta tese está dividida como se segue. No Capítulo 1 é apresentada uma breve revisão sobre Mecânica Quântica e Mecânica Estatística. No Capítulo 2 é apresentada a derivação da EGP, além de uma breve discussão sobre o comprimento de espalhamento átomo-átomo e ressonância de Feshbach. Em seguida, apresentamos a solução analítica da ESL sujeita ao PPT e as soluções exatas para sólitons da ESNL. Finalmente, é feita uma breve discussão sobre o critério VK. No Capítulo 3 são apresentados os métodos analíticos e numéricos empregados para a obtenção da

solução da EGP, proposta nesta tese. Os resultados deste trabalho são discutidos no Capítulo 4. Inicialmente são exibidos os resultados variacionais e numéricos relativos ao número crítico de átomos (diagrama de estabilidade), potencial químico, energia por átomo e raio quadrático médio para um CBE atrativo. A estabilidade do CBE é discutida através do critério VK e comparada com os resultados numéricos provenientes da evolução temporal (propagação imaginária) dos sólitons. A conclusão e as considerações finais deste trabalho se dá no Capítulo 5, onde é feita uma discussão final acerca dos resultados e das perspectivas no estudo de sólitons de ondas de matéria em CBEs aprisionados pelo PPT. Estudos mais detalhados sobre a solução da ESL sujeita ao PPT, formulação do método variacional e o desenvolvimento dos métodos numéricos estão presentes no Apêndice (5).

1.2 Mecânica Quântica

1.2.1 Comutadores e o princípio da incerteza de Heisenberg

Na Mecânica Quântica, um operador é um objeto que atua sobre um estado do sistema para fornecer um valor, ou até mesmo alterar o estado. Os operadores são frequentemente denotados pelo símbolo ($\hat{}$) acima das letras que os representam. Para dois operadores $\hat{A}$ e $\hat{B}$, o comutador é definido como

$$\left[\hat{A}, \hat{B}\right] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}, \tag{1.1}$$

que nos diz se os dois operadores comutam. Se essa quantidade for zero para dois observáveis A e B, então podemos medi-los simultaneamente; caso contrário, estamos limitados a quanta informação podemos saber sobre cada um deles em qualquer momento. Na Mecânica Quântica, o princípio da incerteza nos dá um limite para a quantidade de informações que podemos saber sobre um sistema em um determinado momento. Se tivermos duas grandezas complementares, por exemplo a posição x e momento p de uma partícula em uma dimensão, então temos um limite inferior na precisão para o qual podemos realmente saber os valores de cada grandeza simultaneamente. Matematicamente, isso é expresso por

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}, \tag{1.2}$$

onde $\hbar$ é a constante de Planck reduzida. Similarmente, pode-se dizer que os operadores $\hat{x}$ e $\hat{p}$ não comutam: $[\hat{x}, \hat{p}] \neq 0$. De uma forma geral, o princípio da incerteza generalizado afirma que:

$$\sigma_A^2 \sigma_B^2 \geq \left(\frac{1}{2\mathrm{i}} \left\langle \left[\hat{A}, \hat{B}\right] \right\rangle\right)^2, \tag{1.3}$$

onde $\sigma_A^2 \equiv \left\langle (\Delta A)^2 \right\rangle$ e $\sigma_B^2 \equiv \left\langle (\Delta B)^2 \right\rangle$.

1.2.2 A função de onda e a fase

Ao considerarmos uma partícula descrita pela Mecânica Clássica, basta descrevermos sua posição $\mathbf{r}$ e momento $\mathbf{p}$ que prevemos sua evolução usando as leis de Newton [37]. 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, em geral, é uma função complexa que depende da posição $\mathbf{r}$ e do tempo t. Para uma única partícula, define-se a probabilidade $P(\mathbf{r}, t)$ para encontrar uma partícula de acordo com

$$P(\mathbf{r}, t) \equiv |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 \, d\mathbf{r}. \tag{1.4}$$

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

$$\rho(\mathbf{r}, t) \equiv |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 , \tag{1.5}$$

cuja integral em todo o espaço $\mathbb{R}^3$ resulta no número total de partículas N:

$$\int |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 \, d\mathbf{r} = N. \tag{1.6}$$

A função de onda também contém propriedades relacionadas à *fase* dos sistemas. A fase pode ser melhor explicada através de um exemplo [38]. 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 o momento de dipolo magnético resultante no sistema será praticamente nulo. 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, o momento de dipolo magnético resultante será "fortemente magnético" e as partículas estarão *em fase*.

Similarmente, quando resfriamos um gás quântico até alcançarmos a condensação de Bose-Einstein [39], as partículas passam por uma *transição de fase* de tal forma que elas acabam ficando em fase. Caso uma partícula seja perturbada nessa configuração, todas as outras reagem de forma coletiva como se fossem uma única partícula.

Podemos definir a fase tomando a definição da densidade de partículas dada pela Eq. 1.5 e reorganizá-la em termos da função de onda:

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \sqrt{\rho(\mathbf{r}, t)} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\eta(\mathbf{r}, t)}, \tag{1.7}$$

onde $\eta(\mathbf{r},t)$ é a fase do sistema. Podemos reorganizar esta equação usando a fórmula de Euler para $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\eta(\mathbf{r},t)}$ e separando as partes real $\Re(\Psi(\mathbf{r},t))$ e imaginária $\Im(\Psi(\mathbf{r},t))$ da função de onda para se obter:

$$\eta(\mathbf{r},t) = \arctan\left[\frac{\Im(\Psi(\mathbf{r},t))}{\Re(\Psi(\mathbf{r},t))}\right]. \tag{1.8}$$

1.2.3 Equação de Schrödinger esfericamente simétrica

A equação de Schrödinger linear (ESL) para um sistema tridimensional (3D) é dada por [40]:

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi + V\Psi, \tag{1.9}$$

onde

$$\nabla^2 \equiv \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}, \tag{1.10}$$

é o Laplaciano em coordenadas cartesianas, $\mathrm{i}^2 = -1$ é a unidade imaginária, $\hbar = h/2\pi$ é a constante de Planck reduzida e m é a massa da partícula. O potencial $V \equiv V(\mathbf{r},t)$ e a função de onda $\Psi \equiv \Psi(\mathbf{r},t)$ são funções da posição $\mathbf{r} \equiv (x,y,z)$ e do tempo t. A probabilidade de se encontrar uma partícula no volume infinitesimal $d\mathbf{r} = dxdydz$ é de $|\Psi(\mathbf{r},t)|^2 d\mathbf{r}$ e a função de onda é normalizada à unidade:

$$\int |\Psi(\mathbf{r},t)|^2 d\mathbf{r} = 1. \tag{1.11}$$

Se o potencial é independente do tempo $V(\mathbf{r},t) \to V(\mathbf{r})$, haverá um conjunto completo de estados estacionários [37],

$$\Psi_n(\mathbf{r},t) = \psi_n(\mathbf{r})\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_n t/\hbar}, \tag{1.12}$$

nos quais a função de onda espacial ψ_n satisfaz a ESL independente do tempo:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V\psi = E\psi. \tag{1.13}$$

A solução geral para a ESL dependente do tempo é:

$$\Psi(\mathbf{r},t) = \sum_n c_n\psi_n(\mathbf{r})\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_n t/\hbar}, \tag{1.14}$$

onde os coeficientes c_n são determinados pela função de onda inicial $\Psi(\mathbf{r},0)$.

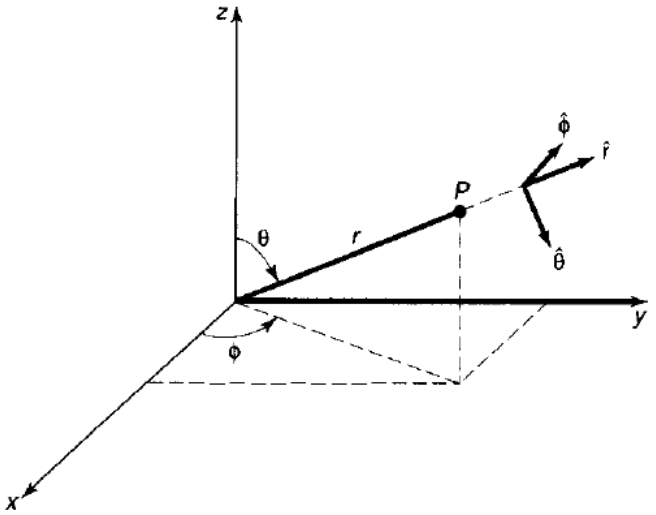


Figura 1.1: Sistema de coordenadas esféricas: raio r, ângulo polar θ e ângulo azimutal ϕ.

Geralmente, o potencial é uma função apenas da distância da origem, ou seja, um potencial central $V(\mathbf{r}) \rightarrow V(r)$. Nesse caso, é natural adotar coordenadas esféricas $\mathbf{r} \equiv (r, \theta, \phi)$. Em coordenadas esféricas, o Laplaciano toma a seguinte forma:

$$\nabla^2 \equiv \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2 \mathrm{sen}\,(\theta)}\frac{\partial}{\partial \theta}\left(\sin(\theta)\,\frac{\partial}{\partial \theta}\right) + \frac{1}{r^2 \mathrm{sen}^2\,(\theta)}\left(\frac{\partial^2}{\partial \phi^2}\right). \tag{1.15}$$

Assim, a ESL independente do tempo nos diz que:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2 \mathrm{sen}\,(\theta)}\frac{\partial}{\partial \theta}\left(\sin(\theta)\,\frac{\partial}{\partial \theta}\right) + \frac{1}{r^2 \mathrm{sen}^2\,(\theta)}\left(\frac{\partial^2}{\partial \phi^2}\right)\right]\psi + V\psi = E\psi. \tag{1.16}$$

Buscando soluções por meio do método da separação de variáveis:

$$\psi(r, \theta, \phi) = R(r)\,\Upsilon(\theta, \phi), \tag{1.17}$$

podemos inserir a Eq. 1.17 na Eq. 1.16, e após algumas manipulações algébricas, obtemos:

$$\left\{\frac{1}{R}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right) - \frac{2m}{\hbar^2}r^2\,[V - E]\right\} + \left\{\frac{1}{\Upsilon}\frac{1}{\mathrm{sen}\,(\theta)}\frac{\partial}{\partial \theta}\left(\mathrm{sen}\,(\theta)\,\frac{\partial \Upsilon}{\partial \theta}\right) + \frac{1}{\Upsilon}\frac{1}{\mathrm{sen}^2\,(\theta)}\left(\frac{\partial^2 \Upsilon}{\partial \phi^2}\right)\right\} = 0. \tag{1.18}$$

O primeiro termo depende somente da variável radial r, considerando que o restante depende apenas das variáveis angulares θ e ϕ; consequentemente, cada termo deve ser igual a

uma constante $l\,(l+1)$:

$$\frac{1}{\operatorname{sen}(\theta)}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\operatorname{sen}(\theta)\frac{\partial\Upsilon}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\operatorname{sen}^2(\theta)}\left(\frac{\partial^2\Upsilon}{\partial\phi^2}\right)=-l\,(l+1)\,\Upsilon; \tag{1.19}$$

$$\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right)-\frac{2m}{\hbar^2}r^2\left[V-E\right]R=l\,(l+1)\,R. \tag{1.20}$$

onde as Eqs. 1.19 e 1.20 são denominadas de equação angular e equação radial, respectivamente.

1.2.3.1 Equação angular

A Eq. 1.19 descreve a dependência ψ em função das variáveis angulares θ e ϕ. Supondo a seguinte separação de variáveis:

$$\Upsilon(\theta,\phi)=\Theta(\theta)\,\Phi(\phi), \tag{1.21}$$

e substituindo a Eq. 1.21 na Eq. 1.19, encontramos:

$$\left\{\frac{1}{\Theta}\operatorname{sen}(\theta)\frac{d}{d\theta}\left(\operatorname{sen}(\theta)\frac{d\Theta}{d\theta}\right)+l\,(l+1)\operatorname{sen}^2(\theta)\right\}+\left\{\frac{1}{\Phi}\frac{d^2\Phi}{d\phi^2}\right\}=0. \tag{1.22}$$

O primeiro termo depende somente da variável angular polar θ, considerando que o restante depende apenas da variável angular azimutal ϕ; consequentemente, cada termo deve ser igual a uma constante m^2:

$$\operatorname{sen}(\theta)\frac{d}{d\theta}\left(\operatorname{sen}(\theta)\frac{d\Theta}{d\theta}\right)+l\,(l+1)\operatorname{sen}^2(\theta)\,\Theta=m^2\Theta; \tag{1.23}$$

$$\frac{d^2\Phi}{d\phi^2}=-m^2\Phi. \tag{1.24}$$

A solução para a Eq. 1.24 é simples:

$$\Phi(\phi)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\phi},$$

onde $m=0,\pm1,\pm2,\ldots$.

A solução para a Eq. 1.23 pode ser obtida analiticamente em termos dos polinômios associados de Legendre:

$$\Theta(\theta)=AP_{lm}(\cos(\theta)),$$

onde A é uma constante de normalização e $P_{lm}(\cos(\theta))$ são os polinômios associados de Legendre (PAL), definidos por:

$$P_{lm}(\xi) \equiv \left(1-\xi^2\right)^{m/2}\left(\frac{d}{d\xi}\right)^m P_l(\xi) \tag{1.25}$$

e $P_l(\xi)$ são os polinômios de Legendre que podem ser obtidos por meio da fórmula de Rodrigues:

$$P_l(\xi) \equiv \frac{1}{2^l l!}\left(\frac{d}{d\xi}\right)^l \left(\xi^2-1\right)^l. \tag{1.26}$$

Observe que l deve ser um número inteiro não negativo para que a fórmula de Rodrigues faça sentido; além disso, se $|m| > l$, então a Eq. 1.25 diz que $P_{lm} = 0$. Para qualquer l dado, então há $2l+1$ valores possíveis de m:

$$l = 0, 1, 2, \ldots; \quad m = -l, -l+1, \ldots, -1, 0, 1, \ldots l-1, l. \tag{1.27}$$

As funções de onda angulares normalizadas são chamadas de harmônicos esféricos [37]:

$$\Upsilon_{lm}(\theta,\phi) = \epsilon\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\phi}P_{lm}(\cos(\theta)), \tag{1.28}$$

onde $\epsilon = (-1)^m$ para $m \geq 0$ e $\epsilon = 1$ para $m \leq 0$. Os números quânticos l e m são chamados de número quântico azimutal e número quântico magnético, respectivamente.

1.2.3.2 Equação radial

É importante destacar que a parte angular da função de onda $\Upsilon_{lm}(\theta,\phi)$ é a mesma para todos os potenciais esfericamente simétricos; a forma do potencial $V(r)$ afeta somente a parte radial da função de onda $R(r)$, a qual é determinada pela Eq. 1.20:

$$\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right) - \frac{2m}{\hbar^2}r^2\left[V-E\right]R = l\left(l+1\right)R. \tag{1.29}$$

A Eq. 1.20 torna-se mais simples quando fazemos a seguinte mudança de variável:

$$u(r) \equiv rR(r), \tag{1.30}$$

tal que

$$\frac{dR}{dr} = \frac{1}{r^2}\left(r\frac{du}{dr} - u\right); \tag{1.31}$$

$$\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right) = r\frac{d^2u}{dr^2}, \tag{1.32}$$

e, portanto,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u}{dr^2}+Vu+\frac{\hbar^2}{2m}\frac{l\left(l+1\right)}{r^2}u=Eu. \tag{1.33}$$

A Eq. 1.33 é chamada de equação radial; ela é praticamente indêntica à ESL-1D, mas o potencial efetivo

$$V_{ef}\left(r\right)=V\left(r\right)+\frac{\hbar^2}{2m}\frac{l\left(l+1\right)}{r^2}, \tag{1.34}$$

possui um termo adicional chamado de termo centrífugo $\frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2}$ e a condição de normalização se transforma em

$$\int\left|u\left(r\right)\right|^2dr=1. \tag{1.35}$$

1.3 Mecânica Estatística Quântica

1.3.1 Gás ideal de bósons

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 ^{4}He) e *férmions* (partículas com *spin* semi-inteiro, por exemplo, elétrons, prótons, nêutrons, átomos de ^{3}He). 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 devido ao *princípio de exclusão de Pauli* [37]. Assim, a condensação de Bose-Einstein ocorre para bósons, de modo que todas as partículas possam existir no mesmo estado e se comportarem como uma única partícula.

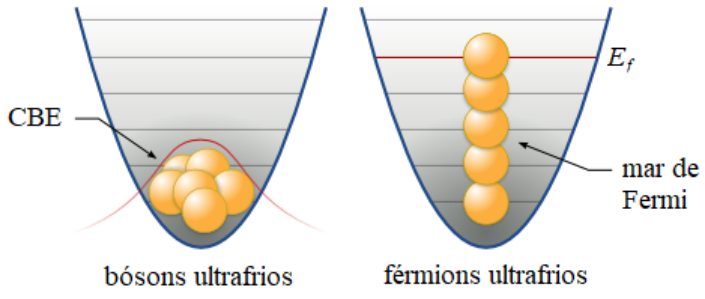


Figura 1.2: Em cada diagrama as linhas horizontais representam os níveis de energia em uma armadilha harmônica simples. O diagrama à esquerda ilustra um sistema de bósons não interagentes em $T=0$, ocupando o nível de mais baixa energia; e o diagrama à direita mostra o mesmo sistema constituído de férmions onde E_f é a energia de Fermi. Figura adaptada de `https://www.quantum-bits.org/`.

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*:

$$f_{\mathrm{BE}}(\epsilon) = \frac{1}{\mathrm{e}^{(\epsilon-\mu)/k_B T} - 1}; \tag{1.36}$$

$$f_{\mathrm{FD}}(\epsilon) = \frac{1}{\mathrm{e}^{(\epsilon-\mu)/k_B T} + 1}. \tag{1.37}$$

As propriedades termodinâmicas de uma gás ideal de bósons podem ser obtidas por meio da grande função de partição $\Xi(T, V, \mu)$ [41]:

$$\ln \Xi(T, V, \mu) = -\sum_j \ln\left[1 - \mathrm{e}^{-\beta(\epsilon_j - \mu)}\right], \tag{1.38}$$

onde $\beta = 1/k_B T$, k_B é a constante de Boltzmann, T é a temperatura de equilíbrio do sistema, V é o volume do sistema, ϵ_j é a energia de um orbital j e μ é o potencial químico descrevendo a energia necessária para adicionar ou remover partículas do sistema. A soma deve ser feita sobre todos os estados de partícula única. No limite termodinâmico, a pressão como função da temperatura e do potencial químico é dada pela expressão:

$$p(T, \mu) = -k_B T \lim_{V \to \infty} \frac{1}{V} \ln \Xi(T, V, \mu). \tag{1.39}$$

A partir da grande função de partição, podemos obter o valor esperado do número de ocupação de bósons em um determinado estado com energia ϵ é dado por:

$$\langle n_j \rangle = \frac{1}{\mathrm{e}^{(\epsilon_j - \mu)/k_B T} - 1}, \tag{1.40}$$

o número termodinâmico de partículas:

$$N = \sum_j \langle n_j \rangle = \sum_j \frac{1}{\mathrm{e}^{(\epsilon_j - \mu)/k_B T} - 1}, \tag{1.41}$$

e a energia interna do sistema:

$$U = \sum_j \epsilon_j \langle n_j \rangle = \sum_j \frac{\epsilon_j}{\mathrm{e}^{(\epsilon_j - \mu)/k_B T} - 1}. \tag{1.42}$$

Assim, à medida que a energia do nosso sistema diminui, 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. 1.40 só tem validade para $\epsilon - \mu > 0$, isto é, para um potencial químico estritamente negativo, $\mu < 0$. De fato, como $\langle n_j \rangle > 0$, então

$$\langle n_j \rangle > 0 \Rightarrow \frac{1}{\mathrm{e}^{(\epsilon_j - \mu)/k_B T} - 1} > 0 \Rightarrow \mathrm{e}^{(\epsilon_j - \mu)/k_B T} > 1 \Rightarrow \frac{\epsilon_j - \mu}{k_B T} > 0 \Rightarrow \epsilon_j > \mu, \tag{1.43}$$

para todas as energias permitidas ϵ_j. Ou seja, para um gás de bósons, o potencial químico sempre será menor do que a energia.

1.3.2 A condensação de Bose-Einstein

A partir da Eq. 1.41, podemos obter o potencial químico μ em termos da temperatura T e da densidade $\rho = N/V$. No limite clássico, que funciona para altas temperaturas, pode-se demonstrar que [41]:

$$\frac{\mu}{k_B T} = \ln\left[\frac{1}{\gamma}\left(\frac{2\pi\hbar^2}{m k_B}\right)^{3/2}\right] + \ln\left(\frac{N}{V}\right) - \frac{3}{2}\ln\left(T\right), \tag{1.44}$$

onde $\gamma = 2S + 1$ é a multiplicidade do *spin*. Portanto, para densidades fixas e temperaturas suficientemente altas, constata-se que o potencial químico é negativo. Através de métodos numéricos, para um determinado valor de densidade, pode-se obter as três curvas esboçadas na Fig. 1.3 representando o potencial químico em função da temperatura no caso de férmions, bósons e partículas clássicas livres.

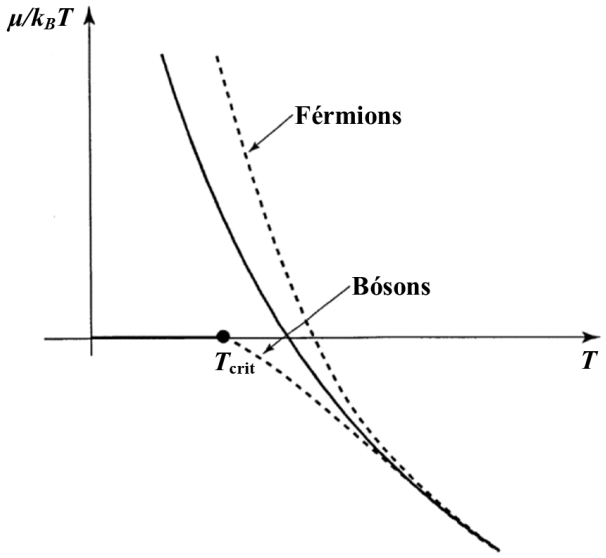


Figura 1.3: Potencial químico versus temperatura, a uma densidade fixa, para férmions, bósons e partículas clássicas livres. A linha contínua indica o limite clássico. A temperatura T_{crit} indica a condensação de Bose-Einstein. Figura adaptada da Ref. [41].

Para temperaturas altas, as três curvas são idênticas. À medida que a temperatura diminui, o potencial químico dos férmions (ou das partículas clássicas) pode se tornar positivo, mas o potencial químico dos bósons atinge o limite $\mu \to 0$, numa determinada temperatura crítica $T_{\rm crit}$, e permanece no valor $\mu = 0$ para qualquer temperatura $T \leq T_{\rm crit}$, dando origem ao fenômeno da condensação de Bose-Eintein [42, 39].

Para calcular a tempratura crítica $T_{\rm crit}$, basta fazer $\mu = 0$ na Eq. 1.41. Utilizando o espectro de energia de partículas livres confinadas no poço infinito 3D

$$\epsilon = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \tag{1.45}$$

e notando que a soma pode ser tranformada numa integral convergente no limite termodinâmico, temos:

$$N = \frac{\gamma V}{2\pi^2} \int_0^\infty \frac{k^2}{\mathrm{e}^{\hbar^2 k^2 / 2mk_B T_{\rm crit}} - 1} dk, \tag{1.46}$$

onde a mudança de variável

$$x = \frac{\hbar^2 k^2}{2mk_B T_{\rm crit}} \Rightarrow k = \frac{\sqrt{2mk_B T_{\rm crit}}}{\hbar} x^{1/2} x \Rightarrow dk = \frac{\sqrt{2mk_B T_{\rm crit}}}{2\hbar} x^{-1/2} dx, \tag{1.47}$$

transforma a Eq. 1.46 em

$$\rho = \gamma \left[\frac{mk_B T_{\rm crit}}{\left(2\pi^4\right)^{1/3} \hbar^2} \right]^{3/2} \int_0^\infty \frac{x^{1/2}}{\mathrm{e}^x - 1} dx = \gamma \left[\frac{mk_B T_{\rm crit}}{\left(2\pi^4\right)^{1/3} \hbar^2} \right]^{3/2} \Gamma\left(\frac{3}{2}\right) \zeta\left(\frac{3}{2}\right). \tag{1.48}$$

onde $\int_0^\infty \frac{x^{s-1}}{\mathrm{e}^x - 1} dx \equiv \Gamma(s)\,\zeta(s)$, sendo $\Gamma(s)$ a função gama de Euler e $\zeta(s)$ a função zeta de Riemann [43]. Como $\Gamma(3/2) = \sqrt{\pi}/2$, obtemos finalmente a temperatura crítica:

$$T_{\rm crit} = \frac{2\pi\hbar^2}{mk_B} \left[\frac{\rho}{\gamma \zeta(3/2)} \right]^{2/3}, \tag{1.49}$$

que também é conhecida como a temperatura de Bose-Einstein.

No universo quântico, como mencionamos anteriormente, uma partícula tem sua posição exata ignorada, podendo estar em uma região de espaço com uma probabilidade que é determinada por uma função matemática do tipo pacote de onda. 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. O comprimento de onda térmico de de Broglie é:

$$\lambda_{\rm dB} = \sqrt{\frac{2\pi\hbar^2}{mk_B T}}, \tag{1.50}$$

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

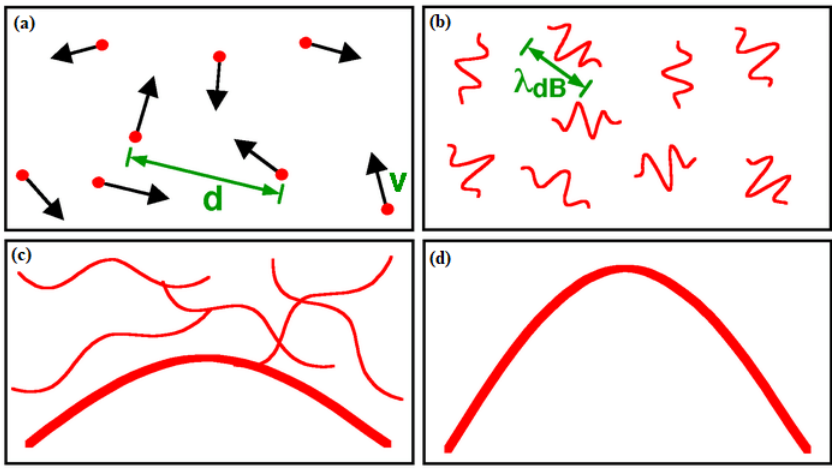


Figura 1.4: Critério para condensação de Bose-Einstein . Em altas temperaturas (a), um gás fracamente interagente pode ser tratado como um sistema de "bolas de bilhar". Em uma descrição quântica simplificada, os átomos podem ser considerados como pacotes de ondas (b) com um tamanho de seu comprimento de onda de de Broglie, λ_{dB}. Na temperatura de transição, $T = T_{\mathrm{crit}}$, para o CBE, λ_{dB} torna-se comparável à distância entre os 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 macroscópica, isto é, um CBE puro. Figura adaptada da Ref. [44].

É interessante enfatizar que usando a Eq. 1.49 em termos de λ_{dB} podemos escrever:

$$\left.\begin{aligned} T_{\mathrm{crit}} &= \frac{2\pi\hbar^2}{mk_B}\left[\frac{\rho}{\zeta\left(3/2\right)}\right]^{2/3} \\ T &= \frac{2\pi\hbar^2}{mk_B}\frac{1}{\lambda_{\mathrm{dB}}^2} \end{aligned}\right\} \xrightarrow{T=T_{\mathrm{crit}}} \rho\lambda_{\mathrm{dB}}^3 \approx 2.612. \tag{1.51}$$

onde $\zeta\left(3/2\right) \approx 2.612$ [43].

É importante destacar que para que a condensação de Bose-Einstein ocorra, essa relação deve ser satisfeita. Percebe-se na Eq. 1.49 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 CBEs porque tanto a densidade quanto a temperatura são muito maiores [38].

1.3.3 Realização experimental

Durante o ano de 1995, três grupos de pesquisa, através de técnicas que combinam resfriamento com *lasers*, aprisionamento magnético de átomos e resfriamento evaporativo, consegui-

ram reunir as condições necessárias para a observação experimental da condensação de Bose-Einstein em gases constituídos por átomos alcalinos [1, 2, 3].

No primeiro experimento [1], um CBE foi produzido em um vapor de átomos de ^{87}Rb que foi confinado por campos magnéticos e resfriado por evaporação. A fração condensada apareceu pela primeira vez perto de uma temperatura de $170\,\mathrm{nK}$ e uma densidade numérica de 2.5×10^{12} átomos/cm^3 e pôde ser preservada por mais de 15 segundos. Três assinaturas primárias de condensação de Bose-Einstein foram contempladas (Fig 1.5).

No segundo experimento [2], evidências da condensação de Bose-Einstein em um gás de átomos de ^{7}Li foram apresentadas. Os átomos foram confinados em uma armadilha magnética e resfriados a *laser* a uma temperatura de $200\,\mu\mathrm{K}$ e foram então resfriados por evaporação a temperaturas mais baixas. Para os átomos de ^{7}Li, o comprimento de espalhamento das ondas s é conhecido por ser negativo, correspondendo a uma interação interatômica atrativa. Anteriormente, previa-se que a condensação de Bose-Einstein não ocorreria em tal sistema.

No terceiro experimento [3], observaram a condensação de Bose-Einstein de átomos de ^{23}Na. Os átomos foram aprisionados em uma armadilha que empregava forças magnéticas e ópticas. Os CBEs continham até 5×10^5 átomos em densidades superiores a 10^{14} átomos/cm^3. A assinatura marcante da condensação de Bose-Einstein foi o súbito aparecimento de uma distribuição de velocidade bimodal abaixo da temperatura crítica de $\approx 2\,\mu\mathrm{K}$. A distribuição consistiu de uma distribuição térmica isotrópica e um núcleo elíptico atribuído à expansão de um CBE denso (Fig. 1.7).

Os sistemas com os quais vamos lidar nesta tese são CBEs constituídos por átomos diluídos e fracamente interagentes. O termo "diluídos" se refere à baixa densidade atômica, o que significa que necessitamos de baixas temperaturas. Uma característica importante dos CBEs diluídos, que usaremos praticamente em todo este trabalho, é que sua dinâmica à temperatura nula pode ser descrita pela denominada equação de Gross-Pitaevskii (EGP) [5, 6].

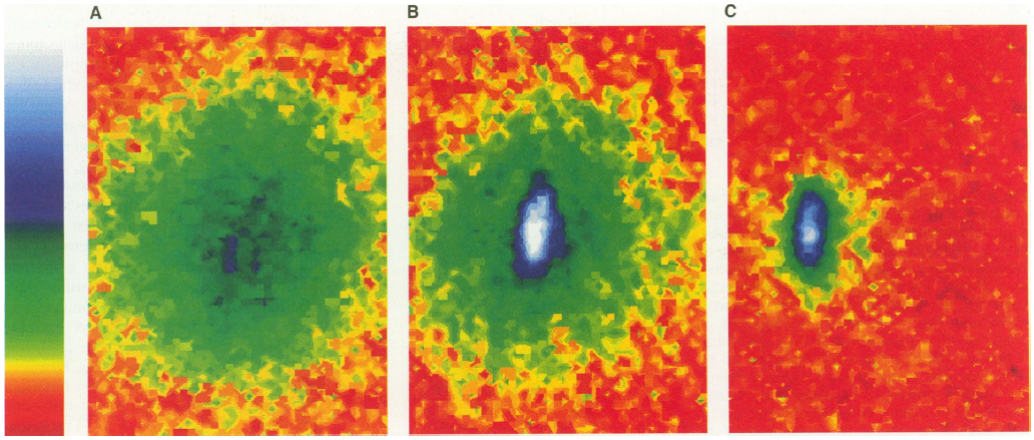


Figura 1.5: Dados de distribuição de velocidade para um gás de átomos de ^{87}Rb [1]. Imagens de cores falsas exibem a distribuição de velocidade da nuvem (A) logo antes do aparecimento do condensado, (B) logo após o aparecimento do condensado, e (C) após a evaporação posterior, deixou uma amostra de condensado quase puro. O padrão circular da fração não condensada (principalmente amarelo e verde) é uma indicação de que a distribuição da velocidade é isotrópica, consistente com o equilíbrio térmico. A fração condensada (principalmente azul e branco) é elíptica, indicativo de que é uma distribuição altamente não térmica. O padrão elíptico é, na verdade, uma imagem de uma única função de onda quântica ocupada macroscopicamente.

