



Instituto de Física Teórica
Universidade Estadual Paulista

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

IFT-D.007/05

**Estabilidade de Sistemas Condensados com Interação Atrativa
ou Repulsiva**

Sheila Magali Holz

Orientador

Lauro Tomio

Co-orientador

Victo dos Santos Filho

Março de 2005

Agradecimentos

Sou grata a todas as pessoas que direta ou indiretamente colaboraram com a concretização desse mestrado. Em especial, agradeço:

Ao meu orientador, professor Lauro, e ao meu co-orientador, Victo, pelos ensinamentos, apoio, amizade e orientação, a qual foi crucial durante todo o desenrolar do curso de mestrado.

Aos meus pais, por todo amor, dedicação, paciência, apoio, e por serem meus grandes incentivadores. Esse título também pertence a vocês.

Ao Orildo, meu amado, por toda compreensão, carinho, apoio e estar ao meu lado em todos os momentos.

À Shirley e ao Marcos, por todo incentivo, ajuda, carinho e pelo Nicollas.

Aos queridos, Daniel, Denise, Fernando e Lucelene. Pela amizade, atenção, paciência e ajuda nos momentos difíceis.

Aos companheiros: Ricardo e Marcia, pela amizade e solidariedade.

Aos colegas: Gisele, Carina, Fabiano, Marijana, Celso, Dáfni, Mario, D.Maria, Nadiane, Evandro, Doff, Clóvis, Bóris...

Aos amigos, que mesmo longe, faziam-se presentes: Daiene, Jussane, Mateus, Leandro e Cibeli...

A todos os funcionários do IFT.

Ao Cnpq, pelo apoio financeiro.

Resumo

Investigamos as soluções estacionárias e dinâmicas da equação de Gross-Pitaevskii generalizada para sistemas atômicos com um potencial confinante e termos não-conservativos associados à dissipação e à alimentação atômica, visando a descrição de condensados de Bose-Einstein. Consideramos os casos de comprimentos de espalhamento negativos (interações atrativas) e positivos (interações repulsivas) entre dois átomos. Verificamos como a variação dos parâmetros associados aos termos não conservativos pode produzir situações de instabilidade resultando no fenômeno conhecido como caos espaço-temporal. Por outro lado, verificamos também quais combinações de parâmetros leva a soluções de equilíbrio, tipo solitônica. Nessa pesquisa, utilizando esse modelo de campo médio com uma parametrização conhecida, estudamos as propriedades de tais sistemas para alguns valores dos parâmetros não-conservativos, por meio de métodos numéricos e variacionais.

Palavras Chaves:

Condensados de Bose-Einstein; Equação de Gross-Pitaevskii; Dinâmica Não-Linear; Caos Espaço-Temporal; Autosóliton.

Áreas do conhecimento:

Dinâmica Não-Linear; Ondas de Matéria.

Abstract

We investigate the stationary and dynamical solutions of the Gross-Pitaevskii equation extended for atomic systems with confining potential in the presence of nonconservative terms associated to atomic dissipation and feeding, in order to describe Bose-Einstein Condensates. We considered the cases of negative (attractive interaction) and positive (repulsive interaction) two-body scattering length. We verified how the variation of the parameters associated to those nonconservative terms could produce instabilities resulting in occurrence of spacetemporal chaos. In other hand, we looked for parameters combinations that give us stable solitonic-like solutions. In this research, by using the mean-field approach with a particular parameterization, we studied the properties of these systems for some values of the nonconservative parameters, by means of numerical and variational methods.

Key words:

Bose-Einstein condensation; Gross-Pitaevskii equation; Nonlinear dynamics; Space-temporal chaos; Autosoliton.

Research Fields:

Nonlinear dynamics; Matter waves.

Índice

1	Introdução	1
1.1	Motivação	2
2	Condensados de Bose-Einstein	4
2.1	Introdução	4
2.2	Condensação de bósons	7
2.2.1	Gases de Bose Não-Homogêneos	7
2.2.2	O gás ideal de Bose em uma armadilha harmônica	8
2.2.3	Bósons aprisionados em temperatura finita	9
2.3	Formalismo de Gross-Pitaevskii	11
2.3.1	Introdução	11
2.3.2	Efeitos de interações no condensado de Bose-Einstein	11
2.4	Equações de Schrödinger não-lineares	15
2.5	Formalismo de Gross-Pitaevskii estacionário generalizado	17
2.6	Métodos de solução	18
2.6.1	Métodos numéricos	18
3	Soluções estacionárias	23
3.1	Método variacional independente do tempo	23
3.1.1	Interações atrativas	23
3.1.2	Interações repulsivas	25
3.2	Cálculo numérico	26
3.2.1	Interações atrativas	26
3.2.2	Interações repulsivas	28
4	Dinâmica de condensados não conservativos	42
4.1	Introdução	42
4.2	Modelo não-conservativo	43
4.2.1	Caracterização das dinâmicas	45
4.3	Cálculo variacional dinâmico	46

4.3.1	Sólitos de Pereira-Stenflo	47
4.3.2	Método Variacional Dependente do Tempo	48
4.4	Resultados numéricos para a EGPG	51
4.4.1	Análise de instabilidades na EGPG para interação repulsiva	52
4.4.2	Análise de instabilidades na EGPG para interação atrativa	53
4.5	Comparando interações repulsivas e atrativas	54
5	Conclusão	76
	Referências	79

Capítulo 1

Introdução

No estudo de sistemas físicos complexos, como os que envolvem muitos corpos, deparamo-nos com equações integrais ou parciais não-lineares, cujo tratamento requer o conhecimento e domínio adequado de métodos avançados de cálculo, sejam numéricos, analíticos ou semi-analíticos.

No estudo de estados físicos como os condensados de Bose-Einstein (CBE), o formalismo utilizado é típico dessa forma de abordagem, uma vez que o condensado é descrito através de aproximação de campo médio, na qual se considera que as partículas estão tão separadas umas das outras, que acabam sentindo apenas uma interação média de dois corpos em sua dinâmica (em geral, o parâmetro de diluição é da ordem de 10^{-3}). Assim, a evolução temporal destas partículas pode ser determinada por meio das soluções de um tipo de equação de Schrödinger *não-linear* denominada equação de Gross-Pitaevskii.

Equações não-lineares do tipo Schrödinger descrevem uma série de fenômenos físicos interessantes, presentes em várias áreas da Física, mesmo na Física Clássica. Podemos ainda encontrar equações desse tipo em outros domínios científicos como nas Engenharias e Biociências.

A maioria dos sistemas não-lineares não têm solução analítica exata. Esses sistemas envolvem análises mais complexas do que os sistemas lineares, uma vez que estes podem ser divididos em partes. Cada uma destas partes pode ser resolvida separadamente e, finalmente recombinadas para se obter a resposta do sistema inteiro (superposição). Porém isso nem sempre é possível. Quando as partes do sistema interferem ou cooperam, ocorrem interações não-lineares, e o princípio da superposição não se aplica mais.

Neste trabalho, investigamos as propriedades estacionárias e a dinâmica associada ao formalismo não-linear obtido através de variantes da equação de Gross-Pitaevskii. Visamos, desta forma, estudar e dominar as técnicas de cálculo numérico e variacional para resolver equações deste tipo, bem como entender uma de suas aplicações: descrever propriedades de um condensado de Bose-Einstein. Neste contexto, pretendemos verificar

a existência de soluções estáveis conhecidas como sólitons, bem como a ocorrência de situações instáveis e caóticas, para certos regimes dos parâmetros utilizados.

1.1 Motivação

A condensação de Bose-Einstein para sistemas em que os átomos têm um comprimento de espalhamento de dois corpos na onda s repulsiva, é favorecida em relação a sistemas com interações de dois corpos atrativa, pois no caso atrativo o sistema fica instável colapsando para um número finito de átomos. Sistemas repulsivos são estáveis mesmo para um número grande de átomos aprisionados (pode-se atingir até 10^7 partículas condensadas nesses sistemas) e sua depleção (esgotamento ou tempo de vida) ocorre devido a efeitos não-conservativos.

A condensação de Bose-Einstein para sistemas em que os átomos têm um comprimento de espalhamento de dois corpos na onda s negativo (interações efetivas de dois corpos atrativa) não é estável para um número grande de átomos aprisionados, levando o sistema a sofrer um efeito chamado de colapso da função de onda do condensado. O colapso de um sistema gasoso é o fenômeno em que o raio quadrático médio do sistema tende a zero em um tempo extremamente pequeno devido às interações atrativas muito intensas entre seus átomos, ao se atingir uma densidade atômica crítica. Um dos fenômenos associados a condensados de Bose-Einstein de átomos com comprimento de espalhamento negativo, é a existência de um número crítico de átomos, abaixo do qual é possível a ocorrência do estado condensado e acima do qual ocorre o fenômeno do colapso da função de onda correspondente. Nesse efeito, o condensado tende a ter seu raio quadrático médio contraído até aproximadamente um ponto, o que só não ocorre devido às perdas por recombinação de três corpos, que se tornam relevantes nesta escala e causam uma nova expansão do condensado. Com base nestes fenômenos presentes em um CBE descritos na literatura, vamos estudar (1) as soluções estacionárias de tal sistema físico, visando reproduzir propriedades como a existência do número crítico no caso atrativo e a estabilidade no caso repulsivo; e (2) as soluções dinâmicas de um CBE para interações atrativas e repulsivas, considerando efeitos não conservativos.

Deseja-se também realizar um estudo da estabilidade de sistemas condensados, visando descrever sistemas realísticos e descobrir efeitos ou fenômenos decorrentes da evolução temporal. Estudaremos a equação de Gross-Pitaevskii que inclui um potencial de aprisionamento e termos não conservativos que visam descrever a entrada e saída de átomos do sistema condensado para a nuvem térmica que o envolve. Especificamente, analisaremos o efeito de colisões inelásticas de dois corpos na dinâmica de um CBE.

Neste ensejo, resumimos o conteúdo de cada capítulo dessa dissertação.

- No capítulo 2, faremos uma breve descrição sobre condensados de Bose-Einstein. Descreveremos o tratamento dado a um gás diluído aprisionado por uma armadilha de potencial harmônico no caso esfericamente simétrico. Daremos ênfase à importância da temperatura na condensação, analisando o caso de bósons aprisionados em temperatura finita. Analisaremos ainda os efeitos de interações no condensado de Bose-Einstein. Na descrição do gás não-ideal usaremos a hipótese de que somente colisões binárias são relevantes para a dinâmica do condensado, aplicaremos então a aproximação de campo médio, obtendo a equação de Gross-Pitaevskii.

Mostraremos que equações não-lineares do tipo Schrödinger podem ser generalizadas acrescentando potenciais externos ou termos não-conservativos. Veremos que uma das formas da equação de Schrödinger não-linear é a equação de Gross-Pitaevskii generalizada e apresentaremos as generalizações utilizadas nos cálculos. Em seguida, faremos a descrição dos métodos que serão utilizados.

- No capítulo 3, estudaremos as soluções estacionárias, para interações atrativas e repulsivas. Por meio da aplicação do método variacional independente do tempo, obteremos alguns observáveis, para os dois tipos de interação. Em seguida, através do cálculo numérico, faremos um estudo para interações repulsivas e interações atrativas, com potencial harmônico e potencial anarmônico.
- No capítulo 4, estudaremos a dinâmica de condensados não-conservativos. Inicialmente, descreveremos o modelo não-conservativo, fazendo a caracterização do caos e a descrição dos Sólitons de Pereira-Stenflo. Aplicaremos o método variacional dependente do tempo, para interações atrativas e repulsivas.

Através dos resultados numéricos (para os casos de interação repulsiva e atrativa), exploraremos a ocorrência de instabilidade na equação de Gross-Pitaevskii Generalizada.

- No capítulo 5, destacaremos as principais conclusões obtidas nessa dissertação.

Capítulo 2

Condensados de Bose-Einstein

2.1 Introdução

Quando um gás é resfriado a temperaturas muito baixas, é possível atingir um regime onde seu comportamento deixa de ser clássico e a visão tradicional de que um gás é constituído de partículas animadas com movimento desordenado não mais se sustenta. As partículas bosônicas no regime de ultra-baixas temperaturas atingem um estado que denominamos de Condensado de Bose-Einstein (CBE).

A pesquisa sobre a condensação iniciou-se com o artigo de S. N. Bose em 1924 [1], no qual o físico indiano apresentou uma derivação original para a estatística de fótons e a distribuição de Planck. Com base nesse artigo, nos anos de 1924 e 1925, Einstein apresentou um trabalho [2] (o segundo de um total de três artigos que escrevera sobre mecânica estatística de um gás monoatômico ideal), estendendo o tratamento a um sistema de partículas livres, mostrando que em temperaturas suficientemente baixas ocorre o “empilhamento” de uma fração finita das partículas no estado de menor energia. É a esse empilhamento que se passou a chamar de condensação de Bose-Einstein [3, 4].

Os trabalhos de Bose e de Einstein precederam o nascimento da Moderna Mecânica Quântica, do conceito de estatística de Fermi e da divisão das partículas em duas classes (férmions e bósons), dependendo do spin delas [3]. No artigo de Einstein, havia, pela primeira vez desde seu surgimento, a utilização da idéia de ondas de matéria de de Broglie. Einstein justificou aplicar o cálculo de Bose usando o argumento de que se as partículas fossem ondas, elas deveriam obedecer a mesma estatística que os fótons.

Desde então, muitos trabalhos relacionados ao conceito foram realizados [3]. Em 1947, Bogoliubov escreveu um trabalho muito importante para o tratamento de sistemas de muitos corpos que consistia em separar a contribuição do estado fundamental daquela devido a todos os demais estados [5], idéia chave para aplicação em CBE anos depois. Em 1956, Penrose e Onsager estenderam o conceito de parâmetro de ordem para um

líquido de Bose uniforme e discutiram as correlações de longo alcance que ela implicava. Feynman escreveu artigos no período 1953-1954, visando determinar a função de onda de estados quânticos de muitas partículas e descobrir como ela seria afetada no hélio líquido pela estatística de Bose. Entretanto, não havia menção significativa e direta sobre condensação de Bose-Einstein. O período de 1957-1965 ficou conhecido como a era dourada, pois muitos e importantes estudos teóricos foram feitos atacando o problema do gás condensado de Bose, muito embora fosse um sistema previsto apenas teoricamente à época, mas não realizado experimentalmente [3]. Trinta anos depois, muitos desses trabalhos foram relevantes para a pesquisa de gases não-ideais aprisionados. Nesse período, um desenvolvimento muito importante para gases aprisionados foi aquele devido a Pitaevskii [6] (1959-1961). Além da contribuição relevante para a área com sua equação para o parâmetro de ordem, um conceito importante trabalhado por Pitaevskii foi o de uma função de onda macroscópica que poderia depender da posição e do tempo. Essa idéia foi, sem dúvida, inspirada na função de onda de Ginzburg e Landau em sua teoria pioneira de supercondutores espacialmente não-homogêneos. Independentemente, Gross também desenvolveu a equação para o parâmetro de ordem [6], motivo pelo qual tal equação é conhecida como equação de Gross-Pitaevskii. Após esse período de grande desenvolvimento teórico, iniciou-se intensa pesquisa experimental, principalmente da década de 80 em diante, para a obtenção de uma forma pura de condensado de Bose-Einstein, sem as complicações de um líquido. Antes de 1995, os principais sistemas em estudo eram excitons (excitações do tipo buraco-elétron ou h^+e^-) em semicondutores, átomos de Hidrogênio e gases diluídos de metais alcalinos (os mais promissores). Procurando a realização experimental de CBE num sistema gasoso, vários cientistas passaram a investir no desenvolvimento de técnicas que permitissem o resfriamento de um gás confinado a temperaturas da ordem de $10^{-9}K$ (como resfriamento a laser). Durante o ano de 1995, três grupos de pesquisa, utilizando técnicas que conjugam resfriamento com lasers, aprisionamento magnético de átomos e resfriamento evaporativo, conseguiram reunir as condições necessárias para observação da condensação de Bose-Einstein em gases, cujas amostras atômicas eram de metais alcalinos. Num primeiro experimento [7], átomos de ^{87}Rb a uma densidade de 10^{12} átomos/ cm^3 foram resfriados a cerca de $100nK$, mostrando nesse regime uma variação de comportamento com respeito à sua distribuição espacial e de momentos, o que assegura que o sistema sofreu a condensação de Bose-Einstein (CBE). Em seguida, um experimento realizado com átomos de ^{23}Na [8] também demonstrou a ocorrência da CBE. Em outro experimento [9], átomos de ^7Li sofreram quase o mesmo tratamento para atingirem a CBE.

Acompanhando os recentes sucessos experimentais em condensados atômicos, as pesquisas teóricas foram reiniciadas, dessa vez no sentido de simular as condições experimentais, em que havia potencial confinante externo. Muitos progressos nas

pesquisas teóricas e experimentais sobre gases condensados de Bose diluídos e aprisionados têm sido feitos, como a obtenção de condensação para átomos de Hidrogênio, obtida por Fried *et al.* [10] em 1998 no MIT, e em outras espécies, atômicas ou não.

De acordo com a mecânica quântica, os constituintes de um gás confinado não apresentam um espectro de energia contínuo, sendo possível somente valores discretos. As partículas que constituem este sistema apresentam-se estatisticamente distribuídas por estes estados de energia e todas as propriedades do sistema advêm da contribuição estatística destas várias partículas contidas nos vários estados de energia. Nenhum dos estados apresenta-se ocupado com um número macroscópico de partículas, de modo que nenhum estado contribui diferentemente para as propriedades termodinâmicas do sistema, além daquela que advém de seu “peso” estatístico. Como observado por Einstein, um gás constituído por bósons poderia em ultra-baixas temperaturas apresentar uma população macroscópica no seu estado de mais baixa energia (número este da ordem do número total de partículas do sistema). Neste estado específico, as partículas contribuiriam para as propriedades do gás de uma forma diferente das demais, com um “peso” maior. Esta mudança de comportamento com relação às propriedades termodinâmicas caracteriza a chamada *transição de fase*. Neste contexto, a CBE leva o sistema para uma nova fase com propriedades bastantes peculiares.

Os sistemas físicos mais simples para obtenção e constatação de condensação de Bose-Einstein são os formados por gases de átomos alcalinos diluídos e confinados por armadilhas, uma vez que para esses átomos o espectro de níveis de energia pode ser excitado de modo mais eficiente na fase de resfriamento a laser e de confinamento óptico.

Nos experimentos realizados em 1995, para obter o fenômeno de condensação, utilizaram-se técnicas magnéticas e ópticas de aprisionamento de gases, formando-se, assim, armadilhas que confinavam esses gases diluídos de metais alcalinos. Após os átomos serem confinados em armadilhas magnéticas, eles eram resfriados a temperaturas extremamente baixas, da ordem de frações de microkelvins. Abaixo de uma temperatura crítica T_c , os átomos dos gases de metais alcalinos se condensam, formando, por um curto intervalo de tempo, o condensado de Bose-Einstein. Para se fazer uma medida do estado condensado, o procedimento foi o de liberar os átomos, desligando-se a armadilha confinante, que podiam, assim, se expandir livremente. Em seguida, efetuavam-se medidas de tempo de vôo ou da distribuição de momentos, por meio de métodos ópticos. Nessas medidas, um pico estreito na distribuição de momentos era observado abaixo de uma certa temperatura crítica, fornecendo uma clara assinatura experimental de um condensado de Bose-Einstein. Pelo fato dos átomos alcalinos possibilitarem a obtenção fácil de amostras densas e frias, eles se apresentaram como excelentes candidatos à formação de gases no regime quântico ou, mais precisamente, à obtenção do condensado.

Até o momento, a condensação de Bose-Einstein foi obtida com os seguintes sistemas

atômico/moleculares: ^{87}Rb [7], ^{23}Na [8], ^7Li [9, 11], ^1H [10], ^{85}Rb [12], Hélio metaestável [13], ^{40}K [14], ^{133}Cs [15], ^{174}Yb [16], $^{40}\text{K}_2$ [17] e $^6\text{Li}_2$ [18].

2.2 Condensação de bósons

2.2.1 Gases de Bose Não-Homogêneos

Uma das mais relevantes características dos gases aprisionados de Bose formados por metais alcalinos é a de que eles são gases não-homogêneos e formam sistemas de tamanho finito. Eles têm um número de átomos limitado a poucos milhares, para sistemas com interações de dois corpos atrativa, e da ordem de milhões de partículas, no caso com interações repulsivas.

Na maioria dos casos, as armadilhas confinantes são bem aproximadas por potenciais harmônicos, sendo que a frequência de aprisionamento ω_h fornece uma escala de comprimento característica para o sistema, o comprimento do oscilador harmônico: $a_h = \sqrt{\hbar/(m\omega_h)}$, que é da ordem de poucos micrômetros para as amostras disponíveis. No caso do ^{87}Rb e do ^{23}Na , o tamanho do condensado é aumentado como consequência das forças de dois corpos repulsivas; assim, os gases aprisionados podem se tornar quase objetos macroscópicos, podendo atingir, em certos casos, uma extensão axial média de $0,3\text{mm}$.

Como consequências importantes da não-homogeneidade dos gases aprisionados, podemos citar:

1. O estado condensado pode ser descrito tanto no espaço dos momentos quanto no espaço das coordenadas. Assim, torna-se mais ampla a investigação dos efeitos de condensação e a utilização de novos métodos de estudo de quantidades relevantes, como a dependência com a temperatura, as distribuições de densidade e energia, fenômenos de interferência, frequências de oscilações coletivas, etc.
2. O papel importante desempenhado pelas interações de dois corpos. Apesar da natureza muito diluída desses gases (uma distância média típica entre átomos maior que dez vezes o alcance das forças interatômicas), a combinação de condensação de Bose-Einstein e aprisionamento harmônico aumenta significativamente os efeitos das interações átomo-átomo em muitas quantidades mensuráveis importantes. Por exemplo, a densidade central do gás não-ideal, em temperaturas muito baixas, pode atingir até uma ou duas ordens de magnitude menores que a da densidade prevista para um gás ideal na mesma armadilha.

Apesar da não-homogeneidade desses sistemas, o que complica muito o problema de muitos corpos, a natureza diluída do gás possibilita que os efeitos da interação sejam descritos de um modo um tanto fundamental. Na prática, um único parâmetro físico, o comprimento de espalhamento na onda s , é suficiente para se obter uma descrição precisa.

A primeira e mais natural abordagem no estudo do comportamento desses sistemas é a teoria de bósons interagindo fracamente, a qual, para sistemas não-homogêneos, assume a forma de uma Aproximação de Campo Médio, chamada de Formalismo ou Teoria de Gross-Pitaevskii. A aproximação de campo médio para o parâmetro de ordem fornece equações simples para descrever os fenômenos relevantes associados à condensação de Bose-Einstein. Em particular, ela reproduz propriedades típicas de sistemas superfluidos, como a propagação de excitações coletivas e efeitos de interferência originários da fase do parâmetro de ordem. A teoria é adequada para descrever a maioria dos efeitos de interações de dois corpos de gases diluídos em temperatura zero, podendo ser generalizada para explorar também efeitos térmicos [19].

2.2.2 O gás ideal de Bose em uma armadilha harmônica

Em todos os experimentos citados, o potencial que confina os átomos pode ser aproximado por um potencial confinante do tipo harmônico.

$$V_{ext} = \frac{m}{2}(\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2) . \quad (2.1)$$

Assim, a investigação desses sistemas inicia-se através da análise de um sistema quântico não-relativístico de partículas idênticas em um potencial externo harmônico. Nesse caso, o Hamiltoniano de muitos corpos é a soma dos Hamiltonianos de partícula única, cujos auto-valores são dados pelas frequências e por três números quânticos inteiros não-negativos, n_x , n_y e n_z , na forma

$$\epsilon_{n_x n_y n_z} = \left(n_x + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega_x + \left(n_y + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega_y + \left(n_z + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega_z . \quad (2.2)$$

O estado fundamental $\phi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)$ de N bósons sem interação confinados pelo potencial harmônico (2.1) é obtido fazendo $n_x = n_y = n_z = 0$ (todas as partículas no mais baixo estado de energia), isto é

$$\phi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = \prod_{i=1}^N \phi_0(\vec{r}_i) , \quad (2.3)$$

onde

$$\vec{r}_i \equiv (x_i, y_i, z_i) , \quad (2.4)$$

$$\phi_0(\vec{r}) = \left(\frac{m\omega_h}{\pi\hbar}\right)^{3/4} \exp\left[-\frac{m}{2\hbar}(\omega_x x^2 + \omega_y y^2 + \omega_z z^2)\right] \quad (2.5)$$

e ω_h é a média geométrica das frequências do oscilador nas três direções espaciais, neste trabalho, dada por

$$\omega_h = \sqrt[3]{\omega_x \omega_y \omega_z} . \quad (2.6)$$

Estamos considerando uma frequência de aprisionamento simetricamente esférica, ou seja $\omega_x = \omega_y = \omega_z = \omega$, o que gera $\omega_h = \omega$.

O tamanho da nuvem é fixado pelo comprimento do oscilador harmônico, que corresponde à largura média da Gaussiana. Nos experimentos existentes, tem-se $a_h \cong 1\mu m$.