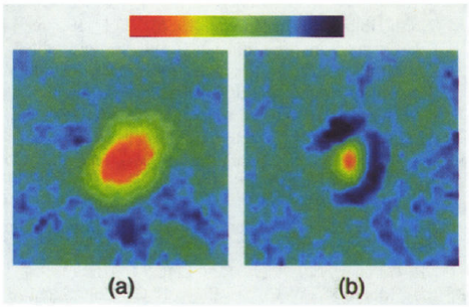


Figura 1.6: Observação da condensação de Bose-Einstein por imagem de absorção [2]. (a) corresponde a 1.2×10^5 átomos em $590\,\mathrm{nK}$, e (b) aos valores nominais de 2×10^4 átomos em $100\,\mathrm{nK}$. O halo em torno do pico de absorção visível em (b) é atribuído à difração do CBE espacialmente localizado.

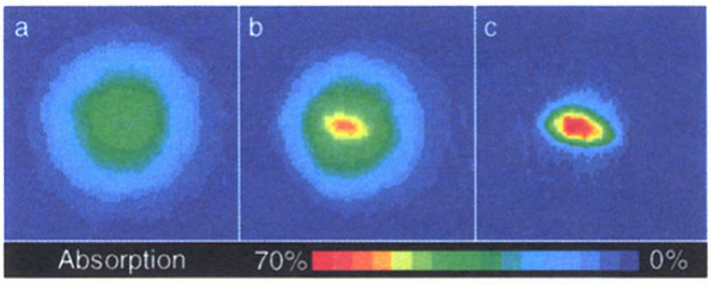


Figura 1.7: Observação da condensação de Bose-Einstein por imagem de absorção [3]. (a) é a distribuição da velocidade de uma nuvem resfriada até logo acima do ponto de transição, (b) logo após o condensado aparecer, e (c) após o resfriamento evaporativo posterior ter deixado um condensado quase puro. (b) mostra a diferença entre a distribuição térmica isotrópica e um núcleo elíptico atribuído à expansão de um condensado denso.

Capítulo 2

Teoria de campo médio para condensados de Bose-Einstein

2.1 Equação de Gross-Pitaevskii

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

$$\hat{H} = \int \hat{\Psi}^{\dagger}(\mathbf{r},t)\hat{H}_0\left(\mathbf{r}\right)\hat{\Psi}(\mathbf{r},t)d\mathbf{r} + \frac{1}{2}\int\int \hat{\Psi}^{\dagger}(\mathbf{r},t)\hat{\Psi}^{\dagger}(\mathbf{r}',t)\hat{V}_{\text{int}}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\hat{\Psi}(\mathbf{r}',t)\hat{\Psi}(\mathbf{r},t)d\mathbf{r}'d\mathbf{r}, \quad (2.1)$$

onde $\hat{H}_0\left(\mathbf{r}\right) \equiv -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \hat{V}_{\text{ext}}(\mathbf{r})$ é o Hamiltoniano de uma única partícula, $V_{\text{int}}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$ é o potencial de interação entre dois bósons (interação interatômica) e os operadores $\hat{\Psi}(\mathbf{r},t)$ e $\hat{\Psi}^{\dagger}(\mathbf{r},t)$ são os operadores de campo de aniquilação e criação de bósons, respectivamente. As relações de comutação para operadores bosônicos são [45]:

$$\left[\hat{\Psi}(\mathbf{r},t), \hat{\Psi}(\mathbf{r}',t)\right] = 0, \quad (2.2)$$

$$\left[\hat{\Psi}^{\dagger}(\mathbf{r},t), \hat{\Psi}^{\dagger}(\mathbf{r}',t)\right] = 0, \quad (2.3)$$

$$\left[\hat{\Psi}(\mathbf{r},t), \hat{\Psi}^{\dagger}(\mathbf{r}',t)\right] = \delta\left(\mathbf{r}-\mathbf{r}'\right). \quad (2.4)$$

Estamos trabalhando sob a suposição de um gás de bósons ultrafrios, diluído e com colisões binárias elásticas a baixa energia. Neste limite, o potencial interatômico pode ser expresso por

um potencial efetivo (potencial de contato) que é bem descrito por [46]:

$$V_{\text{int}}(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \equiv g_{3D}\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}'), \tag{2.5}$$

onde $\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$ é a função delta de Dirac, definida como $\int \delta(x-x_0)f(x)dx = f(x_0)$, e $g_{3D} = 4\pi\hbar^2 a_s/m$ é a constante de acoplamento (coeficiente de não linearidade) que define a intensidade das interações interatômicas. O parâmetro a_s é o comprimento de espalhamento das ondas s, que determina o tamanho das interações interatômicas, e é caracterizado pela espécie atômica. Assim, substituindo a Eq. 2.5 na Eq. 2.1, obtemos:

$$\hat{H} = \int \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r},t)\hat{H}_0\left(\mathbf{r}\right)\hat{\Psi}(\mathbf{r},t)d\mathbf{r} + \frac{g_{3D}}{2}\int \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r},t)\hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r},t)\hat{\Psi}(\mathbf{r},t)\hat{\Psi}(\mathbf{r},t)d\mathbf{r}, \tag{2.6}$$

onde a dependência de $\mathbf{r}'$ foi integrada através da função delta de Dirac.

Por simplicidade, seja $\hat{\Psi} \equiv \hat{\Psi}(\mathbf{r},t)$, $\hat{\Psi}^\dagger \equiv \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r},t)$, $\hat{\Psi}' \equiv \hat{\Psi}(\mathbf{r}',t)$, $\hat{\Psi}^{\dagger\prime} \equiv \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}',t)$, $\hat{H}_0 \equiv \hat{H}_0\left(\mathbf{r}\right)$ e $\hat{H}_0' \equiv \hat{H}_0\left(\mathbf{r}'\right)$ de forma que a Eq. 2.6 seja reescrita como:

$$\hat{H} = \int \hat{\Psi}^\dagger\hat{H}_0\hat{\Psi}d\mathbf{r} + \frac{g_{3D}}{2}\int \hat{\Psi}^\dagger\hat{\Psi}^\dagger\hat{\Psi}\hat{\Psi}d\mathbf{r}. \tag{2.7}$$

Com o intuito de determinar a equação que descreve a dinâmica do CBE, usaremos a equação de Heisenberg [47]:

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\hat{\Psi}'}{\partial t} = \left[\hat{\Psi}', \hat{H}\right]. \tag{2.8}$$

Definindo $\hat{H} \equiv \hat{\mathcal{H}} + \hat{\mathcal{G}}$, com

$$\hat{\mathcal{H}} \equiv \int \hat{\Psi}^\dagger\hat{H}_0\hat{\Psi}d\mathbf{r}, \tag{2.9}$$

e

$$\hat{\mathcal{G}} \equiv \frac{g_{3D}}{2}\int \hat{\Psi}^\dagger\hat{\Psi}^\dagger\hat{\Psi}\hat{\Psi}d\mathbf{r}, \tag{2.10}$$

a Eq. 2.8 se torna:

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\hat{\Psi}'}{\partial t} = \left[\hat{\Psi}', \hat{\mathcal{H}}+\hat{\mathcal{G}}\right] = \left[\hat{\Psi}', \hat{\mathcal{H}}\right] + \left[\hat{\Psi}', \hat{\mathcal{G}}\right]. \tag{2.11}$$

Calculando o comutador de $\hat{\Psi}'$ com $\hat{\mathcal{H}}$, obtém-se:

$$\begin{aligned}\left[\hat{\Psi}', \hat{\mathcal{H}}\right] &= \hat{\Psi}'\hat{\mathcal{H}} - \hat{\mathcal{H}}\hat{\Psi}' \\ &= \int \hat{\Psi}'\hat{\Psi}^\dagger \hat{H}_0 \hat{\Psi} d\mathbf{r} - \int \hat{\Psi}^\dagger \hat{H}_0 \hat{\Psi}\hat{\Psi}' d\mathbf{r} \\ &= \int \left(\hat{\Psi}'\hat{\Psi}^\dagger - \hat{\Psi}^\dagger\hat{\Psi}'\right) \hat{H}_0 \hat{\Psi} d\mathbf{r} \\ &= \int \delta\left(\mathbf{r} - \mathbf{r}'\right) \hat{H}_0 \hat{\Psi} d\mathbf{r} \\ &= \hat{H}_0' \hat{\Psi}'. \end{aligned} \tag{2.12}$$

Calculando o comutador de $\hat{\Psi}'$ com $\hat{\mathcal{G}}$, obtém-se:

$$\begin{aligned}\left[\hat{\Psi}', \hat{\mathcal{G}}\right] &= \hat{\Psi}'\hat{\mathcal{G}} - \hat{\mathcal{G}}\hat{\Psi}' \\ &= \frac{g_{3D}}{2} \int \left(\hat{\Psi}'\hat{\Psi}^\dagger\hat{\Psi}^\dagger\hat{\Psi}\hat{\Psi} - \hat{\Psi}^\dagger\hat{\Psi}^\dagger\hat{\Psi}\hat{\Psi}\hat{\Psi}'\right) d\mathbf{r} \\ &= \frac{g_{3D}}{2} \int \left(\hat{\Psi}'\hat{\Psi}^\dagger\hat{\Psi}^\dagger - \hat{\Psi}^\dagger\hat{\Psi}^\dagger\hat{\Psi}'\right) \hat{\Psi}\hat{\Psi} d\mathbf{r} \\ &= \frac{g_{3D}}{2} \int \left(\hat{\Psi}'\hat{\Psi}^\dagger\hat{\Psi}^\dagger - \hat{\Psi}^\dagger\hat{\Psi}^\dagger\hat{\Psi}' + \hat{\Psi}^\dagger\hat{\Psi}'\hat{\Psi}^\dagger - \hat{\Psi}^\dagger\hat{\Psi}'\hat{\Psi}^\dagger\right) \hat{\Psi}\hat{\Psi} d\mathbf{r} \\ &= \frac{g_{3D}}{2} \int \left(\left[\hat{\Psi}', \hat{\Psi}^\dagger\right] \hat{\Psi}^\dagger + \hat{\Psi}^\dagger \left[\hat{\Psi}', \hat{\Psi}^\dagger\right]\right) \hat{\Psi}\hat{\Psi} d\mathbf{r} \\ &= g_{3D} \int \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \hat{\Psi}^\dagger\hat{\Psi}\hat{\Psi} d\mathbf{r} \\ &= g_{3D} \hat{\Psi}^{\dagger'}\hat{\Psi}'\hat{\Psi}'. \end{aligned} \tag{2.13}$$

Assim, substituindo as Eqs. 2.12 e 2.13 na Eq. 2.11, obtemos:

$$\mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\Psi}\left(\mathbf{r}', t\right) = \hat{H}_0\left(\mathbf{r}'\right) \hat{\Psi}\left(\mathbf{r}', t\right) + g_{3D} \hat{\Psi}^\dagger\left(\mathbf{r}', t\right) \hat{\Psi}\left(\mathbf{r}', t\right) \hat{\Psi}\left(\mathbf{r}', t\right). \tag{2.14}$$

A Eq. 2.14 descreve a dinâmica de todo o campo. No entanto, queremos extrair informações apenas sobre o condensado. Fazemos isso dividindo o operador de campo de Bose em duas partes [48]:

$$\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) = \hat{\psi}(\mathbf{r}, t) + \hat{\delta}(\mathbf{r}, t), \tag{2.15}$$

onde o operador $\hat{\psi}(\mathbf{r}, t)$ corresponde ao estado fundamental (átomos condensados) e $\hat{\delta}(\mathbf{r}, t)$ cor-

responde aos estados excitados (átomos não condensados/térmicos).

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* [49], que consiste em substituir os operadores de campo pelos campos clássicos (função de onda macroscópica):

$$\left\{\hat{\psi}(\mathbf{r},t),\hat{\psi}^{\dagger}(\mathbf{r},t)\right\}\rightarrow\left\{\psi(\mathbf{r},t),\psi^{*}(\mathbf{r},t)\right\}. \tag{2.16}$$

Ao substituirmos a Eq. 2.15 na Eq. 2.6, obtemos:

$$\hat{H}=\int\left(\psi^{*}+\hat{\delta}^{\dagger}\right)\hat{H}_{0}\left(\psi+\hat{\delta}\right)d\mathbf{r}+\frac{g_{3D}}{2}\int\left(\psi^{*}+\hat{\delta}^{\dagger}\right)\left(\psi^{*}+\hat{\delta}^{\dagger}\right)\left(\psi+\hat{\delta}\right)\left(\psi+\hat{\delta}\right)d\mathbf{r}. \tag{2.17}$$

Agora, definindo $\hat{H}\equiv\hat{\mathcal{H}}'+\hat{\mathcal{G}}'$, com

$$\hat{\mathcal{H}}'\equiv\int\left(\psi^{*}+\hat{\delta}^{\dagger}\right)\hat{H}_{0}\left(\psi+\hat{\delta}\right)d\mathbf{r}, \tag{2.18}$$

e

$$\hat{\mathcal{G}}'\equiv\frac{g_{3D}}{2}\int\left(\psi^{*}+\hat{\delta}^{\dagger}\right)\left(\psi^{*}+\hat{\delta}^{\dagger}\right)\left(\psi+\hat{\delta}\right)\left(\psi+\hat{\delta}\right)d\mathbf{r}, \tag{2.19}$$

e desenvolvendo as Eqs. 2.18 e 2.19, obtemos, respectivamente:

$$\hat{\mathcal{H}}'=\int\left[\psi^{*}\hat{H}_{0}\psi+\psi^{*}\hat{H}_{0}\hat{\delta}+\hat{\delta}^{\dagger}\hat{H}_{0}\psi+\hat{\delta}^{\dagger}\hat{H}_{0}\hat{\delta}\right]d\mathbf{r}, \tag{2.20}$$

e

$$\begin{aligned}\hat{\mathcal{G}}'=\frac{g_{3D}}{2}\int\Big[&|\psi|^{4}+\psi^{*}|\psi|^{2}\hat{\delta}+(\psi^{*})^{2}\hat{\delta}\psi+(\psi^{*})^{2}\hat{\delta}\hat{\delta}+\psi^{*}\hat{\delta}^{\dagger}(\psi)^{2}+\psi^{*}\hat{\delta}^{\dagger}\psi\hat{\delta}+\psi^{*}\hat{\delta}^{\dagger}\hat{\delta}\psi+\psi^{*}\hat{\delta}^{\dagger}\hat{\delta}\hat{\delta}\\&+\hat{\delta}^{\dagger}|\psi|^{2}\psi+\hat{\delta}^{\dagger}|\psi|^{2}\hat{\delta}+\hat{\delta}^{\dagger}\psi^{*}\hat{\delta}\psi+\hat{\delta}^{\dagger}\psi^{*}\hat{\delta}\hat{\delta}+\hat{\delta}^{\dagger}\hat{\delta}^{\dagger}(\psi)^{2}+\hat{\delta}^{\dagger}\hat{\delta}^{\dagger}\psi\hat{\delta}+\hat{\delta}^{\dagger}\hat{\delta}^{\dagger}\hat{\delta}\psi+\hat{\delta}^{\dagger}\hat{\delta}^{\dagger}\hat{\delta}\hat{\delta}\Big]d\mathbf{r}.\end{aligned} \tag{2.21}$$

Assim, a Eq. 2.17 pode ser reescrita como:

$$\hat{H}=\hat{H}_{1}+\hat{H}_{2}+\hat{H}_{3}+\hat{H}_{4}+\hat{H}_{5}, \tag{2.22}$$

onde

$$\hat{H}_1 = \int \left[\psi^* \hat{H}_0 \psi + \frac{g_{3D}}{2} |\psi|^4\right] d\mathbf{r}, \tag{2.23}$$

$$\hat{H}_2 = \int \left[\hat{\delta}^\dagger \left(\hat{H}_0 + g_{3D} |\psi|^2\right) \psi + \psi^* \left(\hat{H}_0 + g_{3D} |\psi|^2\right) \hat{\delta}\right] d\mathbf{r}, \tag{2.24}$$

$$\hat{H}_3 = \int \left[\hat{\delta}^\dagger \left(\hat{H}_0 + 2g_{3D} |\psi|^2\right) \hat{\delta} + \frac{g_{3D}}{2} \left(\hat{\delta}^\dagger \hat{\delta}^\dagger (\psi)^2 + (\psi^*)^2 \hat{\delta}\hat{\delta}\right)\right] d\mathbf{r}, \tag{2.25}$$

$$\hat{H}_4 = g_{3D} \int \left[\psi^* \hat{\delta}^\dagger \hat{\delta}\hat{\delta} + \hat{\delta}^\dagger \hat{\delta}^\dagger \hat{\delta}\psi\right] d\mathbf{r}, \tag{2.26}$$

$$\hat{H}_5 = \frac{g_{3D}}{2} \int \hat{\delta}^\dagger \hat{\delta}^\dagger \hat{\delta}\hat{\delta} d\mathbf{r}. \tag{2.27}$$

Aqui, cada termo $\hat{H}_i$ é categorizado pela quantidade de operadores $\hat{\delta}$ que cada um possui. No regime de temperaturas ultrafrias ($T \to 0$), todas as partículas tendem a ficar no estado condensado, de modo que o operador $\hat{\delta}$ possa ser ignorado. Esta é uma aproximação válida para $T \ll T_{\text{crit}}$ e quando o sistema é fracamente interagente[1]. Assim, ao tomarmos a equação de Heisenberg (Eq. 2.14) e realizarmos a substituição $\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) \to \Psi(\mathbf{r}, t)$, obtemos a equação Gross-Pitaevskii (EGP) [5, 6]:

$$\mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{\text{ext}}(\mathbf{r}) + g_{3D} |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2\right] \Psi(\mathbf{r}, t). \tag{2.28}$$

Aqui, a densidade de energia em qualquer ponto no espaço é dada pela Eq. 2.23. Assim, a energia total do CBE, nesta aproximação, é dada por:

$$E = \int \left[\frac{\hbar^2}{2m} |\nabla \Psi(\mathbf{r}, t)|^2 + V_{\text{ext}}(\mathbf{r}) |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 + \frac{g_{3D}}{2} |\Psi(\mathbf{r}, t)|^4\right] d\mathbf{r}. \tag{2.29}$$

Além disso, podemos extrair soluções estacionárias fazendo a seguinte substituição:

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r}) \, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mu t/\hbar}, \tag{2.30}$$

onde $\psi(\mathbf{r})$ é o autoestado (função de onda espacial) do sistema independente do tempo, e μ é o potencial químico, conforme estabelecido na distribuição de Bose-Einstein e definido por $\mu = \partial E / \partial N$. Assim, inserindo a Eq. 2.30 na Eq. 2.28, obtemos a EGP independente do tempo:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{\text{ext}}(\mathbf{r}) + g_{3D} |\psi(\mathbf{r})|^2\right] \psi(\mathbf{r}) = \mu \psi(\mathbf{r}). \tag{2.31}$$

[1] É importante destacar que um sistema fracamente interagente pode ser definido quando $a_s \ll \lambda_{\text{dB}}$[38]

2.2 Comprimento de espalhamento

Como mencionado na Sec. 2.1, a EGP descreve um gás de bósons fracamente interagentes ($a_s \ll \lambda_{\mathrm{dB}}$) no qual são consideradas apenas as interações átomo-átomo. No contexto de átomos ultrafrios, tal aproximação é razoável uma vez que, experimentalmente, tais sistemas são gases diluídos [49]. No centro de um CBE, a densidade é da ordem de $10^{13} - 10^{15}$ átomos/cm^3, enquanto a densidade do ar sob condições normais de temperatura e pressão é da ordem de 10^{19} átomos/cm^3[50].

No âmbito da Mecânica Quântica, o problema de espalhamento de dois corpos pode ser descrito pela equação de Lippmann-Schwinger (ELS) [51]. No caso de gases ultrafrios, as interações interatômicas são tão pequenas que apenas a contribuição das ondas s é relevante para descrever o espalhamento.

Assim, em primeira ordem, a ELS pode ser descrita pela aproximação de Born na forma [52]:

$$a_s = \frac{\overline{m}}{2\pi\hbar^2} \int V_{\mathrm{int}}\left(\mathbf{r}\right) d\mathbf{r}, \tag{2.32}$$

onde a_s é o comprimento de espalhamento das ondas s, $\overline{m} = m_1 m_2 / \left(m_1 + m_2\right)$ é a massa reduzida do sistema de duas partículas com massas m_1 e m_2, e $V_{\mathrm{int}}\left(\mathbf{r}\right)$ é o potencial de interação entre as duas partículas. Para um gás de bósons idênticos de massa m, a expressão para a massa reduzida torna-se $\overline{m} = m/2$ e o potencial de interação pode ser descrito por $V_{\mathrm{int}}\left(\mathbf{r}\right) = g_{3D}\delta\left(\mathbf{r}\right)$. Assim,

$$a_s = \frac{m}{4\pi\hbar^2} \int g_{3D}\delta\left(\mathbf{r}\right) d\mathbf{r}, \tag{2.33}$$

e, portanto,

$$g_{3D} = \frac{4\pi\hbar^2 a_s}{m}. \tag{2.34}$$

Usualmente, o parâmetro g_{3D} é conhecido como constante de acoplamento ou coeficiente de não linearidade. Conforme descrito na Sec. 1.3.3, os primeiros CBEs atômicos foram realizados experimentalmente em 1995 pelos laboratórios do JILA (Boulder-Colorado), RICE (Houston-Texas) e MIT (Boston-Massachusetts), resfriando gases de ^{87}Rb, ^{7}Li e ^{23}Na, respectivamente. Os comprimentos de espalhamento destas espécies atômicas foram [53]: $a_s = 5,77\,\mathrm{nm}$ para ^{87}Rb, $a_s = -1,45\,\mathrm{nm}$ para ^{7}Li e $a_s = 2,75\,\mathrm{nm}$ para ^{23}Na.

2.3 Ressonância de Feshbach

Através da Eq. 2.34, nota-se que o potencial interatômico depende da magnitude do compri-

mento de espalhamento entre os átomos. Claramente, quanto menor o valor desse termo, mais próximo do comportamento de um gás de bósons ideal o sistema estará. Se $g > 0$ $(a_s > 0)$ a interação entre os átomos é repulsiva; enquanto que, para $g < 0$ $(a_s < 0)$, a interação é atrativa. A manipulação do comprimento de espalhamento é de fundamental importância para o estudo das propriedades de CBEs, sendo esta realizada experimentalmente através do fenômeno de ressonância de Feshbach [54].

A ressonância de Feshbach ocorre quando a energia de um estado ligado E_0 de um potencial interatômico $V_{\rm cf}$ (também denominado de canal fechado) é igual a energia correspondente ao espalhamento de dois átomos (denominado de canal aberto). Considerando que os átomos no canal aberto possuam momento magnético diferente daqueles no canal fechado, então a energia de interação entre os átomos espalhados, em relação a energia do canal fechado, pode ser ajustada por parâmetros externos tais como campo magnéticos ou através de métodos de controle óptico [52]. A Fig. 2.1 ilustra as posições relativas entre as curvas dos canais aberto e fechado.

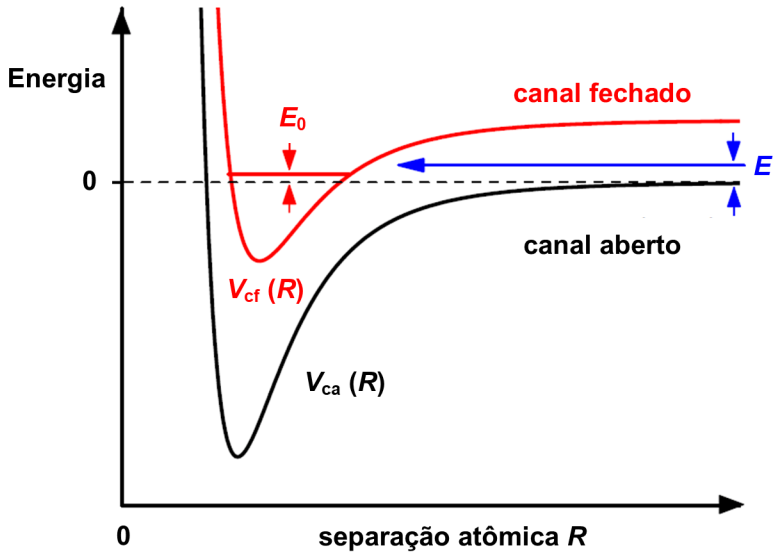


Figura 2.1: Modelo básico de dois canais para uma ressonância de Feshbach. O fenômeno ocorre quando dois átomos colidindo na energia E no canal de entrada se acoplam ressonantemente a um estado de ligação molecular com energia E_0 suportada pelo potencial de canal fechado. No domínio ultrafrio, as colisões ocorrem perto de energia zero, $E \to 0$. O acoplamento ressonante é então convenientemente realizado pelo ajuste magnético de E_0 próximo a 0 se os momentos magnéticos dos canais fechados e abertos forem diferentes. Figura adaptada da Ref. [54].

Nas proximidades da ressonância de Feshbach a expressão para o comprimento de espalhamento das ondas s é dada por [54]

$$a_s = a_f \left(1 - \frac{\Delta}{B - B_0}\right), \tag{2.35}$$

onde a_f corresponde ao comprimento de espalhamento em uma situação distante da condição

de ressonância (comprimento de espalhamento de fundo), Δ é denominado de largura de ressonância e B_0 é o campo magnético característico da condição de ressonância. Como se pode notar pela Eq. 2.35, se $\frac{\Delta}{B-B_0} < 1$ o comprimento de espalhamento é positivo, o que caracteriza um potencial repulsivo entre os átomos. No caso $\frac{\Delta}{B-B_0} > 1$ a interação entre os átomos é atrativa.

2.4 O potencial de Pöschl-Teller

O potencial de Pöschl-Teller (PPT) [22] vem despertando o interesse de alguns pesquisadores da comunidade científica que visam a compreensão de fenômenos físicos devido às propriedades interessantes deste potencial em diversas áreas da física, como por exemplo, na Física Atômica e Molecular [55, 56, 57], Termodinâmica [58, 59], Física de Materiais [60, 61], Óptica não linear [62, 63], Física da Matéria Condensada [64, 65, 66] e Física Básica [67, 68, 69].

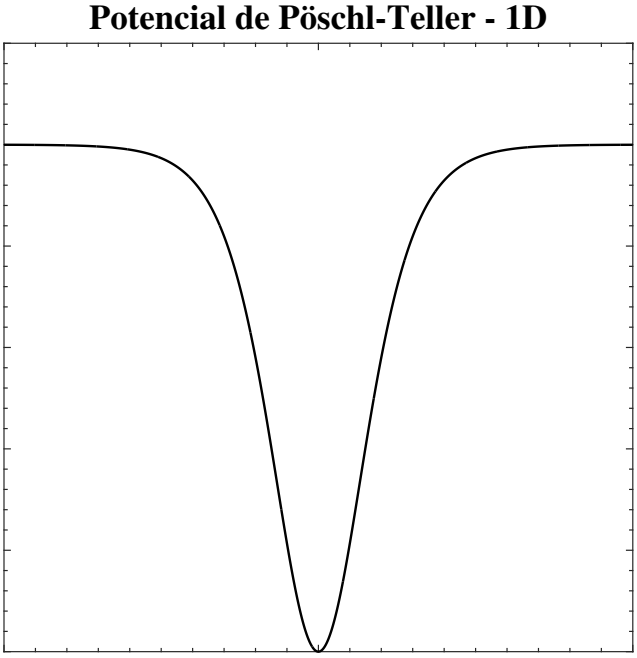


Figura 2.2: Ilustração do PPT-1D na forma simétrica.

O PPT na sua forma mais geral é dado por [67]:

$$V(r) = -\frac{\hbar^2}{2mw^2}\left\{\frac{\nu(\nu+1)}{\operatorname{senh}^2(r/w)} + \frac{\lambda(\lambda+1)}{\cosh^2(r/w)}\right\}, \tag{2.36}$$

onde w é a largura e os parâmetros ν e λ estão relacionados à amplitude do PPT. O PPT assume a forma simétrica quando $\nu = 0$, e torna-se:

$$V(r) = -\frac{\hbar^2}{2mw^2}\frac{\lambda(\lambda+1)}{\cosh^2(r/w)}. \tag{2.37}$$

Sendo o PPT um potencial esfericamente simétrico, torna-se razoável utilizar coordenadas esféricas, conforme descrito na Sec. 1.2.3, para resolver a ESL para este potencial:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi - \frac{\hbar^2}{2mw^2}\frac{\lambda(\lambda+1)}{\cosh^2(r/w)}\psi = E\psi. \tag{2.38}$$

Estamos interessados no caso $l = 0$. Assim, a solução angular, que é independente do potencial de confinamento, é o harmônico esférico $\Upsilon_{00}(\theta,\phi) = 1/\sqrt{4\pi}$ (Sec. 1.2.3.1) e a equação radial pode ser descrita pela Eq. 1.33:

$$l = 0 \rightarrow \begin{cases} \Upsilon_{00}(\theta,\phi) = \dfrac{1}{\sqrt{4\pi}} \\ \\ -\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{d^2u}{dr^2} - \dfrac{\hbar^2}{2mw^2}\dfrac{\lambda(\lambda+1)}{\cosh^2(r/w)}u = Eu \end{cases} \tag{2.39}$$

onde $u(r) = rR(r)$. A Eq. 2.39 pode ser reescrita em função das seguintes variáveis adimensionais:

$$r \equiv w\tilde{r}, \qquad u \equiv \frac{1}{\sqrt{w}}\tilde{u}, \qquad E \equiv -\frac{\hbar^2}{2mw^2}\tilde{E}. \tag{2.40}$$

Assim, a Eq. 2.39 se trnasforma em

$$\frac{d^2\tilde{u}}{d\tilde{r}^2} + \lambda(\lambda+1)\,\mathrm{sech}^2(\tilde{r})\,\tilde{u} = \tilde{E}\tilde{u}, \tag{2.41}$$

sendo $\tilde{u} \equiv \tilde{u}(\tilde{r})$ e $\mathrm{sech}(\tilde{r}) = 1/\cosh(r/w)$. A Eq. 2.41 pode ser resolvida analiticamente em virtude das seguintes mudanças de variáveis:

$$\zeta = \tanh(\tilde{r}), \quad \frac{d}{d\tilde{r}} = \left(1-\zeta^2\right)\frac{d}{d\zeta}, \quad \frac{d^2}{d\tilde{r}^2} = \left(1-\zeta^2\right)^2\frac{d^2}{d\zeta^2} - 2\zeta(1-\zeta^2)\frac{d}{d\zeta}. \tag{2.42}$$

Assim, a Eq. 1.18 pode ser reescrita da seguinte maneira:

$$\left(1-\zeta^2\right)^2\frac{d^2\tilde{u}}{d\zeta^2} - 2\zeta(1-\zeta^2)\frac{d\tilde{u}}{d\zeta} + \left(1-\zeta^2\right)\lambda(\lambda+1)\,\tilde{u} = \tilde{E}\tilde{u}. \tag{2.43}$$

Dividindo a Eq. 2.43 por $(1-\zeta^2)$ obtemos finalmente

$$\left(1-\zeta^2\right)\frac{d^2\tilde{u}}{d\zeta^2} - 2\zeta\frac{d\tilde{u}}{d\zeta} + \left[\lambda(\lambda+1) - \frac{n^2}{1-\zeta^2}\right]\tilde{u} = 0, \tag{2.44}$$

onde $\tilde{E} = n^2$.

A Eq. 2.44 é a equação de Legendre associada e a solução pode ser obtida analiticamente em termos dos polinômios associados de Legendre:

$$\tilde{u}(\zeta) = P_\lambda^n(\zeta),$$

onde $\lambda = 1, 2, 3, \ldots$ e $n = 1, 2, \ldots, \lambda - 1, \lambda$ [70].

Em termos da variável radial, os PALs normalizados (Ap. B) podem ser escritos da seguinte maneira:

$$u_\lambda^n(r) = \sqrt{\frac{2n}{w}\frac{(\lambda-n)!}{(\lambda+n)!}} P_\lambda^n(\tanh(r/w)), \tag{2.45}$$

sendo o espectro de energia dado por:

$$E_n = -\frac{n^2\hbar^2}{2mw^2}. \tag{2.46}$$

Finalmente, as funções de onda espaciais para uma partícula sujeita ao PPT esfericamente simétrico, para $l = 0$, podem ser descritas por $\psi_{\lambda n}(r, \theta, \phi) = R_{\lambda n}(r)\, \Upsilon_{00}(\theta, \phi)$:

$$\psi_{\lambda n}(r, \theta, \phi) = \sqrt{\frac{n}{2\pi w}\frac{(\lambda-n)!}{(\lambda+n)!}}\frac{1}{r} P_\lambda^n(\tanh(r/w)), \tag{2.47}$$

É importante destacar que,

- O valor de λ determina a quantidade de estados estacionários do sistema;
- Alguns estados estacionários não convergem na origem sendo, assim, estados fisicamente impossíveis. Os estados estacionários finitos na origem são aqueles cujo valor $\lambda+n$ é ímpar, o que nos leva a concluir que $\lambda \geq 2$.
- Para um determinado valor de λ, o *estado fundamental* e sua respectiva energia, serão descritos, respectivamente quando $n = \lambda - 1$:

$$\psi_\lambda^{\lambda-1}(r, \theta, \phi) = \sqrt{\frac{1}{2\pi w}\frac{\lambda-1}{(2\lambda-1)!}}\frac{(2\lambda)!}{2^\lambda \lambda!}\frac{1}{r}\mathrm{sech}^{\lambda-1}\left(\frac{r}{w}\right)\tanh\left(\frac{r}{w}\right), \tag{2.48}$$

$$E_{\lambda-1} = -\frac{(\lambda-1)^2\hbar^2}{2mw^2}. \tag{2.49}$$

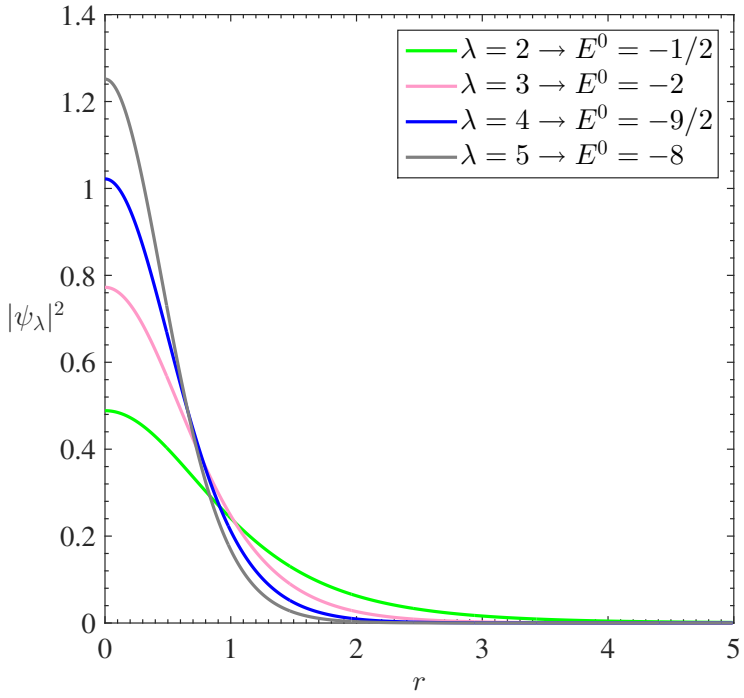


Figura 2.3: Estados Fundamentais referentes à Eq. 2.48 para diferentes valores de λ.

2.5 Sólitons

No âmbito das equações diferenciais parciais não lineares, tais como as equações de Schrödinger não linear (ESNL), $iu_t + u_{xx} + g\,|u|^2\,u = 0$, Korteweg-de Vries (KdV), $u_t + \alpha u u_x + u_{xxx} = 0$, Sine-Gordon (ESG), $u_{tt} - u_{xx} + \mathrm{sen}\,(u) = 0$, entre outras, são estudadas soluções conhecidas como sólitons [71, 72, 73].

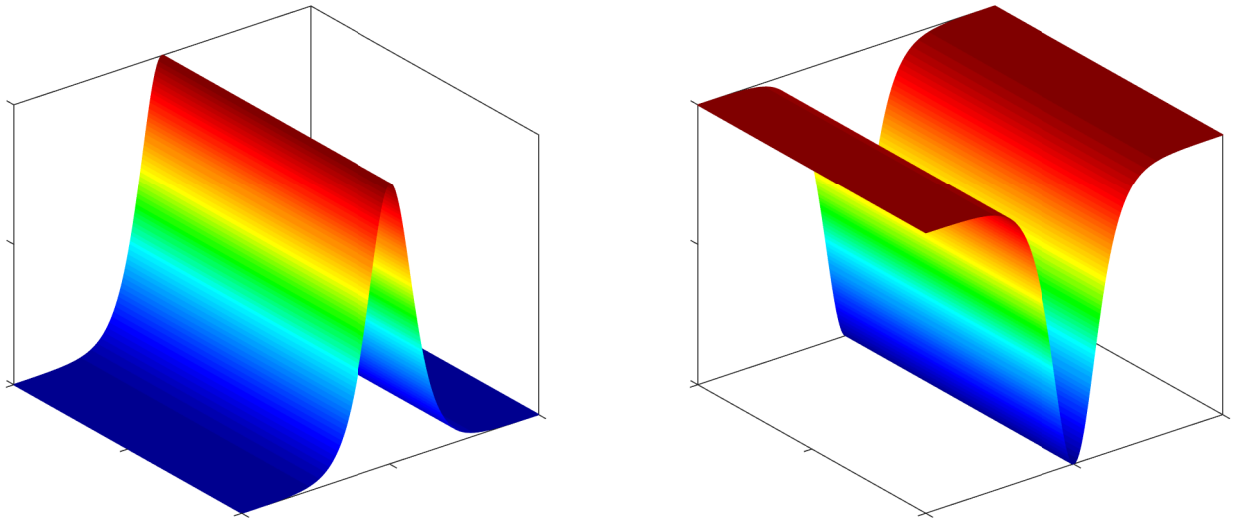
Embora existam definições mais precisas[2], pode-se dizer que sólitons são soluções particulares de equações diferenciais parciais não lineares, que descrevem a propagação de ondas estáveis e aproximadamente localizadas em meios contínuos, envolvendo efeitos de dispersão e não linearidade, permitindo que tais ondas mantenham sua forma (amplitude e largura) à medida que evoluem [79].

O primeiro relato da observação de tal fenômeno deve-se ao engenheiro naval escocês John Scott Russel que, em 1844, descreveu a criação de uma elevação pequena e localizada na superfície da água em um canal de Glasgow, após a parada abrupta de um barco. Durante todo o

[2]O conceito de sóliton é uma sofisticada construção matemática baseada na integrabilidade de uma classe de equações diferenciais não lineares [74, 75]. A ESNL pertence a esta classe de equações integráveis [76, 77] e foi utilizada no AT&T Bell Laboratories, no início dos anos oitentas, para descrever a propagação de sólitons em fibra de vidro com certas propriedades [78].

percurso, tal elevação manteve sua forma e velocidade praticamente inalteradas antes de desaparecer, conforme o próprio Russel relatou.

Com relação ao tipo, os sólitons podem ser divididos em claros (brilhantes ou iluminados) e escuros. O primeiro tipo corresponde a um pulso no qual, para grandes distâncias, seu valor tende a zero, enquanto seu pico possui um valor positivo e não nulo. O oposto ocorre para os sólitons escuros, ou seja, para grandes distâncias seu valor é positivo e não nulo, sendo o valor mínimo de sua intensidade igual a zero.



(a) sóliton claro (b) sóliton escuro

Figure 2.4: Representações ilustrativas das soluções do tipo sóliton claro (a) e sóliton escuro (b).

A EGP-1D, na ausência de potencial externo

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + g\left|\Psi\right|^2\Psi, \tag{2.50}$$

que é a ESNL-1D, admite soluções do tipo sóliton, as quais possuem soluções analíticas. De fato, esta equação permite vários tipos de solução que dependem da escolha de seus parâmetros, especialmente do coeficiente de não linearidade g. Entretanto as soluções de interesse físico do tipo sóliton claro e escuro são obtidas, respectivamente, para $g < 0$ e $g > 0$. No contexto de átomos ultrafrios, a EGP, que descreve a evolução da função de onda macroscópica do CBE para bósons fracamente interagentes, prevê a existência de sólitons escuros para interações repulsivas e sólitons claros para interações atrativas [80].

Para sólitons claros, a solução analítica da Eq. 2.50 é dada por:

$$\Psi = A\mathrm{sech}\left[\frac{A\sqrt{m\,|g|}}{\hbar}\left(x - x_0 - vt\right)\right]\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left[mvx - \frac{1}{2}\left(gA^2 + mv^2\right)t\right]\right\}. \tag{2.51}$$

Para sólitons escuros, a solução analítica da Eq. 2.50 é dada por:

$$\Psi = A\tanh\left[\frac{A\sqrt{m\,|g|}}{\hbar}\left(x - x_0 - vt\right)\right]\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left[mvx - \frac{1}{2}\left(gA^2 + mv^2\right)t\right]\right\}. \tag{2.52}$$

Na Fig. 2.4 estão representadas as densidades de probabilidade $|\Psi|^2$ para as funções de onda 2.51 e 2.52, respectivamente. Percebe-se que a solução do tipo sóliton claro possui um máximo e converge a zero para $x \to \pm\infty$, enquanto a solução do tipo sóliton escuro converge no limite de $x \to \pm\infty$ e possui um mínimo em zero.

2.6 Critério VK

O critério Vakhitov-Kolokov é um critério de *estabilidade* para soluções solitônicas em uma ESNL-1D sem a presença de potenciais de confinamento [81]. Em tal sistema, demonstrou-se a relação $dN/d\lambda^2 > 0$, com $-\lambda^2$ sendo a energia de estado ligado do sóliton. Isto é, se uma partícula é adicionada ao sistema e a energia deste estado ligado diminui, temos então uma solução estável. No caso dos CBEs, uma solução estacionária localizada (estado fundamental) é dinamicamente estável — em particular contra colapso ou dispersão — se seu potencial químico μ diminuir com o número de partículas [82]. Assim, no contexto de CBEs, identifica-se o critério VK como:

$$\frac{d\mu}{dN} < 0. \tag{2.53}$$

O critério VK é um critério *orbital* de estabilidade, o que significa que ao introduzir uma perturbação em uma solução estacionária estável, esta permanecerá próxima à "órbita circular" relativa ao seu estado fundamental ao longo da evolução temporal, caso a perturbação não seja muito grande [83].

Capítulo 3

Metodologia

3.1 O modelo

Nesta tese, propomos um cenário no qual o potencial de Pöschl-Teller esfericamente simétrico atue como o potencial de confinamento de um CBE com interações interatômicas atrativas. No caso de CBEs atrativos, o comprimento de espalhamento é negativo ($a_s < 0$). Assim, adotaremos a convenção $a_s \to -|a_s|$ por simplicidade de notação. Como o PPT esfericamente simétrico é um potencial central $V_{ext}(\mathbf{r}) \to V_{ext}(r)$, torna-se conveniente utilizarmos coordenadas esféricas devido à simetria radial. Consequentemente, a função de onda será dada por $\Psi(\mathbf{r},t) \to \Psi(r,t)$ e, assim, o modelo proposto pode ser descrito pela seguinte EGP:

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(r,t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) - \frac{\hbar^2}{2mw^2}\frac{\lambda(\lambda+1)}{\cosh^2(r/w)} - \frac{4\pi\hbar^2|a_s|}{m}|\Psi(r,t)|^2\right]\Psi(r,t), \quad (3.1)$$

onde a função de onda fica normalizada da seguinte maneira:

$$4\pi\int|\Psi(r,t)|^2 r^2 dr = N. \quad (3.2)$$

Muitos dos parâmetros da EGP são complicados de se trabalhar numericamente devido à ordem de grandeza destes. Assim, torna-se conveniente reescrever a Eq. 3.1 em função das seguintes variáveis adimensionais:

$$r \equiv w\tilde{r}, \quad t \equiv \frac{mw^2}{\hbar}\tilde{t}, \quad \Psi(r,t) = \sqrt{\frac{N}{4\pi w^3}}\tilde{\Psi}\left(\tilde{r},\tilde{t}\right), \quad \varphi\left(\tilde{r},\tilde{t}\right) \equiv \tilde{r}\tilde{\Psi}\left(\tilde{r},\tilde{t}\right). \quad (3.3)$$

Consequentemente, a Eq. 3.1 torna-se:

$$\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial\tilde{t}}\varphi\left(\tilde{r},\tilde{t}\right)=\left[-\frac{1}{2}\frac{\partial^{2}}{\partial\tilde{r}^{2}}-V_{0}\mathrm{sech}^{2}\left(\tilde{r}\right)-Na\left|\frac{\varphi\left(\tilde{r},\tilde{t}\right)}{\tilde{r}}\right|^{2}\right]\varphi\left(\tilde{r},\tilde{t}\right), \tag{3.4}$$

onde $V_0 \equiv \lambda(\lambda+1)/2$ é a amplitude/profundidade do potencial e $a = |a_s|/w$ é a razão do valor absoluto do comprimento de espalhamento pela largura do potencial.

O propósito de transformar a função de onda de $\tilde{\Psi}\left(\tilde{r},\tilde{t}\right)$ para $\varphi\left(\tilde{r},\tilde{t}\right)$ tem certas vantagens. Primeiro, essa transformação remove a primeira derivada $\partial/\partial r$ da Eq. 3.1 e, portanto, resulta em uma EGP mais simples [34]. Em segundo lugar, na origem $r = 0$, a condição $\varphi\left(0,\tilde{t}\right) = 0$ é satisfeita. Assim, ao resolvermos a Eq. 3.4, podemos implementar as condições de contorno $\varphi\left(0,\tilde{t}\right) = 0$ e $\lim_{\tilde{r}\to\infty}\varphi\left(\tilde{r},\tilde{t}\right) = 0$. Além disso, a função de onda $\varphi\left(\tilde{r},\tilde{t}\right)$ fica normalizada à unidade:

$$4\pi\int\left|\varphi\left(\tilde{r},\tilde{t}\right)\right|^{2}d\tilde{r}=1. \tag{3.5}$$

É importante destacar que os valores adimensionais obtidos nas simulações podem ser redimensionados através da Eq. 3.3 para que tenham significado físico e possam ser comparados com observações experimentais. Ademais, o til ($\tilde{}$) será omitido na variáveis adimensionais nas seções posteriores para simplificar a notação.

3.2 Formulação variacional

O método variacional (também conhecido como aproximação variacional) está atrelado na Mecânica Quântica junto à teoria de perturbação como alternativa às soluções exatas da equação de Schrödinger independente do tempo para certos 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 referente ao estado fundamental E_0. E é através do princípio variacional que se possibilita obter, não necessariamente o valor exato, mas, um limite superior para E_0, que frequentemente é muito próximo do valor exato [37, 84].

Este método consiste em escolher uma função de onda tentativa (*ansatz*)[1] com uma forma fixa mas que dependa de um ou mais parâmetros livres (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.

Sendo assim, quanto mais próxima a função de onda teste estiver do que seria a função de onda real, melhor será o resultado obtido [85]. A função de onda obtida pela substituição dos parâmetros, cujos valores são determinados pela minimização, será uma aproximação da função

[1] O *ansatz* pode ser qualquer função desde que esta pertença ao chamado espaço de Hilbert; isto é, o *ansatz* deve ser quadrado-integrável, garantindo, assim, a normalização 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.

Se a forma da solução real estiver próxima a do *ansatz*, os resultados obtidos por meio do método variacional estarão em boa concordância com as soluções exatas, mas em outros casos o método pode ser muito grosseiro ou até mesmo falhar. A formulação variacional adotada nessa tese possui o mesmo formalismo utilizado em trabalhos importantes como podemos encontrar nas referências [31, 32, 86, 87, 88].

O problema de resolver a Eq. 3.4 pode ser ponderado como um problema variacional correspondente à minimização da ação $\mathcal{S}$:

$$\mathcal{S} = \int\int \mathcal{L}\left(\varphi, \varphi', \dot{\varphi}\right) d\mathbf{r}dt, \tag{3.6}$$

sendo que a Eq. 3.4 pode ser derivada a partir da seguinte densidade Lagrangiana:

$$\mathcal{L} = \frac{\mathrm{i}}{2}\left(\varphi\dot{\varphi}^* - \varphi^*\dot{\varphi}\right) + \frac{1}{2}\left|\varphi'\right|^2 - V_0\mathrm{sech}^2\left(r\right)\left|\varphi\right|^2 - \frac{Na}{2}\frac{\left|\varphi\right|^4}{r^2}, \tag{3.7}$$

através da equação de Euler-Lagrange:

$$\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\varphi^*} - \frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{\varphi}^*}\right) - \frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\varphi'^*}\right) = 0, \tag{3.8}$$

onde $\varphi^* \equiv \varphi^*\left(r,t\right)$ é o complexo conjugado de $\varphi \equiv \varphi\left(r,t\right)$, e as quantidades $\varphi' \equiv \partial\varphi/\partial r$ e $\dot{\varphi} \equiv \partial\varphi/\partial t$ são as derivadas espacial e temporal, respectivamente.

A escolha do formato do *ansatz* é muito importante [31, 32]. Em nosso caso, uma escolha natural é uma função secante-tangente hiperbólica, porque no limite linear da EGP, torna-se possível obter a solução analítica do estado fundamental da ESL para o PPT esfericamente simétrico, confome observado na Sec. 2.4. Outra razão plausível pela escolha deste *ansatz* é o fato de que tanto a função secante hiperbólica quanto a função tangente hiperbólica são soluções exatas que descrevem, respectivamente, sólitons claros e escuros da ESNL-1D. Assim, optamos pelo *ansatz* secante-tangente hiperbólica:

$$\varphi = \varphi_\lambda\left(r,t\right) = \sqrt{M}\aleph\mathrm{sech}^{\lambda-1}\left(\frac{r}{\sigma}\right)\tanh\left(\frac{r}{\sigma}\right)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mu t}, \tag{3.9}$$

onde $\aleph = \sqrt{\frac{1}{2\pi\sigma}\frac{\lambda-1}{(2\lambda-1)!}}\frac{(2\lambda)!}{2^\lambda\lambda!}$, M é a norma, σ é a largura, λ é o parâmetro de profundidade do PPT e μ é o potencial químico. Aqui, estamos interessados nos parâmetros de profundidade $\lambda = \{2,3,4,5\}$ que correspondem à $V_0 = \{3,6,10,15\}$ via $V_0 = \lambda\left(\lambda+1\right)/2$.

Agora, nossa intenção é encontrar as equações de Euler-Lagrange que governam a evolução dos parâmetros variacionais. Para este propósito, nós calculamos a Lagrangiana efetiva L através da média da densidade Lagrangiana $\langle\mathcal{L}\rangle$:

$$L = \langle \mathcal{L} \rangle = \mu + 4\pi \int \mathcal{L}\left(\varphi, \varphi', \dot{\varphi}\right) dr \tag{3.10}$$

$$= \mu + 4\pi \int \left[\frac{\mathrm{i}}{2}\left(\varphi\dot{\varphi}^* - \varphi^*\dot{\varphi}\right) + \frac{1}{2}\left|\varphi'\right|^2 - V_0 \mathrm{sech}^2\left(r\right)\left|\varphi\right|^2 - \frac{Na}{2}\frac{\left|\varphi\right|^4}{r^2} \right] dr, \tag{3.11}$$

onde o potencial químico μ foi introduzido para garantir que o parâmetro M mantenha a normalização correta da função de onda φ. Assim, substituindo a Eq. 3.9 na Eq. 3.11, obtém-se a seguinte Lagrangiana efetiva:

$$L = \left(1 - M\right)\mu + \frac{K_\lambda M}{\sigma^2} - 4\pi M V_0 \mathcal{A} - 2\pi M^2 N a \mathcal{B}, \tag{3.12}$$

onde

$$\mathcal{A}\left(r, \sigma, \lambda\right) = \int \left[\mathrm{sech}^2\left(r\right) \aleph^2 \mathrm{sech}^{2\lambda-2}\left(\frac{r}{\sigma}\right) \tanh^2\left(\frac{r}{\sigma}\right) \right] dr, \tag{3.13}$$

$$\mathcal{B}\left(r, \sigma, \lambda\right) = \int \left[\frac{1}{r^2} \aleph^4 \mathrm{sech}^{4\lambda-4}\left(\frac{r}{\sigma}\right) \tanh^4\left(\frac{r}{\sigma}\right) \right] dr, \tag{3.14}$$

sendoe $K_\lambda = \left\{ \frac{7}{10}, \frac{10}{7}, \frac{13}{6}, \frac{32}{11} \right\}$ para $\lambda = \{2, 3, 4, 5\}$.

Finalmente, as equações de evolução para os parâmetros variacionais podem ser derivadas de L através das equações de Euler-Lagrange correspondentes, como será descrito na Sec. 4.1.

3.3 Discretização numérica

3.3.1 Método *split-step*

A EGP esfericamente simétrica que foi proposta na Sec. 3.1, dada pela Eq. 3.4, pode ser expressa da seguinte maneira [33]:

$$\mathrm{i}\frac{\partial \varphi}{\partial t} = \left[-\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial r^2} - V_0 \mathrm{sech}^2\left(r\right) - g\left|\frac{\varphi}{r}\right|^2 \right] \varphi \equiv \hat{H}_{\mathrm{GP}} \varphi, \tag{3.15}$$

onde $g = Na$ é o coeficiente de não linearidade e o operador Hamiltoniano de Gross-Pitaevskii $\hat{H}_{\mathrm{GP}}$ é definido por $\hat{H}_{\mathrm{GP}} = \hat{T} + \hat{V}$, sendo $\hat{T} \equiv -\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial r^2}$ o operador energia cinética (operador linear) e $\hat{V} \equiv \hat{V}_{\mathrm{ext}} + \hat{V}_{\mathrm{NL}}$ o operador energia potencial (operador não linear); $\hat{V}_{\mathrm{ext}} \equiv -V_0 \mathrm{sech}^2\left(r\right)$ é o operador relacionado ao PPT e $\hat{V}_{\mathrm{NL}} \equiv -g\left|\frac{\varphi}{r}\right|^2$ é o operador relativo às interações interatômicas

atrativas[2].

A EGP é definida no domínio espacial (radial) $r_{\text{inicial}} \leq r \leq r_{\text{final}}$ e no domínio temporal $t_{\text{inicial}} \leq t \leq t_{\text{final}}$. Além disso, a Eq. 3.15 é complementada pela condição inicial $\varphi(r, t_{\text{inicial}})$ e pelas condições de contorno $\varphi(r_{\text{inicial}}, t)$ e $\varphi(r_{\text{final}}, t)$.

Ademais, a solução da Eq. 3.15 pode ser obtida através da seguinte expressão:

$$\varphi(r, t + \Delta t) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}_{\mathrm{GP}}\Delta t}\varphi\left(r, t\right), \tag{3.16}$$

sendo $\varphi(r, t + \Delta t)$ a solução após uma evolução temporal de um intervalo de tempo Δt.

A ideia inicial do método *split-step* é baseda na divisão do Hamiltoniano $\hat{H}_{\mathrm{GP}}$ em diferentes termos com derivadas e sem derivadas. Nesta tese, nós dividimos $\hat{H}_{\mathrm{GP}}$ em três partes: $\hat{H}_{\mathrm{GP}} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2 + \hat{H}_3$, onde

$$\hat{H}_1 = \frac{1}{2}\left[-V_0\mathrm{sech}^2\left(r\right) - g\left|\frac{\varphi}{r}\right|^2\right], \tag{3.17}$$

$$\hat{H}_2 = -\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial r^2}, \tag{3.18}$$

$$\hat{H}_3 = \hat{H}_1. \tag{3.19}$$

Pode-se dizer que a Eq. 3.15 foi dividida, respectivamente, em duas equações: uma não linear e outra linear [89]:

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\varphi}{\partial t} = \frac{1}{2}\left[-V_0\mathrm{sech}^2\left(r\right) - g\left|\frac{\varphi}{r}\right|^2\right]\varphi \equiv \hat{H}_1\varphi, \tag{3.20}$$

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\varphi}{\partial t} = -\frac{1}{2}\frac{\partial^2\varphi}{\partial r^2} \equiv \hat{H}_2\varphi. \tag{3.21}$$

Então, a EGP é discretizada no espaço e no tempo através do método das diferenças finitas (MDF) [90, 91]. A ideia consiste em dividir o domínio espacial (temporal) $r_{\text{inicial}} \leq r \leq r_{\text{final}}$ ($t_{\text{inicial}} \leq t \leq t_{\text{final}}$) em $m+1$ ($n+1$) pontos igualmente espaçados por uma distância denominada passo espacial (temporal) $\Delta r = \frac{r_m - r_0}{m}$ $\left(\Delta t = \frac{t_n - t_0}{n}\right)$, onde $r_0 \equiv r_{\text{inicial}}$ e $r_m \equiv r_{\text{final}}$ ($t_0 \equiv t_{\text{inicial}}$ e $t_n \equiv t_{\text{final}}$). Consequentemente, uma malha constituída por $(m+1) \times (n+1)$ pontos é formada, conforme ilustrado pela Fig. 3.1. De uma forma geral, qualquer par (r_j, t_k) pode ser obtido via:

[2]Observe que o termo não linear é tratado como um potencial.

$$r_j = r_0 + j\Delta r, \qquad j = 0, 1, \ldots, m \tag{3.22}$$

$$t_k = t_0 + k\Delta t, \qquad k = 0, 1, \ldots, n \tag{3.23}$$

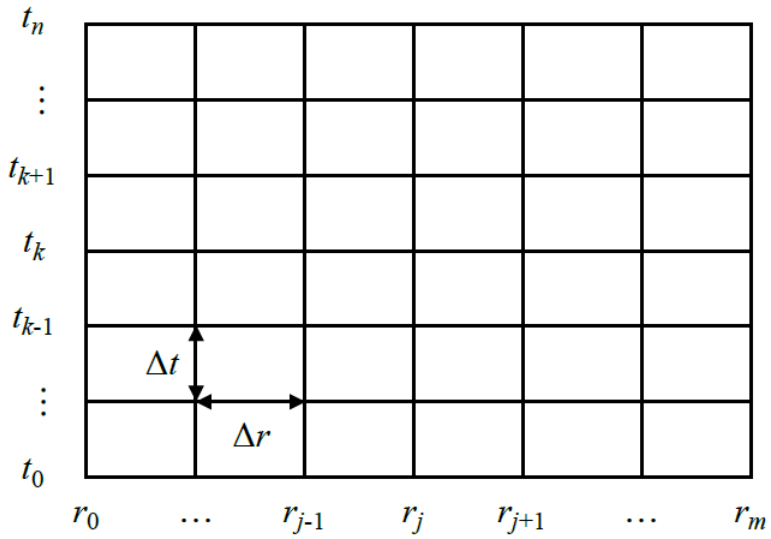


Figura 3.1: Ilustração de malha numérica referente à discretização espacial e temporal. Aqui, os domínios espacial (radial) e temporal foram fragmentados, respectivamente, em $m+1$ e $n+1$ pontos, resultando em uma malha com $(m+1)\times(n+1)$ pontos. Os passos (espaçamentos) espacial e temporal são obtidos, respectivamente, através das expressões $\Delta r = \frac{r_m - r_0}{m}$ e $\Delta t = \frac{t_n - t_0}{n}$. De uma forma geral, qualquer par (r_j, t_k) pode ser obtido via $r_j = r_0 + j\Delta r$ e $t_k = t_0 + k\Delta t$, onde $j = 0, 1, \ldots, m$ e $k = 0, 1, \ldots, n$.

Propagação em tempo real

O operador $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}_{\mathrm{GP}}\Delta t}$ pode ser reescrito por meio das Eqs. 3.17-3.19 e a Eq. 3.16 se torna:

$$\varphi_j^{k+1} = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}_3\Delta t}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}_2\Delta t}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}_1\Delta t}\varphi_j^k, \tag{3.24}$$

onde tomamos $\varphi_j^k \equiv \varphi(r_j, t_k)$ pela simplicidade de notação.

A solução φ_j^{k+1} pode ser obtida por meio da evolução temporal da função de onda φ_j^k em um dado momento t_k, avançando temporalmente de t_k a $t_{k+1} = t_k + \Delta t$ por meio de iterações. Para isso, o operador $\hat{H}_1$, inicialmente, produz uma solução intermediária $\varphi_j^{k+1/3}$ a partir de φ_j^k. Como não há derivada em $\hat{H}_1$, esta propagação é realizada exatamente através da operação [34]:

$$\varphi_j^{k+1/3} = \mathcal{O}_{\mathrm{NL}}(\hat{H}_1)\varphi_j^k \equiv \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}_1\Delta t}\varphi_j^k = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\left[-V_0\mathrm{sech}^2(r_j) - g_k\left|\frac{\varphi_j^k}{r_j}\right|^2\right]\frac{\Delta t}{2}}\varphi_j^k, \tag{3.25}$$

onde $g_k = \frac{k}{n}Na$ denota o coeficiente de não linearidade discretizado, $\mathcal{O}_{\mathrm{NL}}(\hat{H}_1)$ denota operação

de evolução no tempo com $\hat{H}_1$ e o índice "NL" significa não linear (sem derivadas). Em seguida, realizamos a propagação de tempo correspondente ao operador $\hat{H}_2$ numericamente pelo seguinte esquema de Crank-Nicholson:

$$\mathrm{i}\frac{\varphi_j^{k+2/3}-\varphi_j^{k+1/3}}{\Delta t}=-\frac{1}{2}\left[\left(\frac{\varphi_{j+1}^{k+2/3}-2\varphi_j^{k+2/3}+\varphi_{j-1}^{k+2/3}}{2\left(\Delta r\right)^2}\right)+\left(\frac{\varphi_{j+1}^{k+1/3}-2\varphi_j^{k+1/3}+\varphi_{j-1}^{k+1/3}}{2\left(\Delta r\right)^2}\right)\right]. \tag{3.26}$$

A solução formal da Eq. 3.26 pode ser obtida pela forma de Cayley [92] dada pela seguinte expressão:

$$\varphi_j^{k+2/3}=\mathcal{O}_{\mathrm{CN}}(\hat{H}_2)\varphi_j^{k+1/3}\equiv \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}_2\Delta t}\varphi_j^{k+1/3}\equiv\frac{1-\mathrm{i}(\hat{T}/2)\Delta t}{1+\mathrm{i}(\hat{T}/2)\Delta t}\varphi_j^{k+1/3}, \tag{3.27}$$

onde $\mathcal{O}_{\mathrm{CN}}$ denota a operação evolução temporal com $\hat{H}_2$ e o índice "CN" se refere ao algoritmo de Crank-Nicolson. O operador $\mathcal{O}_{\mathrm{CN}}$ é usado para propagar a solução intermediária $\varphi_j^{k+1/3}$ em um instante de tempo Δt , gerando a segunda solução intermediária $\varphi_j^{k+2/3}$. Finalmete, a solução final φ_j^{k+1} é obtida através da atuação do operador $\hat{H}_3$ em $\varphi_j^{k+2/3}$:

$$\varphi_j^{k+1}=\mathcal{O}_{\mathrm{NL}}(\hat{H}_3)\varphi_j^{k+2/3}\equiv \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}_3\Delta t}\varphi_j^{k+2/3}\equiv \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\left[-V_0\mathrm{sech}^2(r_j)-g_k\left|\frac{\varphi_j^{k+2/3}}{r_j}\right|^2\right]\frac{\Delta t}{2}}\varphi_j^{k+2/3}. \tag{3.28}$$

De uma forma mais objetiva, podemos concluir que a solução final é obtida

$$\varphi_j^{k+1}=\mathcal{O}_{\mathrm{NL}}(\hat{H}_3)\mathcal{O}_{\mathrm{CN}}(\hat{H}_2)\mathcal{O}_{\mathrm{NL}}(\hat{H}_1)\psi_j^k. \tag{3.29}$$

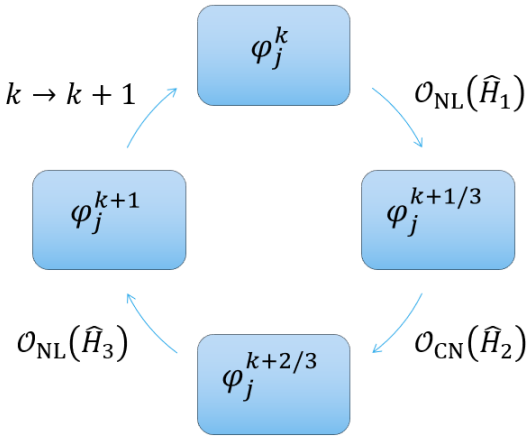


Figura 3.2: Esquema ilustrativo referente ao método *split-step* com Crank-Nicolson.