O aprisionamento do condensado tem sido, em geral, anisotrópico (por exemplo, no caso cilíndrico em forma de disco ou pizza, $\omega_z \gg \omega_\rho$ ou parâmetro de assimetria $\lambda = \omega_z/\omega_\rho > 1$; e no caso cilíndrico em forma de charuto $\omega_z \ll \omega_\rho$ ou $\lambda < 1$). Calculadas as larguras radial e axial médias, pode-se obter a denominada “razão de aspecto”, dada por

$$R = \sqrt{\lambda} = \left(\frac{p_z^2}{p_\rho^2} \right)^{1/2} . \quad (2.7)$$

A razão de aspecto R é fixada pelo parâmetro de assimetria da armadilha e nos dá a anisotropia desse sistema.

2.2.3 Bósons aprisionados em temperatura finita

Abaixo de uma determinada temperatura, a população do mais baixo estado torna-se macroscópica, o que corresponde ao começo da condensação de Bose-Einstein.

Vamos admitir que um grande número de partículas esteja no estado fundamental e determinar a que temperatura isso ocorre [20]. O número de partículas que em média ocupam um dos estados de energia ϵ , a uma dada temperatura T , é dada por [19, 20, 21]

$$n_\epsilon = \frac{g}{e^{\beta\epsilon - \mu} - 1} , \quad (2.8)$$

em que g é a degenerescência do estado, aqui considerado como unitário, μ é o potencial químico do sistema e $\beta = (k_B T)^{-1}$, onde k_B é a constante de Boltzmann. O potencial químico é um importante parâmetro termodinâmico que, em geral, depende do número de partículas e da temperatura. Se ele apresenta o mesmo valor em todos os pontos do sistema, dizemos que o sistema está em equilíbrio termodinâmico. O potencial químico μ para um sistema de bósons é sempre negativo ou nulo, de modo a assegurar um número de ocupação dado pela equação (2.8) sempre positivo. Em outras palavras, o potencial químico μ deve ser menor que o menor dos estados $\epsilon_{n_x n_y n_z}$ ou $\mu \leq \epsilon_{000}$. Quando o potencial químico se aproxima do estado menos energético:

$$\mu \rightarrow \epsilon_{000} = \frac{3}{2} \hbar \bar{\omega} , \quad (2.9)$$

o número de partículas no estado fundamental N_0 ,

$$N_0 = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_{000}-\mu)} - 1}, \quad (2.10)$$

torna-se macroscópico. Assim, quando μ se aproxima do limite superior (2.9), o número total de partículas é dado por

$$N = N_0 + \sum_{n_x, n_y, n_z \neq 0} \frac{1}{e^{\beta\hbar(\omega_x n_x + \omega_y n_y + \omega_z n_z)} - 1}. \quad (2.11)$$

Para calcular a soma acima, geralmente usa-se a aproximação semiclássica para os estados excitados [19] e assume-se que o espaçamento dos níveis de energia torna-se muito pequeno quando $N \rightarrow \infty$, de modo que se pode substituir (2.11) por

$$N = N_0 + \int_0^\infty \int_0^\infty \int_0^\infty \frac{dn_x dn_y dn_z}{e^{\beta\hbar(\omega_x n_x + \omega_y n_y + \omega_z n_z)} - 1}. \quad (2.12)$$

A precisão da aproximação semiclássica (2.12) é boa quando $k_B T \gg \hbar\omega_{h0}$, sendo ω_{h0} a média geométrica. Resolvendo-se (2.12), encontra-se

$$N - N_0 = \zeta(3) \left(\frac{k_B T}{\hbar\omega_{h0}} \right)^3, \quad (2.13)$$

sendo $\zeta(3) = \sum_{k=1}^\infty \frac{1}{k^3} = 1.202$, chamada função Zeta de Riemann [21]. Da última expressão, pode-se extrair a temperatura crítica de transição T_c assumindo-se que $N_0 = 0$ para $T = T_c$:

$$k_B T_c = \hbar\omega_{h0} \left(\frac{N}{\zeta(3)} \right)^{1/3} = 0.94 \hbar\omega_{h0} N^{1/3}. \quad (2.14)$$

Com a equação acima, podemos calcular a que temperatura é esperada a ocorrência da CBE quando são conhecidas as características da armadilha e o número de partículas. Para um valor “típico” de frequência da armadilha de $200Hz$, a temperatura crítica é da ordem de $200nK$ para 1000 bósons, e $400nK$ para 10000 bósons.

Uma vez conhecida a temperatura crítica, podemos determinar a fração de partículas no estado fundamental (N_0/N) como função da temperatura:

$$\frac{N_0}{N} = 1 - \left(\frac{T}{T_c} \right)^{3/2}. \quad (2.15)$$

Este tipo de curva, característica de uma transição de fase, é uma “assinatura” marcante da ocorrência de CBE.

Vamos analisar na seção que segue as mudanças nas propriedades de um condensado de Bose-Einstein, quando se passa do caso de um gás de Bose ideal para o caso de um gás de Bose com interações.

2.3 Formalismo de Gross-Pitaevskii

2.3.1 Introdução

Segundo [4], os condensados atômicos de Bose-Einstein produzidos em laboratórios são não apenas muito frios mas também bastante rarefeitos. Isso faz com que a distância média entre átomos seja suficientemente grande para que, quando dois deles interagem, a probabilidade de que um terceiro esteja também por perto, apto a participar da interação com os dois, seja também bastante pequena. Como os átomos do condensado são extremamente frios, a interação de dois deles é essencialmente elástica, entretanto processos inelásticos como *recombinação de três corpos* e *relaxação dipolar* também podem ocorrer, principalmente quando a densidade é significativa. Os processos elásticos conservam energia e momento, e uma combinação dessas duas condições é o que dá ao condensado sua relativa estabilidade. A interação entre os átomos é rica em estados ligados, mas para que dois átomos não ligados passem para um desses estados é preciso que eles se livrem de parte da energia com a qual iniciam a interação. O modo mais viável para que isso aconteça é a participação de um terceiro átomo no processo, que fica encarregado de carregar consigo a energia sobressalente. Esse mecanismo, chamado de *recombinação de três corpos*, é, de fato, um fator limitante para a vida dos condensados. Entretanto, ele é inibido pela baixa densidade, o que possibilita que a vida dos condensados seja da ordem de vários segundos.

Se considerarmos um sistema suficientemente diluído e a ausência de colapsos, o processo de colisões é extraordinariamente insensível às particularidades da interação, e pode ser muito bem caracterizado através de um único parâmetro diretamente relacionado com a seção de choque para o espalhamento (elástico) dos dois átomos. Quando interações de três corpos são relevantes (casos em que a densidade é um pouco maior e colisões inelásticas de dois ou mais corpos tornam-se importantes), a interação efetiva deve levar em conta mais parâmetros para a descrição do sistema físico, como condensados, como os parâmetros de colisão elástica de três corpos ou os parâmetros de colisão inelástica de dois e três corpos, que passamos a considerar nas seções seguintes.

2.3.2 Efeitos de interações no condensado de Bose-Einstein

A Hamiltoniana de muitos corpos descrevendo N bósons interagindo, confinados por

um potencial externo V_{ext} é dada por [19]

$$\hat{H} = \int d\vec{r} \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{ext}(\vec{r}) \right] \hat{\Psi}(\vec{r}) + \frac{1}{2} \int d\vec{r} d\vec{r}' \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}) \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}') V(\vec{r} - \vec{r}') \hat{\Psi}(\vec{r}') \hat{\Psi}(\vec{r}), \quad (2.16)$$

onde $\hat{\Psi}(\vec{r})$ e $\hat{\Psi}^\dagger(\vec{r})$ são os operadores de campo bosônicos que, respectivamente, aniquilam e criam uma partícula na posição \vec{r} e $V(\vec{r} - \vec{r}')$ é o potencial interatômico de dois corpos.

O estado fundamental do sistema pode ser calculado diretamente, começando da Hamiltoniana (2.16). Por exemplo, pode-se usar o método de Monte-Carlo para calcular grandezas de equilíbrio termodinâmico dos átomos, o que fornece resultados exatos a menos de erros estatísticos. Entretanto, o cálculo pode ser quase que impraticável para sistemas com valores muito grandes de N [22, 23] (por exemplo, para 10^4 ou mais átomos). Em sistemas muito rarefeitos, como acontece no caso dos condensados atômicos de Bose-Einstein, existe um tipo de aproximação que, sem ignorar completamente a interação entre partículas, ignora efeitos de correlação devido a essa interação. Esse tipo de tratamento consiste em tratar a dinâmica de uma partícula levando em conta apenas o efeito “médio” de sua interação com as outras. Esse efeito médio se traduz simplesmente num potencial adicional, ao qual cada uma das partículas está sujeita, o qual depende do estado das demais. Como o estado de cada uma das partículas que contribui para esse potencial adicional depende, por sua vez, dele mesmo, o que se perde nesse tipo de tratamento é a linearidade característica das equações da mecânica quântica: o potencial que define a dinâmica de cada partícula depende dessa dinâmica. Esta aproximação é conhecida como aproximação de campo médio, e foi desenvolvida para sistemas com interação, a fim de superar o problema de resolver exatamente a equação de Schrödinger completa de muitos corpos.

A idéia básica para a descrição de campo médio de um gás de Bose diluído foi formulada por Bogoliubov em 1947 [5]. O ponto-chave consiste em separar a contribuição do condensado para o operador de campo bosônico. Em geral, os operadores de campo de criação e aniquilação podem ser escritos como

$$\hat{\Psi}(\vec{r}) = \sum_{\alpha} \psi_{\alpha}(\vec{r}) a_{\alpha} \quad , \quad \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}) = \sum_{\alpha} \psi_{\alpha}^*(\vec{r}) a_{\alpha}^\dagger \quad , \quad (2.17)$$

onde $\psi_{\alpha}(\vec{r})$ são as funções de onda de partícula única e \hat{a}_{α} e \hat{a}_{α}^\dagger são os operadores de aniquilação e criação. Os operadores \hat{a}_{α}^\dagger e \hat{a}_{α} são definidos no espaço de Fock por meio das relações

$$\hat{a}_{\alpha}^\dagger | n_0, n_1, \dots, n_{\alpha}, \dots \rangle = \sqrt{n_{\alpha} + 1} | n_0, n_1, \dots, n_{\alpha} + 1, \dots \rangle \quad , \quad (2.18)$$

$$\hat{a}_{\alpha} | n_0, n_1, \dots, n_{\alpha}, \dots \rangle = \sqrt{n_{\alpha}} | n_0, n_1, \dots, n_{\alpha} - 1, \dots \rangle \quad , \quad (2.19)$$

onde n_α , o número de átomos no estado de partícula única α , são os autovalores do operador número

$$\hat{n}_\alpha = \hat{a}_\alpha^\dagger \hat{a}_\alpha . \quad (2.20)$$

Os operadores de criação e destruição obedecem às regras de comutação usuais

$$[\hat{a}_\alpha, \hat{a}_\beta^\dagger] = \delta_{\alpha,\beta} , \quad [\hat{a}_\alpha, \hat{a}_\beta] = 0 \quad \text{e} \quad [\hat{a}_\alpha^\dagger, \hat{a}_\beta^\dagger] = 0 . \quad (2.21)$$

A condensação de Bose-Einstein ocorre quando o número de átomos n_0 do estado fundamental torna-se muito grande: $n_0 \equiv N_0 \gg 1$ e a razão N_0/N permanece finita no limite termodinâmico $N \rightarrow \infty$. Neste limite, os estados com N_0 e $N_0 \pm 1 \simeq N_0$ correspondem à mesma configuração física e, conseqüentemente, os operadores \hat{a}_0 e \hat{a}_0^\dagger podem ser tratados como números, com valores

$$\hat{a}_0 = \hat{a}_0^\dagger = \sqrt{N_0} . \quad (2.22)$$

Para um gás uniforme em um volume V , a condensação de Bose-Einstein ocorre no estado de partícula única $\Psi_0 = 1/\sqrt{V}$ com momento nulo e o operador campo $\hat{\Psi}(\vec{r})$ pode, então, ser decomposto na forma $\hat{\Psi}(\vec{r}) = \sqrt{N_0/V} + \hat{\Psi}'(\vec{r})$. Tratando o operador $\hat{\Psi}'$ como uma pequena perturbação, Bogoliubov desenvolveu a teoria de primeira ordem para as excitações de gases de Bose com interação.

A generalização da teoria de Bogoliubov [5] para o caso das configurações dependentes do tempo e não-uniformes é dada por

$$\hat{\Psi}(\vec{r}, t) = \Psi(\vec{r}, t) + \hat{\Psi}'(\vec{r}, t) , \quad (2.23)$$

onde usamos a representação de Heisenberg para os operadores campo. Aqui, $\Psi(\vec{r}, t)$ é a função complexa definida como o valor esperado do operador campo,

$$\Psi(\vec{r}, t) \equiv \langle \hat{\Psi}(\vec{r}, t) \rangle , \quad (2.24)$$

cujo módulo fixa a densidade do condensado:

$$n_0(\vec{r}, t) = |\Psi(\vec{r}, t)|^2 . \quad (2.25)$$

A função $\Psi(\vec{r}, t)$ também possui uma fase bem definida. Essa função $\Psi(\vec{r}, t)$ é um campo clássico com o significado de um parâmetro de ordem, que é freqüentemente chamada de função de onda do condensado.

A decomposição (2.23) torna-se particularmente útil se $\hat{\Psi}'$ é pequena, isto é, quando a redução do condensado é pequena. Então, uma equação para o parâmetro de ordem pode ser deduzida expandindo a teoria para as mais baixas ordens em $\hat{\Psi}'$, como no caso de gases uniformes. A principal diferença é que aqui também se obtém uma teoria de

ordem zero não trivial para $\Psi(\vec{r}, t)$.

Para deduzir a equação para a função de onda do condensado $\Psi(\vec{r}, t)$, tem-se que escrever a evolução temporal do operador campo $\hat{\Psi}(\vec{r}, t)$, usando a equação de Heisenberg com a Hamiltoniana de muitos corpos (2.16), a partir da qual chega-se a

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\Psi}(\vec{r}, t) = [\hat{\Psi}(\vec{r}, t), \hat{H}] \Rightarrow \quad (2.26)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\Psi}(\vec{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_{ext}(\vec{r}) + \int d\vec{r}' \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}', t) V(\vec{r}' - \vec{r}) \hat{\Psi}(\vec{r}', t) \right] \hat{\Psi}(\vec{r}, t) . \quad (2.27)$$

Então, temos que substituir o operador $\hat{\Psi}$ pelo campo clássico Ψ . Na integral contendo a interação átomo-átomo $V(\vec{r}' - \vec{r})$, esta substituição é, em geral, uma aproximação pobre quando distâncias curtas ($\vec{r}' - \vec{r}$) estão envolvidas. Em um gás frio e diluído, entretanto, pode-se obter uma expressão adequada para o termo de interação observando-se que, neste caso, somente colisões binárias em baixa energia são relevantes e essas colisões são independentes dos detalhes do potencial de dois corpos e são caracterizadas por um parâmetro único: o comprimento de espalhamento na onda s . Isto permite que se substitua $V(\vec{r}' - \vec{r})$ na equação (2.27) por uma interação efetiva

$$V(\vec{r}' - \vec{r}) = \lambda_2 \delta(\vec{r}' - \vec{r}) , \quad (2.28)$$

onde a constante de acoplamento λ_2 está relacionada ao comprimento de espalhamento a por

$$\lambda_2 = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m} . \quad (2.29)$$

O uso do potencial efetivo (2.28) na equação (2.27) é compatível com a substituição de $\hat{\Psi}$ por Ψ e produz a seguinte equação fechada para o parâmetro de ordem

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) = \left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_{ext}(\vec{r}) + \lambda_2 |\Psi(\vec{r}, t)|^2 \right) \Psi(\vec{r}, t) . \quad (2.30)$$

Esta equação do tipo Schrödinger não-linear é conhecida como equação de Gross-Pitaevskii (EGP) [6]. Sua validade é baseada na condição de que o comprimento de espalhamento na onda s seja muito menor que a distância média entre átomos e que o número de átomos no condensado seja muito maior que 1.

Com a hipótese de que $\hat{\Psi}' \equiv 0$, o formalismo de Gross-Pitaevskii é estritamente válido somente no limite de temperatura zero, quando todas as partículas estão no condensado.

O parâmetro adimensional que controla a validade da aproximação de gás diluído, exigido para a dedução da equação (2.27), é o número de partículas em um volume de espalhamento $|a|^3$. Esse parâmetro de diluição pode ser escrito como

$$\chi = \bar{n} |a|^3 , \quad (2.31)$$

onde \bar{n} é a densidade média do gás.

Recentes determinações do comprimento de espalhamento das espécies atômicas usadas nos experimentos em condensação de Bose-Einstein fornecem: $a = 2,75$ nm para ^{23}Na [24], $a = 5,77$ nm para ^{87}Rb [25] e $a = -1,45$ nm para ^7Li [26]. Valores típicos de densidade variam de 10^{13} a 10^{15} cm^{-3} , de modo que sempre se tem $\chi < 10^{-3}$.

Quando $\chi \ll 1$, dizemos que o sistema é diluído ou fracamente interagente. Entretanto, o fato de χ ser pequeno não implica necessariamente que os efeitos de interações sejam pequenos. Esses efeitos, de fato, têm que ser comparados com a energia cinética dos átomos na armadilha. Uma primeira estimativa pode ser obtida calculando-se a energia de interação E_{int} do estado fundamental do oscilador harmônico. Esta energia é dada por $E_{int} = \lambda_2 N \bar{n}$, onde a densidade média é da ordem de $\bar{n} = N/a_h^3$, de modo que se obtém $E_{int} \propto N^2 |a| / a_h^3$. Por outro lado, a energia cinética é da ordem de $N\hbar\omega$ e, assim, $E_{cin} \sim Na_h^{-2}$. Finalmente, encontra-se

$$\frac{E_{int}}{E_{cin}} \propto \frac{N |a|}{a_h} . \quad (2.32)$$

Este é o parâmetro que expressa a importância da interação átomo-átomo comparada com a energia cinética. Ele pode ser facilmente maior que 1 mesmo quando $\chi \ll 1$, de modo que muitos gases diluídos podem exibir também um importante comportamento não-ideal. Nos primeiros experimentos com os átomos de ^{87}Rb no JILA [7] a razão $r_a = |a| / a_h$ era de aproximadamente 7×10^{-3} , com N da ordem de alguns milhares. Assim, a razão (2.32) é maior que um. Nos experimentos com ^7Li em Rice [11], o mesmo parâmetro é menor que 1, visto que o número de partículas é da ordem de 1000 e $r_a \approx 5 \times 10^{-4}$. Finalmente, nos experimentos com sódio no MIT [8], o número de átomos no condensado é muito grande ($10^6 - 10^7$) e a razão (2.32) varia de 10^3 a 10^4 .

2.4 Equações de Schrödinger não-lineares

As equações não-lineares do tipo Schrödinger (ESNL) são muito importantes porque descrevem um grande número de fenômenos em Física, tendo extensões relevantes em outros domínios científicos como, por exemplo, em Engenharias e Biociências.

Muitos sistemas físicos podem ser explicados por uma equação diferencial não-linear de 2ª ordem do tipo Schrödinger. Como exemplo, fluidos atravessando duas placas paralelas ou ondas induzidas por vento podem ser descritos por uma equação de Schrödinger não-linear unidimensional denominada equação de Ginzburg-Landau [27]:

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = a\psi - v \frac{\partial \psi}{\partial x} + b \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} - c |\psi|^2 \psi , \quad (2.33)$$

onde $\psi \equiv \psi(x, t)$ é a função de onda do sistema, v é a velocidade de grupo do modo mais instável e a , b e c são parâmetros complexos do sistema.

Pode-se também considerar a introdução do termo quártico para descrever estruturas localizadas rodeadas por um estado estacionário estável. Em outras palavras, tem-se

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = a\psi + b \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} - c |\psi|^2 \psi - d |\psi|^4 \psi \quad (2.34)$$

onde $\text{Re}(a) < 0$, $\text{Re}(c) < 0$ e $\text{Re}(d) > 0$.

O comportamento estático e o comportamento dinâmico de condensados de Bose-Einstein, como vimos, pode ser descrito por um tipo de ESNL chamada de Equação de Gross-Pitaevskii. Essa equação, sem potencial confinante, em 3D e simetria esférica pode ser escrita como

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\vec{r}, t) + N \frac{4\pi\hbar^2 a}{m} |\Psi|^2 \Psi(\vec{r}, t), \quad (2.35)$$

onde m é a massa da partícula, a o comprimento de espalhamento da interação de dois corpos do sistema e N o número de átomos no sistema [28].

Vamos analisar a seguir os casos de sistemas em que o formalismo de Gross-Pitaevskii apresenta generalizações que utilizaremos em nossos cálculos. Generalizações para a equação (2.35) são possíveis, tais como a introdução de um potencial externo e de termos não-conservativos nessa equação. No primeiro caso, temos a equação de Gross-Pitaevskii tradicional, com potencial harmônico confinante, a qual apresenta a seguinte forma tridimensional

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\vec{r}, t) + V_{harm}(\vec{r}) \Psi(\vec{r}, t) + N \frac{4\pi\hbar^2 a}{m} |\Psi|^2 \Psi(\vec{r}, t). \quad (2.36)$$

Em casos que envolvam outras generalizações como diferentes potenciais de aprisionamento, termos com coeficientes reais para descrever colisões elásticas de 3 corpos ou termos não-conservativos, tem-se outras formas de ESNL, que são Equações de Gross-Pitaevski Generalizadas (EGPG).

Por exemplo, no caso de termos dissipativos e de alimentação para descrever sistemas em que há perdas e ganhos de átomos na região onde o potencial externo os confina, temos a equação de Gross-Pitaevskii não-conservativa ou generalizada (EGPG), cuja forma com perdas por colisões inelásticas de dois e três corpos é dada por

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + V_{ext}(\vec{r}) \Psi - N \frac{4\pi\hbar^2 a}{m} |\Psi|^2 \Psi + iG_\gamma \Psi - i(G_\mu |\Psi|^2 + G_\xi |\Psi|^4) \Psi, \quad (2.37)$$

onde $\Psi = \Psi(\vec{r}, t)$, G_γ é o parâmetro de alimentação atômica do condensado pela nuvem térmica externa, G_μ é o parâmetro de dissipação atômica por relaxação dipolar e G_ξ é o parâmetro de dissipação atômica por recombinação de três corpos.

Vamos agora destacar mais o caso estacionário generalizado.

2.5 Formalismo de Gross-Pitaevskii estacionário generalizado

A partir da Lagrangiana efetiva que descreve a função de onda do condensado na aproximação de Hartree, deduzimos uma generalização para a equação de Gross-Pitaevskii [6], caracterizada pela inclusão de um termo proporcional ao quadrado da densidade, correspondente à interação de três corpos.

A seguir, nós a reduzimos a uma equação adimensional para, em seguida, obter numericamente as suas soluções na onda s . Como particularmente observado em [29, 30], para incorporar todos os processos de espalhamento em sistemas de muitos corpos, o potencial de dois corpos deveria ser substituído pela matriz T de muitos corpos. Geralmente, em energias muito baixas, isto é aproximado pela matriz de espalhamento de dois corpos, que é diretamente proporcional ao comprimento de espalhamento [31].

Assim, para obter a equação desejada, nós primeiro consideramos a Lagrangiana efetiva que descreve a função de onda do condensado na aproximação de Hartree-Fock, o que implica no funcional de energia de Gross-Pitaevskii generalizado [30]. A equação de Schrödinger não-linear generalizada que descreve a função de onda do condensado, na aproximação de campo médio, é obtida da Lagrangiana efetiva dada na Ref. [30]. Considerando o cálculo e o referencial adotado neste trabalho, bem como a solução estacionária

$$\Psi(\vec{r}, t) = \exp\left(\frac{-i\mu t}{\hbar}\right)\psi(\vec{r}) , \quad (2.38)$$

onde μ corresponde ao potencial químico, que nos indica a resistência do sistema à entrada ou saída de átomos, essa equação pode ser escrita como [32]

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V_{trap}(r) - \frac{4\pi\hbar^2 |a|}{m}|\psi(\vec{r})|^2 + \lambda_3|\psi(\vec{r})|^4 \right] \psi(\vec{r}) = \mu\psi(\vec{r}) , \quad (2.39)$$

onde V_{trap} é o potencial geral de aprisionamento, μ é o potencial químico, fixado pelo número de átomos N no estado condensado

$$\int d^3r |\psi(\vec{r})|^2 = N . \quad (2.40)$$

As escalas físicas apresentadas na equação (2.39) podem ser facilmente reconhecidas trabalhando-se com equações adimensionais. Reescalando (2.39) para a solução na onda s , obtemos a equação independente do tempo

$$\left[-\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{4}x^2 - \frac{|\Phi(x)|^2}{x^2} + g_3 \frac{|\Phi(x)|^4}{x^4} \right] \Phi(x) = \beta\Phi(x) , \quad (2.41)$$

onde

$$x \equiv \sqrt{2m\omega/\hbar} r ; \quad \Phi(x) \equiv \sqrt{8\pi|a|} r\psi(\vec{r}) , \quad (2.42)$$

sendo a função de onda adimensional $\Phi(x)$ a solução radial da equação.