A divisão do operador energia potencial em duas partes — $\hat{H}_1$ e $\hat{H}_3$ — simetricamente em torno do operador energia cinética $\hat{H}_2$ aumenta enormemente a estabilidade do método e reduz o erro numérico [33].

A escolha da condição inicial é fundamental para a evolução temporal da função de onda. Na implementação numérica da propagação em tempo real do método *split-step*, o estado inicial $\varphi(r,0)$ é geralmente escolhido para ser a solução analiticamente conhecida do potencial de confinamento com não linearidade zero: $g = 0$. No decorrer da iteração temporal, a não linearidade é lentamente introduzida até que a não linearidade final desejada seja atingida. Este procedimento nos levará à solução final do problema [34].

Propagação em tempo imaginário

Embora a propagação em tempo real, conforme descrito na Sec. 3.3.1, tenha diversas vantagens, nesta abordagem é preciso lidar com variáveis complexas para uma função de onda complexa para estados não estacionários. Para o estado fundamental (estacionário), a função de onda é essencialmente real e o método de *propagação em tempo imaginário*, que trata de variáveis reais, parece ser apropriado [34]. Nesta abordagem, a variável temporal t é substituído por uma quantidade imaginária $t \to -\mathrm{i}\bar{t}$ e a Eq. 3.15 se torna:

$$-\frac{\partial}{\partial \bar{t}}\varphi = \left[-\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial r^2} - V_0 \mathrm{sech}^2(r) - Na\left|\frac{\varphi}{r}\right|^2\right]\varphi \equiv \hat{H}_{\mathrm{GP}}\varphi, \tag{3.30}$$

sendo que nesta equação, $\bar{t}$ é apenas um parâmetro numérico.

A iteração no tempo imaginário também é realizada dividindo $\hat{H}_{\mathrm{GP}}$ em três partes: $\hat{H}_{\mathrm{GP}} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2 + \hat{H}_3$, com $\hat{H}_1$, $\hat{H}_2$ e $\hat{H}_3$ dados pelas Eqs. 3.17, 3.18 e 3.19, respectivamente. Percebe-se que todo desenvolvimento da Sec. 3.3.1 permanece válida, desde que substituamos i por 1 nas Eqs. 3.25 e 3.28, e por -1 nas equações restantes. No entanto, existe um detalhe. A propagação em tempo real preserva a normalização da função de onda, enquanto que a propagação em tempo imaginário não preserva a normalização. Assim, este problema pode ser contornado restaurando a normalização da função de onda após cada operação de propagação de Crank-Nicolson [93, 94]:

$$\varphi_j^{k+1} = \varphi_j^{k+1}\left[\int \left|\varphi_j^{k+1}\right|^2 dr\right]^{-1/2} \tag{3.31}$$

Feito isso, o método de propagação em tempo imaginário, para problemas de estado fundamental, produz resultados muito precisos.

Capítulo 4

Resultados e discussão

No presente capítulo, são apresentados os resultados deste trabalho, obtidos através de simulações computacionais de equações presentes na Sec. 3.1 a partir das técnicas discutidas na Sec. 3. Na Sec. 4.3, comparamos os resultados variacionais com os correspondentes numéricos para o caso particular $V_0 = 3$. Os resultados apresentados neste trabalho foram obtidos por meio de parâmetros experimentais típicos, a fim de prever resultados mais realistas. Assim, consideramos o cenário onde um CBE atrativo constituído por átomos de ^{7}Li esteja aprisionado pelo PPT esfericamente simétrico, sendo a largura deste de $w = 1\,\mu\mathrm{m}$. Conforme a Ref. [7], a massa e o comprimento de espalhamento do ^{7}Li são $m = 1.16 \times 10^{-26}\,\mathrm{kg}$ e $a_s = -1.45\,\mathrm{nm}$, respectivamente.

4.1 Resultados variacionais

4.1.1 Equações de Euler-Lagrange

As equações de Euler-Lagrange para os parâmetros variacionais podem ser obtidas via

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\right) - \frac{\partial L}{\partial q_i} = 0, \tag{4.1}$$

onde q_i são as coordenadas generalizadas $q_i \equiv \{\mu, \sigma, M\}$ e a Lagrangiana efetiva é dada pela Eq. (3.12):

$$L = (1 - M)\,\mu + \frac{K_\lambda M}{\sigma^2} - 4\pi M V_0 \mathcal{A} - 2\pi M^2 N a \mathcal{B}. \tag{4.2}$$

A primeira equação variacional, $\partial L/\partial \mu = 0$, recupera a normalização unitária, ou seja, $M = 1$; que é substituído nas outras equações a seguir, exceto para a equação $\partial L/\partial M = 0$, onde $M = 1$

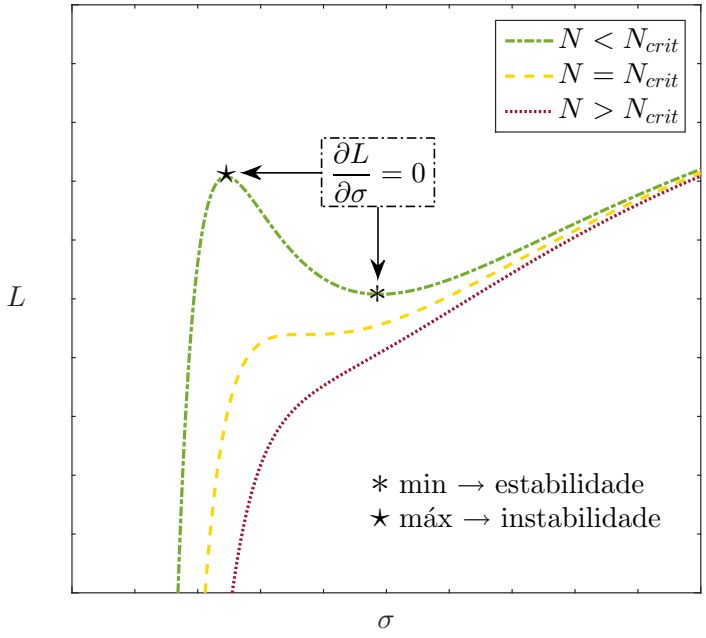


Figura 4.1: Lagrangiana efetiva L de um CBE atrativo aprisionado pelo PPT esfericamente simétrico em função do parâmetro variacional σ, para diferentes valores do parâmetro Na. A curva verde corresponde ao CBE interagente e estável ($N < N_{\rm crit}$). A curva amarela corresponde ao CBE à beira do colapso ($N = N_{\rm crit}$). A curva vermelha corresponde ao CBE em colapso ($N > N_{\rm crit}$).

é substituído após a diferenciação. As outras equações, $\partial L/\partial\sigma = 0$ e $\partial L/\partial M = 0$, produzem um conjunto de equações integrais não lineares acopladas:

$$0 = \frac{2K_\lambda}{\sigma^3} + 4\pi V_0 \mathcal{C} + 2\pi N a \mathcal{D}, \tag{4.3}$$

$$\mu = \frac{K_\lambda}{\sigma^2} - 4\pi V_0 \mathcal{A} - 4\pi N a \mathcal{B}, \tag{4.4}$$

onde $\mathcal{C} = \partial\mathcal{A}/\partial\sigma$ e $\mathcal{D} = \partial\mathcal{B}/\partial\sigma$. Ou seja

$$\mathcal{C}\left(r,\sigma,\lambda\right) = \int \frac{\partial}{\partial\sigma}\left[\mathrm{sech}^2\left(r\right)\aleph^2\mathrm{sech}^{2\lambda-2}\left(\frac{r}{\sigma}\right)\tanh^2\left(\frac{r}{\sigma}\right)\right]dr, \tag{4.5}$$

$$\mathcal{D}\left(r,\sigma,\lambda\right) = \int \frac{\partial}{\partial\sigma}\left[\frac{1}{r^2}\aleph^4\mathrm{sech}^{4\lambda-4}\left(\frac{r}{\sigma}\right)\tanh^4\left(\frac{r}{\sigma}\right)\right]dr. \tag{4.6}$$

Em geral, para uma EGP com termo cúbico negativo (interações interatômicas atrativas), com uma não linearidade fixa e razoável, um ramo de bifurcação nas soluções pode ser observado (Fig. 4.1). Portanto, duas soluções estacionárias estão presentes; uma, dada pelo mínimo

da energia, é o Estado Fundamental (solução estável); e a outra, que corresponde a um máximo da energia, é chamada de solução hiperbólica (solução instável). As soluções hiperbólicas, que não são de interesse neste trabalho, são relevantes para a determinação precisa de pontos críticos, transições de fase e efeitos de tunelamento [94].

4.1.2 Energia por átomo

A partir da Eq. 4.4, torna-se possível obter a energia por átomo do CBE, por meio da definição $\mu = \partial E/\partial N$. Assim, a energia por átomo pode ser definida pela seguinte equação:

$$\frac{E}{N} = \frac{K_\lambda}{\sigma^2} - 4\pi V_0 \mathcal{A} - 2\pi N a \mathcal{B}. \tag{4.7}$$

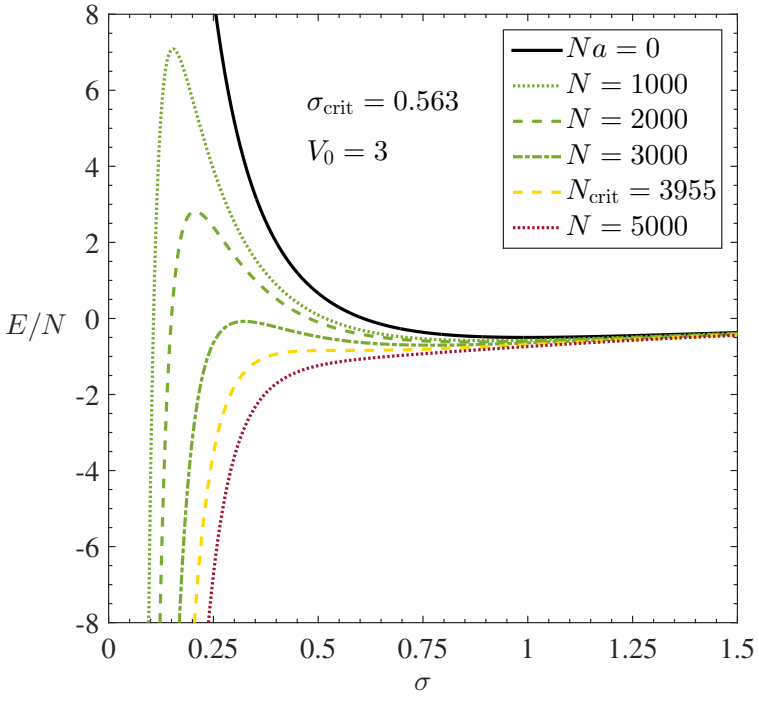


Figura 4.2: Energia por átomo de um CBE atrativo aprisionado pelo PPT esfericamente simétrico em função do parâmetro variacional σ, para diferentes valores do parâmetro Na. A curva contínua preta corresponde ao CBE na ausência de interações ($Na = 0$). As curvas verdes correspondem aos CBEs interagentes e estáveis ($N < N_{\rm crit}$). A curva amarela corresponde ao CBE à beira do colapso ($N = N_{\rm crit}$). A curva vermelha corresponde ao CBE colapsado ($N > N_{\rm crit}$); o ponto de mínimo local desaparece quando $N > N_{\rm crit}$. Parâmetros: $V_0 = 3$, $a_s = -1.45\,\text{nm}$, $w = 1\,\mu\text{m}$.

A Fig. 4.2 ilustra a energia por átomo E/N (Eq. 4.7) em função do parâmetro variacional σ para diferentes valores do parâmetro Na [12, 95]. Em particular, para $V_0 = 3$, a curva $Na = 0$ ($\sigma = 1$) exibe a solução exata do estado fundamental do sistema na ausência de interações,

que é equivalente ao PPT esfericamente simétrico, e a energia correspondente por partícula é igual a $-1/2$. Para interações atrativas, a curva de energia por átomo apresenta um mínimo local quando N é menor que um determinado valor referente ao número crítico de átomos N_{crit}. No entanto, conforme $N \to N_{\text{crit}}$, o mínimo local tende a se estabelecer em larguras cada vez menores. Consequentemente, o CBE se torna cada vez mais estreito e mais pontiagudo devido ao aumento da intensidade das interações atrativas, conforme ilustra a Fig. 4.3.

Assim, quando $N > N_{\text{crit}}$, o ponto de mínimo local desaparece e as soluções estáveis deixam de existir. Em outras palavras, todos os estados tendem para uma largura nula[1] e a nuvem, inevitavelmente, entra em colapso, como ocorre experimentalmente nos CBEs de ^{7}Li [2, 98].

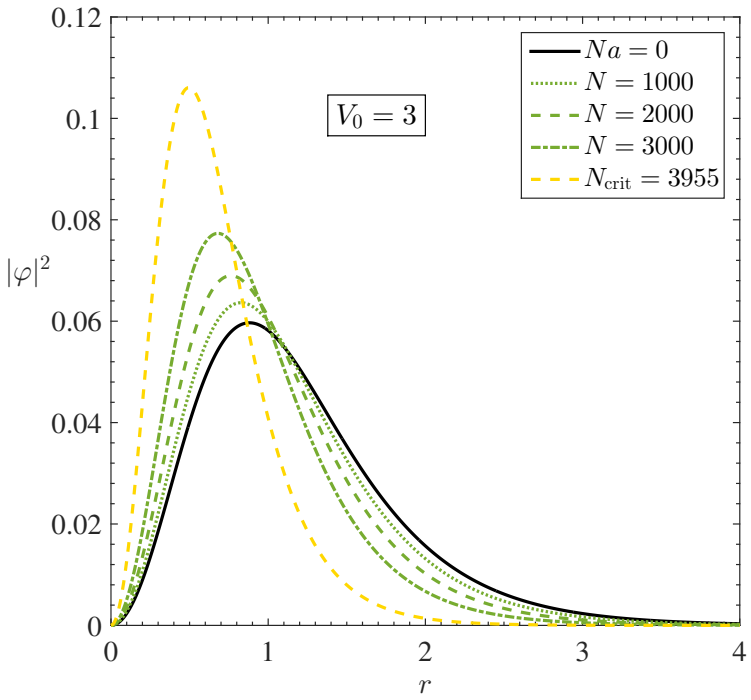


Figura 4.3: Resultados variacionais ilustrando alguns estados estacionários para diferentes valores de Na. Parâmetros: $V_0 = 3$, $a_s = -1.45\,\text{nm}$, $w = 1\,\mu\text{m}$.

4.1.3 Número crítico de átomos

Ao considerarmos o cenário no qual um CBE possui interações interatômicas atrativas ($a_s < 0$), observa-se que o gás tende a aumentar sua densidade no centro da armadilha com o intuito de diminuir a energia de interação. Esta tendência é confrontada pela energia cinética que tende

[1] Na realidade, o CBE não chega a ter largura zero; em altas densidades, as forças interatômicas repulsivas entram em ação, fazendo com que o condensado exploda. Tal efeito é denominado *bosenova* [96, 97].

a estabilizar o sistema. Entretanto, se a densidade central aumentar demasiadamente, a energia cinética não consegue mais evitar o colapso do CBE. Para uma dada espécie atômica em uma determinada armadilha, espera-se que o colapso ocorra quando o número de partículas no condensado exceder um determinado valor crítico $N_{\rm crit}$ [12, 99, 100]. Em outras palavras, o colapso de um sistema gasoso é o fenômeno em que o raio quadrático médio $\langle r^2 \rangle$ do sistema tende a zero em um tempo extremamente pequeno devido às interações interatômicas atrativas muito intensas, ao se atingir uma densidade atômica crítica [53].

Conforme o modelo proposto na Sec. 3.1 e a formulação variacional descrita na Sec. 3.2, o número crítico de átomos pode ser obtido através da minimização da energia dada pela Eq. 4.7, exigindo que a primeira (Eq. 4.8) e a segunda (Eq. 4.9) derivada de E/N com relação ao parâmetro variacional σ se anulem em um determinado ponto crítico $\sigma_{\rm crit}$:

$$\frac{2K_\lambda}{\sigma^3} + 4\pi V_0 \mathcal{C} + 2\pi N a \mathcal{D} = 0, \tag{4.8}$$

$$-\frac{6K_\lambda}{\sigma^4} + 4\pi V_0 \mathcal{E} + 2\pi N a \mathcal{F} = 0, \tag{4.9}$$

onde $\mathcal{E} = \partial\mathcal{C}/\partial\sigma$ e $\mathcal{F} = \partial\mathcal{D}/\partial\sigma$. Ou seja,

$$\mathcal{E}\left(r,\sigma,\lambda\right) = \int \frac{\partial^2}{\partial\sigma^2}\left[\mathrm{sech}^2\left(r\right)\aleph^2 \mathrm{sech}^{2\lambda-2}\left(\frac{r}{\sigma}\right)\tanh^2\left(\frac{r}{\sigma}\right)\right] dr, \tag{4.10}$$

$$\mathcal{F}\left(r,\sigma,\lambda\right) = \int \frac{\partial^2}{\partial\sigma^2}\left[\frac{1}{r^2}\aleph^4 \mathrm{sech}^{4\lambda-4}\left(\frac{r}{\sigma}\right)\tanh^4\left(\frac{r}{\sigma}\right)\right] dr. \tag{4.11}$$

Assim, a partir da Eqs. 4.8 e 4.9, torna-se possível obter a equação responsável pela determinação do parâmetro crítico $\sigma_{\rm crit}$ em função da ampliude do potencial:

$$V_0 = \frac{K_\lambda}{2\pi\sigma_{\rm crit}^4}\left(\frac{3\mathcal{D} + \sigma_{\rm crit}\mathcal{F}}{D\mathcal{E} - \mathcal{C}\mathcal{F}}\right). \tag{4.12}$$

A Fig. 4.4 ilustra o comportamento da amplitude V_0 do PPT em função do parâmetro crítico $\sigma_{\rm crit}$, via Eq. 4.12, em particular, para $\lambda = 2 \rightarrow \varphi = \sqrt{\frac{3}{4\pi\sigma}}\mathrm{sech}\left(\frac{r}{\sigma}\right)\tanh\left(\frac{r}{\sigma}\right)$. Observa-se que a amplitude atinge uma valor mínimo $\left(V_0\right)_{\rm min}$. Assim, um primeiro resultado importante obtido nesta tese foi a determinação do valor crítico (mínimo) da amplitude do PPT:

$$\frac{\partial V_0}{\partial\sigma_{\rm crit}} = 0 \quad \Rightarrow \quad \left(V_0\right)_{\rm min}, \tag{4.13}$$

o que demonstra uma instabilidade do CBE quando sujeito a valores abaixo de $\left(V_0\right)_{\rm min}$.

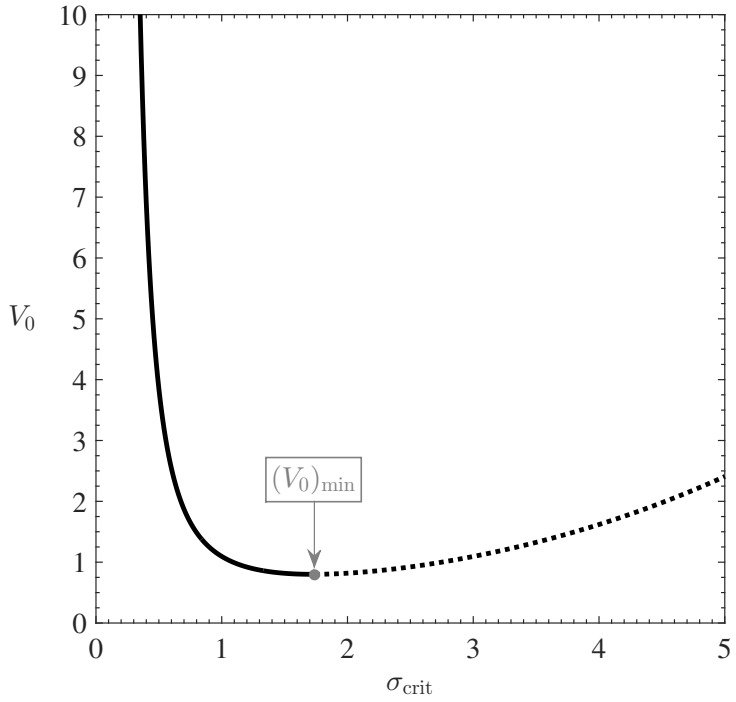


Figura 4.4: Comportamento da amplitude V_0 do PPT em função do parâmetro crítico σ_{crit}. O CBE torna-se instável se $V_0 < (V_0)_{\min}$. A linha tracejada indica soluções fisicamente impossíveis. Aqui, $\lambda = 2 \rightarrow \varphi = \sqrt{\frac{3}{4\pi\sigma}}\text{sech}\left(\frac{r}{\sigma}\right)\tanh\left(\frac{r}{\sigma}\right)$.

Substituindo o parâmetro crítico obtido da Eq. 4.12 na Eq. 4.8, torna-se possível estimar o número crítico de átomos através da seguinte equação:

$$N_{\text{crit}} = -\frac{w}{|a_s|\,\mathcal{D}}\left(\frac{K_\lambda}{\pi\sigma_{\text{crit}}^3} + 2V_0\mathcal{C}\right). \tag{4.14}$$

Percebe-se que N_{crit} depende de configurações experimentais típicas como o comprimento de espalhamento atômico a_s, a largura w e a profundidade V_0 do potencial de confinamento [101]. É importante destacar que o comportamento do CBE próximo ao colapso pode ser significativamente afetado por mecanismos não incluídos na teoria de Gross-Pitaevskii. Entre eles, colisões inelásticas de dois e três corpos, que podem causar uma perda de átomos do CBE [12].

O resultado referente à Eq. 4.14 é ilustrado no diagrama de estabilidade $N_{\text{crit}} - |a_s|$ na Fig. 4.5, exibindo o número crítico N_{crit} para o PPT esfericamente simétrio em função do valor absoluto do comprimento de espalhamento $|a_s|$. Observa-se que número crítico de átomos aumenta com a diminuição do valor absoluto do comprimento de espalhamento atômico.

Assim, com o propósito de elucidar as ordens de magnitudes envolvidas em CBEs reais, resumimos na tabela 4.1 alguns parâmetros experimentais que foram usados em experimentos

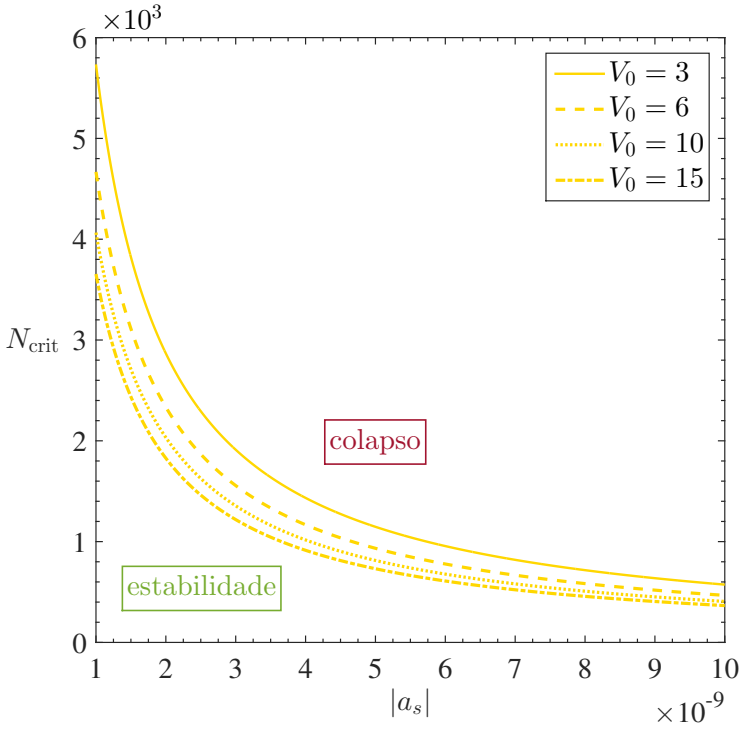


Figura 4.5: Diagrama de estabilidade $N_{\text{crit}} - |a_s|$. O CBE é estável para $N < N_{\text{crit}}$ e colapsa para $N > N_{\text{crit}}$. Parâmetros: $w = 1.0\,\mu\text{m}$.

de condensação de Bose-Einstein de átomos de ^{7}Li, realizados pelo Departamento de Física da Universidade Rice (Houston-Texas, EUA), onde eles experimentaram um potencial harmônico quase simétrico com frequências de oscilação $\nu_x = 150.6\,\text{Hz}$, $\nu_y = 152.6\,\text{Hz}$ e $\nu_z = 131.5\,\text{Hz}$ [98].

Parâmetro	CBE atrativo - ^{7}Li
m	$1.16 \times 10^{-26}\,\text{kg}$
a_s	$-1.45\,\text{nm}$
ω	$908.41\,\text{rad/s}$
a_{oh}	$3.16\,\mu\text{m}$
N	≤ 1400

Tabela 4.1: Dados relacionados à realização experimental da condensação de Bose-Einstein de ^{7}Li [98].

Em geral, os potenciais de confinamento são aproximados localmente por um potencial harmônico:

$$V_{\text{oh}} = \frac{1}{2}m\left(\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2\right), \tag{4.15}$$

onde m é a massa de cada átomo e $\omega_i = 2\pi\nu_i$ $(i = x, y, z)$ corresponde à frequência angular da armadilha, sendo ν_i a frequência de oscilação. Para armadilhas harmônicas anisotrópicas,

as frequências angulares harmônicas podem ser definidas em termos de sua média geométrica $\omega = (\omega_x\omega_y\omega_z)^{1/3}$, e a quantidade $a_{\rm oh} \equiv \sqrt{\hbar/(m\omega)}$ fica definida como sendo o comprimento médio do oscilador harmônico (normalmente da ordem de $a_{\rm oh} \approx 1\,\mu{\rm m}$) [12].

Aqui, os resultados variacionais demonstraram que, para os mesmos parâmetros experimentais apresentados na tabela 4.1, o PPT ($V_{\rm PT}$) permitiu aprisionar mais átomos do que o previsto pelo potencial harmônico ($V_{\rm oh}$), conforme registrado na tabela 4.2.

$V_{\rm ext}$	$N_{\rm crit}$
$V_{\rm oh} = \dfrac{1}{2}m\omega^2 r^2$	≈ 1400
$V_{\rm PT} = -\dfrac{\hbar^2}{mw^2}\dfrac{V_0}{\cosh^2(r/w)}$	≈ 12500

Tabela 4.2: Comparação entre o número crítico de átomos de ^{7}Li em CBEs atrativos aprisionados pelo potencial harmônico ($V_{\rm oh}$) *vs* potencial de Pöschl-Teller ($V_{\rm PT}$). Ambos os resultados foram previstos através da aproximação variacional e os parâmetos experimentais foram os mesmos utilizados no experimento realizado pelo Departamento de Física na Universidade Rice (Houston-Texas, EUA) [98]. Aqui, $V_0 = 3$.

4.1.4 Potencial químico, raio quadrático médio e estabilidade

Nas Figs. 4.6 e 4.8, resolvendo numericamente as Eqs. 4.3 e 4.4 (pelo algoritmo de iteração de Newton), apresentamos, respectivamente, a dependência do potencial químico μ em função do número de átomos N, e o comportamento do raio quadrático médio $\langle\sigma^2\rangle$, também, em função do número de átomos N. A Fig. 4.6 ilustra a curva de existência para uma família de soluções estacionárias. Tanto o potencial químico quanto o raio quadrático médio do CBE foram calculados à medida que o número de átomos fora aumentando gradativamente desde $N = 1$ até $N = N_{\rm crit}$.

A estabilidade das soluções estacionárias pode ser observada na Fig. 4.6 por meio do critério VK, que diz que soluções estáveis sempre se encontram em regiões nas quais $d\mu/dN < 0$. Portanto, nosso estudo analítico prevê a existência de CBEs estáveis confinados pelo PPT esfericamente simétrico para o caso de interações interatômicas atrativas.

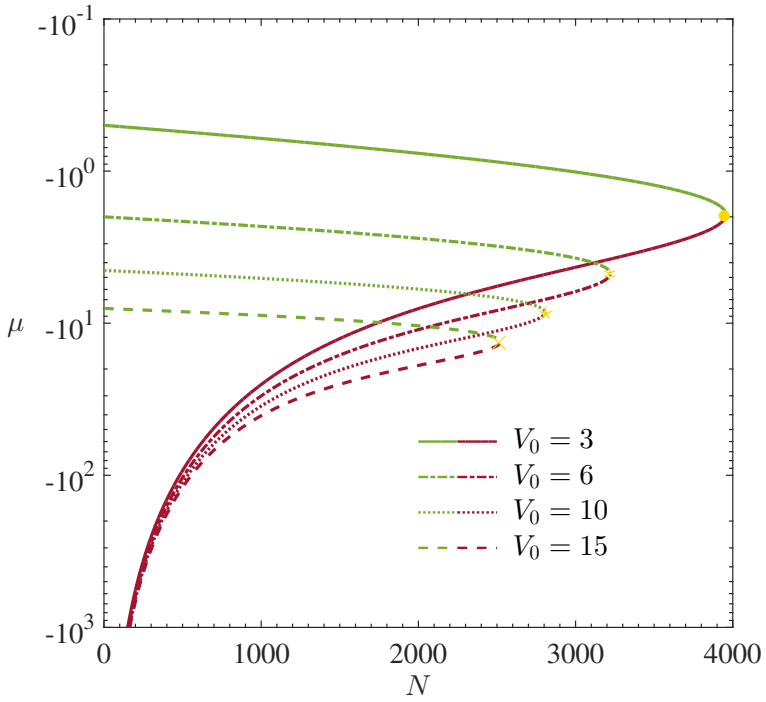


Figura 4.6: Resultados variacionais ilustrando o comportamento do potencal químico μ em função do número de átomos N. As curvas verdes indicam soluções estáveis enquanto que as curvas vermelhas indicam soluções instáveis; os pontos amarelos indicam pontos críticos: colapso iminente. A estabilidade foi confirmada através do critério VK ($d\mu/dN < 0$). Parâmetros: $a_s = -1.45\,\mathrm{nm}$, $w = 1\,\mu\mathrm{m}$.

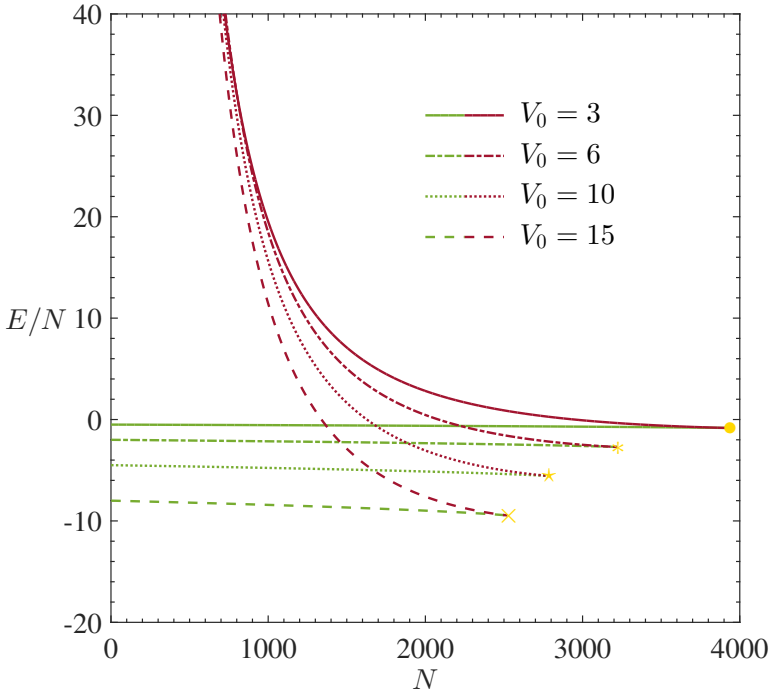


Figura 4.7: Resultados variacionais ilustrando o comportamento da energia por patícula E/N em função do número de átomos N. As curvas verdes indicam soluções estáveis enquanto que as curvas vermelhas indicam soluções instáveis; os pontos amarelos indicam pontos críticos: colapso iminente. Parâmetros: $a_s = -1.45\,\mathrm{nm}$, $w = 1\,\mu\mathrm{m}$.

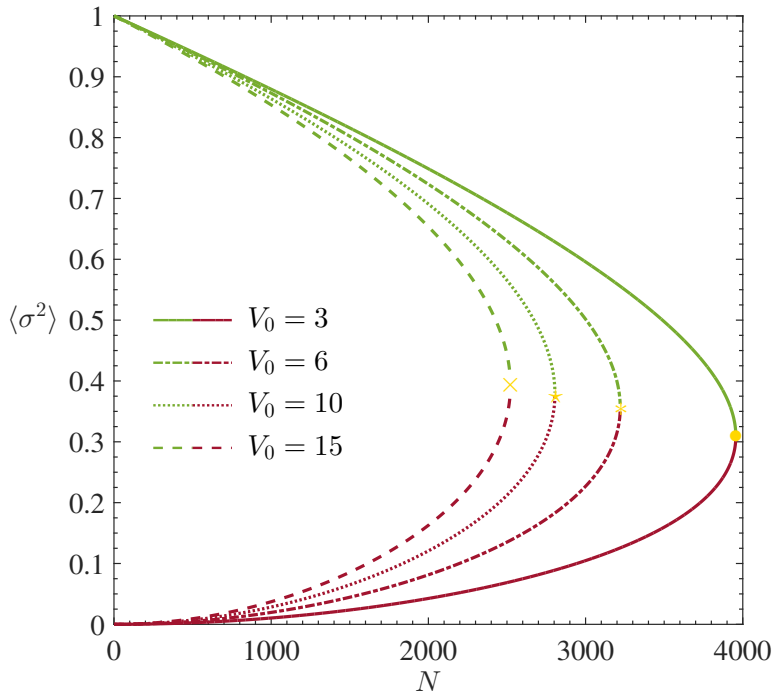


Figura 4.8: Resultados variacionais ilustrando o comportamento da largura σ em função do número de átomos N. A linha contínua indica as soluções estáveis enquanto que a linha pontilhada indica soluções instáveis; o ponto amarelo indica o ponto crítico: colapso iminente. Parâmetros: $a_s = -1.45\,\mathrm{nm}$, $w = 1\,\mu\mathrm{m}$.

4.2 Resultados numéricos

Com o intuito de confirmar as previsões dos resultados variacionais, buscamos, também, soluções numéricas referentes à EGP. Conforme a Sec. 3.3, a EGP proposta nesta tese é uma equação diferencial parcial não linear

$$\mathrm{i}\frac{\partial\varphi}{\partial t} = -\frac{1}{2}\frac{\partial^2\varphi}{\partial r^2} - V_0\mathrm{sech}^2\left(r\right)\varphi - g\left|\frac{\varphi}{r}\right|^2\varphi, \tag{4.16}$$

sujeita à uma condição incial e às condições de contorno. Nesta tese, uma escolha natural da condição inicial é a função secante-tangente hiperbólica (normalizada a unidade):

$$\varphi_\lambda\left(r,0\right) = \aleph\mathrm{sech}^{\lambda-1}(r)\tanh(r), \tag{4.17}$$

com $\aleph = \sqrt{\frac{1}{2\pi}\frac{\lambda-1}{(2\lambda-1)!}\frac{(2\lambda)!}{2^\lambda\lambda!}}$, porque no limite linear da Eq. 3.4 é possível obter soluções estacionárias exatas (estado fundamental) da ESL para o PPT esfericamente simétrico. Ademais, nós utilizamos as condições de contorno $\varphi_0^k = \varphi_m^k = 0$ para satisfazer $\varphi\left(0,t\right) = 0$ e $\lim_{r\to\infty}\varphi\left(r,t\right) = 0$.

Para encontrar as soluções estacionárias foi utilizado o método *split-step* Crank-Nicolson (SSCN) descrito na Sec. 3.3. O algoritmo referente ao método SSCN com evolução temporal imaginária e renormalização da função de onda pode ser resumido da seguinte maneira:

$$\varphi_j^{k+1/3} = \exp\left[-\left(-V_0\mathrm{sech}^2\left(r_j\right) - g_k\left|\varphi_j^k/r_j\right|^2\right)\Delta t/2\right]\varphi_j^k; \tag{4.18}$$

$$\varphi_j^{k+2/3} = \varphi_j^{k+1/3} + \frac{\Delta t}{4\left(\Delta r\right)^2}\left[\left(\varphi_{j+1}^{k+2/3} - 2\varphi_j^{k+2/3} + \varphi_{j-1}^{k+2/3}\right) + \left(\varphi_{j+1}^{k+1/3} - 2\varphi_j^{k+1/3} + \varphi_{j-1}^{k+1/3}\right)\right]; \tag{4.19}$$

$$\varphi_j^{k+1} = \exp\left[-\left(-V_0\mathrm{sech}^2\left(r_j\right) - g_k\left|\varphi_j^{k+2/3}/r_j\right|^2\right)\Delta t/2\right]\varphi_j^{k+2/3}; \tag{4.20}$$

$$\varphi_j^{k+1} = \varphi_j^{k+1}\left[\int\left|\varphi_j^{k+1}\right|^2 dr\right]^{-1/2}, \tag{4.21}$$

sendo que qualquer par (r_j, t_k) pode ser obtido via $r_j = r_0 + j\Delta r$ e $t_k = t_0 + k\Delta t$, onde $j = 0, 1, \ldots, m$ e $k = 0, 1, \ldots, n$, e os passos são $\Delta r = \frac{r_m - r_0}{m}$ e $\Delta t = \frac{t_n - t_0}{n}$.

Assumindo que a função de onda está normalizada à unidade $4\pi\int|\varphi|^2\,dr = 1$, o potencial químico pode ser calculado a partir da seguinte expressão, obtida pela multiplicação da Eq. 3.15 por $\varphi\left(r,t\right)$ e integrando-a sobre todo o espaço:

$$\mu = 4\pi \int \left[\frac{1}{2} \left(\frac{d\varphi}{dr} \right)^2 - V_0 \mathrm{sech}^2 (r) \varphi^2 - Na \frac{\varphi^4}{r^2} \right] dr. \tag{4.22}$$

A expressão analítica para energia por parícula é praticamente a mesma do potencial químico, mas com o termo não linear multiplicado pelo fator $1/2$:

$$\frac{E}{N} = 4\pi \int \left[\frac{1}{2} \left(\frac{d\varphi}{dr} \right)^2 - V_0 \mathrm{sech}^2 (r) \varphi^2 - \frac{Na}{2} \frac{\varphi^4}{r^2} \right] dr, \tag{4.23}$$

sendo a energia cinética E_{cin}, potencial E_{pot} e a de interação E_{int} descritas, respectivamente, por:

$$E_{\mathrm{cin}} = 4\pi \int \frac{1}{2} N \left(\frac{d\varphi}{dr} \right)^2 dr = 2\pi N \int \left(\frac{d\varphi}{dr} \right)^2 dr, \tag{4.24}$$

$$E_{\mathrm{pot}} = 4\pi \int -V_0 N \mathrm{sech}^2 (r) \varphi^2 dr = -4\pi V_0 N \int \mathrm{sech}^2 (r) \varphi^2 dr, \tag{4.25}$$

$$E_{\mathrm{int}} = 4\pi \int -\frac{N^2 a}{2} \frac{\varphi^4}{r^2} dr = -2\pi N^2 a \int \frac{\varphi^4}{r^2} dr. \tag{4.26}$$

Finalmente, o raio quadrático médio $\langle r^2 \rangle$ pode ser calculado por meio sa expressão [102]:

$$\sigma^2 \equiv \langle r^2 \rangle = 4\pi \int \kappa_\lambda r^2 \varphi^2 dr, \tag{4.27}$$

onde $\kappa_\lambda = \left\{ \frac{12}{\pi^2+12}, \frac{12}{\pi^2}, \frac{24}{2\pi^2-7}, \frac{72}{6\pi^2-31} \right\}$ para $\lambda = \{2, 3, 4, 5\}$.

Uma relação importante que permite testar a precisão do algoritmo numérico pode ser derivada por meio do teorema do virial (Apêndice A) [103, 104]:

$$2E_{\mathrm{cin}} + 3E_{\mathrm{int}} - 8\pi V_0 \int r \mathrm{sech}^2 (r) \tanh (r) \varphi^2 dr = 0. \tag{4.28}$$

A estabilidade das soluções numéricas foi verificada por meio da análise direta da evolução temporal imaginária da função de onda (Fig. 4.12) e através do critério VK (Fig. 4.10). Aqui, os parâmetros adimensionais utilizados nas simulações numéricas foram: $r_0 = 0$, $r_m = 10$, $t_0 = 0$, $t_n = 1000$, $\Delta r = 0.02$ e $\Delta t = 0.001$.

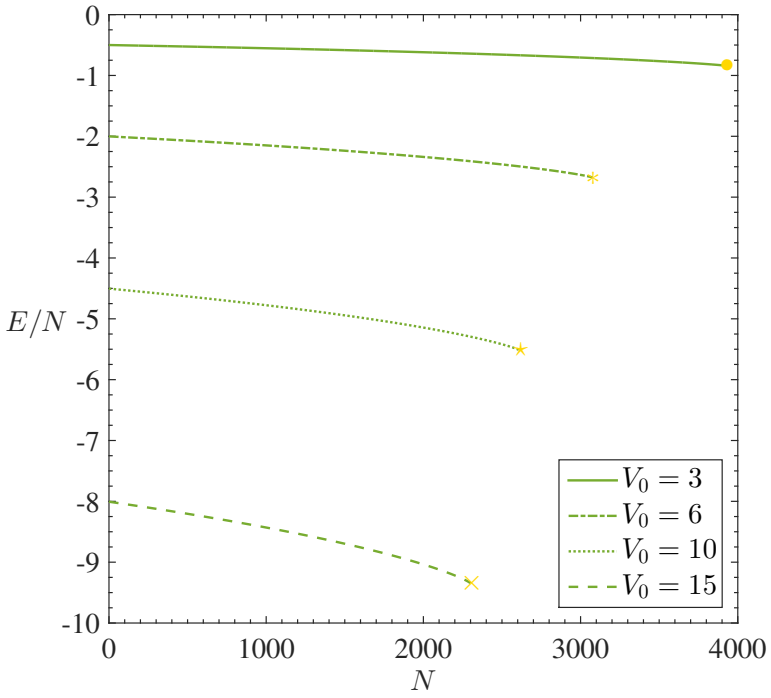


Figura 4.9: Resultados numéricos ilustrando o comportamento da energia por átomo E/N em função do número de átomos N. As curvas indicam soluções estáveis; os pontos amarelos indicam pontos críticos: colapso iminente. Parâmetros: $a_s = -1.45\,\mathrm{nm}$, $w = 1\,\mu\mathrm{m}$.

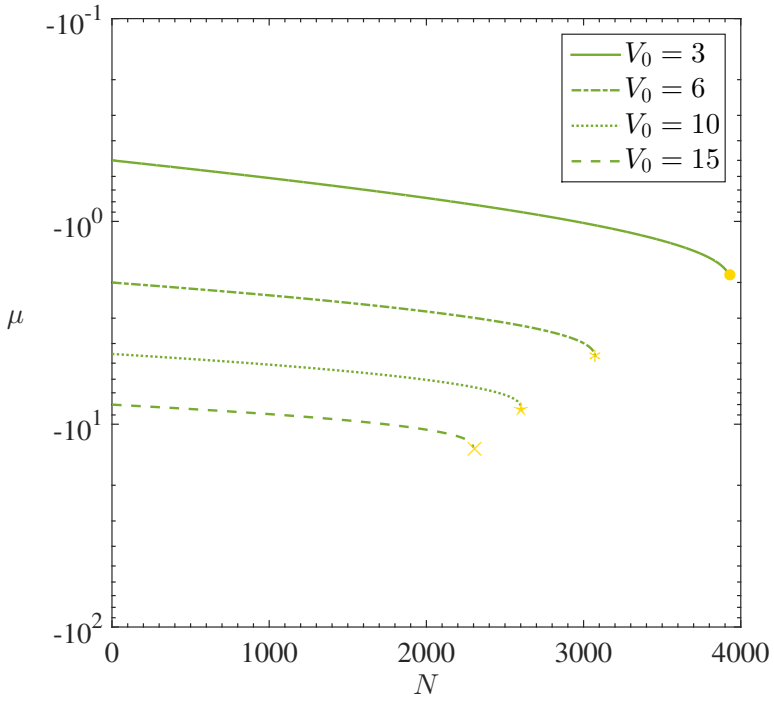


Figura 4.10: Resultados numéricos ilustrando o comportamento do potencal químico μ em função do número de átomos N. As curvas indicam soluções estáveis; os pontos amarelos indicam pontos críticos: colapso iminente. A estabilidade foi confirmada através do critério VK ($d\mu/dN < 0$). Parâmetros: $a_s = -1.45\,\mathrm{nm}$, $w = 1\,\mu\mathrm{m}$.

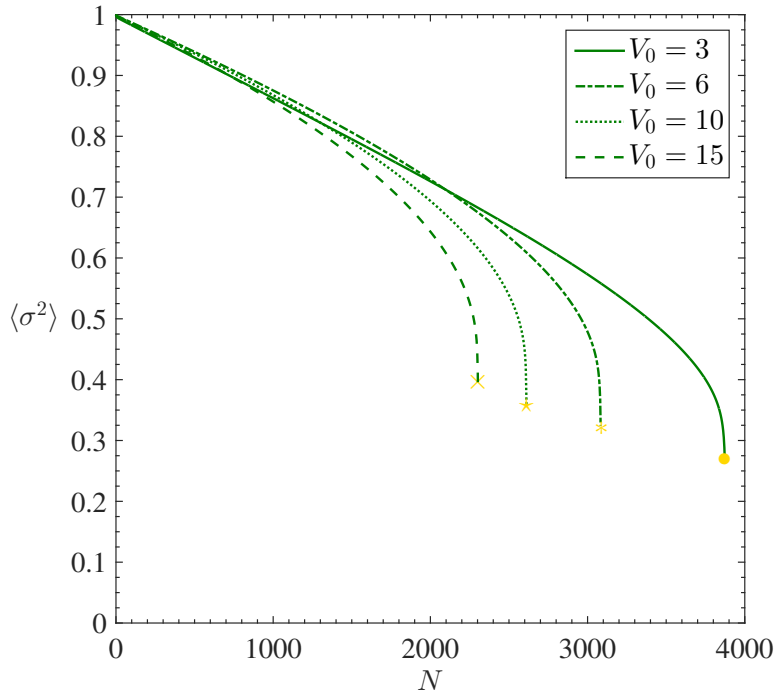


Figura 4.11: Resultados numéricos ilustrando o comportamento do raio quadrático médio $\langle r^2 \rangle$ em função do número de átomos N. As curvas indicam soluções estáveis; o ponto amarelo indica o ponto crítico: colapso iminente. Parâmetros: $a_s = -1.45\,\mathrm{nm}$, $w = 1\,\mu\mathrm{m}$.

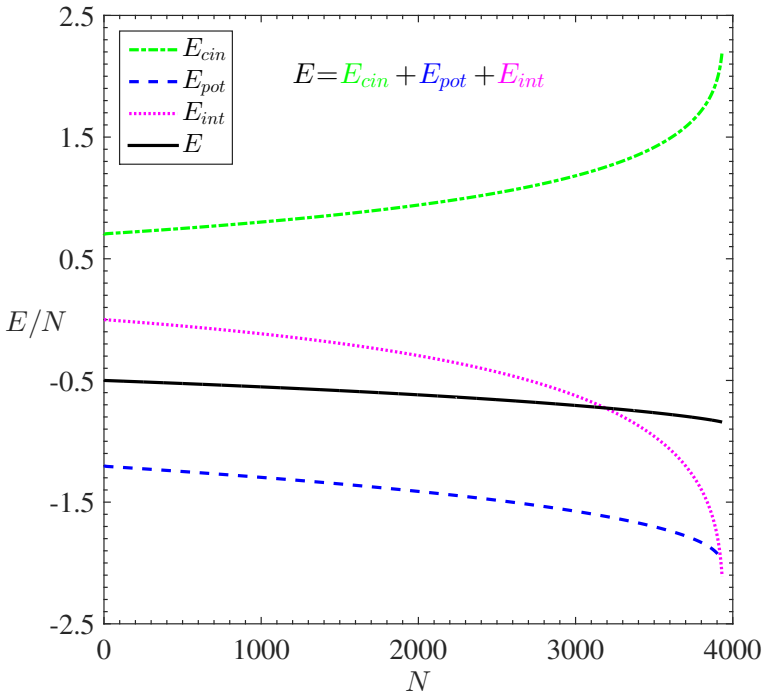


Figura 4.12: Resultados numéricos ilustrando a energia total, energia cinética, energia potencial e energia de interação, em função do número de átomos N. Parâmetros: $V_0 = 3$, $a_s = -1.45\,\mathrm{nm}$, $w = 1\,\mu\mathrm{m}$.

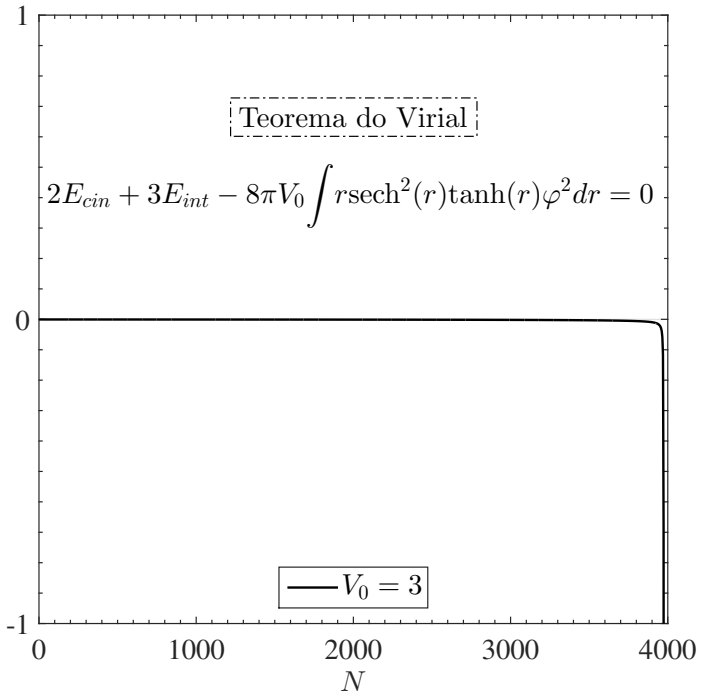


Figura 4.13: Validação dos resultados numéricos através do Teorema do Virial. Parâmetros: $V_0 = 3$, $a_s = -1.45\,\mathrm{nm}$, $w = 1\,\mu\mathrm{m}$.

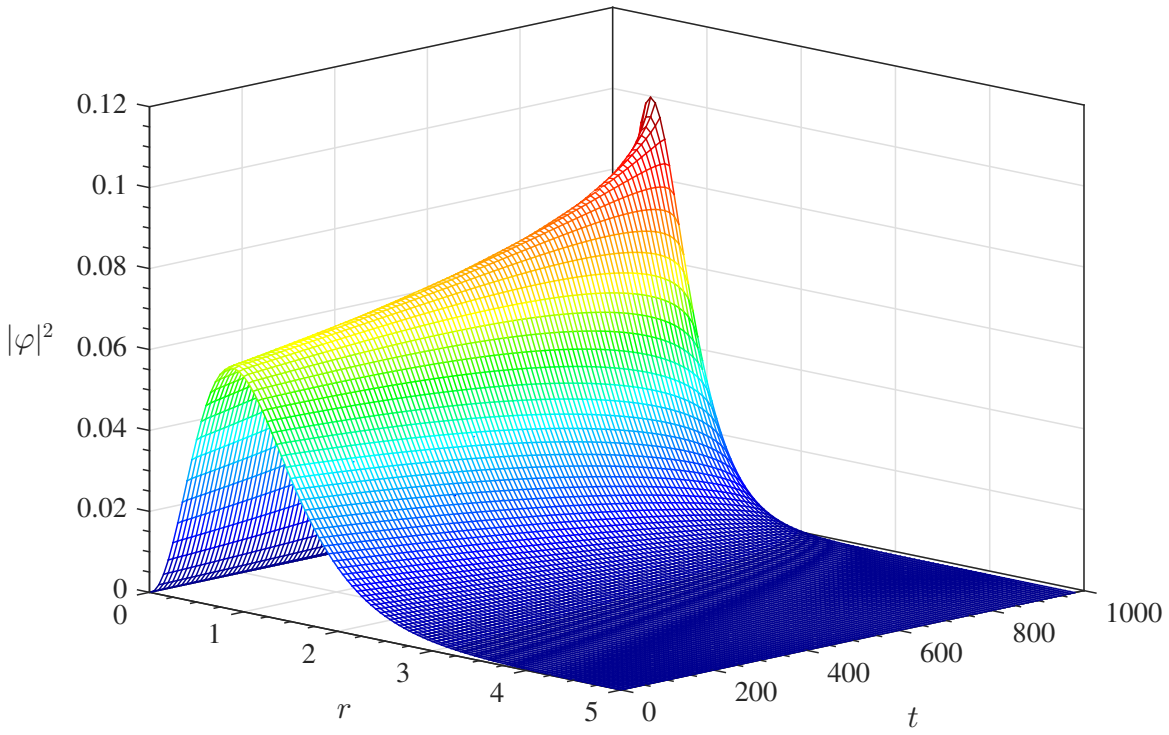


Figura 4.14: Evolução temporal dos sólitons na região de estabilidade. À medida que a não linearidade (número de átomos) é adicionada durante a evolução temporal imaginária, o raio quadrático médio tende a diminuir e a densidade central a aumentar. Caso o número de átomos ultrapasse o valor crítico, o colapso da função de onda torna-se inevitável. Parâmetros: $V_0 = 3$, $a_s = -1.45\,\mathrm{nm}$, $w = 1\,\mu\mathrm{m}$.

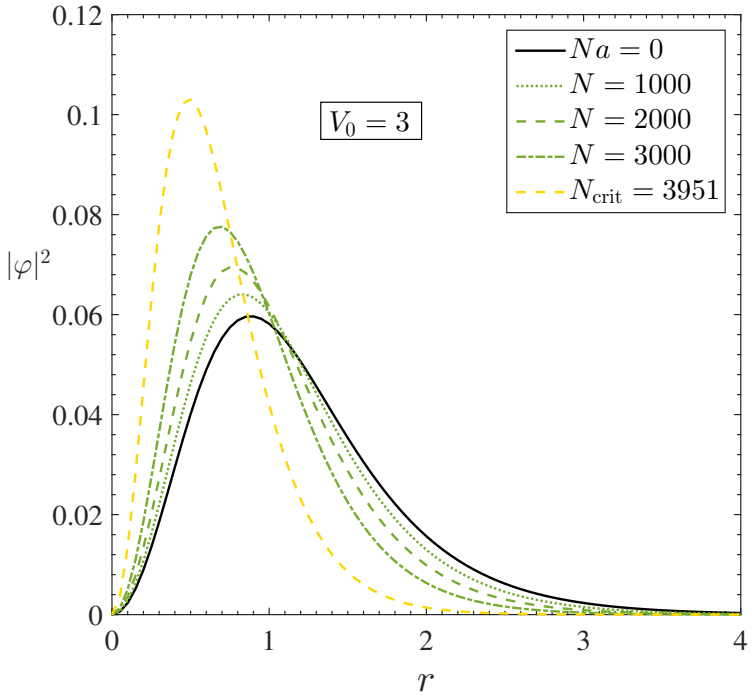


Figura 4.15: Resultados numéricos ilustrando alguns estados estacionários para diferentes valores de N. Parâmetros: $V_0 = 3$, $a_s = -1.45\,\text{nm}$, $w = 1\,\mu\text{m}$.

4.3 Resultados numéricos versus resultados variacionais

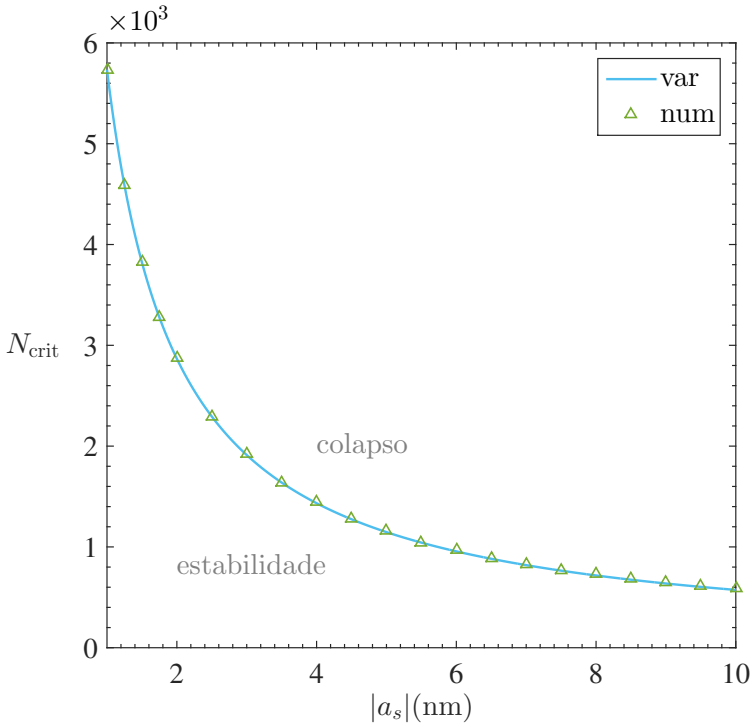


Figura 4.16: Diagrama de estabilidade obtido variacionalmente e numericamente. O CBE é estável para $N < N_{\text{crit}}$ e colapsa para $N > N_{\text{crit}}$. Parâmetros: $V_0 = 3$, $w = 1.0\,\mu$m.

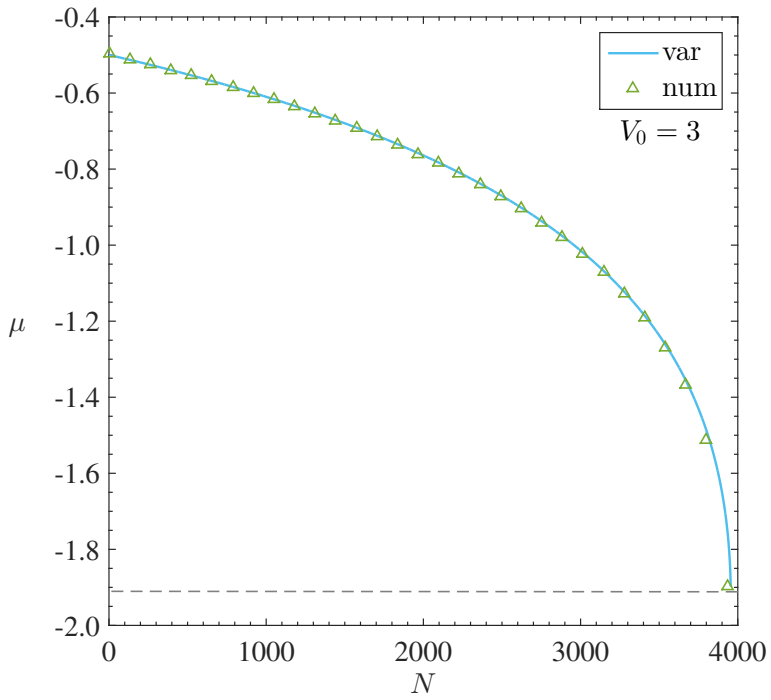


Figura 4.17: Resultados numéricos e variacionais ilustrando o comportamento do potencal químico μ em função do número de átomos N. A linha contínua indica as soluções variacionais e a cadeia de símbolos indica as soluções numéricas. A estabilidade foi confirmada através do critério VK ($d\mu/dN < 0$). Parâmetros: $V_0 = 3$, $a_s = -1.45\,\mathrm{nm}$, $w = 1\,\mu\mathrm{m}$.

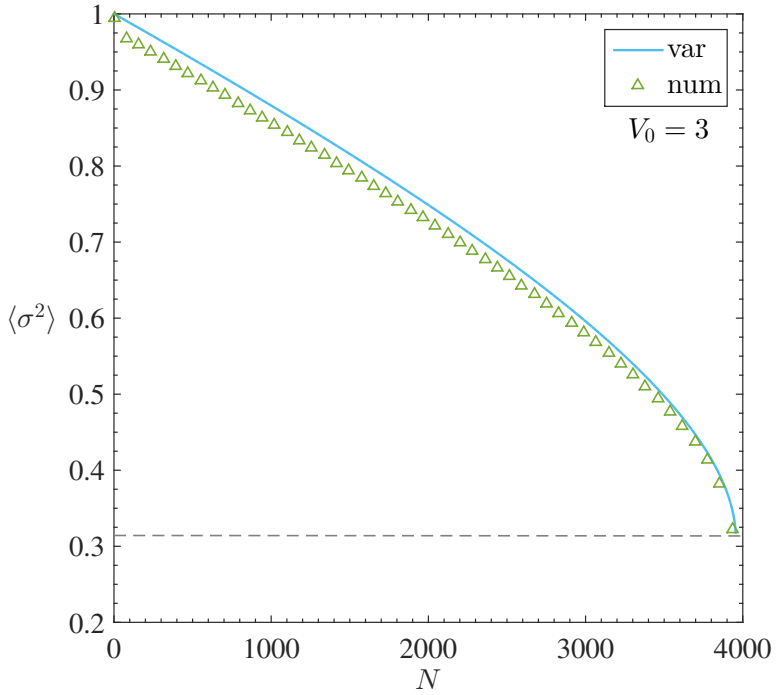


Figura 4.18: Resultados numéricos e variacionais ilustrando o comportamento da largura σ em função do número de átomos N. A linha contínua indica as soluções variacionais e a cadeia de símbolos indica as soluções numéricas. Parâmetros: $a_s = -1.45\,\mathrm{nm}$, $w = 1\,\mu\mathrm{m}$.