Os parâmetros adimensionais, relacionados ao potencial químico e à intensidade de três corpos são, respectivamente, dados por

$$\beta \equiv \frac{\mu}{\hbar\omega} \quad \text{and} \quad g_3 \equiv \lambda_3 \hbar\omega \left[\frac{m}{4\pi\hbar^2 a} \right]^2 \quad (2.43)$$

e a normalização para $\Phi(x)$, obtida da equação (2.40), define um número n relacionado ao número de átomos N :

$$\int_0^\infty dx |\Phi(x)|^2 = n, \quad \text{onde} \quad n \equiv 2N|a| \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}. \quad (2.44)$$

As condições de contorno em (2.41) são dadas por [28]

$$\Phi(0) = 0 \quad \text{e} \quad \Phi(\infty) \sim C \exp \left[-x^2/4 + (\beta - 1/2) \ln(x) \right]. \quad (2.45)$$

2.6 Métodos de solução

Para se obter as soluções da equação de Gross-Pitaevskii generalizada independente do tempo, aplicamos o método variacional (aproximação gaussiana) e cálculo numérico exato, por meio da combinação do método de Runge-Kutta com o método de “chute” (*shooting method*).

Já no caso dinâmico, empregamos o método ou aproximação variacional dependente do tempo, confirmado pelo cálculo numérico exato, em que foi usado o algoritmo de Crank-Nicolson. Estes dois últimos métodos foram aplicados no Capítulo 4. É importante ressaltar que resolvemos a equação de Gross-Pitaevskii generalizada no caso tridimensional com simetria esférica em todos os casos.

Os algoritmos numéricos empregados neste trabalho para os cálculos numéricos exatos dos casos estacionário e dinâmico estão descritos na seção seguinte.

2.6.1 Métodos numéricos

Método de Runge-Kutta

Para resolver equações diferenciais ordinárias do tipo

$$\frac{du}{dt} = F(t, u) \quad (2.46)$$

com condição inicial $u(t_n) = u_n$, pode-se aplicar o método de Runge-Kutta clássico de quarta ordem. Neste método, devemos definir

$$\begin{cases} k_1 = \Delta t F(t_n, u_n) \\ k_2 = \Delta t F(t_n + \frac{\Delta t}{2}, u_n + \frac{1}{2}k_1) \\ k_3 = \Delta t F(t_n + \frac{\Delta t}{2}, u_n + \frac{1}{2}k_2) \\ k_4 = \Delta t F(t_n + \Delta t, u_n + k_3) \end{cases} . \quad (2.47)$$

de modo que o valor da função u da equação (2.46) é dado por

$$u_{n+1} = u_n + \frac{1}{6}[k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4] . \quad (2.48)$$

Para obter as soluções da equação de Gross-Pitaevskii generalizada independente do tempo, através do cálculo numérico, como faremos no Capítulo 3, temos que resolver uma equação diferencial de segunda ordem do tipo

$$y'' = g(y', y, x), \quad (2.49)$$

que pode ser desmembrada em duas equações de primeira ordem

$$y' = z \text{ e } z' = g(z, y, x). \quad (2.50)$$

Para obter as soluções da equação de Gross-Pitaevskii generalizada dependente do tempo, através do método variacional, teremos que resolver um sistema de três equações diferenciais, como faremos no Capítulo 4. Nesse caso, temos o seguinte sistema:

$$\begin{cases} \frac{dx}{dt} = f(t, x, y, z) \\ \frac{dy}{dt} = g(t, x, y, z) \\ \frac{dz}{dt} = h(t, x, y, z) \end{cases} , \quad (2.51)$$

com condição inicial $(t_n, x(t_n), y(t_n), z(t_n)) = (t_n, x_n, y_n, z_n)$ definimos

$$\left\{ \begin{array}{l} k_1 = \Delta t f(t_n, x_n, y_n, z_n) \\ l_1 = \Delta t g(t_n, x_n, y_n, z_n) \\ m_1 = \Delta t h(t_n, x_n, y_n, z_n) \\ k_2 = \Delta t f\left(t_n + \frac{\Delta t}{2}, x_n + \frac{k_1}{2}, y_n + \frac{l_1}{2}, z_n + \frac{m_1}{2}\right) \\ l_2 = \Delta t g\left(t_n + \frac{\Delta t}{2}, x_n + \frac{k_1}{2}, y_n + \frac{l_1}{2}, z_n + \frac{m_1}{2}\right) \\ m_2 = \Delta t h\left(t_n + \frac{\Delta t}{2}, x_n + \frac{k_1}{2}, y_n + \frac{l_1}{2}, z_n + \frac{m_1}{2}\right) \\ k_3 = \Delta t f\left(t_n + \frac{\Delta t}{2}, x_n + \frac{k_2}{2}, y_n + \frac{l_2}{2}, z_n + \frac{m_2}{2}\right) \\ l_3 = \Delta t g\left(t_n + \frac{\Delta t}{2}, x_n + \frac{k_2}{2}, y_n + \frac{l_2}{2}, z_n + \frac{m_2}{2}\right) \\ m_3 = \Delta t h\left(t_n + \frac{\Delta t}{2}, x_n + \frac{k_2}{2}, y_n + \frac{l_2}{2}, z_n + \frac{m_2}{2}\right) \\ k_4 = \Delta t f(t_n + \Delta t, x_n + k_3, y_n + l_3, z_n + m_3) \\ l_4 = \Delta t g(t_n + \Delta t, x_n + k_3, y_n + l_3, z_n + m_3) \\ m_4 = \Delta t h(t_n + \Delta t, x_n + k_3, y_n + l_3, z_n + m_3) \end{array} \right. , \quad (2.52)$$

de modo que o valor de (x, y, z) é dado por

$$\left\{ \begin{array}{l} x_{n+1} = x_n + \frac{k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4}{6} \\ y_{n+1} = y_n + \frac{l_1 + 2l_2 + 2l_3 + l_4}{6} \\ z_{n+1} = z_n + \frac{m_1 + 2m_2 + 2m_3 + m_4}{6} \end{array} \right. . \quad (2.53)$$

Método de Crank-Nicolson

Equações diferenciais parciais parabólicas da forma

$$u_{rr} = \Psi(r, t, u, u_r, u_t) \quad (2.54)$$

podem ser solucionadas numericamente utilizando o Método de Elementos Finitos, o Método da Transformada de Fourier ou o Método de Diferenças Finitas. Neste trabalho, optamos por utilizar um dos Métodos de Diferenças Finitas denominado de Método de Crank-Nicolson, devido à estabilidade incondicional que esse método possui.

Essa equação pode ser colocada muitas vezes na forma

$$u_{rr} + f(r, t, u)u_r + g(r, t, u) = p(r, t, u)u_t \quad (2.55)$$

que, em geral, dependendo das atribuições dadas a f , g e p , é não-linear.

A aplicação do Método de Crank-Nicolson para a equação não-linear (2.54) nos leva a

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2h^2} \delta_r^2 (U_{i,j+1} + U_{i,j}) = \\ & = \Psi \left[ih, \left(j + \frac{1}{2} \right) k, \frac{1}{2} (U_{i,j+1} + U_{i,j}), \frac{1}{4h} \mu \delta_r (U_{i,j+1} + U_{i,j}), \frac{1}{k} (U_{i,j+1} - U_{i,j}) \right] , \end{aligned} \quad (2.56)$$

onde usamos a notação de operadores de discretização

$$\delta_r^2 U_{i,j+1} = U_{i+1,j+1} - 2U_{i,j+1} + U_{i-1,j+1} , \quad (2.57)$$

$$\delta_r U_{i,j+1} = U_{i+\frac{1}{2},j+1} - U_{i-\frac{1}{2},j+1} \text{ e} \quad (2.58)$$

$$\mu U_{i,j+1} = \frac{1}{2} \left(U_{i+\frac{1}{2},j+1} + U_{i-\frac{1}{2},j+1} \right) . \quad (2.59)$$

A solução da equação de diferenças (2.56) converge para a solução de (2.54) sem nenhuma restrição sobre a razão de estabilidade

$$R_{est} = \frac{k}{h^2} , \quad (2.60)$$

onde $k = \Delta t$ e $h = \Delta r$ correspondem aos intervalos de discretização no tempo e na malha espacial da equação, respectivamente. A razão de estabilidade R_{est} tem por grande utilidade possibilitar uma análise da convergência dos métodos de discretização aplicados às equações diferenciais. No caso do Método de Crank-Nicolson, quaisquer valores de k e h escolhidos para gerar a malha de diferenças finitas - ou seja, para todo R_{est} - a equação de diferenças finitas converge para a solução da equação diferencial correspondente, sendo o erro da ordem de $\mathcal{O}(k^2 + h^2)$.

Assim, dizemos que o método de Crank-Nicolson é incondicionalmente estável, o que o torna extremamente adequado para resolução de equações diferenciais tais como as equações de Schrödinger não-lineares, a equação de Navier-Stokes e a equação de difusão não-linear.

A seguir, descreveremos o método variacional independente do tempo e mostraremos os resultados obtidos com os cálculos variacionais e numéricos exatos, no caso estacionário.

Capítulo 3

Soluções estacionárias

3.1 Método variacional independente do tempo

3.1.1 Interações atrativas

Consideremos um fluido de N bósons regido pela equação

$$\mu\psi = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \frac{m}{2}\omega^2 r^2 - N\lambda_2 |\psi|^2 \right] \psi, \quad (3.1)$$

sendo $\psi \equiv \psi(\vec{r})$ e ψ é normalizada a 1. Esta expressão representa uma equação de campo médio com uma interação efetiva ou uma interação de dois corpos. Neste caso, $\lambda_2 < 0$, onde $\lambda_2 = 4\pi\hbar^2 a/m$, o que significa que o sistema apresenta interações de dois corpos atrativas.

Vamos calcular uma função de onda aproximada para o estado condensado e observáveis correspondentes, usando o formalismo variacional. Inicialmente, calculamos a energia E do sistema, que é dada por

$$E = N \int d^3r \left[N \frac{\hbar^2}{2m} |\nabla\psi|^2 + N \frac{m}{2} \omega^2 r^2 |\psi|^2 - \frac{N^2}{2} \lambda_2 |\psi|^4 \right]. \quad (3.2)$$

Para obter a solução, devemos minimizar E ou resolver a equação (3.1). Vamos assumir na equação (3.2) a forma gaussiana para ψ , tendo como parâmetro variacional a largura da Gaussiana σ :

$$\psi(\vec{r}) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar\sigma^2} \right)^{3/4} \exp\left(\frac{-m\omega r^2}{2\hbar\sigma^2} \right). \quad (3.3)$$

Calculando os termos não-lineares da energia potencial, obtemos para a energia

$$E = \hbar\omega N \left[\frac{3}{4} \left(\sigma^2 + \frac{1}{\sigma^2} \right) - \frac{n}{4\sqrt{\pi}\sigma^3} \right]. \quad (3.4)$$

sendo que n está relacionado ao número de átomos N , como mostrado na equação (2.44).

Minimizando E em relação a σ , ou seja

$$\left. \frac{\partial E}{\partial \sigma} \right|_{\sigma_0} = 0 , \quad (3.5)$$

obtemos o polinômio

$$\sigma_0^5 - \sigma_0 + \frac{n}{2\sqrt{\pi}} = 0 . \quad (3.6)$$

Em seguida, procede-se com a determinação das raízes desse polinômio e verifica-se quais são as de máximo e de mínimo, que nos fornecem as soluções para os observáveis do sistema.

Por meio desta análise, pode-se determinar também outros observáveis como o potencial químico, a densidade central e a frequência de oscilações coletivas em torno do ponto σ_0 . As expressões para μ , definido como

$$\mu = \frac{\partial E}{\partial N} \quad (3.7)$$

e ρ_c , definido como

$$\rho_c = N |\psi|^2 \quad (3.8)$$

são dadas por

$$\mu = \hbar\omega \left[\frac{3}{4} \left(\sigma_0^2 + \frac{1}{\sigma_0^2} \right) - \frac{n}{2\sqrt{\pi}\sigma_0^3} \right] \quad (3.9)$$

e

$$\rho_c = N \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{3/2} \frac{1}{\sigma_0^3} . \quad (3.10)$$

O valor do raio quadrático médio para o sistema é dado por

$$\langle r^2 \rangle = \frac{\hbar}{m\omega} \left(\frac{3\sigma^2}{2} \right) . \quad (3.11)$$

A frequência de oscilações coletivas é dada variacionalmente em função da frequência do oscilador ω por

$$\omega_{col} = \omega \sqrt{\left. \frac{2}{3} \frac{1}{N\hbar\omega} \frac{\partial^2 E}{\partial \sigma^2} \right|_{\sigma_0}} , \quad (3.12)$$

a qual pode ser obtida por analogia com o caso mecânico de um sistema massa-mola. Seu valor é dado por:

$$\omega_{col} = \omega \sqrt{5 - \frac{1}{\sigma_0^4}} . \quad (3.13)$$

Dessa forma, o valor do número crítico pode ser obtido analiticamente nessa abordagem variacional [33], pois para $n = n_c$ devemos ter $\omega_{col} = 0$, o que conduz a $\sigma_0^4 = \sigma_c^4 = 1/5$. Esse resultado em conjunto com a equação (3.6) nos fornece

$$n_c = \sqrt{\pi} \left[\frac{8}{5} \left(\frac{1}{5} \right)^{1/4} \right] = 1,8965 . \quad (3.14)$$

O valor do potencial químico crítico é dado por

$$\mu_c = \frac{\sqrt{5}}{10} \hbar \omega . \quad (3.15)$$

Nas figuras 3.1, 3.2, 3.3 e 3.4, temos o comportamento dos observáveis. A energia total E é dada em unidades de $N\hbar\omega/n$, o potencial químico μ é dado em unidades de $\hbar\omega$, o raio quadrático médio $\langle r^2 \rangle$ possui unidades de $\hbar/m\omega$ e a densidade central ρ é dada em unidades de $N(m\omega/\hbar)^{3/2}$. Em todos os casos, podemos notar a existência do limite crítico do número de partículas do condensado nesse caso específico ($a < 0$).

O método variacional consiste em se fazer o cálculo da variação de uma determinada quantidade, de modo a minimizá-la. O que fizemos foi aplicar o princípio de minimização da energia com relação à largura da função de onda σ e, por meio dessa minimização, determinar os pontos de máximo e de mínimo do sistema, que define a solução do estado fundamental.

Um outro método que estudamos [34] consiste em um meio mais simples para calcular os observáveis, usando o formalismo variacional. Isolamos o número de partículas n no polinômio (3.6), obtido através da minimização da energia, e traçamos os gráficos dos observáveis, calculados em função desse número de partículas para cada valor de σ , considerado como um parâmetro. Essa técnica nos fornece os mesmos resultados obtidos pelo método variacional descrito anteriormente. Trata-se de um método mais simples e de igual eficácia.

3.1.2 Interações repulsivas

Consideremos um fluido de N bósons regido pela equação

$$\mu\psi = \left[\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \frac{m}{2} \omega^2 r^2 + N\lambda_2 |\psi|^2 \right] \psi , \quad (3.16)$$

onde $\psi \equiv \psi(\vec{r})$ e ψ é normalizada a 1. Esta expressão representa uma equação de campo médio com uma interação de dois corpos. Agora, temos $\lambda_2 > 0$, e o sistema apresenta interações de dois corpos repulsivas.

Como no caso onde o sistema apresentava interações atrativas, calculamos uma função de onda aproximada para o estado condensado e observáveis correspondentes, usando o formalismo variacional. Em seguida, calculamos a energia E do sistema. Aplicamos o princípio de minimização da energia com relação à largura da função de onda, obtendo o polinômio

$$\sigma_0^5 - \sigma_0 - \frac{n}{2\sqrt{\pi}} = 0 . \quad (3.17)$$

Por meio desta análise, pode-se determinar também outros observáveis como o potencial químico, a densidade central e a frequência de oscilação coletiva em torno do ponto σ_0 . Nesse caso repulsivo, a expressão para μ é

$$\mu = \hbar\omega \left[\frac{3}{4} \left(\sigma_0^2 + \frac{1}{\sigma_0^2} \right) + \frac{n}{2\sqrt{\pi}\sigma_0^3} \right], \quad (3.18)$$

para a densidade central é

$$\rho_c = N \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{3/2} \frac{1}{\sigma_0^3}, \quad (3.19)$$

e para o raio quadrático médio é

$$\langle r^2 \rangle = \frac{\hbar}{m\omega} \left(\frac{3\sigma^2}{2} \right). \quad (3.20)$$

Na figura 3.5, temos o comportamento do potencial químico μ , dado em unidades de $\hbar\omega$.

3.2 Cálculo numérico

3.2.1 Interações atrativas

Potencial harmônico

Nas Refs. [30, 35], os autores utilizaram uma combinação dos métodos de chute (“shooting”) e de Runge-Kutta para obter as correspondentes soluções estacionárias de (2.41). A atribuição de estabilidade foi feita estudando a correspondente equação de Schrödinger dependente do tempo, usando o método de Crank-Nicolson, como na Ref. [36]. A seguir, descrevemos os resultados numéricos exatos obtidos por meio desse método citado [30, 35].

Na figura 3.6, apresentamos o potencial químico adimensional β como função de n . O cálculo concorda com o resultado apresentado na Ref. [28], com o número máximo de átomos limitado a $n_c \approx 1,62$ *.

Na figura 3.7, traçamos também o gráfico da densidade central ρ_c como uma função do número reduzido n . Confirmam-se as conclusões obtidas do gráfico do potencial químico quanto aos setores de estabilidade.

Todos os resultados encontrados via variacional têm qualitativamente a mesma forma dos resultados exatos mostrados nas figuras dessa seção; diferenças quantitativas podem ser observadas, por exemplo, através do gráfico da energia, em que os cálculos variacionais fornecem resultados maiores do que os exatos.

*O parâmetro n é igual ao $|C_{nl}^{3D}|$ da Ref. [28].

Potencial anarmônico

A ESNL que descreve um problema quântico de muitos corpos para um gás muito diluído, em simetria esférica e potencial confinante anarmônico [37], no caso de uma interação de dois corpos atrativa, tem a seguinte forma:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 + V_{an}(r) - \frac{4\pi\hbar^2 |a|}{m} |\psi(\vec{r}, t)|^2 \right) \psi(\vec{r}, t), \quad (3.21)$$

sendo $\psi(\vec{r}, t)$ a função de onda e V_{an} o potencial de aprisionamento. a é o comprimento de espalhamento da interação de dois corpos na onda s e m a massa do átomo aprisionado. A função de onda $\psi(\vec{r}, t) \equiv \psi$ é normalizada ao número de partículas N :

$$\int |\psi|^2 d^3\vec{r} = N. \quad (3.22)$$

No caso específico de potenciais anarmônicos do tipo lei de potências, em simetria esférica, nós podemos escrever o potencial de aprisionamento como:

$$V_{an}(r) = \frac{\hbar\omega}{4} \left(\frac{\sqrt{2}r}{l_0} \right)^\alpha, \quad (3.23)$$

sendo $l_0 \equiv \sqrt{\hbar/(m\omega)}$ definido como unidade de comprimento. Para $\alpha = 2$, nós temos o potencial do oscilador harmônico tridimensional, sendo ω a média geométrica das frequências no espaço tridimensional ($\omega^3 \equiv \omega_1\omega_2\omega_3$). As soluções estacionárias da equação (3.21) em função do potencial químico μ podem ser obtidas supondo $\psi(\vec{r}, t) = e^{-i\mu t/\hbar} \varphi$, de forma que se obtém a equação

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 + V_{an}(r) - \frac{4\pi\hbar^2 |a|}{m} |\varphi(\vec{r})|^2 \right) \varphi(\vec{r}) = \mu \varphi(\vec{r}). \quad (3.24)$$

A armadilha é esféricamente simétrica e nós estamos interessados nas soluções no estado fundamental. Assim, na equação (3.24), nós assumimos o sistema na onda- s , e redefinimos a função de onda, a variável r e o potencial químico como

$$\phi(x) \equiv \sqrt{8\pi |a|} r \varphi(\vec{r}), \quad x \equiv \frac{\sqrt{2}}{l_0} r, \quad \beta = \frac{\mu}{\hbar\omega}. \quad (3.25)$$

Usando as relações (3.25) na equação (3.24), obtemos

$$\beta \phi(x) = -\frac{d^2 \phi(x)}{dx^2} + \frac{x^\alpha}{4} \phi(x) - \frac{|\phi(x)|^2}{x^2} \phi(x). \quad (3.26)$$

Como $\varphi(\vec{r})$ é normalizada a N , a partir de (3.25) nós obtemos normalização correspondente a $\phi(x)$:

$$\int_0^\infty dx |\phi(x)|^2 = 2\sqrt{2} \frac{N |a|}{l_0}. \quad (3.27)$$

Sejam as condições de contorno de (3.26), $\phi(0) = 0$ e $\phi(x \rightarrow \infty) = 0$. A energia total do sistema é dada por

$$E_{tot} = \hbar\omega \left(\frac{l_0}{2\sqrt{2}|a|} \right) \epsilon, \quad (3.28)$$

$$\epsilon \equiv \int_0^\infty dx \left[\left| \frac{d\phi(x)}{dx} \right|^2 + \frac{x^\alpha}{4} |\phi(x)|^2 - \frac{|\phi(x)|^2}{2x^2} \right]. \quad (3.29)$$

Nós aplicamos o método de Runge-Kutta de quarta ordem, combinado com o método de chute (“shooting”) para satisfazer as condições de contorno.

Na figura 3.8, nós apresentamos os resultados para o potencial químico μ , dado pelo observável adimensional correspondente β , como uma função do número de átomos. Conforme podemos visualizar no gráfico, o número de partículas aumenta para menores valores de α . Se nós fixamos o número de partículas, observamos que os valores de β são menores para menores valores da força α somente quando a escala do número de partículas, n , não for muito grande. O inverso deste comportamento pode acontecer próximo do limite crítico dos potenciais com maior valor de α . Isto acontece porque os números críticos n_c são menores para maiores valores de α . Para estender a região de estabilidade para um número de partículas maior, nós devemos diminuir significativamente a força do potencial de aprisionamento.

Com base nesses cálculos, fomos capazes de obter o gráfico da variação do número de partículas como função da potência α da armadilha. Essa curva é mostrada na figura (3.9). Nessa figura, podemos constatar que há um aumento significativo no número crítico de partículas à medida em que α diminui. Por exemplo, no caso de confinamento linear temos um aumento de aproximadamente 38% em relação ao caso harmônico.

3.2.2 Interações repulsivas

Como no caso das interações atrativas, utilizamos a combinação dos métodos de chute (“shooting”) e de Runge-Kutta para obter as correspondentes soluções estacionárias.

Nas figuras 3.10, 3.11, 3.12 e 3.13, temos o comportamento dos observáveis. A energia total E é dada em unidades de $N\hbar\omega/n$, o potencial químico μ é dado em unidades de $\hbar\omega$, o raio quadrático médio $\langle r^2 \rangle$ possui unidades de $\hbar/m\omega$ e a densidade central ρ é dada em unidades de $N(m\omega/\hbar)^{3/2}$.

No gráfico 3.10, apresentamos a energia E como função de n . Podemos observar que, no caso de interações repulsivas $a > 0$, não temos a ocorrência de um número crítico de partículas (como aconteceu no caso de interações atrativas).

Na figura 3.11, do potencial químico adimensional β como função de n , na figura 3.12 do raio quadrático médio e na figura 3.13 da densidade central ρ_c , confirmam-se as conclusões obtidas do gráfico da energia, em relação ao número crítico de partículas.

Gráficos do Capítulo

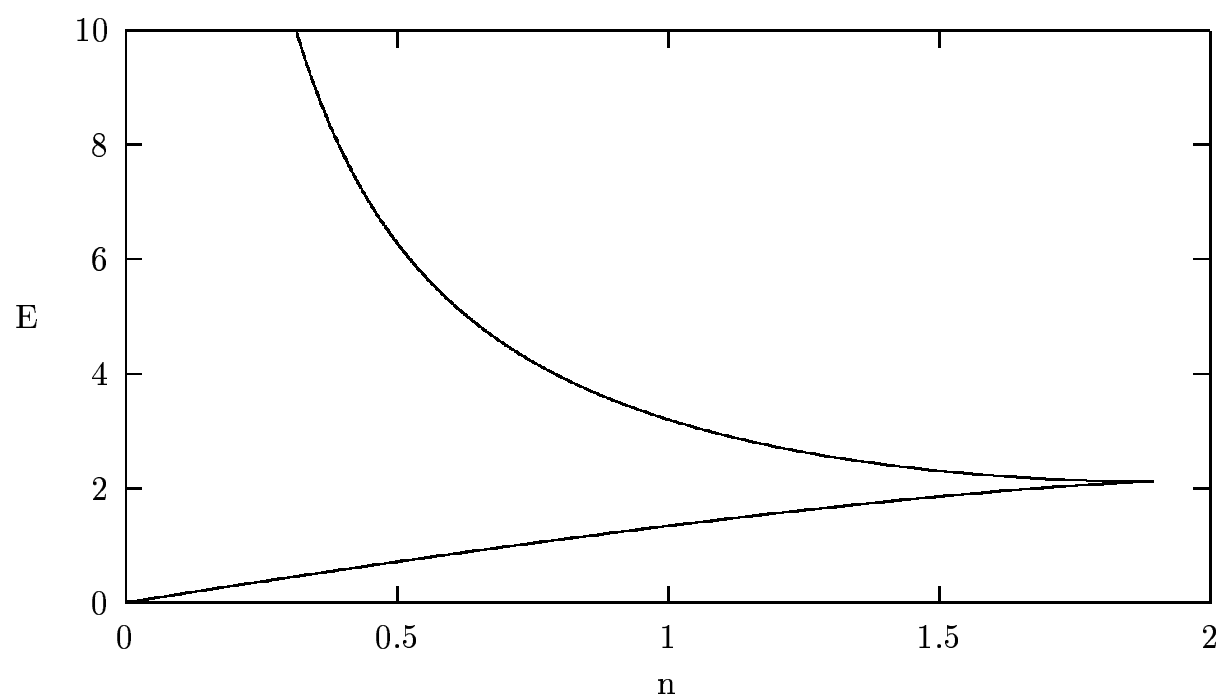


Figura 3.1: Energia obtida para interação atrativa por meio do método variacional. E é dado em unidades de $N\hbar\omega/n$ e n está relacionado ao número de átomos N , conforme a equação (2.44).