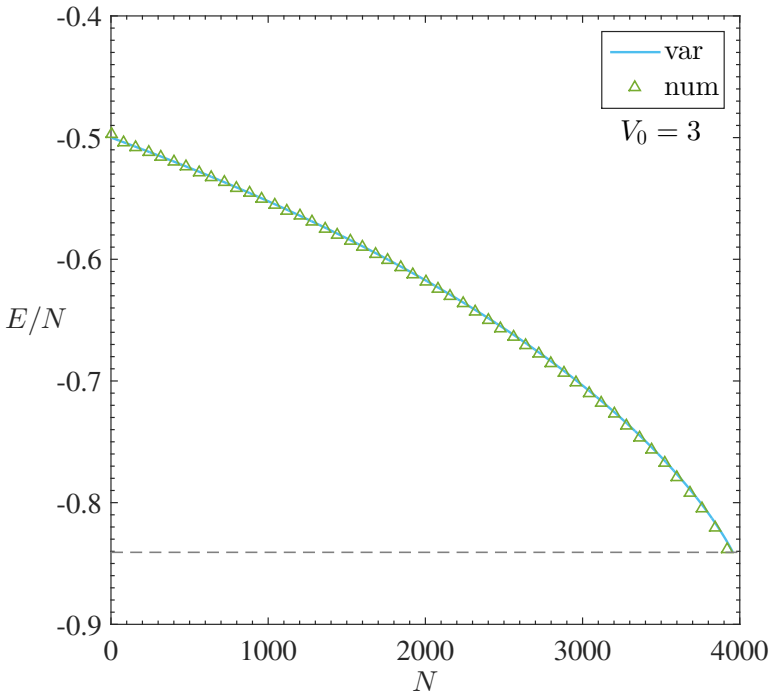


Figura 4.19: Resultados numéricos ilustrando o comportamento do potencal químico μ em função do número de átomos N. As curvas indicam soluções estáveis; os pontos amarelos indicam pontos críticos: colapso iminente. A estabilidade foi confirmada através do critério VK ($d\mu/dN < 0$). Parâmetros: $a_s = -1.45\,\mathrm{nm}$, $w = 1\,\mu\mathrm{m}$.

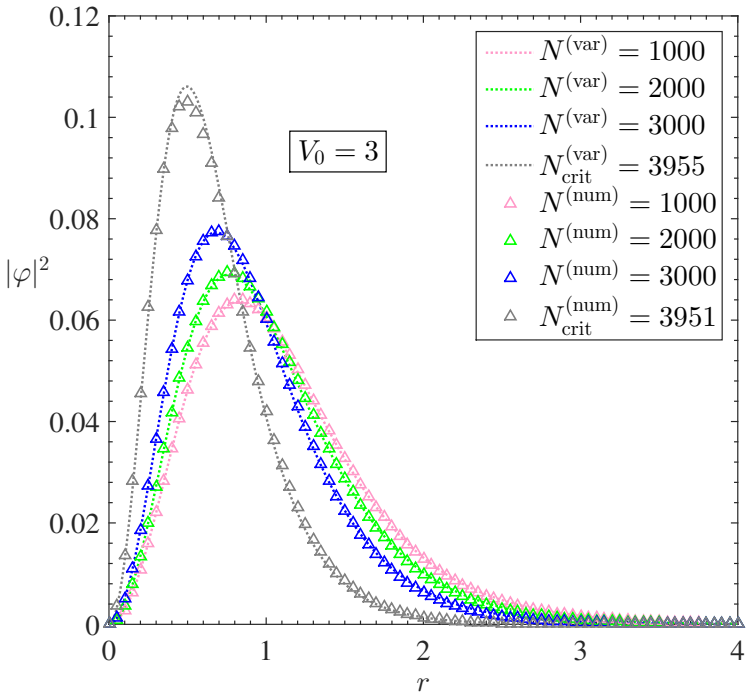


Figura 4.20: Soluções relativas ao estado fundamental do CBE atrativo aprisionado pelo PPT esfericamente simétrico. As linhas pontilhadas representam as soluções variacionais equanto que as cadeias de símbolos representam as soluções numéricas.

Capítulo 5

Conclusões e considerações finais

Esta tese se fundamentou no estudo da estabilidade de sólitons de ondas de matéria em CBEs constituídos por átomos sujeitos a interações interatômicas atrativas, confinados pelo PPT esfericamente simétrico. Para este propósito, utilizamos a EGP, dentro do escopo da TCM, para descrever o CBE. Com o intuito de resolver a EGP, utilizamos duas abordagens distintas: uma analítica (método variacional) e outra numérica (método *split-step* Crank-Nicolson). Em ambas abordagens, utilizamos a função secante-tangente hiperbólica para descrever a função de onda macroscópica referente ao CBE.

O emprego do PPT na investigação de sólitons de ondas de matéria em CBEs se justificou, primordialmente, por descrever uma armadilha finita nas bordas. De fato, à luz da física experimental, o PPT pode descrever um potencial de aprisionamento mais realista e pode ser criado e manipulado através da interação da luz com a matéria, uma vez que o PPT é um potencial óptico.

Com a intenção de se obter resultados mais realistas, as simulações realizadas neste trabalho foram executadas dispondo dos parâmetros experimentais utilizados em CBEs atrativos de ^{7}Li, produzidos pelo departamento de Física da Universidade RICE. Assim, em conformidade com os resultados obtidos, concluímos que é possível demonstrar a existência e a estabilidade de sólitons de ondas de matéria em condensados de Bose-Einstein atrativos confinados pelo PPT esfericamente simétrico. De uma forma geral, obtivemos uma concordância razoável entre os resultados variacionais e os resultados numéricos relativos à EGP associada ao modelo proposto.

Os resultados demonstraram a existência de um valor mínimo da amplitude $(V_0)_{\min}$ do PPT. De fato, observamos que o CBE pode ser aprisionado pelo PPT desde que $V_0 > (V_0)_{\min}$. Além disso, calculamos o número crítico de átomos, que permitem que os CBEs atrativos permaneçam estáveis, em função do comprimento de espalhamento, considerando amplitudes diferentes. Nossos resultados demonstraram que é possível aprisionar uma quantidade superior de átomos, quando comparados com resultados provenientes de uma armadilha harmônica. Tam-

bém observamos que conforme a amplitude/profundidade do PPT diminua, o número crítico de átomos tende a ser menor. Finalmente, a estabilidade das soluções foi verificada através do critério VK e por meio da investigação direta da evolução temporal imaginária numérica dos sólitons, demonstrando, assim, a possibilidade de se criar, do ponto de vista teórico, sólitons estáveis.

Perspectivas

Como perspectivas futuras, projetamos estudos acerca de estabilidade de sólitons de ondas de matéria em condensados unidimensionais ("*cigar-shaped*") e estabilidade de vórtices em condensados bidimensionais ("*pancake-shaped*"), ambos aprisionados pelo potencial de Pöschl-Teller. Além disso, o poço de Pöschl-Teller 1D possui uma propriedade ímpar: a *ausência de reflexão* de ondas incidentes para qualquer energia positiva. Tal propriedade nos motivou a idealizar um estudo futuro, acerca da estabilidade de sólitons incidentes em um poço de Pöschl-Teller na presença de não linearidade cúbica e quíntica, visando possíveis aplicações em guias de ondas ópticas não lineares.

Aplicações

Condensados atômicos podem ser considerados como um laboratório de física não linear, sujeitos a fenômenos como colapso, sólitons e vórtices. Ademais, condensados também permitem estudos de sistemas de Física do Estado Sólido em ambientes controlados, nos quais diversos parâmetros podem ser manipulados. Portanto, na perspectiva de eventuais aplicações, devemos enfatizar que, além dos resultados demonstrarem a possibilidade de se criar sólitons de ondas de matéria tridimensionais em CBEs atrativos, estáveis, aprisionados pelo PPT esfericamente simétrico, tais resultados podem ser relevantes no âmbito da Óptica não Linear [62] (propriedades não lineares em poços quânticos de Pöschl-Teller), Física da Matéria Condensada [28] (condensados de Bose-Einstein de mágnons), Cosmologia [25] (condensados de Bose-Einstein cosmológicos) e Física de Materiais [105] (propriedades não lineares em metamateriais hiperbólicos).

Publicações

[106] "Soluções variacionais e numéricas da Equação de Schrödinger 1D submetida ao potencial de Pöschl-Teller" - *Revista Principia - divulgação científica e tecnológica do IFPB*
[107] "Dynamics of Bose-Einstein Condensates Subject to the Pöschl-Teller Potential through Numerical and Variational Solutions of the Gross-Pitaevskii Equation" - *Materials*

[108] "Stability of matter-wave solitons in quasi-1D Bose-Einstein condensates trapped in Pöschl-Teller potential subject to periodic perturbations through a numerical approach" - *Proceedings of the Romanian Academy - Series A*
[109] "Dynamics and stability of matter-wave solitons in cigar-shaped Bose-Einstein condensates dragged by Pöschl-Teller potential" - *International Journal of Quantum Chemistry*

Apresentações em congressos

"Dynamics of Bose-Einstein condensates subject to the Pöschl-Teller potential through numerical and variational solutions of the Gross-Pitaevskii equation" - *Encontro de Outono da Sociedade Brasileira de Física - 2020*

"Stability of matter-wave solitons in attractive Bose-Einstein condensates trapped by the spherically symmetrical Pöschl-Teller potential" - *Encontro de Outono da Sociedade Brasileira de Física - 2021*

Manuscritos aceitos

[110] "Progeny of supermassive black holes through the collapse of dark matter Bose-Einstein condensates: a variational approach" - *Proceedings of the Romanian Academy - Series A*

Manuscritos em fase de elaboração

"Stability of matter-wave solitons in attractive Bose-Einstein condensates trapped by the spherically symmetrical Pöschl-Teller potential"

revista principia DIVULGAÇÃO CIENTÍFICA E TECNOLÓGICA DO IFPB | Nº 48

Soluções variacionais e numéricas da Equação de Schrödinger 1D submetida ao potencial de Pöschl-Teller

Lucas Carvalho Pereira [1], João Vítor Batista Ferreira [2], Valter Aragão do Nascimento [3]

[1] lukas.cp@gmail.com. [2] joao.ferreira@ufms.br. Universidade Federal de Mato Grosso do Sul - Instituto de Física.
[3] aragao60@hotmail.com. Universidade Federal de Mato Grosso do Sul - Faculdade de Medicina.

RESUMO

Neste trabalho apresentamos as soluções variacionais e numéricas da Equação de Schrödinger 1D submetida ao potencial de Pöschl-Teller. Os métodos utilizados foram o Método Variacional e o Método das Diferenças Finitas. Estes foram abordados de maneira didática e detalhada com o intuito de instruir os discentes, tanto da graduação quanto da pós-graduação, sobre a aplicabilidade e eficácia dos métodos supracitados. Utilizamos o potencial de Pöschl-Teller devido ao fato de ser pouco explorado nos livros de Mecânica Quântica utilizados na graduação e também por causa das diversas aplicações como, por exemplo, em Condensados de Bose-Einstein, guias de onda, defeitos topológicos em teoria de campos, etc. Concluímos este artigo comparando as soluções variacionais e numéricas com a solução analítica e apresentamos as vantagens de cada método.

Palavras-chave: Potencial de Pöschl-Teller. Método Variacional. Método das Diferenças Finitas.

ABSTRACT

This paper presents the numerical and variational solutions of the 1D Schrödinger Equation submitted to the Pöschl-Teller potential. The methods used were the Variational Method and the Finite Difference Method. They were presented in a didactic and detailed way with the purpose of instructing both undergraduate and graduate students, about the applicability and effectiveness of the aforementioned methods. We use the Pöschl-Teller potential due to the fact that it is little explored in the books of Quantum Mechanics used in undergraduation courses and also because of its diverse applications, such as in Bose-Einstein condensates, waveguides, topological defects in field theory and so on. We conclude this paper comparing the variational and numerical solutions with the analytical solution and present the advantages of each method.

Keywords: *Pöschl-Teller Potential. Variational Method. Finite Difference Method.*

materials

MDPI

Article

Dynamics of Bose–Einstein Condensates Subject to the Pöschl–Teller Potential through Numerical and Variational Solutions of the Gross–Pitaevskii Equation

Lucas Carvalho Pereira [1,*] and Valter Aragão do Nascimento [2]

[1] Programa de Pós-Graduação em Ciência dos Materiais, Instituto de Física, Universidade Federal de Mato Grosso do Sul, Campo Grande 79070-900, Mato Grosso do Sul, Brazil

[2] Group of Spectroscopy and Bioinformatics Applied to Biodiversity and Health, School of Medicine, Postgraduation Program in Health and Development in the Midwest Region, Faculty of Medicine, Federal University of Mato Grosso do Sul, Campo Grande 79070-900, Mato Grosso do Sul, Brazil; aragao60@hotmail.com

* Correspondence: lukas.cp@gmail.com; Tel.: +55-67-99280-9266

Received: 29 March 2020; Accepted: 20 April 2020; Published: 13 May 2020

check for updates

Abstract: We present for the first time an approach about Bose–Einstein condensates made up of atoms with attractive interatomic interactions confined to the Pöschl–Teller hyperbolic potential. In this paper, we consider a Bose–Einstein condensate confined in a cigar-shaped, and it was modeled by the mean field equation known as the Gross–Pitaevskii equation. An analytical (variational method) and numerical (two-step Crank–Nicolson) approach is proposed to study the proposed model of interatomic interaction. The solutions of the one-dimensional Gross–Pitaevskii equation obtained in this paper confirmed, from a theoretical point of view, the possibility of the Pöschl–Teller potential to confine Bose–Einstein condensates. The chemical potential as a function of the depth of the Pöschl–Teller potential showed a behavior very similar to the cases of Bose–Einstein condensates and superfluid Fermi gases in optical lattices and optical superlattices. The results presented in this paper can open the way for several applications in atomic and molecular physics, solid state physics, condensed matter physics, and material sciences.

Keywords: Bose–Einstein condensates; Pöschl–Teller potential; variational method; split-step Crank–Nicolson method

THE PUBLISHING HOUSE
OF THE ROMANIAN ACADEMY

PROCEEDINGS OF THE ROMANIAN ACADEMY, Series A
Volume 21, Number 3/2020, pp. 237–244

STABILITY OF MATTER-WAVE SOLITONS IN QUASI-1D BOSE-EINSTEIN CONDENSATES TRAPPED IN PÖSCHL-TELLER POTENTIAL SUBJECT TO PERIODIC PERTURBATIONS THROUGH A NUMERICAL APPROACH

L. C. PEREIRA[1], J. V. B. FERREIRA[2], V. A. NASCIMENTO[1,3]

[1] Programa de Pós-graduação em Ciência dos Materiais, Instituto de Física, Universidade Federal de Mato Grosso do Sul, Campo Grande-MS 79070-900, Brazil
[2] Instituto de Física, Universidade Federal de Mato Grosso do Sul, Campo Grande-MS 79070-900, Brazil
[3] Group of Spectroscopy and Bioinformatics Applied to Biodiversity and Health, School of Medicine, Postgraduation Program in Health and Development in the Midwest Region, Faculty of Medicine, Federal University of Mato Grosso do Sul, Campo Grande-MS 79070-900, Brazil

Corresponding author: L. C. PEREIRA, E-mail: lukas.cp@gmail.com

Abstract: We presented for the first time a study regarding the stability of matter-wave solitons in a quasi one-dimensional Bose-Einstein condensate (cigar-shaped) consisting of atoms with attractive interatomic interactions trapped in a Pöschl-Teller potential subjected to periodic perturbations. The quasi-one-dimensional Bose-Einstein condensate was modeled by Gross-Pitaevskii equation. A numerical (split-step Crank-Nicolson method) approach has been proposed to investigate the dynamic properties of matter-wave solitons during the temporal evolution of this atomic system. The results obtained in this paper demonstrated the stability of the wave-matter solitons while they were perturbed by periodic oscillations of the Pöschl-Teller potential during temporal evolution. The results presented in this paper can open the way for several applications in atomic and molecular physics, condensed matter physics, solid state physics, nonlinear optics and material sciences.

Key words: Bose-Einstein condensates, solitons, Pöschl-Teller potential, split-step Crank-Nicolson method.

Received: 2 December 2020 | Revised: 20 January 2021 | Accepted: 27 January 2021

DOI: 10.1002/qua.26634

FULL PAPER

International Journal of Quantum Chemistry WILEY

Dynamics and stability of matter-wave solitons in cigar-shaped Bose–Einstein condensates dragged by Pöschl–Teller potential

Lucas Carvalho Pereira[1] | Bruno Spolon Marangoni[1] | Valter Aragão do Nascimento[2]

[1]Programa de Pós-graduação em Ciência dos Materiais, Instituto de Física, Universidade Federal de Mato Grosso do Sul, Campo Grande, Brazil

[2]Group of Spectroscopy and Bioinformatics Applied to Biodiversity and Health, School of Medicine, Postgraduation Program in Health and Development in the Midwest Region, Faculty of Medicine, Federal University of Mato Grosso do Sul, Campo Grande, Brazil

Correspondence
Lucas Carvalho Pereira, Programa de Pós-graduação em Ciência dos Materiais, Instituto de Física, Universidade Federal de Mato Grosso do Sul, Campo Grande 79070-900, Mato Grosso do Sul, Brazil.
Email: lukas.cp@gmail.com

Abstract

In this paper, we theoretically investigate the dynamics and stability of matter-wave solitons (MWS) in a cigar-shaped Bose–Einstein condensate (BEC) consisting of atoms with attractive interatomic interactions trapped by Pöschl–Teller (PT) potential. In this scenario, we propose the idea of the BEC being dragged by PT potential at a constant speed. The BEC was modeled by the quasi-one-dimensional Gross–Piteaevskii Equation (1D-GPE). In addition, an analytical (time-dependent variational method) and numerical (split-step Crank–Nicolson method) approach has been proposed to investigate the dynamic properties of solitons during the temporal evolution of this system. Both analytical and numerical results demonstrated that MWSs dragged by PT potential can be stable. From a general point of view, the results obtained in this paper can motivate both theoretical and experimental investigations on the dynamics and stability of solitons in dilute and ultracold unitary Bose gases trapped by PT potential, nonlinear optical properties in PT quantum wells, and propagation of solitons in nonlinear media.

KEYWORDS

Bose–Einstein condensates, matter-wave solitons, Pöschl–Teller potential

THE PUBLISHING HOUSE
OF THE ROMANIAN ACADEMY

PROCEEDINGS OF THE ROMANIAN ACADEMY, Series A
Volume xx, Number yy/2021, pp. 000–000

Progeny of supermassive black holes through the collapse of dark matter Bose-Einstein condensates: a variational approach

L. C. PEREIRA

Universidade Federal de Mato Grosso do Sul, Instituto de Física
Campo Grande - MS 79070-900, Brazil
Corresponding author: L. C. PEREIRA, E-mail: lukas.cp@gmail.com

Abstract: In this paper, we propose that the progeny of supermassive black holes occur due to the collapse of dark matter consisting of dark bosons at ultra-cold temperatures. For this purpose, supermassive black holes were modeled as attractive cosmological Bose-Einstein condensates and described by the Gross-Pitaevskii equation within the scope of the mean-field theory. The study developed in this paper was motivated by the possibility of observing the formation of supermassive black holes through the behavior of the chemical potential as a function of the number of dark bosons. The results demonstrated, through variational formalism, that the formation of supermassive black holes is possible. The results obtained in this paper can open the way for a better understanding about supermassive black holes and motivate new studies related to cosmological Bose-Einstein condensates such as supermassive Kerr black holes and quarks stars.

Key words: supermassive black holes, cosmological Bose-Einstein condensates, dark matter, variational method.

ENCONTRO DE OUTONO **2020**
SOCIEDADE BRASILEIRA DE FÍSICA

CERTIFICATE

The Organizing Committe hereby certifies that the work "Dynamics of Bose-Einstein condensates subject to the Pöschl-Teller potential through numerical and variational solutions of the Gross-Pitaevskii equation" by Lucas Carvalho Pereira, Valter Aragão do Nascimento was presented in the session ATOMIC AND MOLECULAR PHYSICS of the Encontro de Outono da SBF 2020, which took place in Online from November 23 to 27, 2020.

222-346-1

November 27, 2020

SBF
SOCIEDADE BRASILEIRA DE FÍSICA

Eduardo Granado
Coordenador de Programa

Cícero Rafael Cena
Coordenador Geral

Apêndice

A Teorema do Virial em condensados de Bose-Einstein

Em um sistema em equilíbrio, o teorema do virial estabelece relações que devem ser satisfeitas entre as diferentes energias do sistema. Este teorema leva em consideração que a energia deve ser independente de uma transformação escalonada das coordenadas e além disso impõe que a energia deve ser mínima.

Portanto, como a energia (Eq. 4.23) é estacionária para qualquer variação da função de onda $\varphi(r)$ em torno da solução da EGP, a escala deve ser escolhida $r \to \tilde{r} = \nu r$, onde ν é um parâmetro de escala real arbitrário. A função de onda do CBE se transforma em $\varphi(r) \to \tilde{\varphi}(\tilde{r}) = A\varphi(\nu r)$, onde A é uma constante de normalização. A partir do princípio da invariância de escala, a norma da função de onda deve ser preservada. Assim,

$$\begin{aligned} 4\pi \int \varphi^2(r)\, dr &= 4\pi A^2 \int \varphi^2(\nu r)\, dr \\ &= 4\pi A^2 \nu^{-1} \int \varphi^2(\nu r)\, d(\nu r) \\ &= 4\pi A^2 \nu^{-1} \int \tilde{\varphi}^2 d\tilde{r} = 1. \end{aligned} \tag{5.1}$$

onde a constante de normalização é $A = \nu^{1/2}$, porque a integral acima é unitária.

A contribuição da energia cinética (Eq. 4.24), através da função de onda escalonada $\tilde{\varphi}(\tilde{r})$, é dada por

$$\begin{aligned}\tilde{E}_{\text{cin}} &= 2\pi N\nu \int \left[\frac{d\varphi\left(\nu r\right)}{dr}\right]^2 dr \\ &= 2\pi N\nu^2 \int \left[\frac{d\varphi\left(\nu r\right)}{d\left(\nu r\right)}\right]^2 d\left(\nu r\right) \\ &= 2\pi N\nu^2 \int \left[\frac{d\tilde{\varphi}}{d\tilde{r}}\right]^2 d\tilde{r} = \nu^2 E_{\text{cin}}. \end{aligned} \tag{5.2}$$

A energia de interação (Eq. 4.26) se transforma conforme

$$\begin{aligned}\tilde{E}_{\text{int}} &= -2\pi N^2 a\nu^2 \int \frac{\varphi^4\left(\nu r\right)}{r^2} dr \\ &= -2\pi N^2 a\nu^3 \int \frac{\varphi^4\left(\nu r\right)}{\left(\nu r\right)^2} d\left(\nu r\right) \\ &= -2\pi N^2 a\nu^3 \int \frac{\tilde{\varphi}^4}{\tilde{r}^2} d\tilde{r} = \nu^3 E_{\text{int}}. \end{aligned} \tag{5.3}$$

Finalmente, a energia potencial (Eq. 4.25) se transforma em

$$\begin{aligned}\tilde{E}_{\text{pot}} &= -4\pi N V_0 \int \nu \text{sech}^2\left(r\right) \varphi^2\left(\nu r\right) dr \\ &= -4\pi N V_0 \int \text{sech}^2\left(\frac{\nu r}{\nu}\right) \varphi^2\left(\nu r\right) d\left(\nu r\right) \\ &= -4\pi N V_0 \int \text{sech}^2\left(\frac{\tilde{r}}{\nu}\right) \tilde{\varphi}^2 d\tilde{r}. \end{aligned} \tag{5.4}$$

A energia total transformada é

$$\tilde{E} = \nu^2 E_{\text{cin}} + \nu^3 E_{\text{int}} - 4\pi N V_0 \int \text{sech}^2\left(\frac{\tilde{r}}{\nu}\right) \tilde{\varphi}^2 d\tilde{r}. \tag{5.5}$$

Assim, através da condição de equilíbrio

$$\left.\frac{d\tilde{E}}{d\nu}\right|_{\nu=1} = 0, \tag{5.6}$$

o Teorema do Virial[1] de um CBE aprisionado pelo PPT pode ser constatado como

[1] A demonstração do Teorema do Virial para CBEs aprisionados por redes ópticas (potencial periódico) tabém envolve integrais não analíticas. Tal demonstração pode ser encontrada na Ref. [103].

$$2E_{\text{cin}} + 3E_{\text{int}} - 8\pi V_0 \int r\text{sech}^2\left(r\right)\tanh\left(r\right)\varphi^2 dr = 0. \tag{5.7}$$

B Polinômios associados de Legendre

A equação diferencial de Legendre na sua forma geral

$$\left(1-x^2\right)\frac{d^2y}{dx^2}-2x\frac{dy}{dx}+\left[l\left(l+1\right)-\frac{m^2}{1-x^2}\right]y=0, \tag{B.1}$$

tem um papel muito importante na Física. Em geral, a resolução da equação de Laplace em coordenadas esféricas tem como solução esta equação. Ela também aparece na Mecânica Quântica como solução da equação angular da equação de Schrödinger conhecida como harmônicos esféricos. Esta equação pode ser resolvida por meio dos polinômios associados de Legendre:

$$P_l^m(x)=\left(1-x^2\right)^{m/2}\left(\frac{d}{dx}\right)^m P_l(x), \tag{B.2}$$

onde $P_l(x)$ são os Polinômios de Legendre que podem ser obtidos por meio da Fórmula de Rodrigues:

$$P_l(x)=\frac{1}{2^l l!}\left(\frac{d}{dx}\right)^l\left(x^2-1\right)^l, \tag{B.3}$$

Esta fórmula é útil para provar muitas das propriedades dos polinômios de Legendre, tal como a ortogonalidade:

$$\int_{-1}^{+1}P_l(x)P_{l'}(x)dx=\frac{2}{2l+1}\delta_{ll'}. \tag{B.4}$$

Assim, a Eq. B.2 pode ser reescrita da seguinte maneira:

$$P_l^m(x)=\frac{1}{2^l l!}\left(1-x^2\right)^{m/2}\left(\frac{d}{dx}\right)^{l+m}\left(x^2-1\right)^l. \tag{B.5}$$

A integral de ortogonalidade dos PALs é dada por:

$$\int_{-1}^{+1}P_l^m(x)P_{l'}^m(x)dx=\frac{2}{2l+1}\frac{(l+m)!}{(l-m)!}\delta_{ll'}. \tag{B.6}$$

Também é possível desenvolver uma relação de ortogonalidade para os PALs que tenham o mesmo índice inferior, mas índice superior diferente [70]:

$$\int_{-1}^{+1}P_l^m(x)P_l^{m'}(x)\left(1-x^2\right)^{-1}dx=\frac{1}{m}\frac{(l+m)!}{(l-m)!}\delta_{mm'}. \tag{B.7}$$

C Método Variacional

C.1 Teoria de Campos na Forma Lagrangiana

Sistemas contínuos possuem um número infinito de graus de liberdade e podem ser descritos por campos [111]. 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 x do espaço, ou seja, o índice discreto k é substituído pelo índice contínuo x. Por simplicidade, consideraremos inicialmente campos em uma dimensão espacial e, em vez de utilizar a coordenada espacial como subscrito, usaremos a notação tradicional $\psi \equiv \psi(x,t)$.