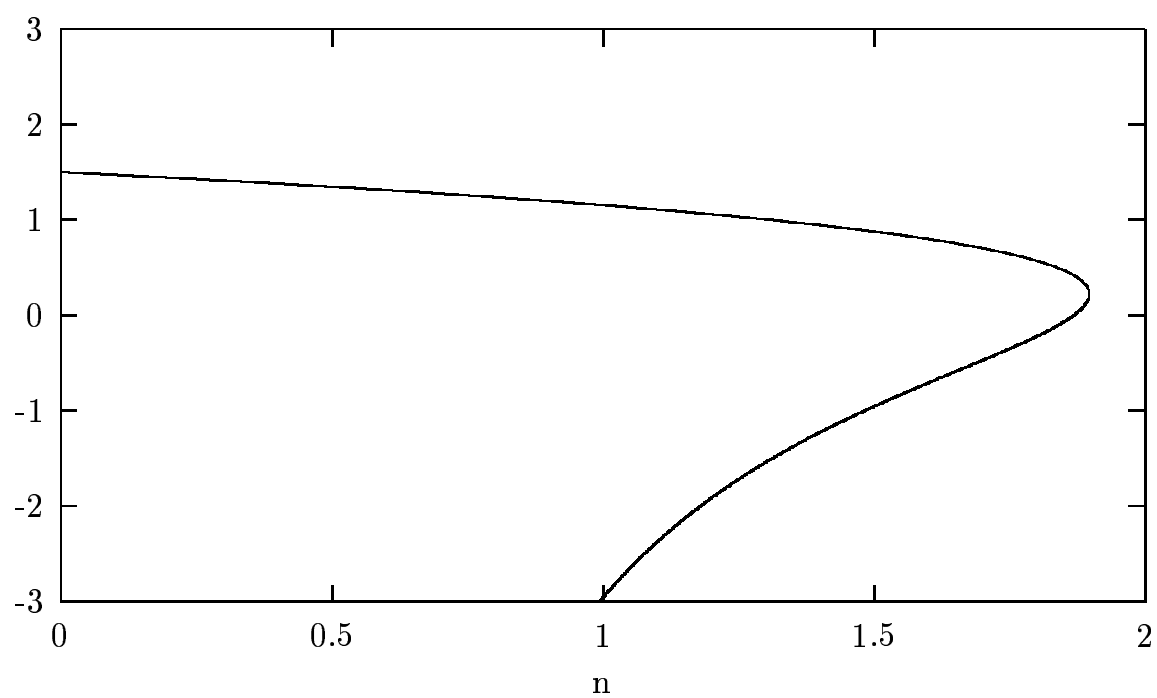


Figura 3.2: O potencial químico, dado pelo observável adimensional correspondente $\beta(= \mu/(\hbar\omega))$, obtida para interação atrativa por meio do método variacional.

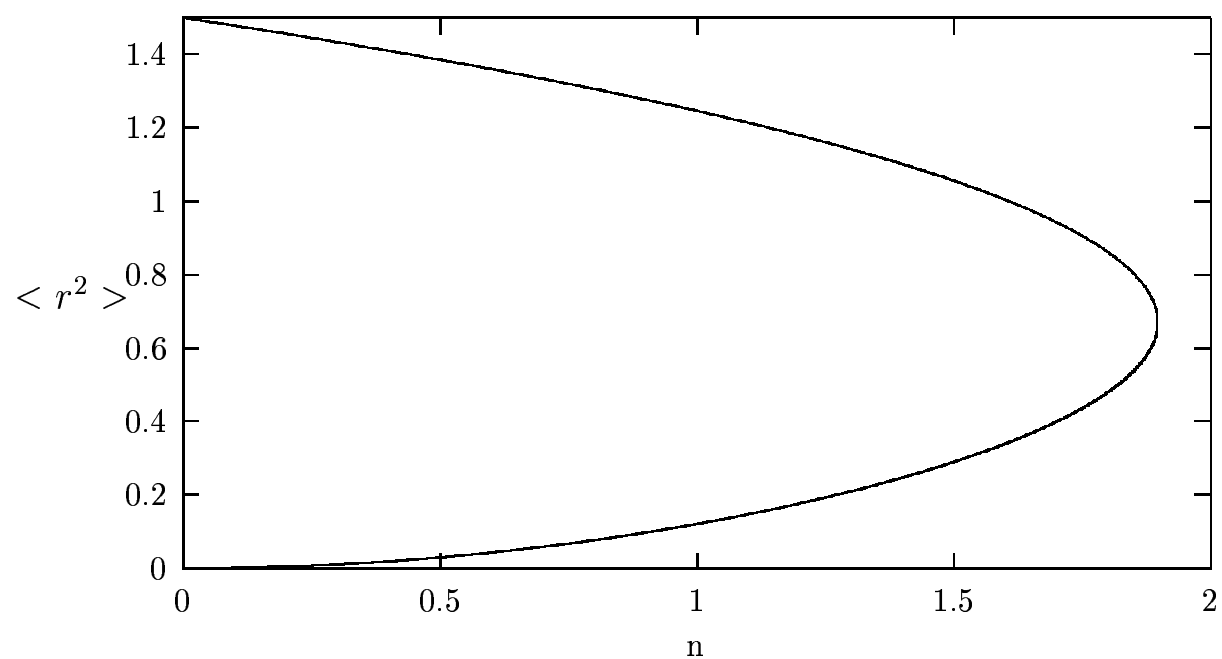


Figura 3.3: Raio quadrático médio obtido para interação atrativa por meio do método variacional. $\langle r^2 \rangle$ em unidades de $\hbar/m\omega$.

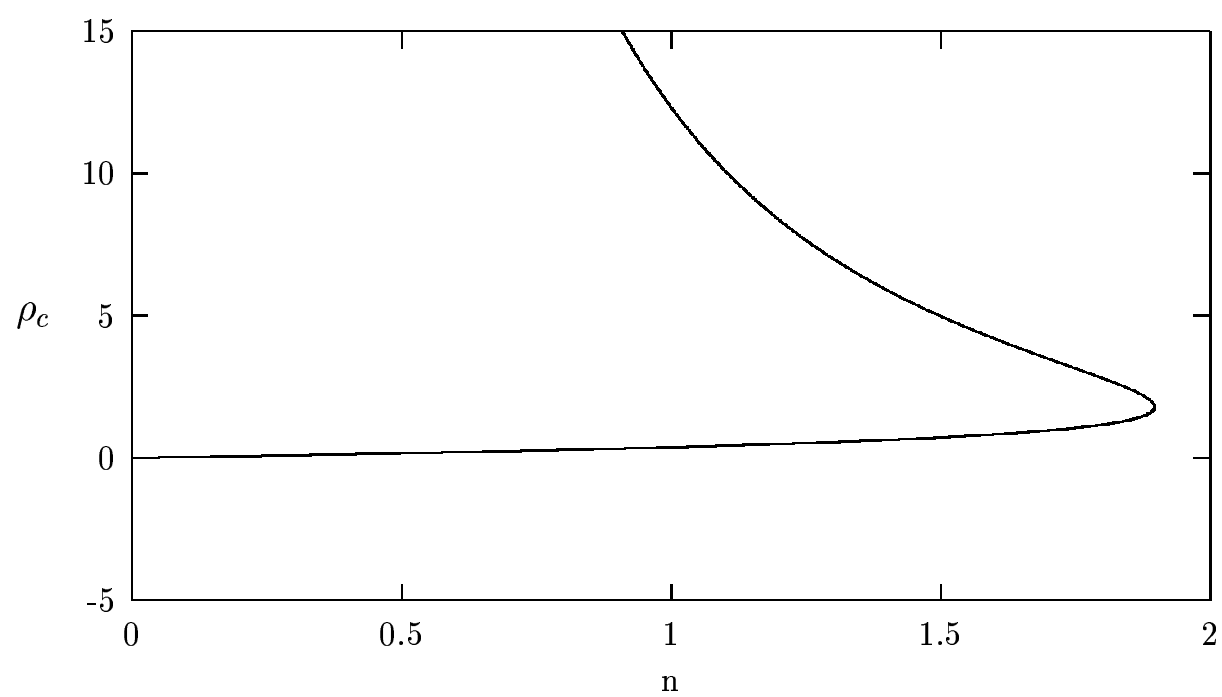


Figura 3.4: Densidade central obtida para interação atrativa por meio do método variacional. ρ é dado em unidades de $N(m\omega/\hbar)^{3/2}$.

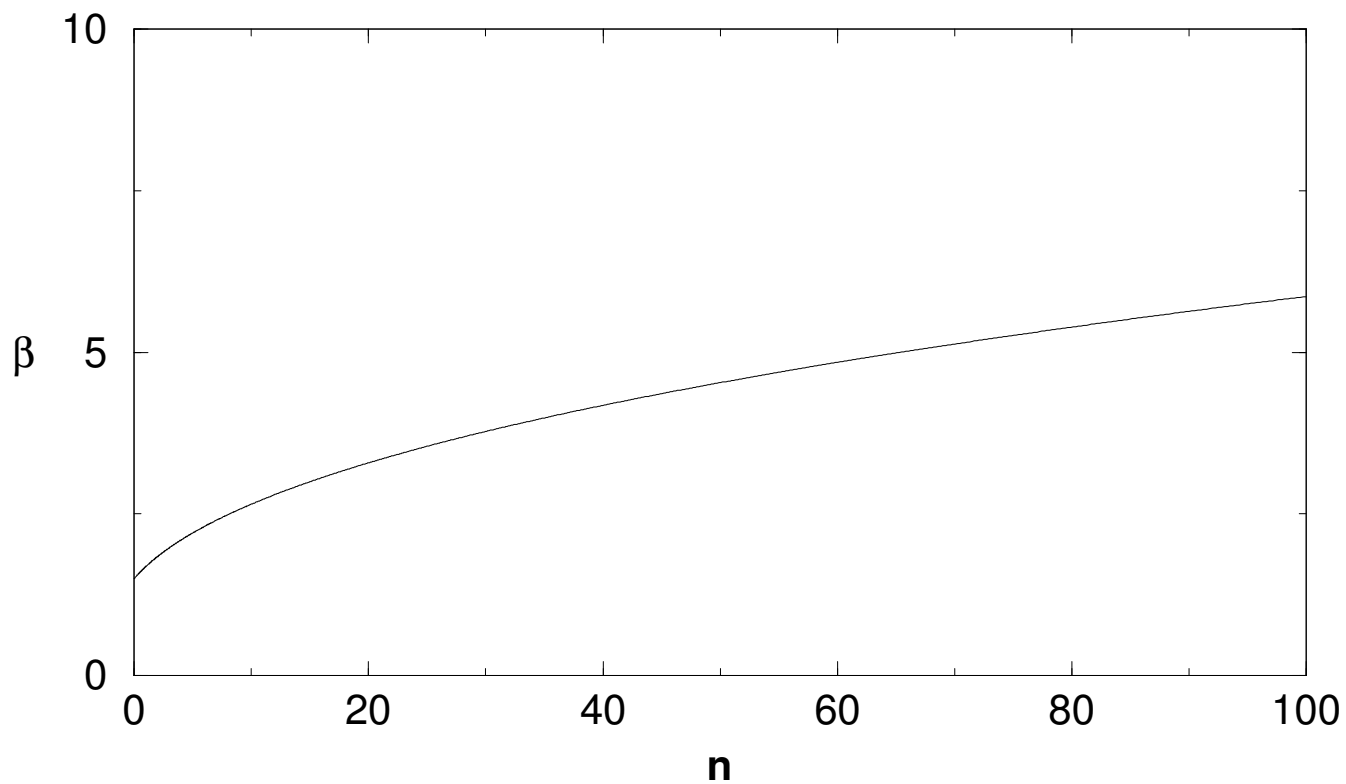


Figura 3.5: O potencial químico, dado pelo observável adimensional correspondente $\beta(= \mu/(\hbar\omega))$, obtida para interação repulsiva por meio do método variacional.

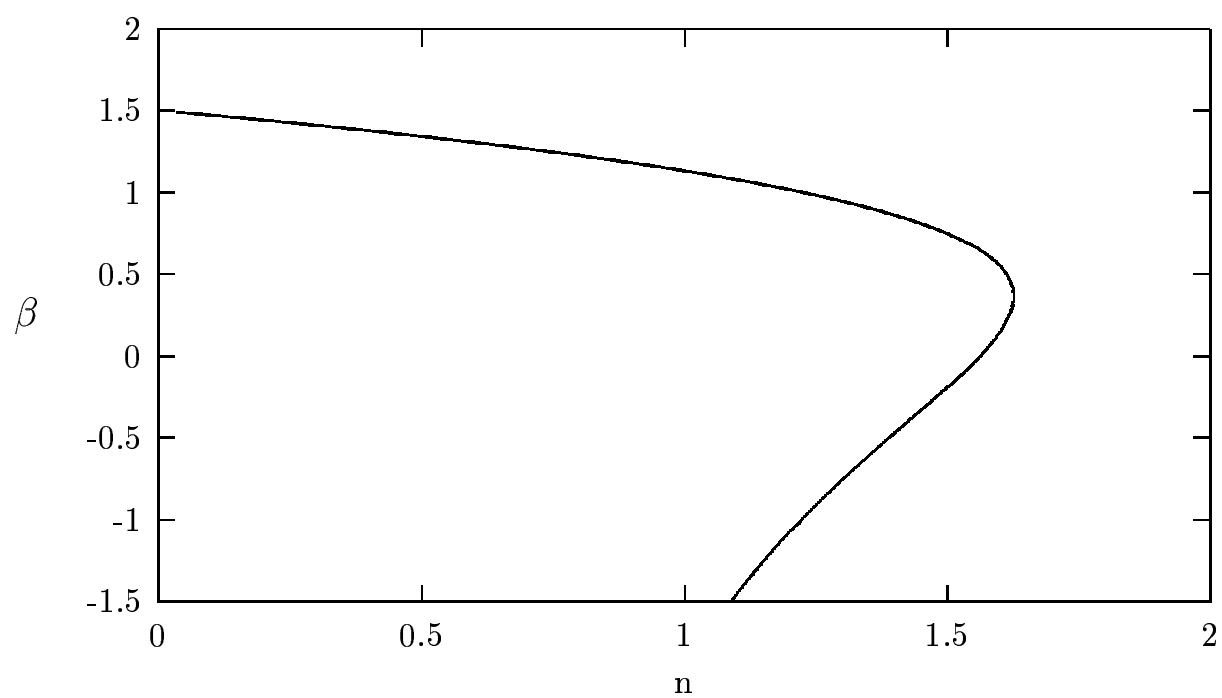


Figura 3.6: O potencial químico, dado pelo observável adimensional correspondente $\beta(= \mu/(\hbar\omega))$, obtido para interação atrativa por meio do cálculo numérico.

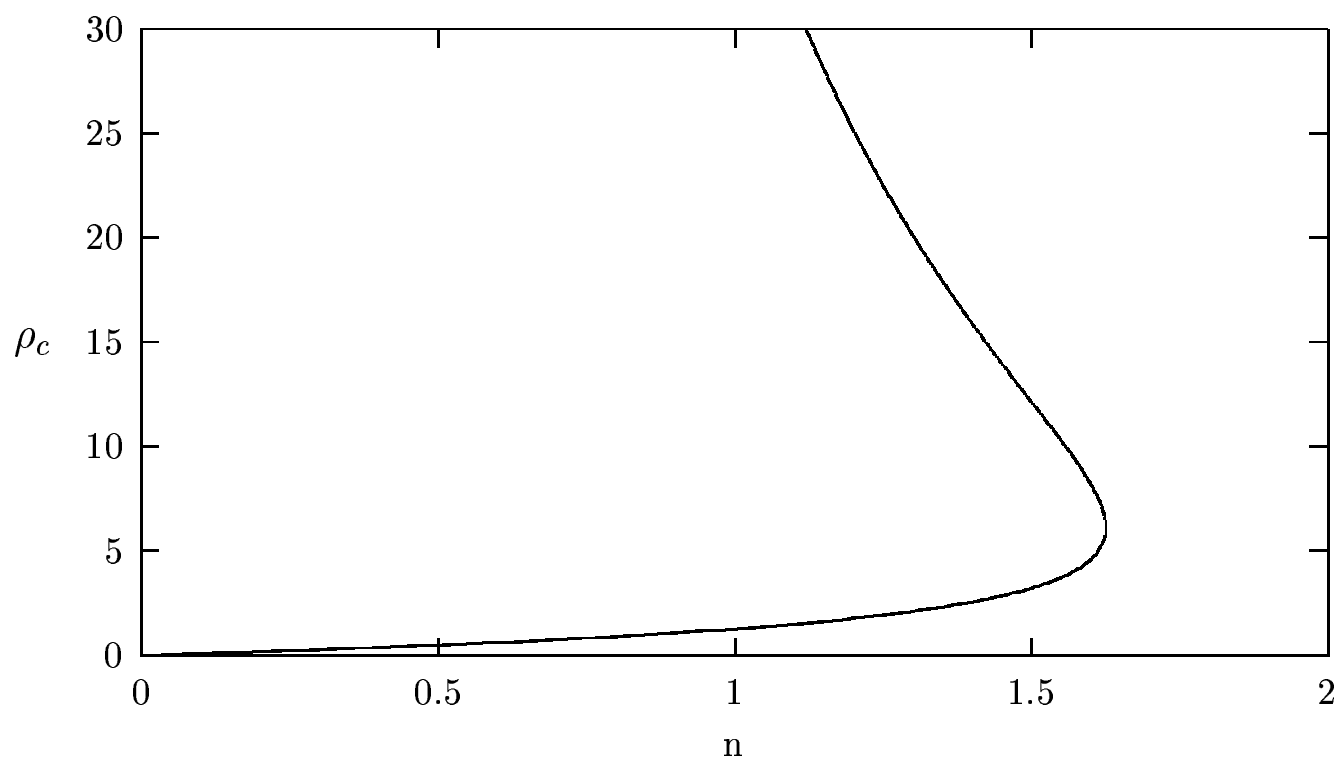


Figura 3.7: Densidade central, dada em unidades $N(m\omega/\pi\hbar)^{3/2}$, como uma função de n . Obtido para interação atrativa por meio do cálculo numérico.

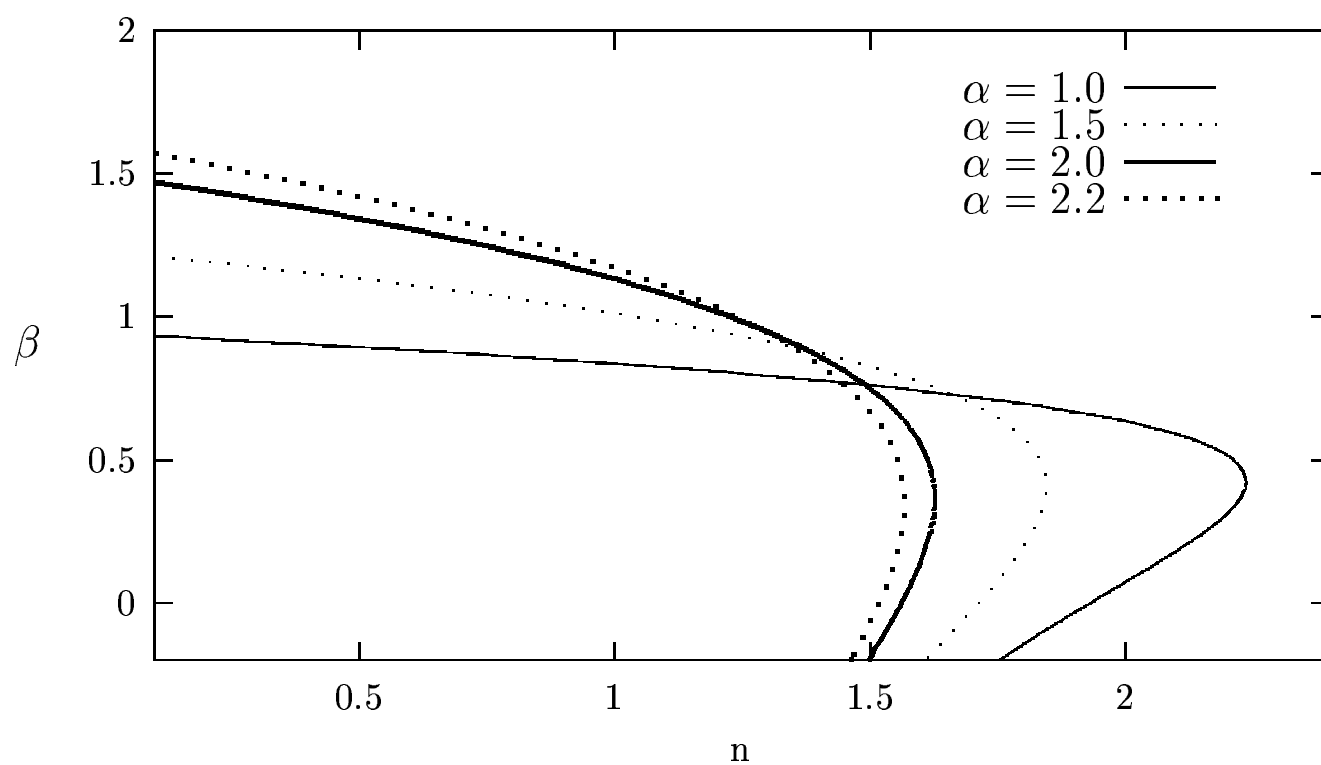


Figura 3.8: O potencial químico, dado pelo observável adimensional correspondente $\beta(= \mu/(\hbar\omega))$, versus n . Os resultados numéricos são mostrados para diferentes potenciais confinantes para interação atrativa, equação (3.23), como indicado na figura.

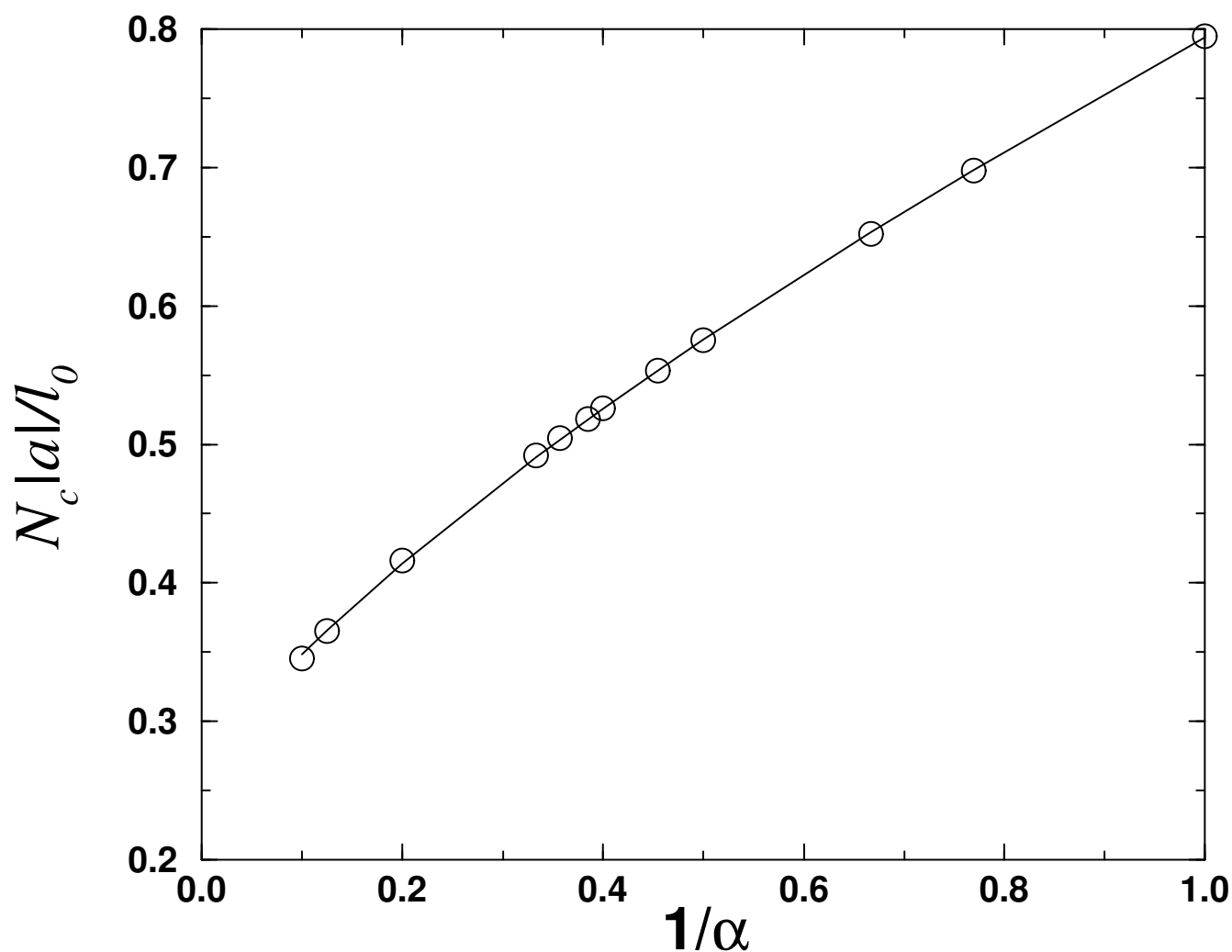


Figura 3.9: Número crítico de partículas N_c , escalonado pelo fator $|a|/l_0$, como função da potência inversa da armadilha, para interação atrativa. A linha sólida interpola os resultados numéricos, representados por círculos.