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, iremos supor que um campo interage somente com seu 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

$$\mathcal{S} = \int_{t_1}^{t_2}\int_{x_1}^{x_2} \mathcal{L}\left(\psi, \psi', \dot{\psi}, x, t\right) dxdt. \tag{C.1}$$

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

$$\mathcal{S} = \int_{t_1}^{t_2} L dt, \tag{C.2}$$

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

$$L = \int_{x_1}^{x_2} \mathcal{L}\left(\psi, \psi', \dot{\psi}, x, t\right) dx. \tag{C.3}$$

A equação de Lagrange para ψ decorre do princípio de Hamilton

$$\delta\mathcal{S} = \delta\int_{t_1}^{t_2}\int_{x_1}^{x_2} \mathcal{L}\left(\psi, \psi', \dot{\psi}, x, t\right) dxdt = 0, \tag{C.4}$$

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

$$\delta\psi\left(x,t_1\right)=\delta\psi\left(x,t_2\right)=0, \tag{C.5}$$

$$\delta\psi\left(x_1,t\right)=\delta\psi\left(x_2,t\right)=0. \tag{C.6}$$

Aplicando a variação da ação na Eq.C.4, resulta

$$\delta\mathcal{S}=\int_{t_1}^{t_2}\int_{x_1}^{x_2}\left[\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\psi}\delta\psi+\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{\psi}}\delta\dot{\psi}+\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\psi'}\delta\psi'\right]dxdt=0. \tag{C.7}$$

Usando as relações

$$\delta\dot{\psi}=\delta\left(\frac{\partial\psi}{\partial t}\right)=\frac{\partial}{\partial t}\left(\delta\psi\right), \tag{C.8}$$

$$\delta\psi'=\delta\left(\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)=\frac{\partial}{\partial x}\left(\delta\psi\right), \tag{C.9}$$

e utilizando o método da integral por partes, segue que

$$\delta\mathcal{S}=\int_{t_1}^{t_2}\int_{x_1}^{x_2}\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\psi}\delta\psi dxdt+\int_{t_1}^{t_2}\int_{x_1}^{x_2}\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{\psi}}\delta\dot{\psi}dxdt+\int_{t_1}^{t_2}\int_{x_1}^{x_2}\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\psi'}\delta\psi'dxdt, \tag{C.10}$$

onde

$$\begin{aligned}\int_{t_1}^{t_2}\int_{x_1}^{x_2}\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{\psi}}\frac{\partial}{\partial t}\left(\delta\psi\right)dxdt&=\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{\psi}}\left(\delta\psi\right)\Big|_{t_1}^{t_2}-\int_{t_1}^{t_2}\int_{x_1}^{x_2}\frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{\psi}}\right)\left(\delta\psi\right)dxdt\\&=-\int_{t_1}^{t_2}\int_{x_1}^{x_2}\frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{\psi}}\right)\left(\delta\psi\right)dxdt,\end{aligned} \tag{C.11}$$

$$\begin{aligned}\int_{t_1}^{t_2}\int_{x_1}^{x_2}\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\psi'}\frac{\partial}{\partial x}\left(\delta\psi\right)dxdt&=\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\psi'}\left(\delta\psi\right)\Big|_{x_1}^{x_2}-\int_{t_1}^{t_2}\int_{x_1}^{x_2}\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\psi'}\right)\left(\delta\psi\right)dxdt\\&=-\int_{t_1}^{t_2}\int_{x_1}^{x_2}\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\psi'}\right)\left(\delta\psi\right)dxdt.\end{aligned} \tag{C.12}$$

Substituindo os resultados acima na Eq. C.7, o princípio de Hamilton torna-se

$$\int_{t_1}^{t_2}\int_{x_1}^{x_2}\left[\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\psi}-\frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{\psi}}\right)-\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\psi'}\right)\right]\delta\psi dxdt=0. \tag{C.13}$$

Assim, obtém-se a equação de Euler-Lagrange

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}}\right)+\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi'}\right)-\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi}=0. \tag{C.14}$$

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

$$\delta \mathcal{S}=\delta \int_{t_1}^{t_2}\int_V \mathcal{L}\left(\psi,\nabla\psi,\dot{\psi},\mathbf{x},t\right)d\mathbf{x}dt=0, \tag{C.15}$$

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

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}_\alpha}\right)+\nabla\cdot\left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial\left(\nabla\psi_\alpha\right)}\right)-\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi_\alpha}=0,\quad \alpha=1,\ldots,N. \tag{C.16}$$

Com o intuito de demonstrar este resultado, consideremos

$$\delta \mathcal{S}=\int_{t_1}^{t_2}\int_V \sum_{\alpha=1}^{N}\left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi_\alpha}\delta\psi_\alpha+\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}_\alpha}\delta\dot{\psi}_\alpha+\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial\left(\nabla\psi_\alpha\right)}\cdot\delta\left(\nabla\psi_\alpha\right)\right]d\mathbf{x}dt=0, \tag{C.17}$$

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 $\delta\dot{\psi}_\alpha=\partial\left(\psi_\alpha\right)/\partial t$, uma integração por partes como no caso unidimensional fornece

$$\int_{t_1}^{t_2}\int_V \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}_\alpha}\delta\dot{\psi}_\alpha d\mathbf{x}dt=-\int_{t_1}^{t_2}\int_V \frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}_\alpha}\right)\delta\psi_\alpha d\mathbf{x}dt. \tag{C.18}$$

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

$$\nabla\cdot\left(\mathbf{AB}\right)=\left(\nabla\cdot\mathbf{A}\right)\mathbf{B}+\mathbf{A}\left(\nabla\cdot\mathbf{B}\right), \tag{C.19}$$

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

$$\begin{aligned}\int_{t_1}^{t_2}\int_V \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial\left(\nabla\psi_\alpha\right)}\cdot\delta\left(\nabla\psi_\alpha\right)d\mathbf{x}dt&=\int_{t_1}^{t_2}\left\{\oint_{\partial V}\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial\left(\nabla\psi_\alpha\right)}\delta\psi_\alpha\cdot d\mathbf{a}-\int_V\nabla\cdot\left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial\left(\nabla\psi_\alpha\right)}\right)\delta\psi_\alpha d\mathbf{x}\right\}dt\\&=-\int_{t_1}^{t_2}\int_V\nabla\cdot\left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial\left(\nabla\psi_\alpha\right)}\right)\delta\psi_\alpha d\mathbf{x}dt\end{aligned} \tag{C.20}$$

pois as variações $\delta\psi_\alpha$ anulam-se na superfície ∂V que limita a região espacial V. Introduzindo a Eq. C.18 e a Eq. C.20 na Eq. C.17, o princípio de Hamilton obtém a forma

$$\delta\mathcal{S} = \int_{t_1}^{t_2} \int_V \sum_{\alpha=1}^{N} \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi_\alpha} - \frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}_\alpha} \right) - \nabla \cdot \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \left(\nabla \psi_\alpha \right)} \right) \right] d\mathbf{x} dt = 0, \tag{C.21}$$

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. C.16 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 [112]:

$$\mathcal{L} = \mathrm{i}\hbar\Psi^*\dot{\Psi} - \frac{\hbar^2}{2m}\left(\nabla\Psi^*\right)\cdot\left(\nabla\Psi\right) - V\Psi^*\Psi - \frac{g}{2}\left(\Psi^*\Psi\right)^2, \tag{C.22}$$

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. C.22 na Eq. C.21 obtemos

$$\sum_{\alpha=1}^{2} \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \Psi_\alpha} - \frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\Psi}_\alpha} \right) - \nabla \cdot \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \left(\nabla \Psi_\alpha \right)} \right) \right] = 0, \tag{C.23}$$

onde as derivadas foram calculadas na sequência.

$$\Psi_1 = \Psi^* \rightarrow \begin{cases} \dfrac{\partial \mathcal{L}}{\partial \Psi^*} = \mathrm{i}\hbar\dot{\Psi} - V\Psi - g\left(\Psi^*\Psi\right)\Psi \\ \dfrac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\Psi}^*} = 0 \\ \dfrac{\partial \mathcal{L}}{\partial \left(\nabla\Psi^*\right)} = -\dfrac{\hbar^2}{2m}\nabla\Psi \quad \Rightarrow \quad \nabla \cdot \left(\dfrac{\partial \mathcal{L}}{\partial \left(\nabla\Psi^*\right)} \right) = -\dfrac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi \end{cases} \tag{C.24}$$

$$\Psi_2 = \Psi \rightarrow \begin{cases} \dfrac{\partial \mathcal{L}}{\partial \Psi} = -V\Psi^* - g\left(\Psi^*\Psi\right)\Psi^* \\ \dfrac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\Psi}} = \mathrm{i}\hbar\Psi^* \quad \Rightarrow \quad \dfrac{\partial}{\partial t}\left(\dfrac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\Psi}} \right) = \mathrm{i}\hbar\dot{\Psi}^* \\ \dfrac{\partial \mathcal{L}}{\partial \left(\nabla\Psi\right)} = -\dfrac{\hbar^2}{2m}\nabla\Psi^* \quad \Rightarrow \quad \nabla \cdot \left(\dfrac{\partial \mathcal{L}}{\partial \left(\nabla\Psi\right)} \right) = -\dfrac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi^* \end{cases} \tag{C.25}$$

Substituindo os resultados apresentados nas Eq's C.24 e C.25 na Eq. C.23 obtemos

$$\mathrm{i}\hbar\dot{\Psi} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi + V\Psi + g\left|\Psi\right|^2\Psi, \tag{C.26}$$

$$-\mathrm{i}\hbar\dot{\Psi}^* = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi^* + V\Psi^* + g\left|\Psi\right|^2\Psi^*. \tag{C.27}$$

C.2 Teoria de Campos na Forma Hamiltoniana

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

$$\pi^\alpha = \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{\psi}}. \tag{C.28}$$

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

$$\mathcal{H} = \sum_\alpha \pi^\alpha\dot{\psi}_\alpha - \mathcal{L}, \tag{C.29}$$

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

A ação na forma hamiltoniana escreve-se

$$\mathcal{S} = \int_{t_1}^{t_2}\int_V \left\{\sum_\alpha \pi^\alpha\dot{\psi}_\alpha - \mathcal{H}(\psi_\alpha, \nabla\psi_\alpha, \pi^\alpha, \nabla\pi^\alpha)\right\} d\mathbf{x}dt \tag{C.30}$$

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

$$H = \int_V \mathcal{H}(\psi_\alpha, \nabla\psi_\alpha, \pi^\alpha, \nabla\pi^\alpha)d\mathbf{x}. \tag{C.31}$$

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

C.3 Método Variacional

O método variacional está atrelado na Mecânica Quântica junto à teoria de perturbação como alternativa à soluções exatas da Equação de Schrödinger independente do tempo de certos 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}(*ground state*). E 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 [37].

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

$$E_{gs} \leq \langle H \rangle \equiv \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle . \tag{C.32}$$

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

$$\langle Q \rangle \equiv \langle \psi | \hat{Q} | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* (x) \hat{Q} \psi (x) \, dx \tag{C.33}$$

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

$$p \to -\mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial x}. \tag{C.34}$$

Pode-se demonstrar a desigualdade na Eq. C.32 expressando, primeiramente, ψ como uma combinação linear das autofunções(desconhecidas) do hamiltoniano

$$\psi = \sum_n c_n \psi_n, \tag{C.35}$$

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, $\langle \psi_m \mid \psi_n \rangle = \delta_{mn}$; segue que

$$1 = \langle \psi \mid \psi \rangle = \left\langle \sum_m c_m \psi_m \middle| \sum_n c_n \psi_n \right\rangle = \sum_m \sum_n c_m^* c_n \langle \psi_m \mid \psi_n \rangle = \sum_n |c_n|^2 . \tag{C.36}$$

Enquanto isso

$$\langle H \rangle = \left\langle \sum_m c_m \psi_m \middle| \hat{H} \middle| \sum_n c_n \psi_n \right\rangle = \sum_m \sum_n c_m^* E_n c_n \langle \psi_m \mid \psi_n \rangle = \sum_n E_n |c_n|^2 . \tag{C.37}$$

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,

$$\langle H\rangle \geq E_{gs}\sum_n |c_n|^2 = E_{gs}. \tag{C.38}$$

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

$$\langle H\rangle = \langle T\rangle + \langle V\rangle\,, \tag{C.39}$$

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. C.32, esse resultado excede E_{gs} para qualquer parâmetro variacional b. Sendo assim, para obter o valor mais adequado do parâmetro b, minimiza-se $\langle H\rangle$:

$$\frac{d\langle H\rangle}{db} = 0 \;\Rightarrow\; b_{mín}. \tag{C.40}$$

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

$$\langle H\rangle_{mín} = E_{mín} \equiv E_0. \tag{C.41}$$

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.

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

$$L = \int_V \mathcal{L}(\psi, \nabla\psi, \dot{\psi}, \mathbf{x}, t)d\mathbf{x} \tag{C.42}$$

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

$$H = \int_V \mathcal{H}(\psi, \nabla\psi, \pi)d\mathbf{x}. \tag{C.43}$$

como mencionado, respectivamente, na Sec. C.1 e na Sec. C.2.

Como o Método Variacional descrito na Sec. C.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. C.29, a equivalência entre $\mathcal{L}$ e $\mathcal{H}$:

$$\mathcal{H} = \pi\dot{\psi} - \mathcal{L} \rightarrow \mathcal{H} = -\mathcal{L}. \tag{C.44}$$

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

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

$$L = \int\int\int \mathcal{L}(\psi, \nabla\psi, x, y, z)dxdydz \tag{C.45}$$

a lagrangiana L.

D 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 PVCs é a própria ESL independente do tempo. Porém, são poucas as soluções analíticas exatas conhecidas da ESL.

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 EGP, principal objeto estudado nesse trabalho, pertence à classe dos PVCs desprovidas de soluções analíticas exatas uma vez que a EGP é uma equação diferencial parcial não linear de segunda ordem; fazendo com que a análise do problema convergisse ao estudo de um dos métodos mais utilizados para resolvermos PVCs: o método das diferenças finitas (MDF).

D.1 Método de Newton-Raphson

O método de Newton (ou Método de Newton-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 abcissas, a fim de encontrar uma melhor aproximação para a raiz.

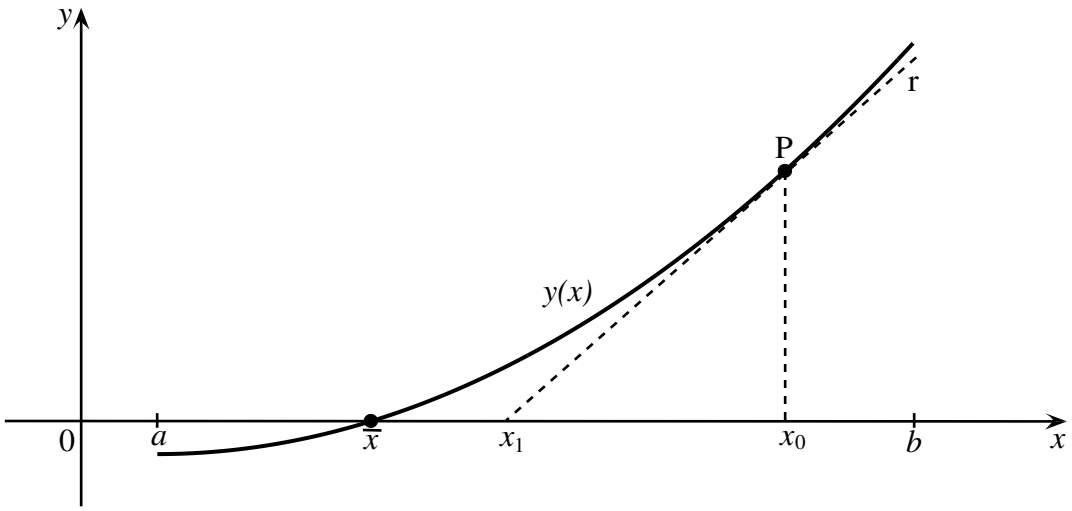


Figura 5.1: A figura acima representa de forma esquemática a aplicação do método de Newton-Raphson. $\bar{x}$ é a raiz da função $y(x)$

$$y(x) = y(x_0) + y'(\epsilon)(x - x_0) + \frac{y''(x_0)}{2!}(x - x_0)^2 + \dots \tag{D.1}$$

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

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

$$y(\bar{x}) \approx y(x_0) + y'(x_0)(\bar{x} - x_0) \tag{D.3}$$

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

$$\bar{x} \approx x_0 - \frac{y\,(x_0)}{y'\,(x_0)} \tag{D.4}$$

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:

$$x_{n+1} = x_n - \frac{y\,(x_n)}{y'\,(x_n)} \tag{D.5}$$

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.

D.2 Método das diferenças finitas

A ideia básica do 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 [90], 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 PVCs sendo que a forma mais geral dos PVCs é dada por:

$$\begin{cases} y''(x) = f\left(x, y(x), y'(x)\right) & a < x < b \\ y(a) = \alpha \\ y(b) = \beta \end{cases} \tag{D.6}$$

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 $x = \epsilon$.

$$y(x) = y(\epsilon) + y'(\epsilon)(x-\epsilon) + \frac{y''(\epsilon)}{2!}(x-\epsilon)^2 + \ldots + \frac{y^{(k)}(\epsilon)}{k!}(x-\epsilon)^k + \ldots = \sum_{k=0}^{+\infty} \frac{y^{(k)}(\epsilon)}{k!}(x-\epsilon)^k. \tag{D.7}$$

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

$$h = \frac{b-a}{m+1}. \tag{D.8}$$

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

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

$$x_i = x_0 + ih,\ i = 0, 1, ..., m+1, \tag{D.9}$$

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

$$y_i \to y(x_i) = y(x_0 + ih),\ i = 0, 1, ..., m+1. \tag{D.10}$$

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:

$$y(x) = y(x_i) + y'(x_i)(x - x_i) + \frac{y''(x_i)}{2}(x - x_i)^2 \tag{D.11}$$

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

$$y(x_{i+1}) = y(x_i) + y'(x_i)h + \frac{y''(x_i)}{2}h^2 \tag{D.12}$$

$$y(x_{i-1}) = y(x_i) - y'(x_i)h + \frac{y''(x_i)}{2}h^2 \tag{D.13}$$

Isolando o termo $y'(x_i)$ nas Eq's. D.12 e D.13 chega-se em:

$$y'(x_i) = \frac{y(x_{i+1}) - y(x_i)}{h} + \mathcal{O}(h) \tag{D.14}$$

$$y'(x_i) = \frac{y(x_i) - y(x_{i-1})}{h} + \mathcal{O}(h) \tag{D.15}$$

Em contrapartida, subtraindo a Eq. D.12 da Eq. D.13 e isolando o termo $y'(x_i)$ obtém-se

$$y'(x_i) = \frac{y(x_{i+1}) - y(x_{i-1})}{2h} + \mathcal{O}(h^2) \tag{D.16}$$

As Eq's D.14, D.15 e D.16 são as fórmulas de aproximações mais utilizadas para derivadas de primeira ordem no ponto x_i:

$$y'(x_i) \approx \frac{y(x_{i+1}) - y(x_i)}{h} \equiv \text{diferença avançada} \tag{D.17}$$

$$y'(x_i) \approx \frac{y(x_i) - y(x_{i-1})}{h} \equiv \text{diferença atrasada} \tag{D.18}$$

$$y'(x_i) \approx \frac{y(x_{i+1}) - y(x_{i-1})}{2h} \equiv \text{diferença centrada} \tag{D.19}$$

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 $x \to x_{i+1} = x_i + h$ e $x \to x_{i-1} = x_i - h$ obtemos respectivamente:

$$y(x_{i+1}) = y(x_i) + y'(x_i)h + \frac{y''(x_i)}{2}h^2 + \frac{y'''(x_i)}{6}h^3 + \frac{y^{(4)}(x_i)}{24}h^4 \tag{D.20}$$

$$y(x_{i-1}) = y(x_i) - y'(x_i)h + \frac{y''(x_i)}{2}h^2 - \frac{y'''(x_i)}{6}h^3 + \frac{y^{(4)}(x_i)}{24}h^4 \tag{D.21}$$

Adicionado as Eq's. D.20 e D.21 e isolando o termo $y''(x_i)$ obtemos:

$$y''(x_i) = \frac{y(x_{i-1}) - 2y(x_i) + y(x_{i+1})}{h^2} + \mathcal{O}(h^2). \tag{D.22}$$

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:

$$y''(x_i) \approx \frac{y(x_{i+1}) - 2y(x_i) + y(x_{i-1})}{h^2} \equiv \text{diferença centrada} \tag{D.23}$$

Sendo assim, nosso problema de resolver um PCV como na Eq. D.6 se transforma em:

$$\begin{cases} \dfrac{y(x_{i+1}) - 2y(x_i) + y(x_{i-1})}{h^2} = f\left(x_i, y_i, \dfrac{y(x_{i+1}) - y(x_{i-1})}{2h}\right) \\ y(x_0) = \alpha \\ y(x_{m+1}) = \beta \end{cases} \tag{D.24}$$

Aplicação do MDF na Equação de Schrödinger

Nesta seção, aplicaremos o MDF à ESL 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:

$$\begin{cases} -\dfrac{1}{2}\psi''(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \qquad a < x < b \\ \psi(a) = \alpha \\ \psi(b) = \beta \end{cases} \tag{D.25}$$

A Eq. D.25 equivale a uma equação de autovalores para o operador hamiltoniano $\hat{H}$:

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V. \tag{D.26}$$

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 autofunlções $\psi(x)$ do operador hamiltoniano, ou seja, funções que satisfazem:

$$\hat{H}\psi_n(x) = E_n\psi_n(x), \tag{D.27}$$

onde 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. **??**. 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 $\psi_n(x_1), \psi_n(x_2), \ldots, \psi_n(x_m)$ e assim, para cada $i = 1, 2, \ldots, m$ usaremos a aproximação obtida na Eq. D.23:

$$\psi''(x_i) \approx \frac{\psi(x_{i-1}) - 2\psi(x_i) + \psi(x_{i+1})}{h^2}. \tag{D.28}$$

Para cada i a Eq. D.25 discretizada fica:

$$-\frac{1}{2}\frac{\psi_n(x_{i-1}) - 2\psi_n(x_i) + \psi_n(x_{i+1})}{h^2} + V(x_i)\psi_n(x_i) = E_n\psi_n(x_i), \tag{D.29}$$

ou seja

$$-\frac{1}{2h^2}\psi_n(x_{i-1}) + \left[\frac{1}{h^2} + V(x_i)\right]\psi_n(x_i) - \frac{1}{2h^2}\psi_n(x_{i+1}) = E_n\psi_n(x_i). \tag{D.30}$$

Agora, fazendo $i = 1$ na Eq. D.30 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. D.30 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 [91]:

$$\begin{cases} -\dfrac{1}{2h^2}\alpha + \left[\dfrac{1}{h^2} + V(x_1)\right]\psi_n(x_1) - \dfrac{1}{2h^2}\psi_n(x_2) = E_n\psi_n(x_1) \\ \\ -\dfrac{1}{2h^2}\psi_n(x_{i-1}) + \left[\dfrac{1}{h^2} + V(x_i)\right]\psi_n(x_i) - \dfrac{1}{2h^2}\psi_n(x_{i+1}) = E_n\psi_n(x_i) \qquad 2 \leq i \leq (m-1) \\ \\ -\dfrac{1}{2h^2}\psi_n(x_{m-1}) + \left[\dfrac{1}{h^2} + V(x_m)\right]\psi_n(x_m) - \dfrac{1}{2h^2}\beta = E_n\psi_n(x_m) \end{cases} \tag{D.31}$$

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

$$\psi_n(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} \psi_n(x_1) \\ \psi_n(x_2) \\ \vdots \\ \psi_n(x_i) \\ \vdots \\ \psi_n(x_{m-1}) \\ \psi_n(x_m) \end{pmatrix}. \tag{D.32}$$

Com isso, o sistema D.31 assume a seguinte forma:

$$\begin{pmatrix} F(x_1) & -\dfrac{1}{2h^2} & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ -\dfrac{1}{2h^2} & F(x_2) & -\dfrac{1}{2h^2} & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \cdots & -\dfrac{1}{2h^2} & F(x_i) & -\dfrac{1}{2h^2} & \cdots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & 0 & -\dfrac{1}{2h^2} & F(x_{m-1}) & -\dfrac{1}{2h^2} \\ 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & -\dfrac{1}{2h^2} & F(x_m) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_n(x_1) \\ \psi_n(x_2) \\ \vdots \\ \psi_n(x_i) \\ \vdots \\ \psi_n(x_{m-1}) \\ \psi_n(x_m) \end{pmatrix} = E_n \begin{pmatrix} \psi_n(x_1) \\ \psi_n(x_2) \\ \vdots \\ \psi_n(x_i) \\ \vdots \\ \psi_n(x_{m-1}) \\ \psi_n(x_m) \end{pmatrix} \tag{D.33}$$

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

Observa-se que a matriz tridiagonal da Eq. D.33 $m \times m$ é simétrica e real; isto significa que podemos diagonalizá-la através da equação

$$\det\left(\hat{H} - E_n I\right) = 0. \tag{D.34}$$

Assim, obtemos o conjunto de autovalores resolvendo o determinate:

$$\begin{vmatrix}
F(x_1)-E_n & -\frac{1}{2h^2} & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\
-\frac{1}{2h^2} & F(x_2)-E_n & -\frac{1}{2h^2} & 0 & 0 & \cdots & 0 \\
0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 & \cdots & 0 \\
0 & \cdots & -\frac{1}{2h^2} & F(x_i)-E_n & -\frac{1}{2h^2} & \cdots & 0 \\
0 & \cdots & 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\
0 & \cdots & 0 & 0 & -\frac{1}{2h^2} & F(x_{m-1})-E_n & -\frac{1}{2h^2} \\
0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{2h^2} & F(x_m)-E_n
\end{vmatrix} = 0 \tag{D.35}$$

Para se obter as autofunções, basta substituir cada autovalor nas Eq. D.31 e resolver o sistema linear correspondente.

É importante ressaltar que obter a solução da Eq. D.35 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.

D.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

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{\Psi_{j,k+1} - \Psi_{j,k}}{h} + \mathcal{O}(h^2), \tag{D.36}$$

e uma combinação ponderada de diferenças avançadas e diferenças atrasadas para o restante da equação

$$\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} = \frac{1}{2}\left[\frac{\Psi_{j-1,k+1} - 2\Psi_{j,k+1} + \Psi_{j+1,k+1}}{h^2} + \frac{\Psi_{j-1,k} - 2\Psi_{j,k} + \Psi_{j+1,k}}{h^2}\right] + \mathcal{O}(h^2) \tag{D.37}$$

e tem erro $\mathcal{O}\left(h^2\right) + \mathcal{O}\left(k^2\right)$.

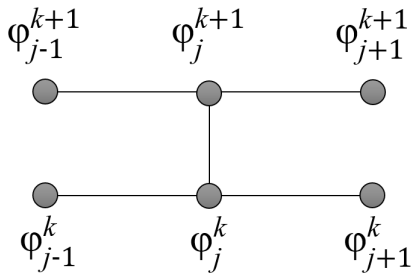


Figura 5.2: Malha do método de Crank-Nicolson.

Exemplo: partícula livre 1D

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

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x,t) \tag{D.38}$$

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. D.38 como segue abaixo

$$\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t) = \frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x,t) \tag{D.39}$$

e aplicando a discretização de Crank-Nicolson na Eq. D.39 obtemos

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\Psi_j^{k+1} - \Psi_j^k}{\Delta t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{\Psi_{j+1}^{k+1} - 2\Psi_j^{k+1} + \Psi_{j-1}^{k+1}}{\Delta x^2} + \frac{\Psi_{j+1}^{k} - 2\Psi_j^{k} + \Psi_{j-1}^{k}}{\Delta x^2}\right]. \tag{D.40}$$

onde $\Psi_j^k \equiv \Psi\left(x_j, t_k\right)$. Após algumas manipulações algébricas podemos reescrever a Eq. D.40 tomando $\sigma = \frac{\mathrm{i}\hbar\Delta t}{m\Delta x^2}$ da seguinte maneira

$$-\sigma\Psi_{j+1}^{k+1} + (4+2\sigma)\,\Psi_j^{k+1} - \sigma\Psi_{j-1}^{k+1} = \sigma\Psi_{j+1}^{k} + (4-2\sigma)\,\Psi_j^{k} + \sigma\Psi_{j-1}^{k}. \tag{D.41}$$

A discretização relativa à Eq. D.41 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

$$\mathbf{A}\boldsymbol{\Psi}^{k+1} = \mathbf{B}\boldsymbol{\Psi}^{k}, \tag{D.42}$$

onde as matrizes

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 4+2\sigma & -\sigma & \cdots & \cdots & 0 \\ -\sigma & 4+2\sigma & -\sigma & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & \cdots & -\sigma & 4+2\sigma & -\sigma \\ 0 & \cdots & \cdots & -\sigma & 4+2\sigma \end{pmatrix}, \tag{D.43}$$

e

$$\mathbf{B} = \begin{pmatrix} 4-2\sigma & \sigma & \cdots & \cdots & 0 \\ \sigma & 4-2\sigma & \sigma & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & \cdots & -\sigma & 4-2\sigma & \sigma \\ 0 & \cdots & \cdots & \sigma & 4-2\sigma \end{pmatrix}, \tag{D.44}$$

são matrizes tridiagonais e os vetores

$$\boldsymbol{\Psi}^{k+1} = \begin{pmatrix} \Psi_1^{k+1} \\ \vdots \\ \Psi_j^{k+1} \\ \vdots \\ \Psi_N^{k+1} \end{pmatrix} \tag{D.45}$$

e

$$\boldsymbol{\Psi}^{k} = \begin{pmatrix} \Psi_1^{k} \\ \vdots \\ \Psi_j^{k} \\ \vdots \\ \Psi_N^{k} \end{pmatrix} \tag{D.46}$$

Para equações de difusão (e muitas outras), pode-se provar que o MCN é incondicionalmente estável [113], 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 ESL que descreve a partícula livre, utilizaremos a gaus-

siana normalizada e as condições de contorno $\lim_{x\to\pm\infty}\Psi\left(x,t\right)=0$. Assim

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

$$\downarrow \text{discretização}$$

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

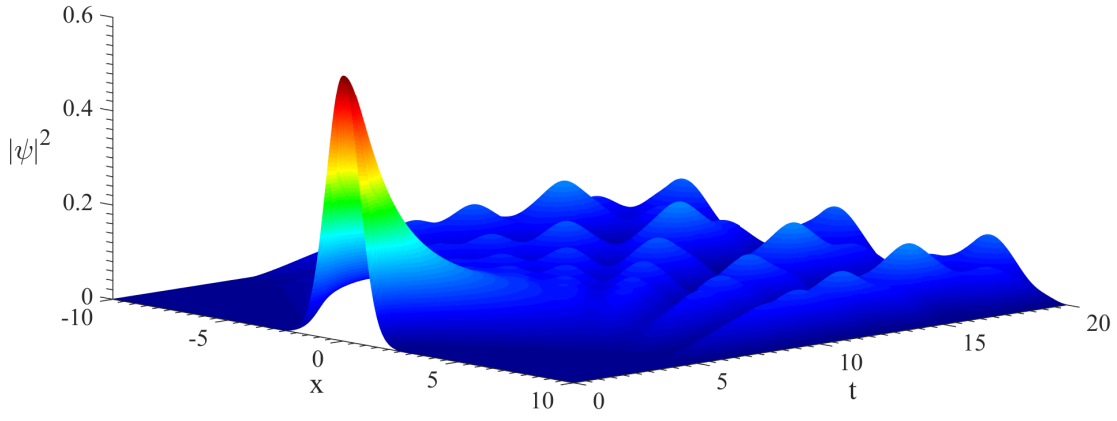


Figura 5.3: Pacote de onda gaussiano. Observa-se que a medida que o tempo aumenta, $|\psi|^2$ se achata e amplia. Isso ocorre devido à dispersão do pacote de onda gaussiano, sendo este formado pela combinação linear de infinitas ondas planas com diferentes momentos, $p=\hbar k$, com $k\equiv\pm\sqrt{2mE}/\hbar$. O resultado acima está de acordo com a solução analítica [37], porém, por conveniência, adotamos $m=\omega=\hbar=1$.

D.4 Método *split-step*

O método *split-step* é um método numérico que possibilita determinar a solução de uma equação diferencial parcial não linear. Pode-se dizer que este método numérico complementa o MCN, permitindo que a solução de uma equação diferencial parcial de segunda ordem, sujeita a um potencial externo, seja determinada. Além disso, podemos tratar um termo não linear como um "potencial" e, utilizando o mesmo procedimento, determinar soluções de equações diferenciais parciais não lineares.

A ESL-1D é dada por

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi. \tag{D.47}$$

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 $\hat{V} \equiv \hat{V}(\hat{x})$ o operador energia potencial. A Eq. D.47 pode ser resolvida de forma exata:

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \left(\hat{T}+\hat{V}\right)\Psi \Rightarrow \int_{t_0}^{t}\frac{1}{\Psi}d\Psi = -\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left(\hat{T}+\hat{V}\right)\int_{t_0}^{t}dt, \tag{D.48}$$

obtendo, assim, a solução

$$\Psi = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\left(\hat{T}+\hat{V}\right)\frac{\Delta t}{\hbar}}\Psi_0, \tag{D.49}$$

sendo $\Delta t = t - t_0$ e $\Psi_0 \equiv \Psi(t = t_0)$.

Pelo fato de não conhecermos o operador $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\left(\hat{T}+\hat{V}\right)\frac{\Delta t}{\hbar}}$, é preciso separá-lo em um produto dos operadores $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{T}\Delta t/\hbar}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{V}\Delta t/\hbar}$. 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

$$\mathrm{e}^{\hat{A}}\mathrm{e}^{\hat{B}} = \mathrm{e}^{\hat{A}+\hat{B}+\frac{1}{2}\left[\hat{A},\hat{B}\right]+\frac{1}{12}\left(\left[\hat{A},\left[\hat{A},\hat{B}\right]\right]+\left[\hat{B},\left[\hat{B},\hat{A}\right]\right)+\ldots}. \tag{D.50}$$

A partir das expansões abaixo

$$\begin{aligned}\mathrm{e}^{\lambda\left(\hat{A}+\hat{B}\right)} &= 1+\lambda\left(\hat{A}+\hat{B}\right)+\frac{\lambda^2}{2!}\left(\hat{A}+\hat{B}\right)^2+\ldots \\ &= 1+\lambda\left(\hat{A}+\hat{B}\right)+\frac{\lambda^2}{2!}\left(\hat{A}^2+\hat{A}\hat{B}+\hat{B}\hat{A}+\hat{B}^2\right)+\ldots;\end{aligned} \tag{D.51}$$

$$\begin{aligned} \mathrm{e}^{\lambda\hat{A}}\mathrm{e}^{\lambda\hat{B}} &= \left[1+\lambda\hat{A}+\frac{\lambda^2}{2!}\hat{A}^2+\ldots\right]\left[1+\lambda\hat{B}+\frac{\lambda^2}{2!}\hat{B}^2+\ldots\right] \\ &= 1+\lambda\left(\hat{A}+\hat{B}\right)+\frac{\lambda^2}{2!}\left(\hat{A}^2+2\hat{A}\hat{B}+\hat{B}^2\right)+\ldots, \end{aligned} \tag{D.52}$$

podemos subtrair a Eq. D.51 da Eq. D.52 e obter:

$$\mathrm{e}^{\lambda\left(\hat{A}+\hat{B}\right)}-\mathrm{e}^{\lambda\hat{A}}\mathrm{e}^{\lambda\hat{B}} = -\frac{\lambda^2}{2!}\hat{A}\hat{B}+\frac{\lambda^2}{2!}\hat{B}\hat{A}+\mathcal{O}\left(\lambda^3\right). \tag{D.53}$$

Reescrevendo a Eq. D.53, torna-se possível verificar que

$$\mathrm{e}^{\lambda\left(\hat{A}+\hat{B}\right)} = \mathrm{e}^{\lambda\hat{A}}\mathrm{e}^{\lambda\hat{B}}-\frac{\lambda^2}{2!}\left[\hat{A},\hat{B}\right]+\mathcal{O}\left(\lambda^3\right), \tag{D.54}$$

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:

$$\mathrm{e}^{\lambda\frac{\hat{A}}{2}}\mathrm{e}^{\lambda\hat{B}}\mathrm{e}^{\lambda\frac{\hat{A}}{2}} = \left[1+\lambda\frac{\hat{A}}{2}+\frac{\lambda^2}{2!}\left(\frac{\hat{A}}{2}\right)^2+\ldots\right]\left[1+\lambda\hat{B}+\frac{\lambda^2}{2!}\hat{B}^2+\ldots\right]\left[1+\lambda\frac{\hat{A}}{2}+\frac{\lambda^2}{2!}\left(\frac{\hat{A}}{2}\right)^2+\ldots\right]. \tag{D.55}$$

Comparando as Eqs. D.51 e D.55, constatamos que esta apresenta um erro da ordem de λ^3 na aproximação. Tomando $\hat{A}=\hat{V}$, $\hat{B}=\hat{T}$ e $\lambda=-\mathrm{i}\Delta t/\hbar$ obtemos:

$$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\left(\hat{T}+\hat{V}\right)\frac{\Delta t}{\hbar}} = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\hat{V}}{2}\frac{\Delta t}{\hbar}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{T}\frac{\Delta t}{\hbar}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\hat{V}}{2}\frac{\Delta t}{\hbar}}+\mathcal{O}\left(\triangle t^3\right), \tag{D.56}$$

que nos fornece um erro relativamente pequeno para o "*split-step*", da ordem de $\triangle t^3$. Agora a solução da ESL-1D para o potencial V

$$\Psi = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\hat{V}}{2}\frac{\Delta t}{\hbar}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{T}\frac{\Delta t}{\hbar}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\hat{V}}{2}\frac{\Delta t}{\hbar}}\Psi_0, \tag{D.57}$$

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

Com o intuito de resolver a EGP, isto é, uma equação diferencial parcial de segunda ordem não linear (sendo que este tipo equação, em geral, não possui solução analítica), buscamos apresentar nessa tese o algoritmo para a obtenção da solução numérica usufruindo do método *split-step* com Crank-Nicolson, abordado na seção anterior.