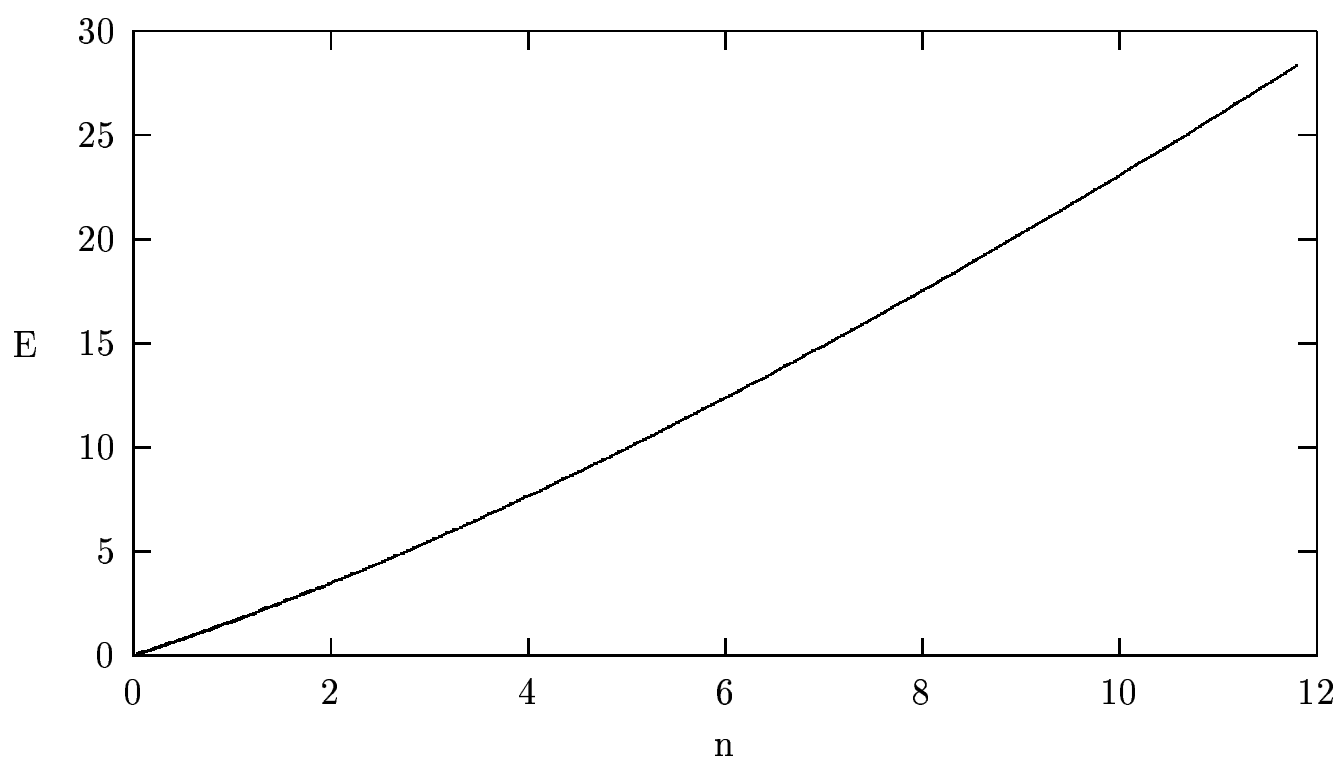


Figura 3.10: Energia obtida para interação repulsiva por meio do método numérico. E é dada em unidades de $N\hbar\omega/n$.

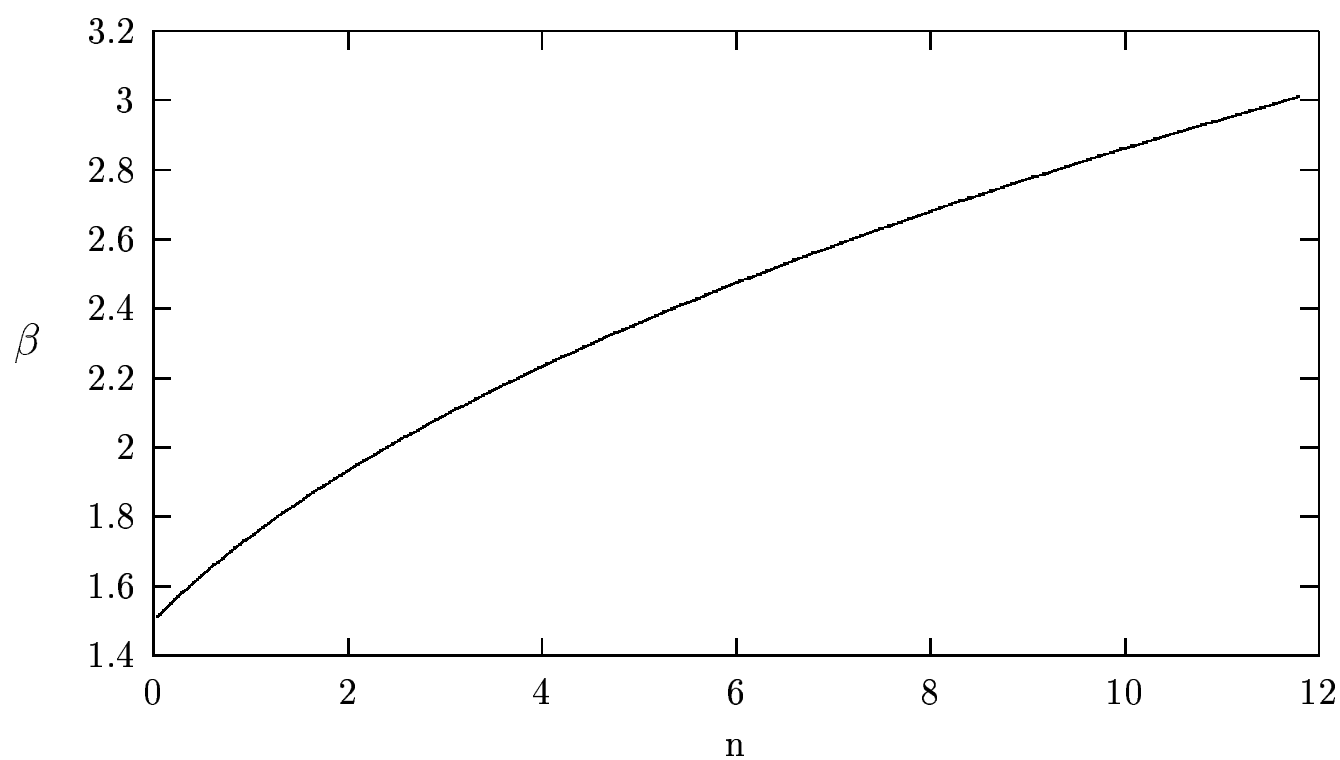


Figura 3.11: O potencial químico, dado pelo observável adimensional correspondente $\beta(= \mu/(\hbar\omega))$, versus n . Para interação repulsiva por meio do método numérico.

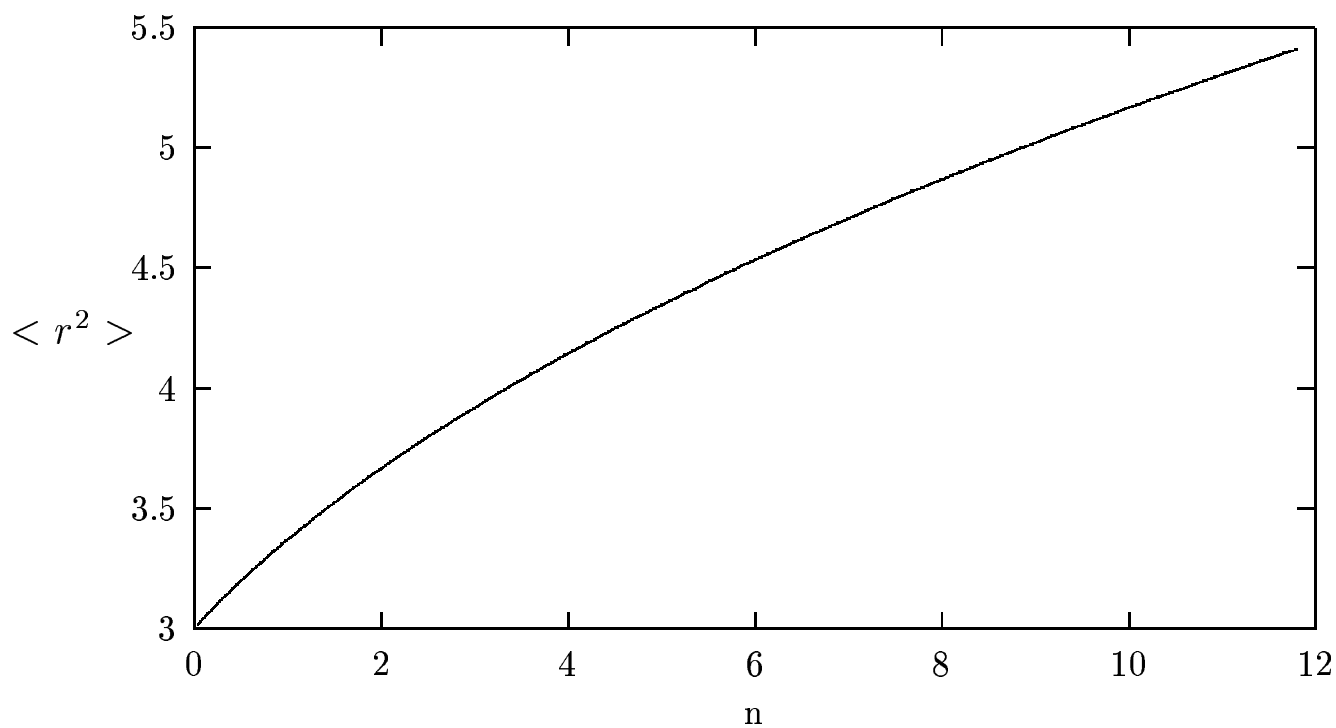


Figura 3.12: Raio quadrático médio obtido para interação repulsiva por meio do método numérico. $\langle r^2 \rangle$ é dado em unidades de $\hbar/m\omega$.

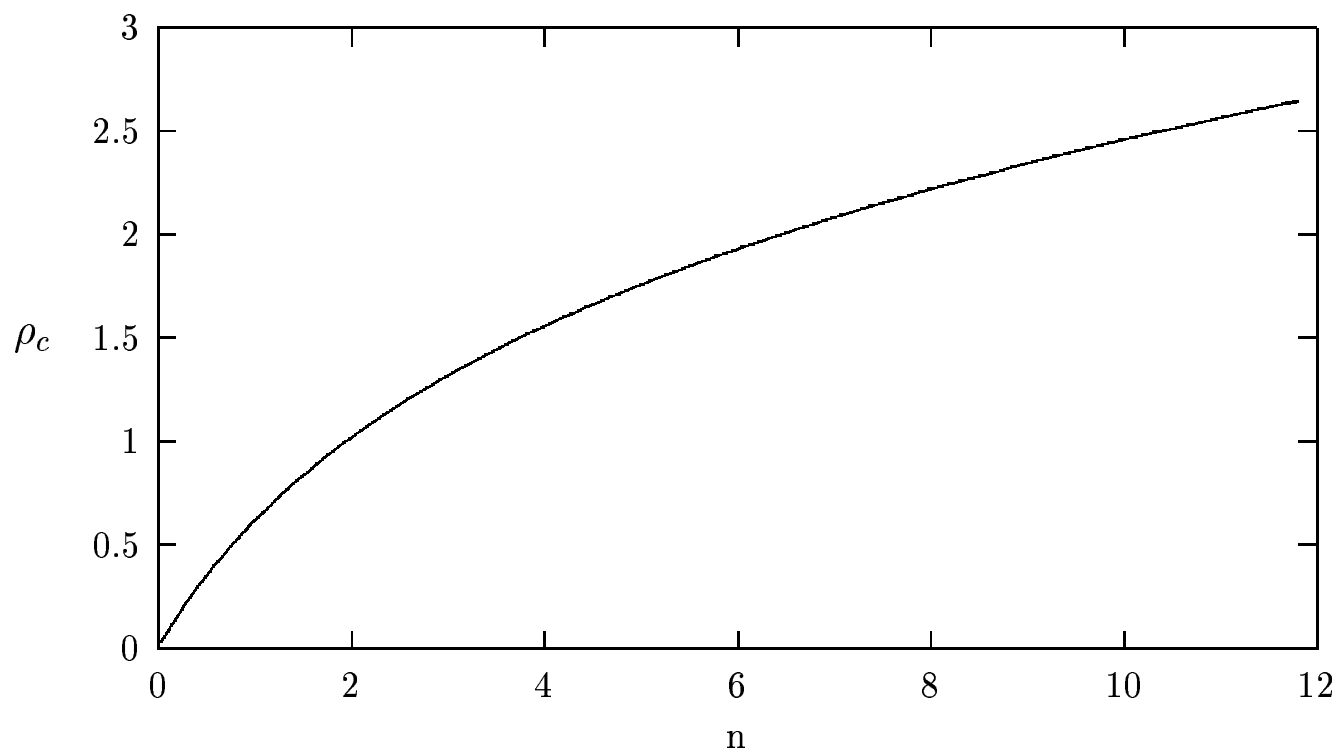


Figura 3.13: Densidade central obtida para interação repulsiva por meio do método numérico. ρ é dado em unidades de $N(m\omega/\hbar)^{3/2}$.

Capítulo 4

Dinâmica de condensados não conservativos

4.1 Introdução

Investigamos a dinâmica da equação de Gross-Pitaevskii com um potencial de aprisionamento, com termos de dissipação e de alimentação atômica aplicada a condensados atômicos de Bose-Einstein com comprimento de espalhamento negativo ($a < 0$) e positivo ($a > 0$). Procuramos fazer um estudo da dinâmica da equação, considerando alguns valores para os parâmetros de dissipação e alimentação. Constatamos os comportamentos na escala de evolução de longo tempo já descritos na literatura [38, 39]. Nessa descrição de condensados de Bose-Einstein, verificamos que o número de átomos pode ultrapassar o limite de estabilidade estático do sistema, para um grande número de combinações desses parâmetros.

Inicialmente, reproduzimos alguns resultados [40] para condensados de ^7Li ; em seguida, analisamos a extensão desse cálculo para a interação repulsiva. Além disso, consideramos também o parâmetro de dissipação atômica por relaxação dipolar (para interação atrativa e repulsiva), com o objetivo de comprovar os possíveis comportamentos dinâmicos que poderiam ser observados em sistemas bosônicos não-conservativos para esse parâmetro. Verificamos os casos de estabilidade das soluções, bem como casos de instabilidade, uma parte dos quais dando origem ao fenômeno de caos espaço-temporal.

4.2 Modelo não-conservativo

A condensação de Bose-Einstein para sistemas atômicos com interações repulsivas de dois corpos ($a > 0$) é favorecida em relação a sistemas com interações de dois corpos atrativas ($a < 0$), já que essas últimas ficam instáveis e colapsam para um número finito de átomos. Apesar disso, tem sido mostrado experimentalmente [11] que a condensação de Bose-Einstein é viável em sistemas atômicos aprisionados, mesmo com interações atrativas, como no caso do ^7Li . Neste caso, conforme previsto numericamente [28], foi observada a ocorrência de um número máximo crítico de átomos (N_c) condensados no nível do estado fundamental; acima deste limite, ocorre o fenômeno de colapso por atração de dois corpos. O colapso é o fenômeno em que o raio quadrático médio do condensado sofre grande redução em um tempo extremamente curto. Perdas por recombinação de três corpos impedem o condensado de colapsar a um ponto. Experimentalmente, constatou-se diretamente o fenômeno de colapso em condensados de ^7Li , como descrito em [41]. Observou-se que, ao se atingir um número crítico de átomos N_c , o sistema sofria uma rápida transição para um estado com número de partículas sensivelmente menor, após a qual se reiniciava o crescimento no número de partículas do sistema, com a repetição de ciclos de colapso e crescimento.

No caso atrativo, o termo cinético é significativo comparado aos termos do potencial efetivo, ao contrário do caso repulsivo em que se pode fazer a aproximação de desprezar o termo cinético.

Estudamos a evolução de um condensado por longos períodos, através da solução numérica da equação de Schrödinger não-linear correspondente, com a mesma parametrização utilizada em [42]. Nosso objetivo era o de verificar os possíveis comportamentos existentes nestes sistemas, tais como esse fenômeno interessante do colapso.

É sabido também que sistemas com dinâmica complexa podem apresentar comportamentos caóticos para alguma escala apropriada de parâmetros. Em particular, deve-se notar que a transição de uma dinâmica complexa ao caos foi anteriormente considerada na equação de Schrödinger não-linear dependente do tempo nas Refs. [43, 27, 44]. Deissler e Kaneko, na Ref. [27, 44], desenvolveram um critério útil e conveniente para diagnosticar caos espaço-temporal na equação de Schrödinger não-linear, que usamos nesse trabalho para verificar a existência de caos espaço-temporal em nossos estudos.

Descrevemos a seguir o modelo não-conservativo ou a equação de Gross-Pitaevskii generalizada, proposta por Kagan *et al.*, para analisar a evolução temporal de um condensado realístico de Bose-Einstein de átomos com interação atrativas, perdas e ganhos atômicos.

A equação de Gross-Pitaevskii pode ser generalizada para incluir termos não-conservativos (coeficientes imaginários puros) ou, alternativamente, podemos considerar a equação de Ginzburg-Landau 3D com um potencial confinante harmônico esférico e atribuir números complexos aos parâmetros a , c e d em (2.34). Em ambos os casos, obtém-se a equação que pode descrever um condensado de Bose-Einstein em uma armadilha magnética, a equação de Gross-Pitaevskii generalizada ou não-conservativa (EGPG), dada por

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + \frac{m\omega^2 r^2}{2} + \frac{4\pi\hbar^2 a}{m} |\Psi|^2 + iG_\gamma - iG_\mu |\Psi|^2 - iG_\xi |\Psi|^4 \right] \Psi, \quad (4.1)$$

sendo $\Psi = \Psi(\vec{r}, t)$, G_ξ é o parâmetro de dissipação de átomos do sistema por colisões inelásticas de três corpos, G_μ é o parâmetro de dissipação atômica do sistema por colisões inelásticas de dois corpos, G_γ é um parâmetro relacionado à alimentação do condensado por átomos provenientes da nuvem térmica externa, a é o comprimento de espalhamento de dois corpos, que caracteriza a intensidade da interação de dois corpos e m é a massa de um átomo do sistema condensado. A função de onda do condensado $\Psi(\vec{r}, t)$ na equação (4.1) é normalizada ao número total de átomos $N(t)$:

$$\int d^3r |\Psi(\vec{r}, t)|^2 = N(t) . \quad (4.2)$$

Com os termos não-conservativos, esse número de átomos não mais se conserva. Em nossos estudos neste capítulo, temos como efeitos não-conservativos o caso de dissipação atômica por relaxação dipolar (parametrizado por G_μ), o decréscimo na densidade devido à recombinação de três corpos (parametrizado por G_ξ) e a alimentação atômica do condensado pela nuvem térmica externa (parametrizada por G_γ). A equação de Gross-Pitaevskii generalizada é válida e é obtida na aproximação de campo médio para o problema quântico de muitos corpos de um gás diluído em que a distância média interpartículas é muito maior que o valor absoluto do comprimento de espalhamento e sua validade é também restrita aos casos de comprimentos de onda muito maiores que a distância média interpartículas.

A EGP nos fornece soluções estáveis para sistemas com comprimento de espalhamento positivo; assim, ela pode descrever, por exemplo, a condensação com ^{87}Rb , ^{23}Na ou ^1H [7, 8, 10]. No caso atrativo, a EGP pode descrever condensados quando o sistema possui um número de partículas inferior ao crítico (por exemplo, a condensação de ^7Li [9, 11]). Em ambos os casos, podem ocorrer colisões inelásticas que levam ao esgotamento do condensado e é esse efeito dinâmico que visamos descrever por meio da equação (4.1) [42, 45].

A equação (4.1) foi proposta em [42] por Kagan *et al.* para descrever os resultados experimentais, obtidos na Universidade de Rice pelo grupo de Hulet [9, 11], para condensados de ^7Li .

A fim de reconhecer facilmente as escalas físicas existentes na equação (4.1) e facilitar os nossos cálculos, é conveniente a utilização de quantidades adimensionais.

No presente caso, em que temos simetria esférica, podemos substituir o módulo do raio físico $|\vec{r}|$ e o tempo t pelos adimensionais correspondentes

$$x \equiv \sqrt{2m\omega/\hbar}|\vec{r}|, \quad \tau \equiv \omega t, \quad (4.3)$$

onde x e τ são, respectivamente, o raio e o tempo adimensionais e ω é a frequência da armadilha harmônica.

A função de onda física $\Psi(\vec{r}, t)$ pode ser redefinida em forma adimensional como

$$\Phi(x, \tau) \equiv \sqrt{8\pi|a|}|\vec{r}| \Psi(\vec{r}, t). \quad (4.4)$$

Os parâmetros de amplificação G_γ e de dissipação G_ξ e G_μ são redefinidos em forma adimensional por

$$\gamma = G_\gamma \frac{2}{\hbar\omega}, \quad (4.5)$$

$$\xi = G_\xi \frac{\hbar\omega}{2} \left[\frac{m}{4\pi\hbar^2 a} \right]^2, \quad (4.6)$$

$$\mu = G_\mu \frac{2m}{\hbar^2 \sqrt{8\pi|a|}}. \quad (4.7)$$

Com essas transformações, obtemos a equação generalizada de Gross-Pitaevskii na onda s adimensional

$$i \frac{\partial \Phi}{\partial \tau} = \left[-\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{4}x^2 - \frac{|\Phi|^2}{x^2} - i\mu \frac{|\Phi|^2}{x^2} - 2i\xi \frac{|\Phi|^4}{x^4} + i\frac{\gamma}{2} \right] \Phi. \quad (4.8)$$

Com as transformações (4.3) a (4.7), a função de onda adimensional $\Phi(x, \tau)$ é normalizada ao número reduzido de átomos, definido por

$$n(\tau) \equiv 2N(t)|a|\sqrt{2m\omega/\hbar}, \quad (4.9)$$

ou seja, temos a condição de normalização

$$\int_0^\infty dx |\Phi(x, \tau)|^2 = n(\tau). \quad (4.10)$$

Nossos estudos tiveram por objetivo verificar a estabilidade da EGPG com $a < 0$ e $a > 0$, seja pelo método numérico exato ou pelo variacional dinâmico.

4.2.1 Caracterização das dinâmicas

Resolvemos a EGPG para alguns valores dos parâmetros (γ, ξ) , (γ, ξ, μ) e verificamos casos de estabilidade (sólitons), instabilidades e caos espaço-temporal. Verificamos a

existência de ciclos de crescimento e colapso do condensado para sistemas atômicos com interações átomo-átomo atrativas, como em [38, 39, 42], e determinamos na escala analisada quando uma dinâmica de colapsos aparece e quando ela não está presente. Para caracterizar o comportamento caótico da equação (4.8) para um dado conjunto de valores dos parâmetros, calculamos o equivalente do maior expoente de Lyapunov das equações diferenciais ordinárias, como dado em [27, 44]. Para obter o expoente de Lyapunov estendido, devemos traçar o gráfico do logaritmo da separação entre dois estados muito próximos como uma função do tempo, ou seja, o logaritmo da função

$$\zeta(\tau) = \left(\int_0^L |\delta\Phi(x, \tau)|^2 dx \right)^{1/2}. \quad (4.11)$$

A inclinação média do logaritmo de ζ em função de τ nos dá o maior expoente de Lyapunov estendido [27, 44] em um período de tempo arbitrário. O comportamento caótico de um dado sistema é caracterizado por uma inclinação positiva dessa função.

4.3 Cálculo variacional dinâmico

Nesta seção, examinamos um dos possíveis comportamentos dinâmicos dos condensados: a possibilidade de existência de sólitons do tipo Pereira-Stenflo - também conhecidos por autosólitons ou sólitons dissipativos - na equação de Gross-Pitaevskii generalizada. Para tal, introduzimos o cálculo variacional dinâmico.

Os autosólitons podem ser diferenciados dos sólitons ordinários. Os sólitons ordinários existem em meio conservativo e sua origem está ligada ao balanço entre efeitos dispersivos e efeitos não-lineares na propagação da onda em meio dispersivo não-linear. As propriedades dos sólitons gerados são definidas pelas condições iniciais (o número deles e parâmetros dos sólitons como amplitudes, larguras, etc.) [46]. As soluções são caracterizadas pela família de parâmetros. Autosólitons, por outro lado, são formados em meio não-conservativo quando existem os efeitos de amplificação e dissipação no meio. Para a existência de autosólitons, junto com a condição de equilíbrio entre dispersão e não-linearidade, deve-se acrescentar a exigência de equilíbrio entre amplificação, amortecimento dependente da frequência e dissipação não-linear. Como distinção dos sólitons usuais, os parâmetros dos autosólitons, em regra, são fixados pelos coeficientes da equação de Schrödinger não-linear e quaisquer perturbações iniciais atraem as soluções a um ponto fixo do sistema (atrator no espaço de coeficientes).

A existência de autosólitons em uma dimensão em um meio não-linear homogêneo com dissipação e amplificação foi demonstrada por Pereira e Stenflo para o caso de plasmas [47]. Mais tarde, a existência de autosólitons foi verificada experimentalmente em: (1)

óptica de fibras não-lineares [48, 49], no caso de fibras com amplificadores e de filtros distribuídos (essa última verificação corresponde ao caso de amortecimento dependente da frequência na equação de Schrödinger não-linear) e em (2) ondas na superfície da água em reservatórios com grande profundidade [50] (caso com amortecimento não-linear). A existência do análogo bidimensional dos sólitons de Pereira-Stenflo [51] em meios homogêneos 2D com amortecimento não-linear e amplificação foi considerada recentemente através da abordagem variacional. A ocorrência do análogo dos autosólitons na equação em 3D que descreve o condensado de Bose-Einstein com potencial de aprisionamento externo é possível, conforme mostraremos a seguir.

As simulações numéricas da equação de Gross-Pitaevskii generalizada executadas em [38, 39, 42] mostram que existem oscilações periódicas do condensado e, para certas escolhas dos parâmetros de alimentação atômica e dissipação por recombinação de três corpos, existe o estado estável da nuvem atômica. Assim, nós podemos esperar a existência do análogo de autosólitons em condensados de Bose-Einstein 2D e 3D. O problema é descrito pela equação de Gross-Pitaevskii não-conservativa no limite de pequenas perturbações.

Usaremos a abordagem variacional dependente do tempo para comprovar tais soluções. Como mostrado na Ref. [52], a abordagem variacional dependente do tempo é efetiva para estudar a dinâmica do condensado de Bose-Einstein 3D com um potencial de aprisionamento e perturbações conservativas.

As previsões analíticas são confirmadas pela solução numérica exata dessa equação de Schrödinger não-linear com amplificação linear e termos dissipativos não-lineares.

4.3.1 Sólitons de Pereira-Stenflo

Pereira e Stenflo analisaram um tipo de ESNL à qual acrescentaram o termo $i\gamma_0\Psi + i\gamma_2(\partial^2\Psi/\partial x^2)$, que corresponde a uma razão de crescimento linear $\gamma_0 - \gamma_2 k^2$ para a função Ψ com número de onda k . Adicionaram um termo referente a um amortecimento não-linear (dependente da amplitude), $-i\gamma_n |\Psi|^2 \Psi$, para levar em conta dissipações que poderiam ser causadas por colisões entre partículas confinadas em armadilhas. Para coeficientes γ positivos, a equação não-linear de Schrödinger pode ser escrita na forma

$$i\frac{\partial\Psi}{\partial t} - i\gamma_0\Psi + (1 - i\gamma_2)\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + (1 + i\gamma_n) |\Psi|^2 \Psi = 0 . \quad (4.12)$$

Uma solução exata, em equilíbrio, para a equação (4.12), que pode ser verificada por substituição direta, é dada por

$$\Psi(x, t) = \sqrt{2}A [\operatorname{sech}(Kx)]^{1+i\alpha} \exp(-i\Omega t) , \quad (4.13)$$

sendo A a amplitude e Ω o deslocamento não-linear da frequência. Substituindo (4.13) em (4.12), temos

$$\alpha = -\beta + \sqrt{2 + \beta^2} , \quad (4.14)$$

$$\beta = \frac{3}{2} \left[(1 - \gamma_2 \gamma_n) (\gamma_2 + \gamma_n)^{-1} \right] . \quad (4.15)$$

Expandindo até primeira ordem nas constantes γ de amortecimento e de crescimento, temos

$$\alpha \cong \frac{1}{\beta} \cong \frac{2}{3} (\gamma_2 + \gamma_n) . \quad (4.16)$$

O inverso da largura ao quadrado é dado por

$$K^2 = \frac{\gamma_0}{2\alpha - \gamma_2 + \alpha^2 \gamma_2} \quad (4.17)$$

ou

$$K^2 = K_e^2 \left(1 + \frac{\alpha}{3} \frac{2\alpha\gamma_n - \alpha\gamma_2 - 6\gamma_2\gamma_n}{2\alpha - \gamma_2 + \alpha^2\gamma_2} \right) , \quad (4.18)$$

sendo K_e o valor de equilíbrio entre crescimento e amortecimento ($dK/dt = 0$), que ocorre quando:

$$K^2 = K_e^2 = \frac{3\gamma_0}{\gamma_2 + 4\gamma_n} . \quad (4.19)$$

Nesse caso, a estimativa de K^2 para a condição de equilíbrio, dada pela equação (4.19), fica correta até primeira ordem, mas pode ser maior ou menor do que K_e^2 para valores reais de K até segunda ordem.

A amplitude A é dada por

$$A^2 = K^2 \left(1 + \frac{3}{2} \alpha \gamma_2 - \frac{1}{2} \alpha^2 \right) , \quad (4.20)$$

enquanto que Ω é dado por

$$\Omega = -K^2 (1 + 2\alpha\gamma_2 - \alpha^2) . \quad (4.21)$$

4.3.2 Método Variacional Dependente do Tempo

Nessa seção, vamos estudar a equação de Gross-Pitaevskii generalizada em 3D por meio do método variacional dependente do tempo. A dinâmica da função de onda do condensado pode ser descrita na aproximação de campo médio pela equação (4.1). Podemos escrever a equação para a função de onda $u(\vec{r}, t)$ na seguinte forma [†]

$$i \frac{\partial u}{\partial t} + \nabla^2 u - r^2 u + \lambda_2 |u|^2 u + \lambda_3 |u|^4 u = i\gamma u - i\mu |u|^2 u - i\xi |u|^4 u \equiv R(u, u^*) , \quad (4.22)$$

[†]Essa equação difere da equação (4.1) da seção anterior pela escala de tempo que é o dobro da usada anteriormente.

onde r é dado em unidades $\sqrt{\hbar/(m\omega)}$ e o tempo t em unidades $2/\omega$, sendo ω a frequência do oscilador. Os coeficientes λ_2 e λ_3 explicitam os parâmetros de interação de dois e três corpos; $\gamma > 0$, $\mu > 0$ e $\xi > 0$ são, respectivamente, os coeficientes de alimentação, de relaxação dipolar e de recombinação inelástica de três corpos.

Usamos como solução de (4.22) a função tentativa na forma gaussiana

$$u(\vec{r}, t) = A(t) \exp \left[-\frac{r^2}{2a^2(t)} + i\frac{b(t)r^2}{2} + i\phi(t) \right] , \quad (4.23)$$

onde A , a , b e ϕ são parâmetros variacionais dependentes do tempo que correspondem, respectivamente, à amplitude, à largura, à distorção de fase e a uma fase linear. Não incluímos as coordenadas do centro no ansatz porque os termos de amplificação e dissipação não são influenciados por ele. O caso rotacionalmente simétrico é considerado.

O método variacional é aplicado à Lagrangiana do sistema conservativo

$$L(t) = \int \mathcal{L}(r, t) d^3r , \quad (4.24)$$

onde a densidade Lagrangiana $\mathcal{L}(r, t)$ é dada por

$$\mathcal{L} = \frac{i}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial t} u^* - \frac{\partial u^*}{\partial t} u \right) - |\nabla u|^2 + \frac{\lambda_2}{2} |u|^4 + \frac{\lambda_3}{3} |u|^6 - r^2 |u|^2 . \quad (4.25)$$

Substituindo a função tentativa (4.23) nas equações (4.25) e (4.24), encontramos a Lagrangiana em termos dos parâmetros da função de onda do condensado

$$\begin{aligned} L(t) = & -\frac{3}{4} \pi^{3/2} A^2 a^5 \frac{db}{dt} - \pi^{3/2} A^2 a^3 \frac{d\phi}{dt} - \frac{3\pi^{3/2}}{2} A^2 a^5 \left(\frac{1}{a^4} + b^2 \right) \\ & + \frac{\pi^{3/2}}{4\sqrt{2}} \lambda_2 A^4 a^3 + \frac{\pi^{3/2}}{3^{5/2}} \lambda_3 A^6 a^3 - \frac{3\pi^{3/2}}{2} A^2 a^5 . \end{aligned} \quad (4.26)$$

Para levar em conta formalmente a parte não-conservativa da equação (4.22), vamos adicionar um termo \mathcal{L}_R à equação (4.25), onde \mathcal{L}_R satisfaz a expressão

$$\frac{\delta \mathcal{L}_R}{\delta u^*} = -R(u, u^*) , \quad (4.27)$$

sendo R dado pelo lado direito de (4.22), ou seja,

$$R(u, u^*) = i\gamma u - i\mu |u|^2 u - i\xi |u|^4 u . \quad (4.28)$$

Dessa forma, a densidade Lagrangiana correspondente à equação (4.22) é dada por

$$\mathcal{L}' = \mathcal{L} + \mathcal{L}_R , \quad (4.29)$$

e a Lagrangiana é dada por

$$L' = L + L_R . \quad (4.30)$$

Aplicando as equações de Euler-Lagrange a \mathcal{L}' , com respeito a u^* , obtemos

$$\frac{\partial \mathcal{L}'}{\partial u^*} - \frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}'}{\partial \dot{u}^*} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial u^*} - \frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{u}^*} - R(u, u^*) = 0, \quad (4.31)$$

que nos leva à equação (4.22) (a equação conjugada é obtida de uma forma similar).

O princípio variacional correspondente é dado por

$$\delta \int_0^t L' dt = 0, \quad (4.32)$$

onde

$$L_R = \int d^3r \mathcal{L}_R. \quad (4.33)$$

Para um pequeno deslocamento $\delta\eta_i$ do parâmetro variacional η_i , temos

$$f(\eta + \delta\eta) = f(\eta) + \delta\eta \frac{\delta f(u, u^*)}{\delta \eta}, \quad (4.34)$$

onde $f(\eta) \equiv f(\eta(u, u^*))$. Em nosso caso, $f(u, u^*) = L$ ou $f(u, u^*) = L_R$, a partir das quais resulta o seguinte sistema de equações para os parâmetros variacionais η_i

$$\frac{\partial L}{\partial \eta_i} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{\eta}_i} = \int d^3r \left[R \frac{\partial u^*}{\partial \eta_i} + R^* \frac{\partial u}{\partial \eta_i} \right], \quad (4.35)$$

onde η_i são os parâmetros variacionais presentes na equação (4.23).

Substituindo as equações (4.23) e (4.26) na equação (4.35), obtemos o sistema de equações diferenciais ordinárias para os parâmetros da função de onda do condensado, dado por

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d}{dt}(A^2 a^5) = 4A^2 a^5 b + 2\gamma A^2 a^5 - \frac{\mu}{2\sqrt{2}} A^4 a^5 - \frac{2}{3^{5/2}} \xi A^6 a^5 \\ \frac{d(A^2 a^3)}{dt} = 2\gamma A^2 a^3 - \frac{\mu}{\sqrt{2}} A^4 a^3 - \frac{2}{3^{3/2}} \xi A^6 a^3 \\ \frac{db}{dt} = \frac{2}{a^4} - 2b^2 - 2 - \frac{\lambda_2 A^2}{2\sqrt{2}a^2} - \frac{4\lambda_3 A^4}{3^{5/2}a^2} \\ \frac{d\phi}{dt} = -\frac{3}{a^2} + \frac{7}{2^{7/2}} \lambda_2 A^2 + \frac{2}{3^{3/2}} \lambda_3 A^4 \end{array} \right., \quad (4.36)$$

A equação para a fase é desacoplada do sistema para os outros parâmetros.

É útil reescrever o sistema usando as notações $x = a^2$ e $y = A^2$, obtendo-se

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dx}{dt} = 4xb + \frac{4}{3^{5/2}} \xi y^2 x + \frac{\mu}{2\sqrt{2}} xy \\ \frac{dy}{dt} = -6yb + 2\gamma y - \frac{4}{3^{3/2}} \xi y^3 - \frac{7\mu}{4\sqrt{2}} y^2 \\ \frac{db}{dt} = \frac{2}{x^2} - 2b^2 - 2 - \frac{\lambda_2 y}{2\sqrt{2}x} - \frac{4\lambda_3 y^2}{3^{5/2}x} \end{array} \right. . \quad (4.37)$$

Esse sistema de equações diferenciais ordinárias (EDO) não-lineares permite analisar a dinâmica dos observáveis do condensado, como o número de partículas e o raio quadrático médio, e verificar comportamentos como colapso, instabilidades e autosólitons, como verificadas por também por nossos cálculos numéricos exatos. Vamos agora apresentar alguns casos significativos que obtivemos a partir da resolução do sistema de equações acima. Apresentamos especificamente os casos mais interessantes de formação de sólitons por meio dessa técnica variacional. No caso repulsivo, o sistema apenas troca de sinal no termo de campo médio e pode-se também obter sua dinâmica. Resolvemos os sistemas de equações ordinárias correspondentes por meio do algoritmo de Runge-Kutta, já descrito anteriormente.

Analisamos agora a evolução temporal variacional do número de partículas sobre o número crítico de partículas (N/N_c) nos casos de interação de dois corpos atrativa ou repulsiva.

Interação repulsiva

Na figura 4.1, mostramos a evolução temporal do número de átomos para $\gamma = 10^{-3}$ e $\xi = 10^{-3}$, para a condição inicial $N(t=0)/N_c = 0.1$ e $a > 0$. A abordagem variacional nos dá um número de átomos um pouco maior que os cálculos exatos. Pode-se perceber da figura, que o sistema tende a formar os estados de sólito dissipativo, mesmo que o processo de sua formação demore um pouco.

Interação atrativa

Na figura 4.2, mostramos a evolução temporal do número de átomos para $\gamma = 10^{-3}$ e $\xi = 10^{-3}$, para a condição inicial $N(t=0)/N_c = 0.1$ e $a < 0$.

Analogamente ao caso anterior, conseguimos obter o estado de equilíbrio (autosólito). Cálculos com o algoritmo numérico estão em concordância com os resultados variacionais aqui apresentados. Assim, tanto no caso repulsivo quanto atrativo, pode-se atingir os estados de sólito dissipativo.

4.4 Resultados numéricos para a EGPG

Para obter as soluções da equação (4.8), nós utilizamos tanto métodos aproximados semi-analíticos como métodos numéricos exatos. Lembrando que estamos considerando o caso dinâmico, para as soluções numéricas da EGPG o algoritmo de Crank-Nicolson

semi-implícito é o mais apropriado devido à sua estabilidade. Usamos em nossos cálculos a mesma condição inicial para o número de átomos no condensado ($N(t)/N_c = n(\tau)/n_c = 0,75$) das Refs. [38, 39, 42].

Assim, resolvemos a EGPG adimensional (4.8) com $a < 0$ ou $a > 0$ fixo (coeficiente do termo de campo médio proporcional a $|\Psi|^2$ parametrizado a 1), calculamos o número de átomos e o raio quadrático médio para várias combinações dos parâmetros não-conservativos ξ e γ , traçamos os gráficos do espaço de fase para a raiz do raio quadrático médio e para a função $\zeta(\tau)$, considerando uma longa evolução do sistema. Em seguida, analisamos o caso de dissipação atômica por relaxação bipolar (μ), juntamente com os termos de γ e ξ .

Como veremos a seguir, para muitos casos é possível explicar propriedades tais como o número crítico de átomos no condensado, colapsos e até mesmo caos.

4.4.1 Análise de instabilidades na EGPG para interação repulsiva

Fizemos um estudo da EGPG considerando interação repulsiva, variando alguns parâmetros (γ, ξ, μ). Em um estudo sistemático, primeiramente desligamos μ e estudamos o comportamento do sistema com os parâmetros de dissipação ξ e de alimentação γ . Em seguida, ligamos o parâmetro de dissipação μ , mostrando os resultados para o caso dos três parâmetros ligados. Traçamos os gráficos do espaço de fase nos casos mais relevantes, calculamos os observáveis e os expoentes de Lyapunov estendidos e analisamos quais deles apresentavam caos espaço-temporal. Os principais resultados e conclusões para a condição inicial dada (a mesma de Kagan *et al.*) e escala de evolução temporal estudada ($\tau = 500$ para todos os casos) são dados nas seções a seguir.

EGPG com $\gamma > 0$, $\xi > 0$ e $\mu = 0$

Analisaremos a seguir a equação (4.8) com os parâmetros de alimentação (γ) e dissipação (ξ) não-nulos. É um objetivo importante o estudo do comportamento dinâmico do sistema repulsivo para valores extremamente pequenos dos parâmetros não-conservativos, casos mais realísticos que correspondem aos estimados experimentalmente.

No gráfico 4.3, temos a dinâmica do número de partículas sobre o número crítico (N/N_c) de um CBE para $\gamma = 1 \times 10^{-3}$ e alguns valores de ξ . Podemos notar que não há ocorrência de caos em nenhum caso. Isso é confirmado olhando a figura 4.4 do expoente de Lyapunov. Nesse caso, o aumento da função ζ não é exponencial.

Observando o gráfico 4.5, vemos o número de átomos (normalizado) N/N_c para o caso $\xi = 1 \times 10^{-3}$ e γ variando. Se a alimentação é muito pequena, pode ocorrer decaimento no número de partículas. Entretanto, como esperado, o mais natural é a ocorrência de um crescimento não muito acentuado em N para pequenos valores de γ ($\gamma \cong 10^{-3}$). Para uma intensa alimentação, entretanto, percebe-se um crescimento bem mais acentuado, que pode chegar a estabilizar em um nível dez ($\gamma \cong 10^{-2}$) ou cem vezes ($\gamma \cong 0.1$) maior do que nos casos anteriores. Devido à escala, não apresentamos esse último caso neste gráfico (ele pode ser visto, entretanto, na seção de comparações). Desses cálculos, podemos perceber como possíveis dinâmicas: casos de estabilidade (sólitons), decaimento e crescimento. No caso de intenso crescimento (para $\gamma = 0.1$), percebemos que há uma aparente estabilização. Entretanto, percebem-se oscilações na função de onda que indicam a presença de uma dinâmica complexa no sistema. De fato, confirmamos esse caso como caos espaço-temporal no gráfico 4.6, pelo sinal positivo do expoente de Lyapunov. Como confirmação qualitativa, observamos que as trajetórias do raio quadrático médio no espaço de fase indicam o comportamento de um atrator estranho (vide figura 4.7). Para casos em que γ é pequeno, como $\gamma = 5 \times 10^{-4}$, os gráficos do espaço de fase são muito similares, com a forma mostrada na figura 4.8. As trajetórias fazem um movimento espiral, formando uma aparente elipse que encolhe em torno de um centro bem definido em torno de $X \cong 1.9$.

EGPG com $\gamma > 0$, $\xi > 0$ e $\mu > 0$

Na figura 4.9, temos N/N_c versus τ com γ e ξ fixos e variando μ . Observamos crescimento ($\mu = 1 \times 10^{-4}$), estabilidade para um valor ainda bem pequeno de μ ($\mu \cong 3.5 \times 10^{-4}$) e, para $\mu = 10^{-2}$, também observamos o efeito de decaimento do número de partículas como no caso anterior.

Em nenhum desses casos mostrados, verificou-se a presença de caos por meio do Lyapunov.

4.4.2 Análise de instabilidades na EGPG para interação atrativa

Fizemos um estudo da EGPG com interação atrativa, variando os parâmetros (γ, ξ, μ) . Em um estudo sistemático, primeiramente desligamos μ e estudamos o comportamento do sistema com os parâmetros de dissipação ξ e de alimentação γ não-nulos. Em seguida, novamente, ligamos o parâmetro de dissipação μ e mostramos os resultados para o caso dos três parâmetros ligados. Para algumas parametrizações estudadas, traçamos os gráficos do espaço de fase nos casos mais relevantes, calculamos os observáveis e os expoentes de Lyapunov estendidos e analisamos quais deles apresentavam caos espaço-temporal. Os

principais resultados e conclusões para a mesma condição inicial dada no caso repulsivo e escala de evolução temporal estudada (em geral, pelo menos $\tau = 500$) são dados a seguir.

EGPG com $\gamma > 0$, $\xi > 0$ e $\mu = 0$

Analisando os gráficos do número de átomos sobre o número crítico versus τ , nós vemos na figura 4.10 uma série de colapsos para ξ muito pequeno ($\xi = 10^{-5}$ ou $\xi = 10^{-6}$). O caso mais interessante ocorre para $\xi = 5 \times 10^{-4}$, em que podemos observar a formação de um autosóliton.

Quanto ao expoente de Lyapunov (não mostrado), não se percebe um crescimento exponencial da função ζ em nenhum caso, mas apenas discontinuidades para $\xi = 10^{-5}$ e $\xi = 10^{-6}$, devido aos colapsos, e não se pode afirmar que haja caos espaço-temporal no sistema.

EGPG com $\gamma > 0$, $\xi > 0$ e $\mu > 0$

Nesse caso, a análise do número de átomos versus τ não apresenta qualitativamente significativas alterações; entretanto, percebemos que se atinge o colapso mais lentamente porque γ é um pouco menor do que no caso anterior, com μ desligado, apesar das diferenças dos valores dos parâmetros dissipativos. Podemos concluir também que quando diminuimos o valor da relaxação dipolar (μ), mais rapidamente o sistema atinge o valor crítico e ocorre o colapso.

No cálculo do expoente de Lyapunov, obtivemos o mesmo resultado que no caso anterior, com μ desligado: presença de descontinuidade e ausência de caos espaço-temporal.

4.5 Comparando interações repulsivas e atrativas

Nos gráficos da figura 4.12, comparamos o número de átomos sobre o valor crítico (N/N_c) versus τ do caso atrativo com o caso repulsivo. Observamos que para a interação repulsiva ($a > 0$) o número de átomos cresce rapidamente até $N/N_c \simeq 125$ e, para a interação atrativa ($a < 0$), o número de átomos também cresce, mas só até atingir o valor crítico, após o qual segue-se o colapso. Como pode ser verificado nos gráficos da figura 4.13, em ambos os casos (interação atrativa e repulsiva) existe caos.

Os gráficos 4.14 e 4.15 mostram a função de onda para interação repulsiva e atrativa, respectivamente. Para a interação repulsiva, percebemos o surgimento de

uma complexidade na função de onda, isto é, o aparecimento de muitas oscilações (ou flutuações) para um longo tempo de evolução ($\tau = 900$). Quando analisamos a interação atrativa, constatamos que a função de onda apresenta o mesmo comportamento, mas de uma forma extremamente mais acentuada, devido aos colapsos. Isto também se inicia mais rapidamente, por volta de $\tau = 50$.

Podemos comparar os gráficos do espaço de fase para $\gamma = 0.1$ do caso repulsivo (dado na figura 4.7, mostrada anteriormente) com o caso atrativo, apresentado na figura 4.16. Ambos mostram uma desordem, típico de atrator estranho, que é característica do fenômeno de caos.

Na figura 4.17, traçamos os gráficos do número de partículas sobre o crítico versus τ para parâmetros muito pequenos (mais realísticos), como $\gamma = 1 \times 10^{-4}$ e $\xi = 2 \times 10^{-6}$. Quando analisamos esse caso, verificamos que o número de átomos aumenta sutilmente, e que para a interação repulsiva esse aumento é levemente maior. Mas, não há a ocorrência de colapsos ou caos, como pode ser verificado nos gráficos da figura 4.18, em que traçamos os expoentes de Lyapunov para esses valores dos parâmetros. Pode-se perceber, nitidamente, que há enormes flutuações ou oscilações no expoente de Lyapunov, mas em uma escala muito pequena ($\ln \zeta$ varia poucas unidades e, inclusive, decai no caso atrativo), e o Lyapunov não apresenta um crescimento exponencial.

Esses comportamentos também podem ser verificados ao observarmos os gráficos da função de onda (figuras 4.19 e 4.20). Verificamos nesses gráficos que, para curtos e longos tempos, os gráficos da função de onda são todos bem comportados.