A EGP-1D é dada por

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi\left(x,t\right)=\hat{H}_{\mathrm{GP}}\Psi\left(x,t\right). \tag{D.58}$$

O Hamiltoniano $\hat{H}_{\mathrm{GP}}$ pode ser expresso por $\hat{H}_{\mathrm{GP}}=\hat{T}+\hat{V}$, sendo $\hat{T}\equiv-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}$ o operador energia cinética e $\hat{V}\equiv V_{\mathrm{ext}}(x)+V_{\mathrm{NL}}$ 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. D.58

$$\Psi(x,t)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\hat{V}}{2}\frac{\Delta t}{\hbar}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{T}\frac{\Delta t}{\hbar}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\hat{V}}{2}\frac{\Delta t}{\hbar}}\Psi(x,t_0) \tag{D.59}$$

é calculada numericamente em três etapas:

Primeiramente, obtém-se $\Psi^{\star}=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\hat{V}}{2}\frac{\Delta t}{\hbar}}\Psi(x,t_0)$ aplicando o operador $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\hat{V}}{2}\frac{\Delta t}{\hbar}}$. Como conhecemos o valor do potencial $V\left(x\right)$ 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 $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\hat{V}}{2}\frac{\Delta t}{\hbar}}$, que possui um valor específico para cada ponto do espaço. Na segunda etapa, resolve-se $\Psi^{\star\star}=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{T}\frac{\Delta t}{\hbar}}\Psi^{\star}$. Aplicar $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{T}\frac{\Delta t}{\hbar}}$ à função $\Psi^{\star}$ é o mesmo que evoluir a função $\Psi^{\star}$ por um intervalo de Δt. Utilizamos aqui, para a evolução temporal, o MCN. Enfim, obtemos o resultado final $\Psi(x,t)$ por outra simples multiplicação do operador $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\hat{V}}{2}\frac{\Delta t}{\hbar}}$ pela função $\Psi^{\star\star}$. 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 MCN (Método *split-step* Crank-Nicolson).

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

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}=\left(\hat{T}+\hat{V}\right)\Psi\quad\begin{array}{c}\nearrow\\ \\ \searrow\end{array}\quad\begin{array}{l}\mathrm{i}\hbar\dfrac{\partial\Psi}{\partial t}=\hat{T}\Psi\\ \\ \mathrm{i}\hbar\dfrac{\partial\Psi}{\partial t}=\hat{V}\Psi\end{array} \tag{D.60}$$

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

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} \tag{D.61}$$

através do método de Crank-Nicolson pois a Eq. D.61 é a equação da difusão e a aplicação do operador $\mathrm{e}^{-i\frac{\hat{V}}{2}\frac{\Delta t}{\hbar}}$ é obtida ao resolver o subproblema não linear

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = V_{\mathrm{ext}}\Psi + V_{\mathrm{NL}}\Psi \tag{D.62}$$

de forma exata, isto é, integrando a Eq. D.62 como foi feito na Eq. D.48.

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, torna-se bastante conveniente [114, 94, 34]. A ideia básica da propagação do tempo imaginário é substituir a variável temporal t da EGP:

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \hat{H}_{\mathrm{GP}}\Psi, \tag{D.63}$$

pela variável temporal imaginária $-\mathrm{i}t$:

$$t \to -\mathrm{i}t. \tag{D.64}$$

A evolução temporal sobre a Eq. D.63 pode ser escrita em termos dos autoestados ψ_n, que são definidos por $\hat{H}_{\mathrm{GP}}\psi_n = \mu_n\psi_n$ com autovalores μ_n:

$$\Psi = \sum_n c_n\psi_n\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mu_n t/\hbar}, \tag{D.65}$$

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

$$\Psi\left(t=0\right) = \sum_n c_n\psi_n. \tag{D.66}$$

A propagação da Eq. D.63 no tempo imaginário altera a evolução temporal dada pela Eq. D.65 para

$$\Psi\left(t \to -\mathrm{i}t\right) = \sum_n c_n\psi_n\mathrm{e}^{-\mu_n t/\hbar}, \tag{D.67}$$

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 ψ_0 [115]:

$$\Psi \xrightarrow{-\mathrm{i}t} \psi_0. \tag{D.68}$$

Isto pode ser facilmente observado colocando o termo $\mathrm{e}^{-\mu_0 t/\hbar}$ da eq. D.67 em evidência:

$$\Psi\left(t \to -\mathrm{i}t\right) = \mathrm{e}^{-\mu_0 t/\hbar}\left[c_0\psi_0 + c_1\psi_1\mathrm{e}^{-(\mu_1-\mu_0)t/\hbar} + c_2\psi_2\mathrm{e}^{-(\mu_2-\mu_0)t/\hbar} + \ldots\right]. \tag{D.69}$$

Entretanto, como o termo $\mathrm{e}^{-\mu_0 t/\hbar}$ também está tendendo a zero com $t \to \infty$ 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 [34]. 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.

Referências Bibliográficas

[1] 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.

[2] C. C. Bradley, C. A. Sackett, J. J. Tollett, R. G. Hulet, Evidence of Bose-Einstein Condensation in an Atomic Gas with Attractive Interactions, Phys. Rev. Lett. 75 (1995) 1687–1690.
URL https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.75.1687

[3] 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

[4] M. Edwards, R. J. Dodd, C. W. Clark, K. Burnett, Zero-Temperature, Mean-Field Theory of Atomic Bose-Einstein Condensates, Journal of research of the National Institute of Standards and Technology 101 (4) (1996) 553–565.
URL https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/27805108

[5] E. P. Gross, Structure of a quantized vortex in boson systems, Il Nuovo Cimento (1955-1965) 20 (3) (1961) 454–477.
URL https://doi.org/10.1007/BF02731494

[6] L. P. Pitaevskii, Vortex lines in an imperfect Bose gas, Sov. Phys. JETP 13 (2) (1961) 451–454.

[7] J. Rogel-Salazar, The Gross-Pitaevskii equation and Bose-Einstein condensates, European Journal of Physics 34 (2) (2013) 247–257.
URL https://doi.org/10.1088%2F0143-0807%2F34%2F2%2F247

[8] P. A. Ruprecht, M. J. Holland, K. Burnett, M. Edwards, Time-dependent solution of the nonlinear schrödinger equation for bose-condensed trapped neutral atoms, Phys. Rev. A 51 (1995) 4704–4711.
URL https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.51.4704

[9] K. Kirsten, D. J. Toms, Bose-einstein condensation of atomic gases in a general harmonic-oscillator confining potential trap, Phys. Rev. A 54 (1996) 4188–4203.
URL https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.54.4188

[10] T. Haugset, H. Haugerud, J. O. Andersen, Bose-einstein condensation in anisotropic harmonic traps, Phys. Rev. A 55 (1997) 2922–2929.
URL https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.55.2922

[11] W. J. Mullin, Bose-einstein condensation in a harmonic potential, Journal of Low Temperature Physics 106 (5) (1997) 615–641.
URL https://doi.org/10.1007/BF02395928

[12] F. Dalfovo, S. Giorgini, L. P. Pitaevskii, S. Stringari, Theory of Bose-Einstein condensation in trapped gases, Rev. Mod. Phys. 71 (1999) 463–512.
URL https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.71.463

[13] J. C. Bronski, L. D. Carr, B. Deconinck, J. N. Kutz, K. Promislow, Stability of repulsive Bose-Einstein condensates in a periodic potential, Phys. Rev. E 63 (2001) 036612.
URL https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.63.036612

[14] J. C. Bronski, L. D. Carr, R. Carretero-González, B. Deconinck, J. N. Kutz, K. Promislow, Stability of attractive Bose-Einstein condensates in a periodic potential, Phys. Rev. E 64 (2001) 056615.
URL https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.64.056615

[15] O. Morsch, M. Oberthaler, Dynamics of Bose-Einstein condensates in optical lattices, Rev. Mod. Phys. 78 (2006) 179–215.
URL https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.78.179

[16] I. Bloch, Ultracold quantum gases in optical lattices, Nature Physics 1 (1) (2005) 23–30.
URL https://doi.org/10.1038/nphys138

[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] G. J. Milburn, J. Corney, E. M. Wright, D. F. Walls, Quantum dynamics of an atomic Bose-Einstein condensate in a double-well potential, Phys. Rev. A 55 (1997) 4318–4324.
URL https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.55.4318

[19] J. Ruostekoski, D. F. Walls, Bose-Einstein condensate in a double-well potential as an open quantum system, Phys. Rev. A 58 (1998) R50–R53.
URL https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.58.R50

[20] K. Saha, A. Kumar, A Bose-Einstein condensate in a double-well and periodic potential: a variational study, Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical 42 (31) (2009) 315303.
URL https://doi.org/10.1088%2F1751-8113%2F42%2F31%2F315303

[21] D. Dast, D. Haag, H. Cartarius, G. Wunner, R. Eichler, J. Main, Description of Bose-Einstein Condensates in PT-Symmetric Double Wells, in: G. Wunner, A. Pelster (Eds.), Selforganization in Complex Systems: The Past, Present, and Future of Synergetics, Springer International Publishing, Cham, 2016, pp. 129–144.

[22] G. Pöschl, E. Teller, Bemerkungen zur Quantenmechanik des anharmonischen Oszillators, Zeitschrift für Physik 83 (3) (1933) 143–151.
URL https://doi.org/10.1007/BF01331132

[23] R. Sarath, P. C. Vinodkumar, Bose-Einstein condensation in generalized Pöschl-Teller potential, Pramana 85 (1) (2015) 77–89.
URL https://doi.org/10.1007/s12043-014-0890-7

[24] A. Nath, U. Roy, A unified model for an external trap in a cigar-shaped Bose-Einstein condensate, Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical 47 (41) (2014) 415301.
URL https://doi.org/10.1088%2F1751-8113%2F47%2F41%2F415301

[25] W. Mück, G. Pozzo, Quantum portrait of a black hole with Pöschl-Teller potential, Journal of High Energy Physics 2014 (5) (2014) 128.
URL https://doi.org/10.1007/JHEP05(2014)128

[26] N. Kundu, U. Roy, Two Component Bose-Einstein Condensate in a Pöschl-Teller Potential, in: P. C. Deshmukh, E. Krishnakumar, S. Fritzsche, M. Krishnamurthy, S. Majumder (Eds.), Quantum Collisions and Confinement of Atomic and Molecular Species, and Photons, Springer Singapore, Singapore, 2019, pp. 130–136.

[27] P. Das, A. Khan, A. Pathak, Formation of solitonic bound state via light-matter interaction, The European Physical Journal D 74 (10) (2020) 213.
URL https://doi.org/10.1140/epjd/e2020-10251-0

[28] I. V. Borisenko, B. Divinskiy, V. E. Demidov, G. Li, T. Nattermann, V. L. Pokrovsky, S. O. Demokritov, Direct evidence of spatial stability of Bose-Einstein condensate of magnons,

Nature Communications 11 (1) (2020) 1691.
URL https://doi.org/10.1038/s41467-020-15468-6

[29] M. Davoudi Darareh, M. Bagheri Harouni, Nonclassical properties of a particle in a finite range trap: The f-deformed quantum oscillator approach, Physics Letters A 374 (40) (2010) 4099 – 4103.
URL http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0375960110009928

[30] S. Rajendran, P. Muruganandam, M. Lakshmanan, Bright and dark solitons in a quasi-1D Bose-Einstein condensates modelled by 1D Gross-Pitaevskii equation with time-dependent parameters, Physica D: Nonlinear Phenomena 239 (7) (2010) 366 – 386.
URL http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0167278909003832

[31] V. M. Pérez-García, H. Michinel, J. I. Cirac, M. Lewenstein, P. Zoller, Low Energy Excitations of a Bose-Einstein Condensate: A Time-Dependent Variational Analysis, Phys. Rev. Lett. 77 (1996) 5320–5323.
URL https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.77.5320

[32] V. M. Pérez-García, H. Michinel, J. I. Cirac, M. Lewenstein, P. Zoller, Dynamics of Bose-Einstein condensates: Variational solutions of the Gross-Pitaevskii equations, Phys. Rev. A 56 (1997) 1424–1432.
URL https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.56.1424

[33] S. K. Adhikari, P. Muruganandam, Bose-Einstein condensation dynamics from the numerical solution of the Gross-Pitaevskii equation, Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics 35 (12) (2002) 2831–2843.
URL https://doi.org/10.1088%2F0953-4075%2F35%2F12%2F317

[34] P. Muruganandam, S. Adhikari, Fortran programs for the time-dependent Gross-Pitaevskii equation in a fully anisotropic trap, Computer Physics Communications 180 (10) (2009) 1888 – 1912.
URL http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S001046550900126X

[35] L. Tomio, F. K. Abdullaev, H. L. F. da Luz, A. Gammal, Stability of BEC Systems in Nonlinear Optical Lattices, Springer Netherlands, Dordrecht, 2011, pp. 165–172.
URL https://doi.org/10.1007/978-90-481-9884-9_21

[36] F. K. Abdullaev, A. Gammal, H. L. F. da Luz, M. Salerno, L. Tomio, Three-dimensional solitons in cross-combined linear and nonlinear optical lattices, Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics 45 (11) (2012) 115302.
URL https://doi.org/10.1088/0953-4075/45/11/115302

[37] D. Griffiths, Introduction to Quantum Mechanics, Pearson international edition, Pearson Prentice Hall, 2005.
URL https://books.google.com.br/books?id=z4fwAAAAMAAJ

[38] 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).

[39] V. S. Bagnato, A Condensação de Bose-Einstein, Revista Brasileira de Ensino de Física 19 (1).

[40] R. Eisberg, R. Resnick, Física quântica: átomos, moléculas, sólidos, núcleos e partículas, Elsevier Editora, (1979).
URL https://books.google.com.br/books?id=5tBlPgAACAAJ

[41] S. Salinas, Introdução a Física Estatística, EDUSP, 1997.
URL https://books.google.com.br/books?id=cAlP3sc0K44C

[42] N. J. van Druten, C. G. Townsend, M. R. Andrews, D. S. Durfce, D. M. Kurn, M.-O. Mewes, W. Ketterle, Bose-Einstein condensates—a new form of quantum matter, Czechoslovak Journal of Physics 46 (6) (1996) 3077–3088.
URL https://doi.org/10.1007/BF02548113

[43] I. F. Silvera, Bose-Einstein condensation, American Journal of Physics 65 (6) (1997) 570–574.
URL https://doi.org/10.1119/1.18591

[44] 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

[45] B. Robertson, Introduction to Field Operators in Quantum Mechanics, American Journal of Physics 41 (5) (1973) 678–690.
URL https://doi.org/10.1119/1.1987330

[46] P.-H. Chavanis, T. Harko, Bose-Einstein condensate general relativistic stars, Phys. Rev. D 86 (2012) 064011.
URL https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevD.86.064011

[47] P. G. Kevrekidis, D. J. Frantzeskakis, R. Carretero-González, Basic Mean-Field Theory for Bose-Einstein Condensates, Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 2008, pp. 3–21.
URL https://doi.org/10.1007/978-3-540-73591-5_1

[48] A. L. Fetter, Nonuniform states of an imperfect bose gas, Annals of Physics 70 (1) (1972) 67 – 101.
URL http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0003491672903302

[49] C. J. Pethick, H. Smith, Bose-Einstein Condensation in Dilute Gases, Cambridge University Press, 2001.

[50] 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).

[51] B. A. Lippmann, J. Schwinger, Variational Principles for Scattering Processes. I, Phys. Rev. 79 (1950) 469–480.
URL https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.79.469

[52] H. F. Ferreira, Estabilidade de vórtices em condensados de Bose-Einstein, Master's thesis, Universidade de São Paulo, São Paulo, an optional note (7 2016).

[53] S. M. Holz, Estabilidade de Sistemas Condensados com Interação Atrativa ou Repulsiva, Master's thesis, Instituto de Física Teórica - Universidade Estadual Paulista, São Paulo (3 2005).

[54] 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

[55] M. Antezza, F. Dalfovo, L. P. Pitaevskii, S. Stringari, Dark solitons in a superfluid Fermi gas, Phys. Rev. A 76 (2007) 043610.
URL https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.76.043610

[56] C.-S. Jia, L.-H. Zhang, X.-L. Peng, Improved Pöschl-Teller potential energy model for diatomic molecules, International Journal of Quantum Chemistry 117 (14) (2017) e25383.
URL https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/qua.25383

[57] L. Madeira, S. Gandolfi, K. E. Schmidt, V. S. Bagnato, Vortices in low-density neutron matter and cold Fermi gases, Phys. Rev. C 100 (2019) 014001.
URL https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevC.100.014001

[58] S. M. Ikhdair, B. J. Falaye, Approximate analytical solutions to relativistic and nonrelativistic Pöschl-Teller potential with its thermodynamic properties, Chemical Physics 421 (2013) 84 – 95.
URL http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0301010413002450

[59] W. Yahya, K. Oyewumi, Thermodynamic properties and approximate solutions of the l-state Pöschl-Teller-type potential, Journal of the Association of Arab Universities for Basic and Applied Sciences 21 (2016) 53 – 58.
URL http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1815385215000139

[60] C.-S. Park, Two-dimensional transmission through modified Pöschl-Teller potential in bilayer graphene, Phys. Rev. B 92 (2015) 165422.
URL https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.92.165422

[61] R. R. Hartmann, M. E. Portnoi, Two-dimensional Dirac particles in a Pöschl-Teller waveguide, Scientific Reports 7 (1) (2017) 11599.
URL https://doi.org/10.1038/s41598-017-11411-w

[62] H. Yıldırım, M. Tomak, Nonlinear optical properties of a Pöschl-Teller quantum well, Phys. Rev. B 72 (2005) 115340.
URL https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.72.115340

[63] O. Aytekin, S. Turgut, M. Tomak, Nonlinear optical properties of a Pöschl-Teller quantum well under electric and magnetic fields, Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures 44 (7) (2012) 1612 – 1616.
URL http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1386947712001178

[64] A. Hakimyfard, M. Barseghyan, C. Duque, A. Kirakosyan, Simultaneous effects of pressure and temperature on donor binding energy in Pöschl-Teller quantum well, Physica B: Condensed Matter 404 (23) (2009) 5159 – 5162.
URL http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0921452609010345

[65] A. Sánchez-Arellano, J. Madrigal-Melchor, I. Rodríguez-Vargas, Non-conventional graphene superlattices as electron band-pass filters, Scientific Reports 9 (1) (2019) 8759.
URL https://doi.org/10.1038/s41598-019-45417-3

[66] P. Le, P. T. Vinh, L. T. Tu, H. V. Phuc, C. V. Nguyen, N. N. Hieu, L. T. Hoa, Magneto-optical absorption in Pöschl-Teller-like quantum well, Physica B: Condensed Matter 592 (2020) 412279.
URL http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0921452620302957

[67] M. M. Nieto, Exact wave-function normalization constants for the $B_0 tanhz - U_0 cosh^{-2} z$ and Pöschl-Teller potentials, Phys. Rev. A 17 (1978) 1273–1283.
URL https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.17.1273

[68] J. Lekner, Reflectionless eigenstates of the $sech^2$ potential, American Journal of Physics 75 (12) (2007) 1151–1157.
URL https://doi.org/10.1119/1.2787015

[69] E. Brown, L. Hernández de la Peña, A Simplified Pöschl-Teller Potential: An Instructive Exercise for Introductory Quantum Mechanics, Journal of Chemical Education 95 (11) (2018) 1989–1995.
URL https://doi.org/10.1021/acs.jchemed.8b00029

[70] G. Arfken, H. Weber, Física matemática: métodos matemáticos para engenharia e física, Elsevier, 2007.
URL https://books.google.com.br/books?id=l8dyPgAACAAJ

[71] J. L. C. Júnior, Solitons, Revista Brasileira de Física 10 (3).
URL http://sbfisica.org.br/bjp/download/v10/v10a44.pdf

[72] S. Novikov, S. Manakov, L. Pitaevskii, V. Zakharov, Theory of Solitons: The Inverse Scattering Method, Monographs in Contemporary Mathematics, Springer US, 1984.
URL https://books.google.com.br/books?id=Gtv0vY3OObsC

[73] P. Drazin, R. Johnson, D. Crighton, M. Ablowitz, S. Davis, E. Hinch, A. Iserles, J. Ockendon, P. Olver, Solitons: An Introduction, Cambridge Texts in Applied Mathematics, Cambridge University Press, 1989.
URL https://books.google.com.br/books?id=HPmbIDk2u-gC

[74] C. S. Gardner, J. M. Greene, M. D. Kruskal, R. M. Miura, Method for solving the korteweg-devries equation, Phys. Rev. Lett. 19 (1967) 1095–1097.
URL https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.19.1095

[75] P. D. Lax, Integrals of nonlinear equations of evolution and solitary waves, Communications on Pure and Applied Mathematics 21 (5) (1968) 467–490.
URL https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/cpa.3160210503

[76] V. Zakharov, A. Shabat, Exact theory of two-dimensional self-focusing and one-dimensional self-modulation of waves in nonlinear media, Journal of Experimental and Theoretical Physics 34 (1970) 62–69.

[77] V. E. Zakharov, A. B. Shabat, A scheme for integrating the nonlinear equations of mathematical physics by the method of the inverse scattering problem. i, Functional Analysis and Its Applications 8 (3) (1974) 226–235.
URL https://doi.org/10.1007/BF01075696

[78] A. Hasegawa, F. Tappert, Transmission of stationary nonlinear optical pulses in dispersive dielectric fibers. i. anomalous dispersion, Applied Physics Letters 23 (3) (1973) 142–144.
URL https://doi.org/10.1063/1.1654836

[79] P. J. Y. Louis, Matter-wave solitons in optical lattices and superlattices, Ph.D. thesis, Australian National University, Canberra (5 2005).

[80] R. Balakrishnan, I. I. Satija, Solitons in Bose-Einstein condensates, Pramana 77 (5) (2011) 929–947.
URL https://doi.org/10.1007/s12043-011-0187-z

[81] N. G. Vakhitov, A. A. Kolokolov, Stationary solutions of the wave equation in a medium with nonlinearity saturation, Radiophysics and Quantum Electronics 16 (7) (1973) 783–789.
URL https://doi.org/10.1007/BF01031343

[82] M. Olshanii, S. Choi, V. Dunjko, A. Feiguin, H. Perrin, J. Ruhl, D. Aveline, Three-dimensional Gross-Pitaevskii solitary waves in optical lattices: Stabilization using the artificial quartic kinetic energy induced by lattice shaking, Physics Letters A 380 (1) (2016) 177 – 181.
URL http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0375960115007720

[83] F. K. Abdullaev, A. Gammal, L. Tomio, T. Frederico, Stability of trapped Bose-Einstein condensates, Phys. Rev. A 63 (2001) 043604.
URL https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.63.043604

[84] R. Borghi, The variational method in quantum mechanics: an elementary introduction, European Journal of Physics 39 (3) (2018) 035410.
URL https://doi.org/10.1088%2F1361-6404%2Faaafd9

[85] J. a. C. B. Araujo, G. R. P. Borges, E. Drigo Filho, Supersimetria, método variacional e potencial de Lennard-Jones (12,6), Revista Brasileira de Ensino de Física 28 (2006) 41 – 44.
URL http://www.scielo.br/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S1806-11172006000100006&nrm=iso

[86] D. Anderson, Variational approach to nonlinear pulse propagation in optical fibers, Phys. Rev. A 27 (1983) 3135–3145.
URL https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.27.3135

[87] H. Michinel, Non-linear propagation of Gaussian beams in planar graded-index waveguides: a variational approach, Pure and Applied Optics: Journal of the European Optical Society Part A 4 (6) (1995) 701–708.
URL https://doi.org/10.1088%2F0963-9659%2F4%2F6%2F002

[88] L. Salasnich, Time-dependent variational approach to Bose-Einstein condensation, International Journal of Modern Physics B 14 (01) (2000) 1–11.
URL https://doi.org/10.1142/S0217979200000029

[89] 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

[90] M. Ruggiero, V. da Rocha Lopes, Cálculo numérico: aspectos teóricos e computacionais, Makron Books do Brasil, 1996.
URL https://books.google.com.br/books?id=kuRDAAAACAAJ

[91] G. Monerat, L. Ferreira Filho, E. C. Silva, G. Oliveira-Neto, P. Nogueira, A. d. Assumpção, Quantização de sistemas hamiltonianos via método de diferenças finitas, Revista Brasileira de Ensino de Física 32 (2010) 1304 – 1310.
URL http://www.scielo.br/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S1806-11172010000100004&nrm=iso

[92] A. Goldberg, H. M. Schey, J. L. Schwartz, Computer-generated motion pictures of one-dimensional quantum-mechanical transmission and reflection phenomena, American Journal of Physics 35 (3) (1967) 177–186.
URL https://doi.org/10.1119/1.1973991

[93] A. Gammal, T. Frederico, L. Tomio, Improved numerical approach for the time-independent Gross-Pitaevskii nonlinear Schrödinger equation, Phys. Rev. E 60 (1999) 2421–2424.
URL https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.60.2421

[94] M. Brtka, A. Gammal, L. Tomio, Relaxation algorithm to hyperbolic states in Gross-Pitaevskii equation, Physics Letters A 359 (5) (2006) 339 – 344.
URL http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0375960106008486

[95] C. Barenghi, N. Parker, A Primer on Quantum Fluids, SpringerBriefs in Physics, Springer International Publishing, 2016.
URL https://books.google.com.br/books?id=qi3RDAAAQBAJ

[96] E. A. Donley, N. R. Claussen, S. L. Cornish, J. L. Roberts, E. A. Cornell, C. E. Wieman, Dynamics of collapsing and exploding Bose-Einstein condensates, Nature 412 (6844) (2001) 295–299.
URL https://doi.org/10.1038/35085500

[97] J. L. Roberts, N. R. Claussen, S. L. Cornish, E. A. Donley, E. A. Cornell, C. E. Wieman, Controlled Collapse of a Bose-Einstein Condensate, Phys. Rev. Lett. 86 (2001) 4211–4214.
URL https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.86.4211

[98] C. C. Bradley, C. A. Sackett, R. G. Hulet, Bose-Einstein Condensation of Lithium: Observation of Limited Condensate Number, Phys. Rev. Lett. 78 (1997) 985–989.
URL https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.78.985

[99] A. Gammal, T. Frederico, L. Tomio, Critical number of atoms for attractive Bose-Einstein condensates with cylindrically symmetrical traps, Phys. Rev. A 64 (2001) 055602.
URL https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.64.055602

[100] A. Gammal, L. Tomio, T. Frederico, Critical numbers of attractive Bose-Einstein condensed atoms in asymmetric traps, Phys. Rev. A 66 (2002) 043619.
URL https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.66.043619

[101] S. K. Adhikari, The critical number of atoms in an attractive Bose-Einstein condensate on optical plus harmonic traps, Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics 36 (13) (2003) 2943–2949.
URL https://doi.org/10.1088%2F0953-4075%2F36%2F13%2F321

[102] L. Bergé, T. J. Alexander, Y. S. Kivshar, Stability criterion for attractive Bose-Einstein condensates, Phys. Rev. A 62 (2000) 023607.
URL https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.62.023607

[103] M. Centelles, M. Guilleumas, M. Barranco, R. Mayol, M. Pi, Bose-Fermi mixtures in optical lattices, Laser Physics 16 (2) (2006) 360–366.
URL https://doi.org/10.1134/S1054660X06020277

[104] M. Membrado, A. F. Pacheco, Bose-Einstein condensate haloes embedded in dark energy, A&A 611 (2018) A81.
URL https://doi.org/10.1051/0004-6361/201731447

[105] R. Teixeira, E. S. G. Leandro, L. C. B. da Silva, F. Moraes, Schrödinger formalism for a particle constrained to a surface in r13, Journal of Mathematical Physics 60 (2) (2019) 023502.
URL https://doi.org/10.1063/1.5078442

[106] L. C. Pereira, J. V. B. Ferreira, V. A. do Nascimento, Soluções variacionais e numéricas da Equação de Schrödinger 1D submetida ao potencial de Pöschl-Teller, Revista Principia - Divulgação Científica e Tecnológica do IFPB 1 (48) (2020) 156–168.
URL https://periodicos.ifpb.edu.br/index.php/principia/article/view/3745

[107] L. C. Pereira, V. A. do Nascimento, Dynamics of Bose-Einstein condensates subject to the Pöschl-Teller potential through numerical and variational solutions of the Gross-Pitaevskii equation, Materials 13 (10).
URL https://www.mdpi.com/1996-1944/13/10/2236

[108] L. C. Pereira, J. V. B. Ferreira, V. A. Nascimento, Stability of matter-wave solitons in quasi-1D Bose-Einstein condensates trapped in Pöschl-Teller potential subject to periodic perturbations through a numerical approach, Proceedings of the Romanian Academy Series A - Mathematics Physics Technical Sciences Information Science 21 (3) (2020) 237–244.
URL https://acad.ro/sectii2002/proceedings/doc2020-3/06-Pereira.pdf

[109] L. C. Pereira, B. S. Marangoni, V. A. a. do Nascimento, Dynamics and stability of matter-wave solitons in cigar-shaped Bose-Einstein condensates dragged by Pöschl-Teller potential, International Journal of Quantum Chemistry 121 (11) (2021) e26634.
URL https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/qua.26634

[110] L. C. Pereira, Progeny of supermassive black holes through the collapse of dark matter Bose-Einstein condensates: a variational approach, Proceedings of the Romanian Academy Series A - Mathematics Physics Technical Sciences Information Science.

[111] N. Lemos, Mecânica Analítica, Livraria da Física, 2007.
URL https://books.google.com.br/books?id=XpOS2eOdDR4C

[112] X.-Y. Wu, B.-J. Zhang, X.-J. Liu, L. Xiao, Y.-H. Wu, Y. Wang, Q.-C. Wang, S. Cheng, Derivation of Nonlinear Schrödinger Equation, International Journal of Theoretical Physics 49 (10) (2010) 2437–2445.
URL https://doi.org/10.1007/s10773-010-0429-8

[113] 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

[114] M. L. Chiofalo, S. Succi, M. P. Tosi, Ground state of trapped interacting Bose-Einstein condensates by an explicit imaginary-time algorithm, Phys. Rev. E 62 (2000) 7438–7444.
URL https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.62.7438

[115] 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