Resultados (Figuras) do Capítulo

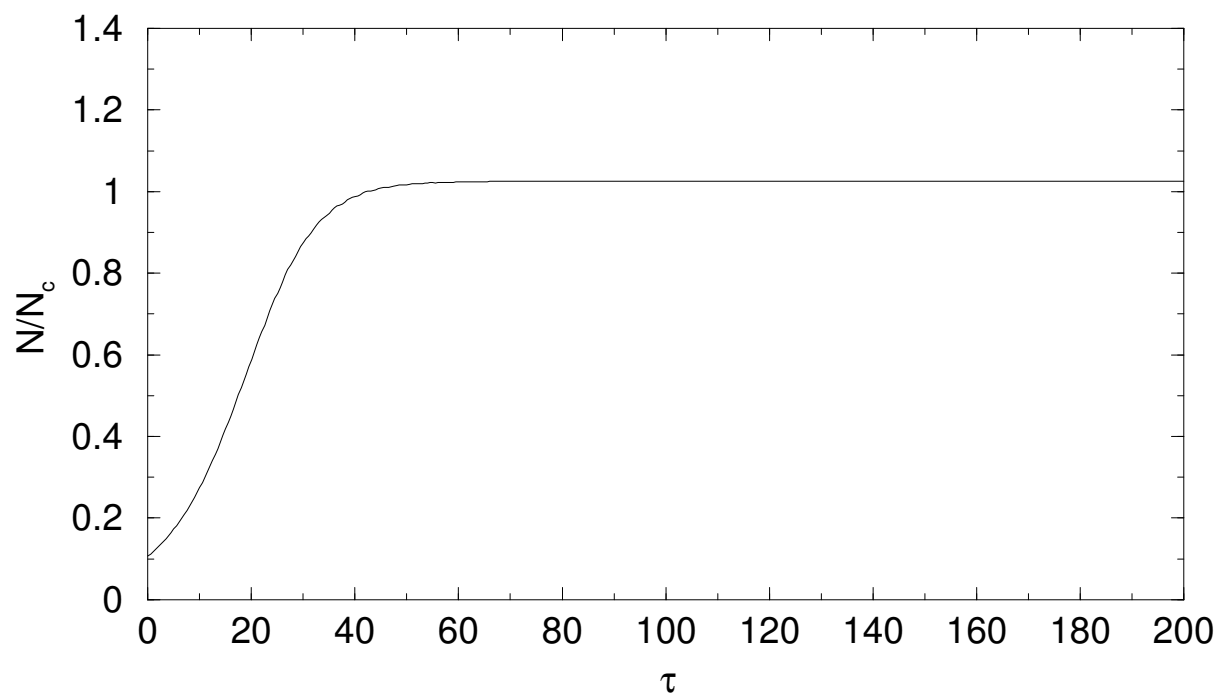


Figura 4.1: Evolução do número de átomos na equação de Gross-Pitaevskii com interação repulsiva, obtida através do método variacional. Alimentação $\gamma = 10^{-3}$ e dissipação por três corpos $\xi = 10^{-3}$ ($\mu = 0$).

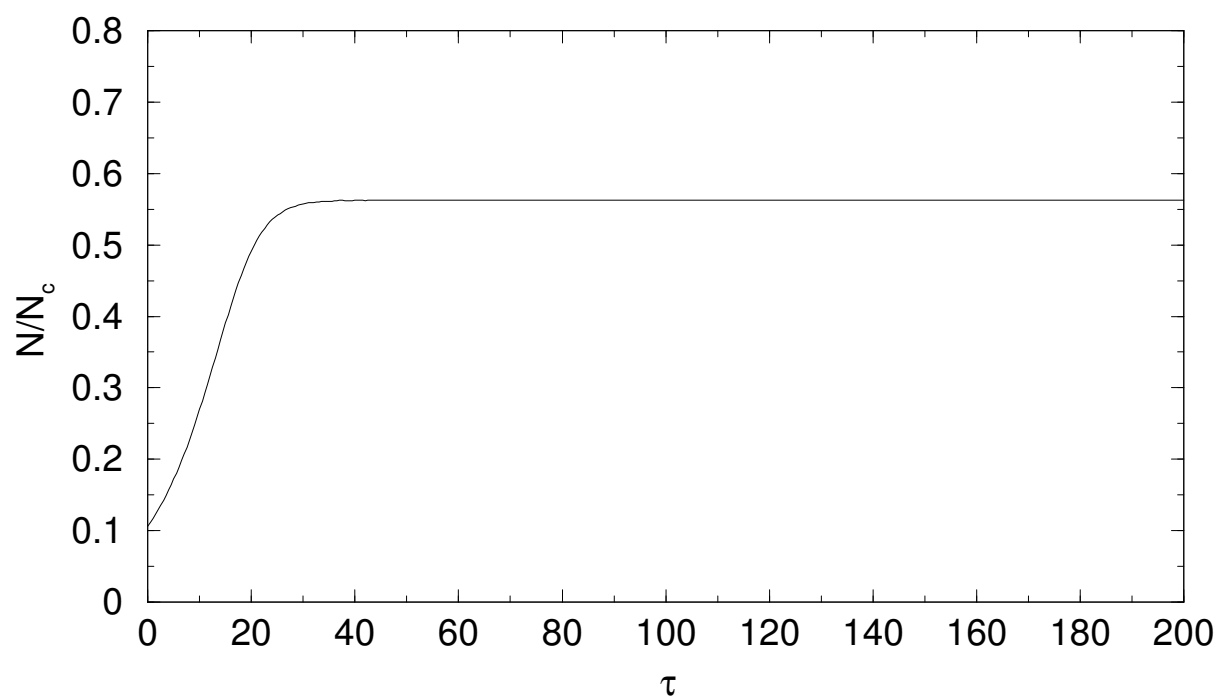


Figura 4.2: Evolução do número de átomos na equação de Gross-Pitaevskii com interação atrativa, obtida através método variacional. Alimentação $\gamma = 10^{-3}$ e dissipação por três corpos $\xi = 10^{-3}$ ($\mu = 0$).

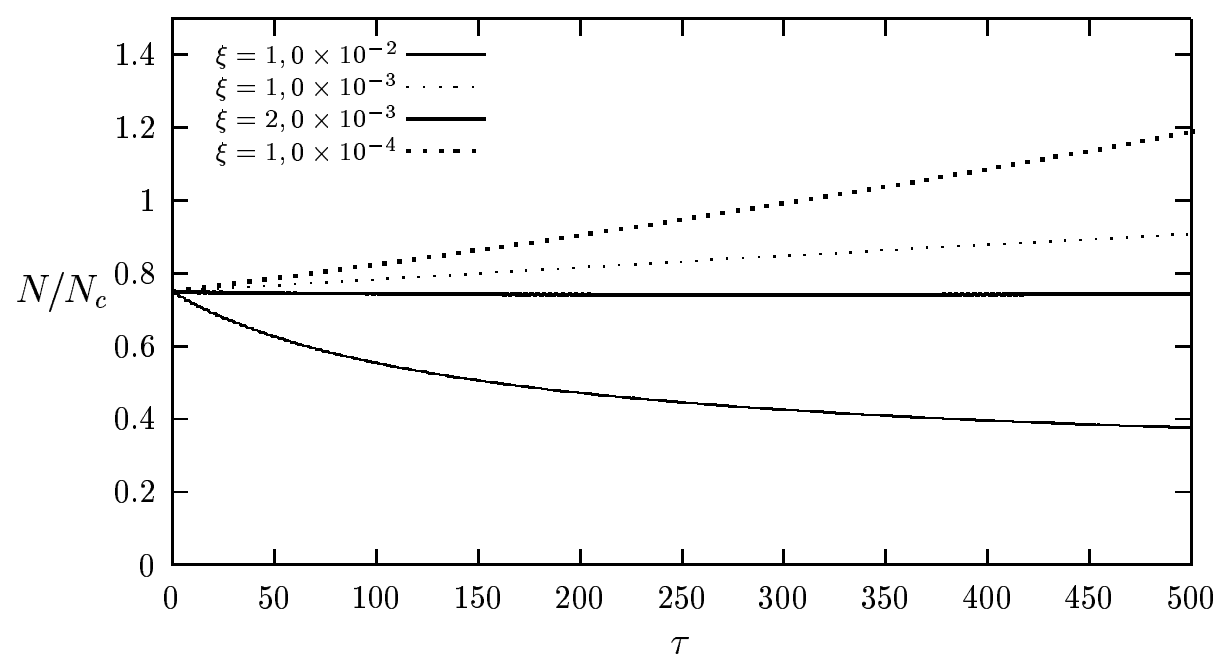


Figura 4.3: Razão N/N_c em função do tempo para interação repulsiva, $\omega t \leq 500$, $\gamma = 1 \times 10^{-3}$ e um conjunto de valores de ξ .

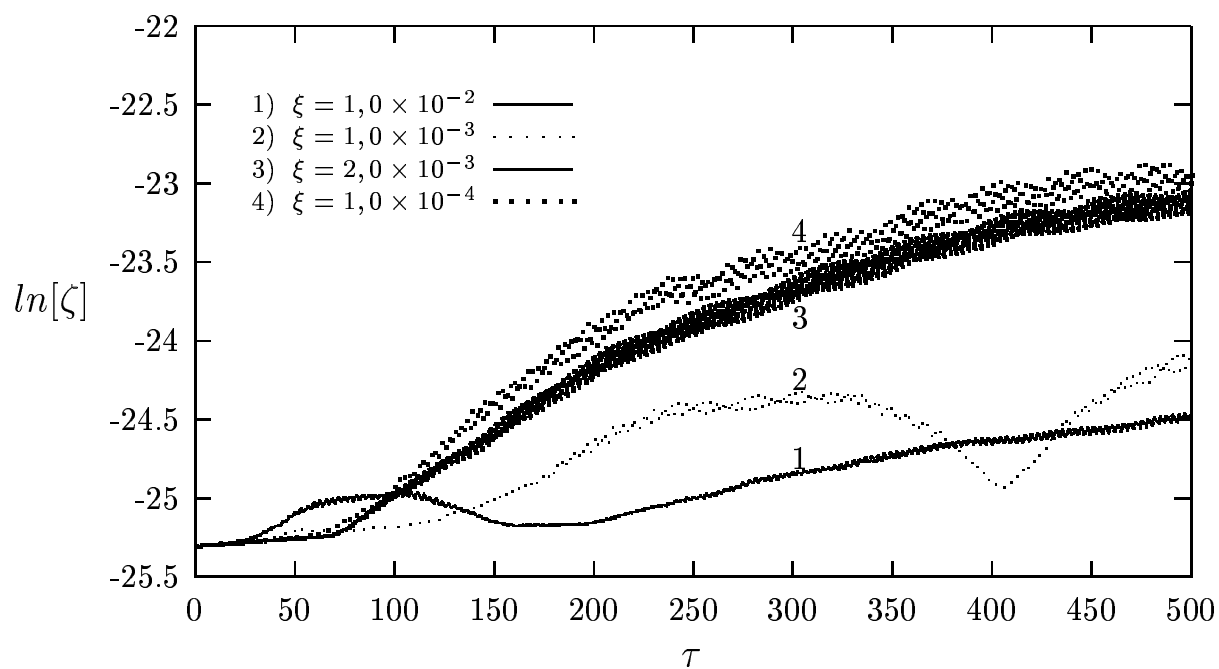


Figura 4.4: Gráfico do logaritmo da separação entre dois estados infinitesimalmente próximos para um CBE com interação repulsiva, $\gamma = 1 \times 10^{-3}$ e um conjunto de valores de ξ . $\tau = \omega t$ e ζ são dados em unidades adimensionais.

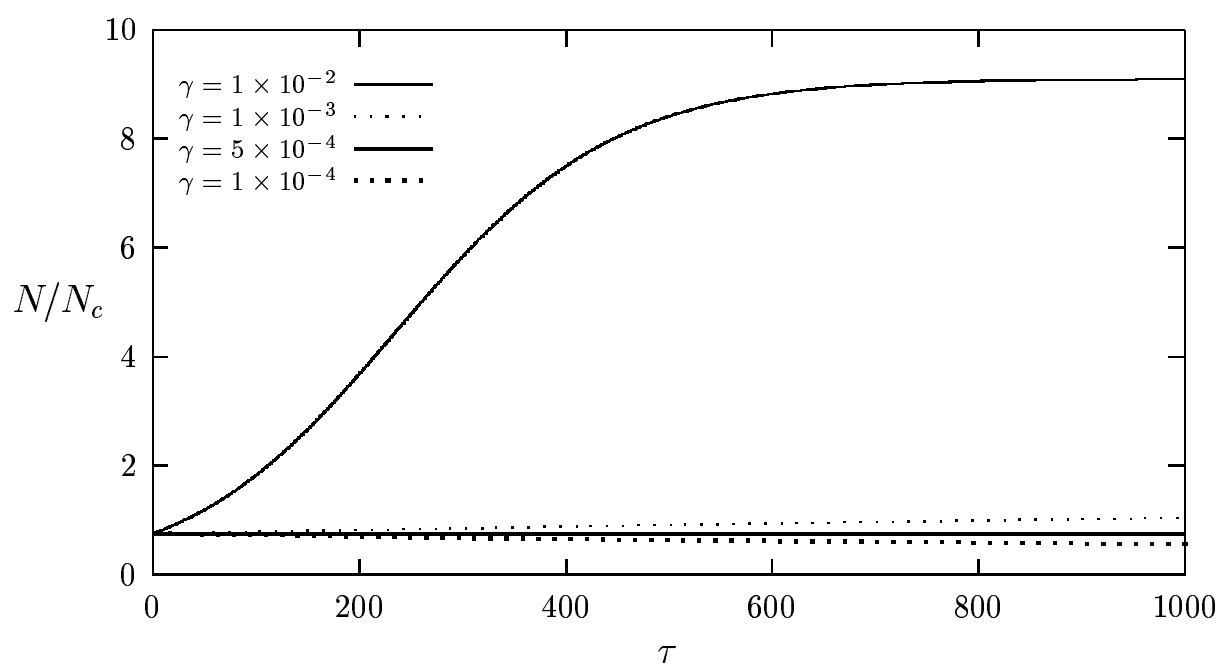


Figura 4.5: Razão N/N_c em função do tempo para interação repulsiva, $\omega t \leq 1000$, $\xi = 1 \times 10^{-3}$ e um conjunto de valores de γ .

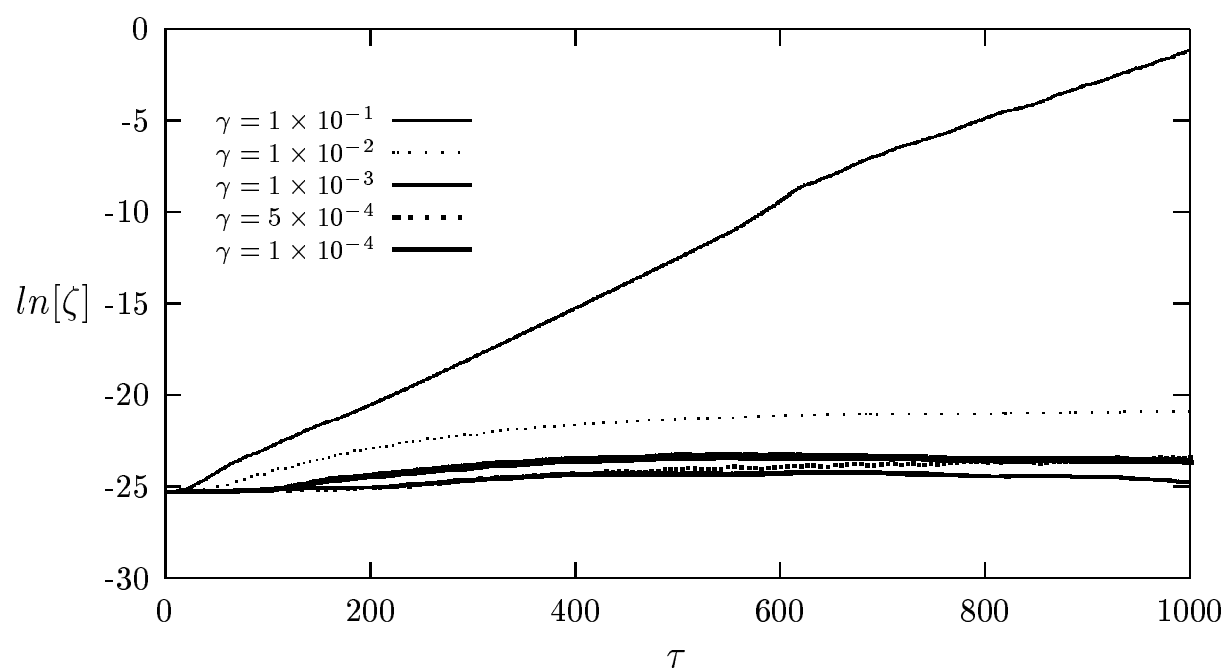


Figura 4.6: Gráfico do logaritmo da separação entre dois estados infinitesimalmente próximos para um CBE com interação repulsiva, $\xi = 1 \times 10^{-3}$ e um conjunto de valores de γ . $\tau = \omega t$ e ζ são dados em unidades adimensionais.

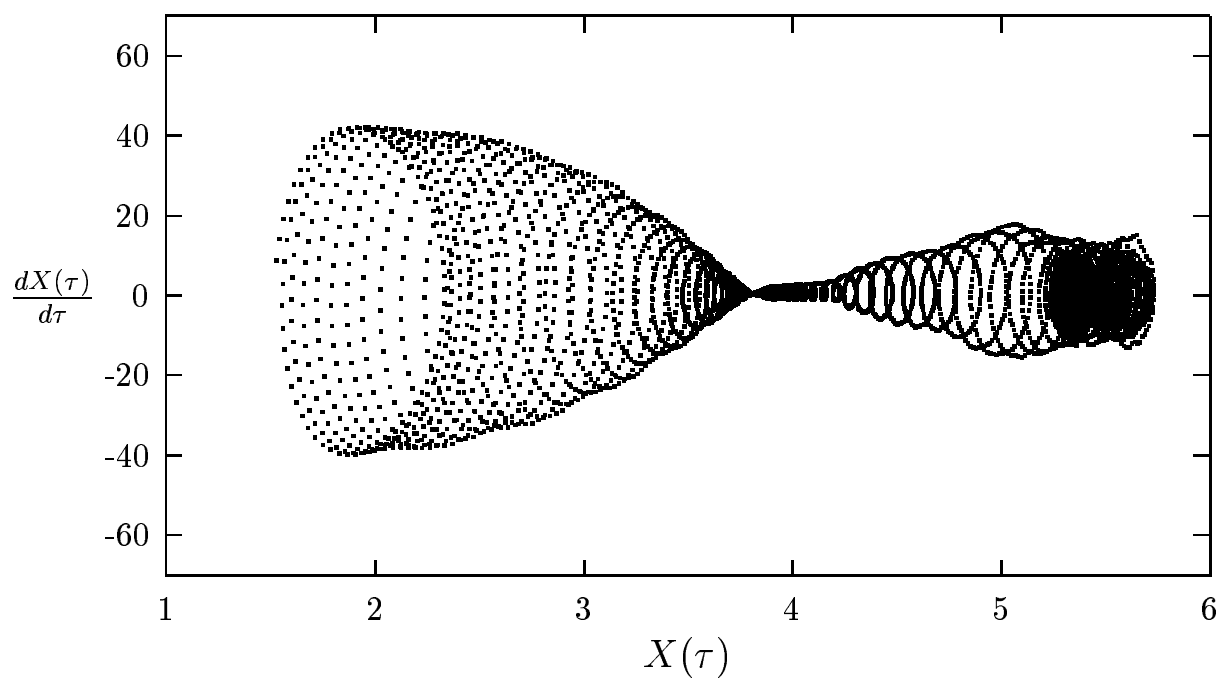


Figura 4.7: Gráfico do espaço de fase para o raio quadrático médio, dado por $X(\tau) \equiv \sqrt{\langle x^2(\tau) \rangle}$, em unidades adimensionais, para interação repulsiva, $\xi = 1 \times 10^{-3}$ e $\gamma = 1 \times 10^{-1}$.

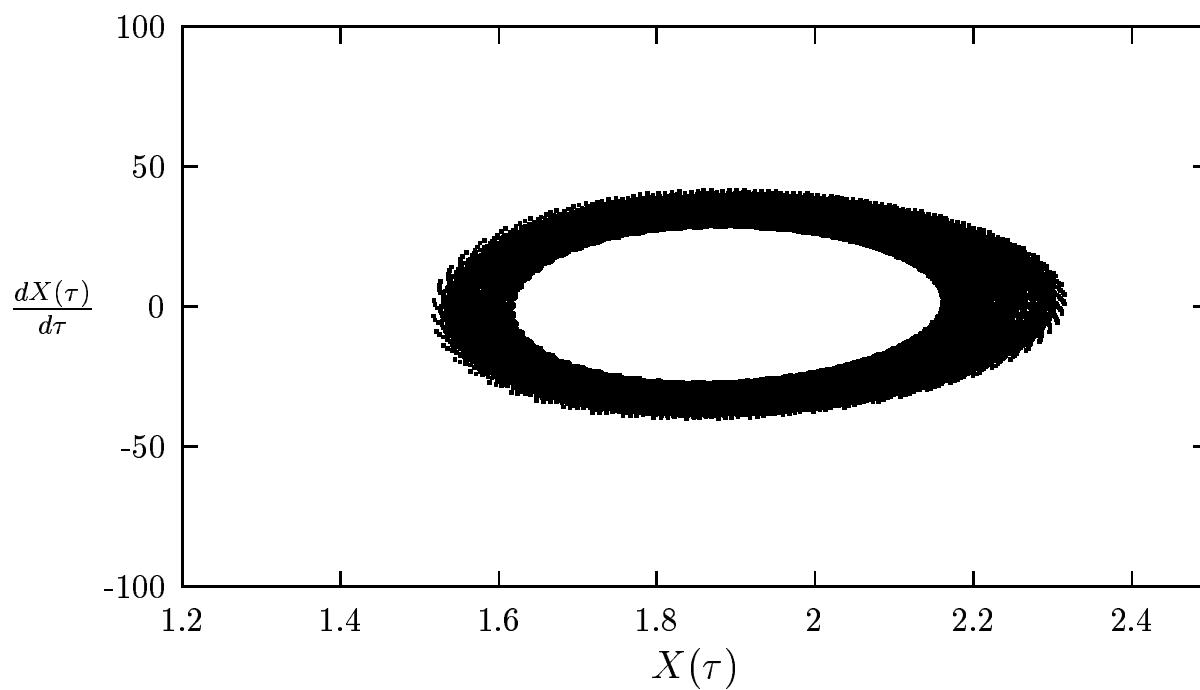


Figura 4.8: Gráfico do espaço de fase para o raio quadrático médio, dado por $X(\tau) \equiv \sqrt{\langle x^2(\tau) \rangle}$, em unidades adimensionais, para interação repulsiva, $\xi = 1 \times 10^{-3}$ e $\gamma = 5 \times 10^{-4}$.

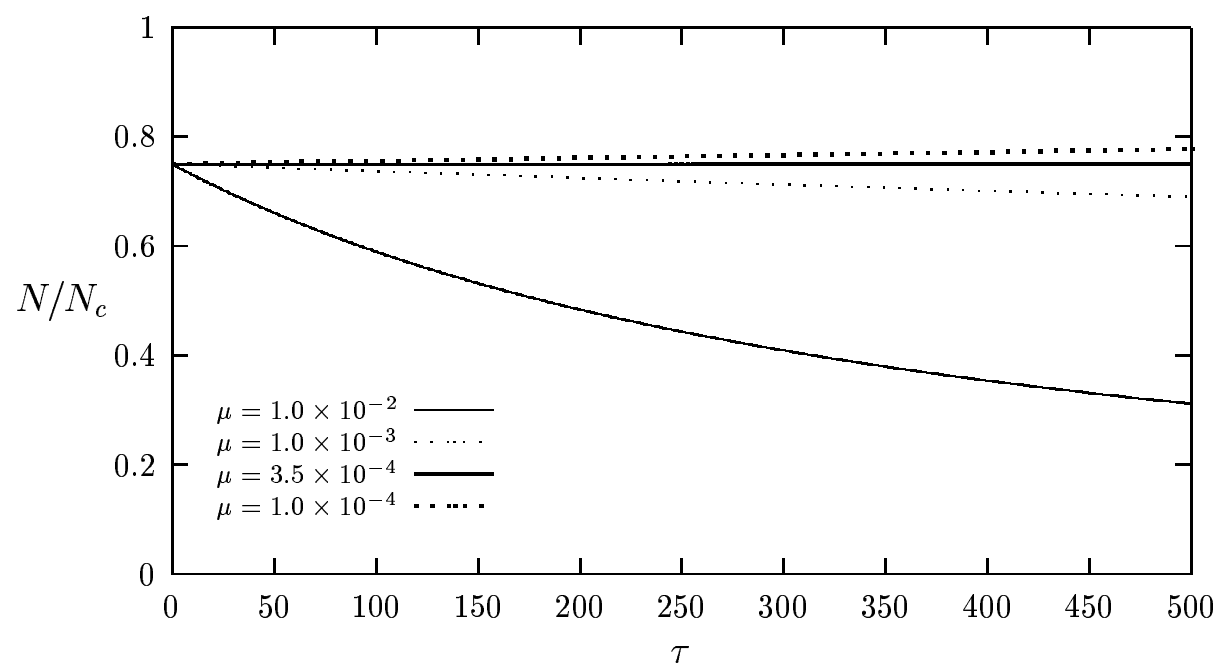


Figura 4.9: Razão N/N_c em função do tempo para interação repulsiva, $\omega t \leq 500$, $\gamma = 1 \times 10^{-4}$, $\xi = 1 \times 10^{-6}$ e um conjunto de valores de μ .

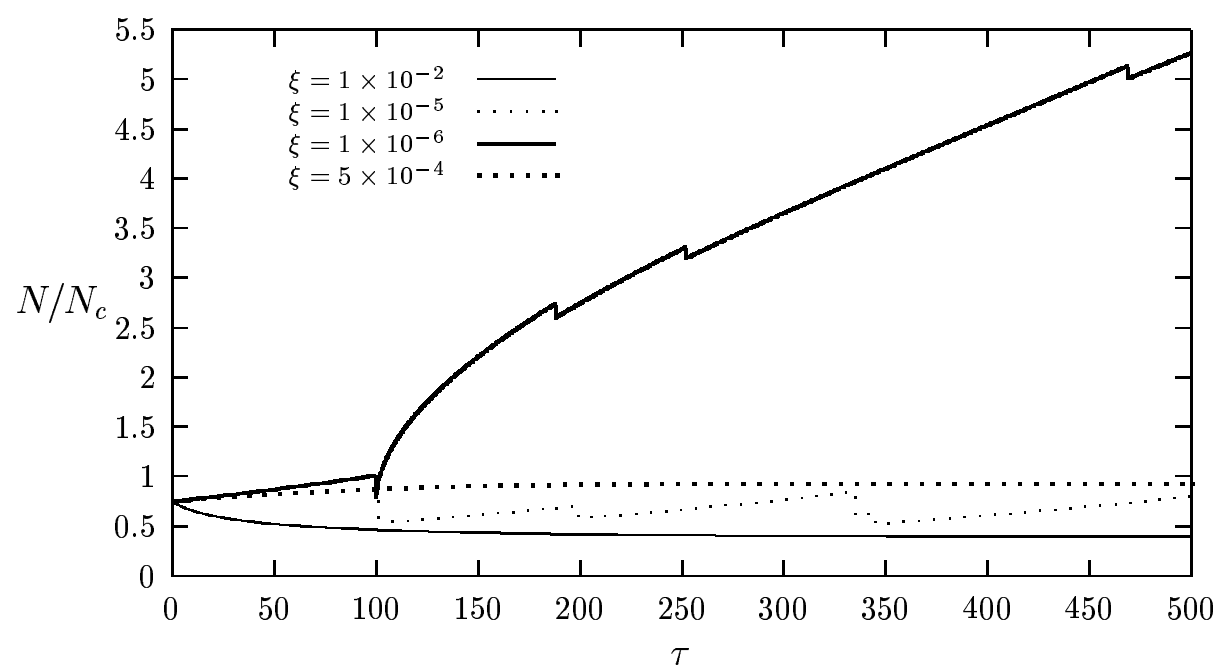


Figura 4.10: Razão N/N_c em função do tempo para interação atrativa, $\omega t \leq 500$, $\gamma = 3 \times 10^{-3}$ e um conjunto de valores de ξ .

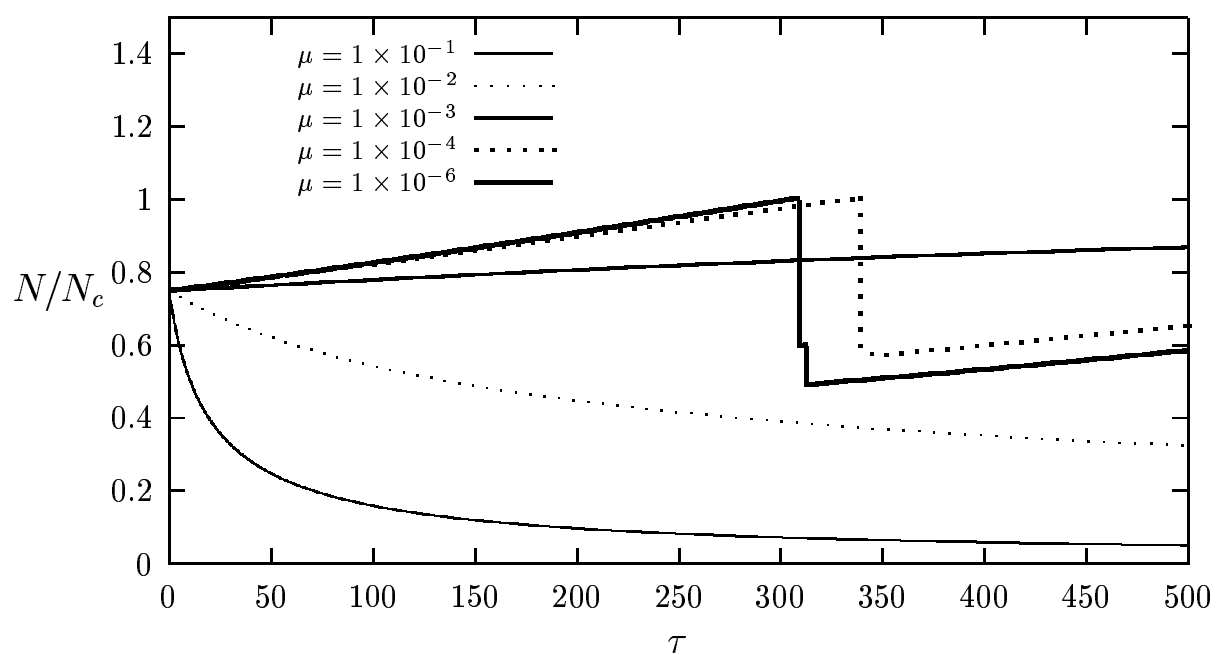


Figura 4.11: Razão N/N_c em função do tempo para interação atrativa, $\omega t \leq 500$, $\gamma = 1 \times 10^{-3}$, $\xi = 1 \times 10^{-5}$ e um conjunto de valores de μ .

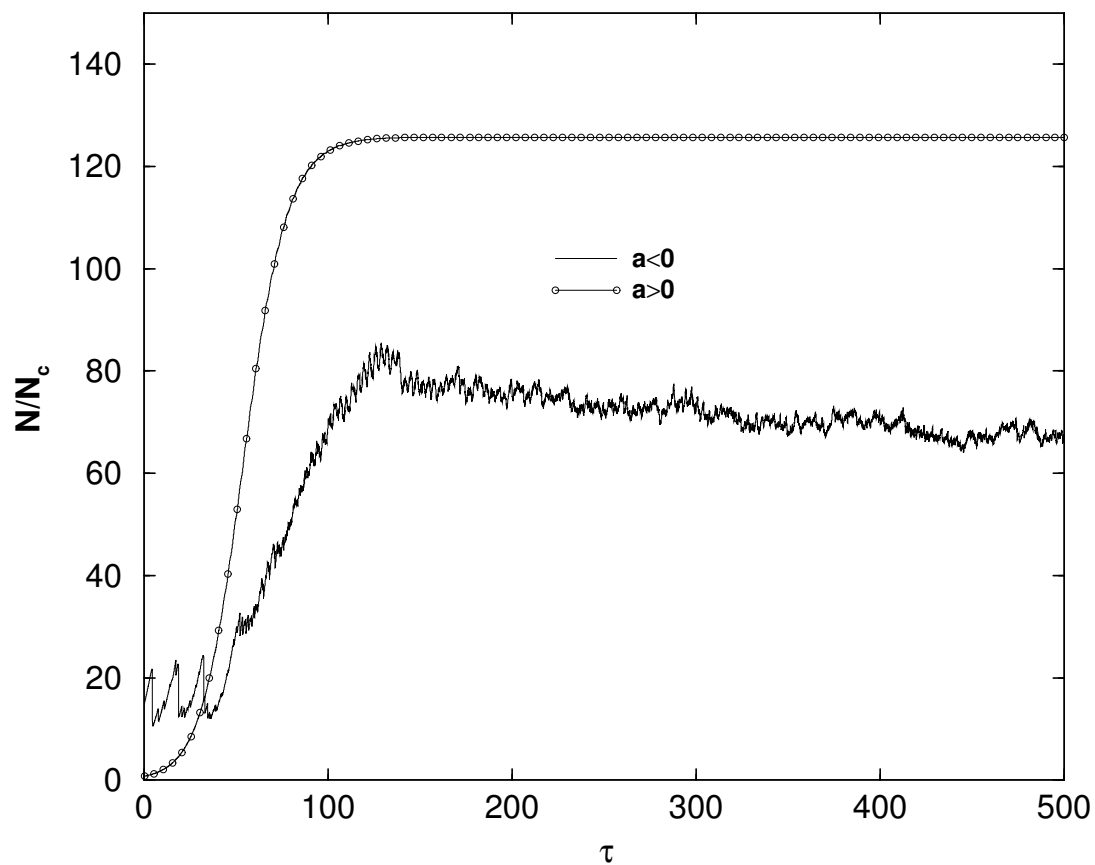


Figura 4.12: Razão N/N_c em função do tempo para $\omega t \leq 1000$, $\gamma = 1 \times 10^{-1}$ e $\xi = 1 \times 10^{-3}$. No caso $a < 0$, ampliamos 20 vezes N/N_c para melhor visualização do gráfico.

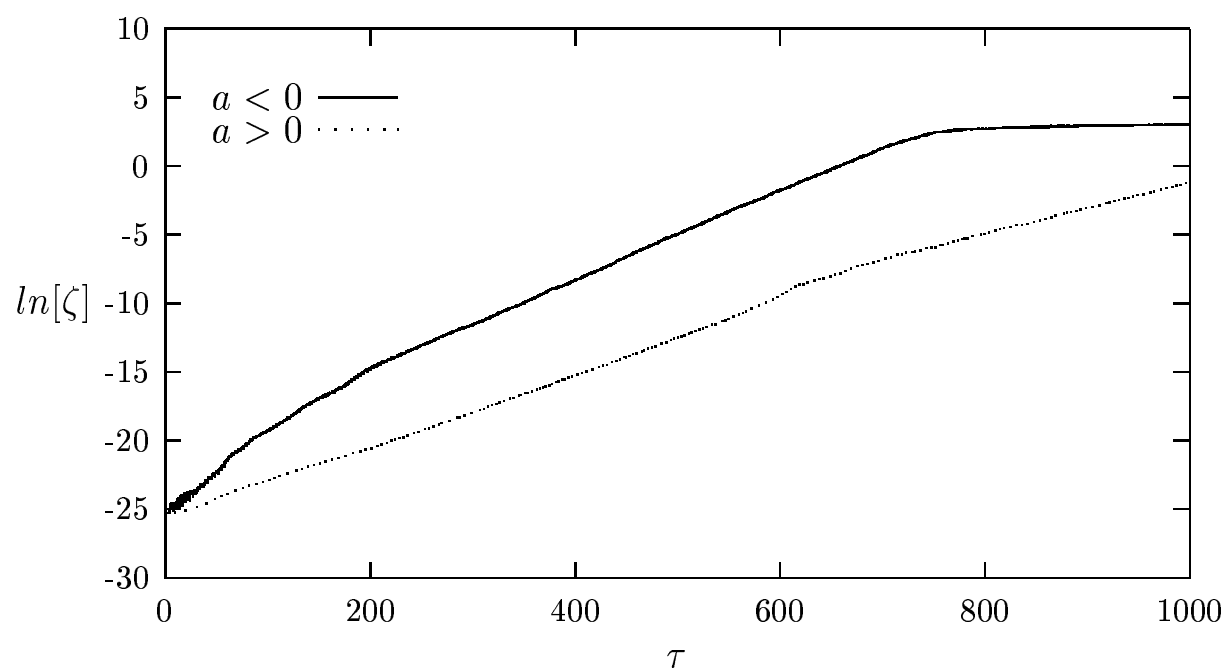


Figura 4.13: Gráfico do logaritmo da separação entre dois estados infinitesimalmente próximos para $\gamma = 1 \times 10^{-1}$ e $\xi = 1 \times 10^{-3}$. $\tau = \omega t$ e ζ são dados em unidades adimensionais.

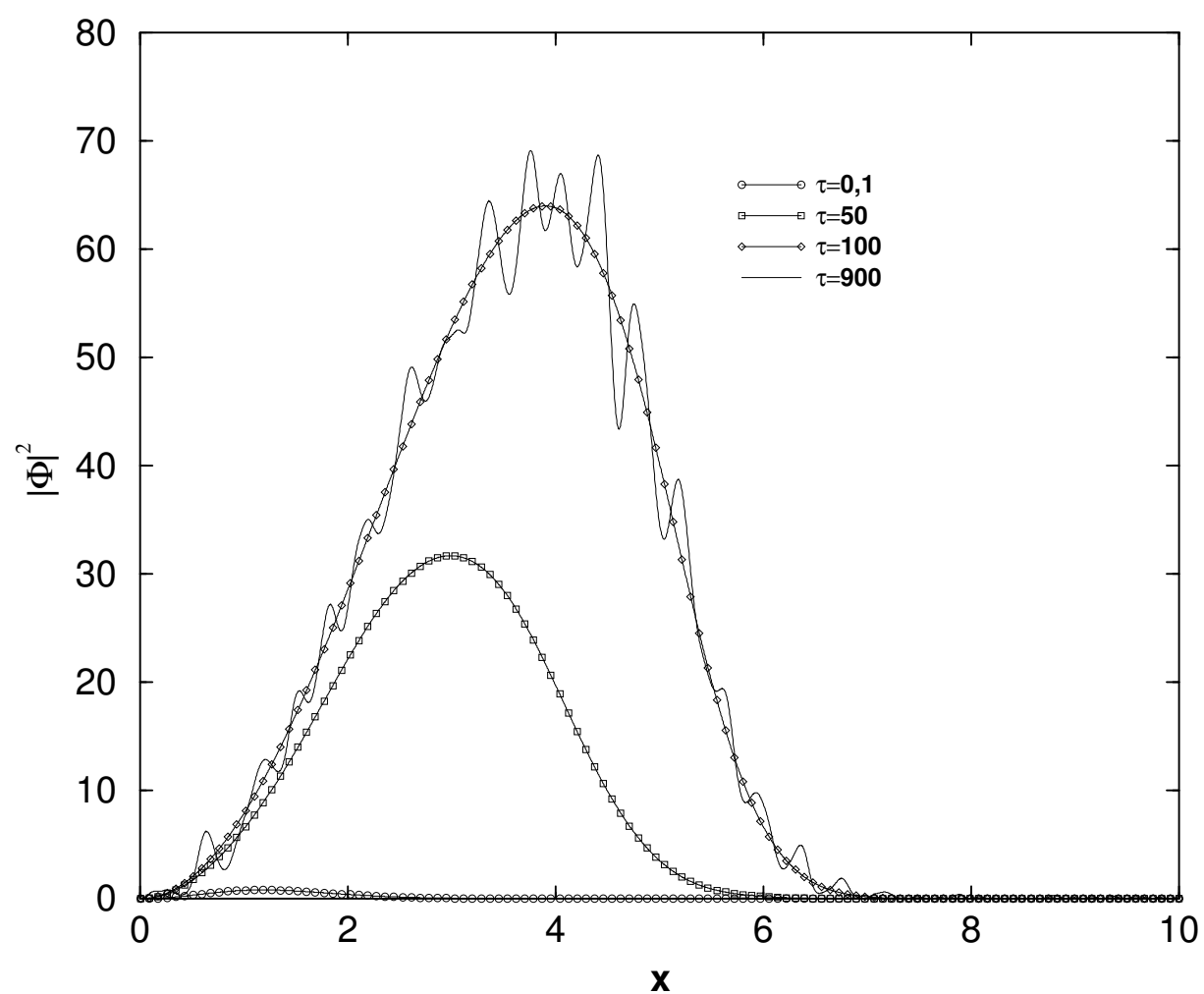


Figura 4.14: $|\Phi|^2$ como função da posição x . Para $a > 0$, $\gamma = 1 \times 10^{-1}$ e $\xi = 1 \times 10^{-3}$.

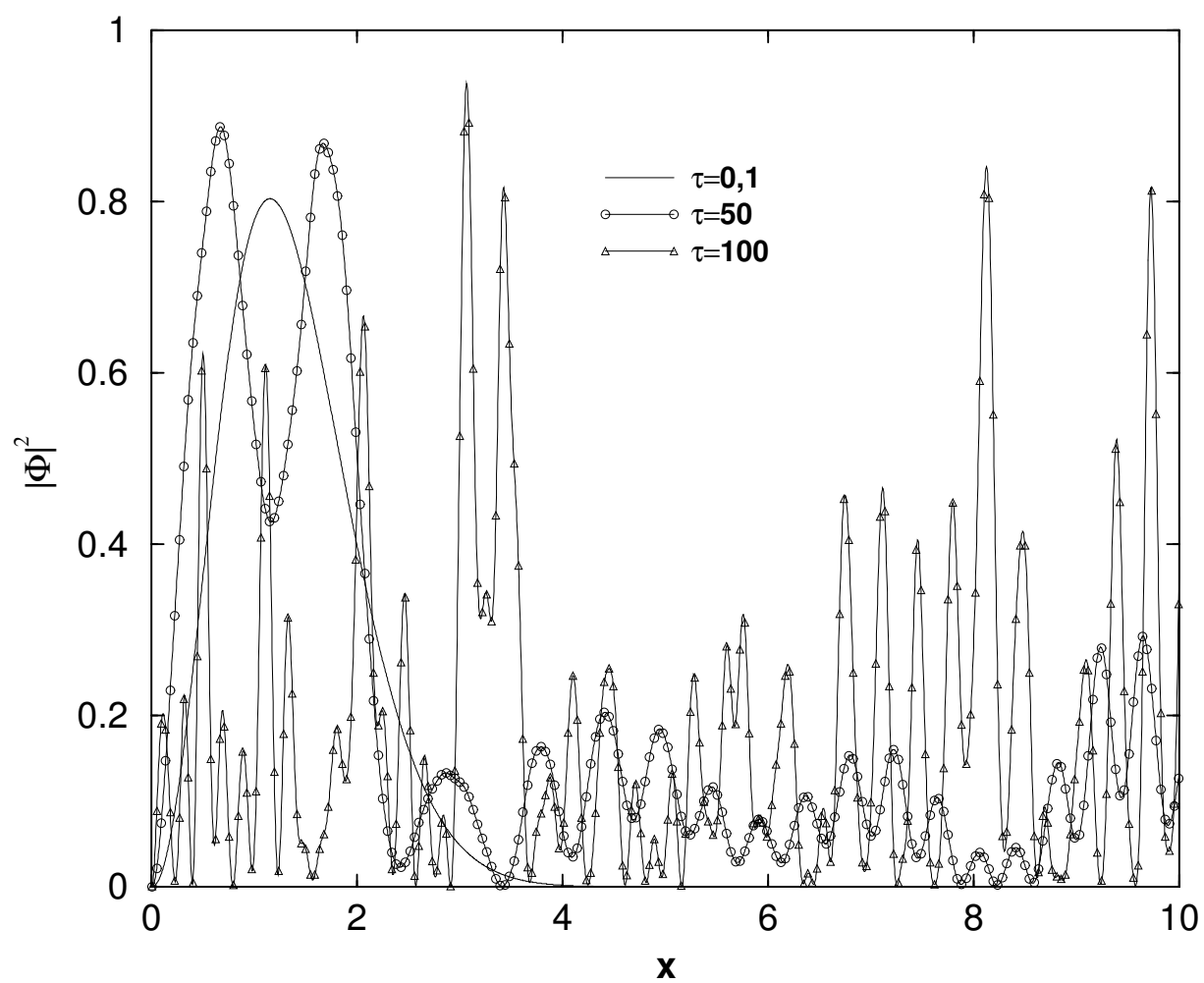


Figura 4.15: $|\Phi|^2$ como função da posição x . Para $a < 0$, $\gamma = 1 \times 10^{-1}$ e $\xi = 1 \times 10^{-3}$.

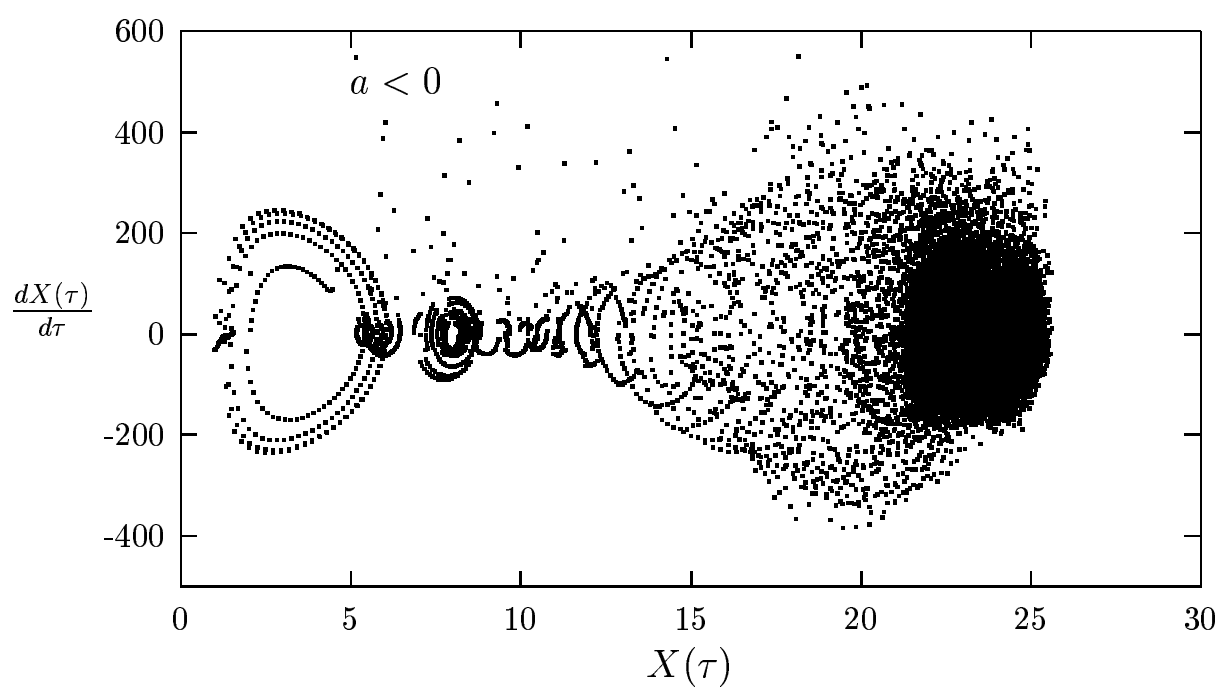


Figura 4.16: Gráfico do espaço de fase para o raio quadrático médio, dado por $\sqrt{\langle x^2(\tau) \rangle}$, em unidades adimensionais, para $a < 0$, $\gamma = 1 \times 10^{-1}$ e $\xi = 1 \times 10^{-3}$.

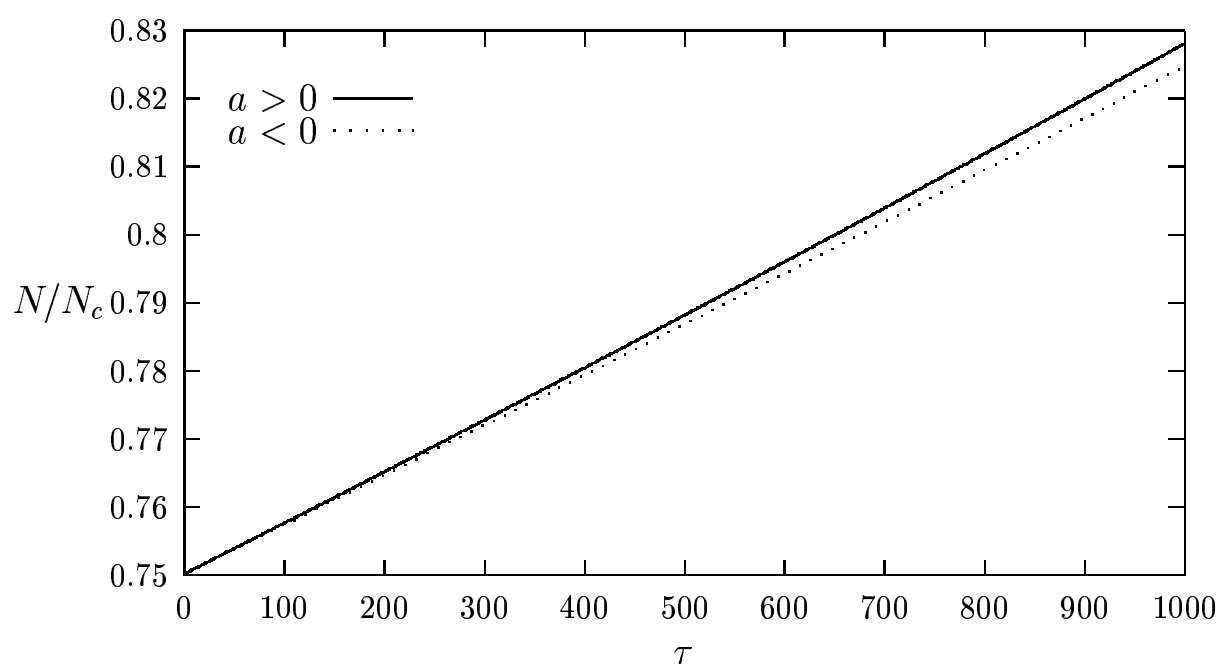


Figura 4.17: Razão N/N_c em função do tempo para $\omega t \leq 1000$, $\gamma = 1 \times 10^{-4}$ e $\xi = 2 \times 10^{-6}$.

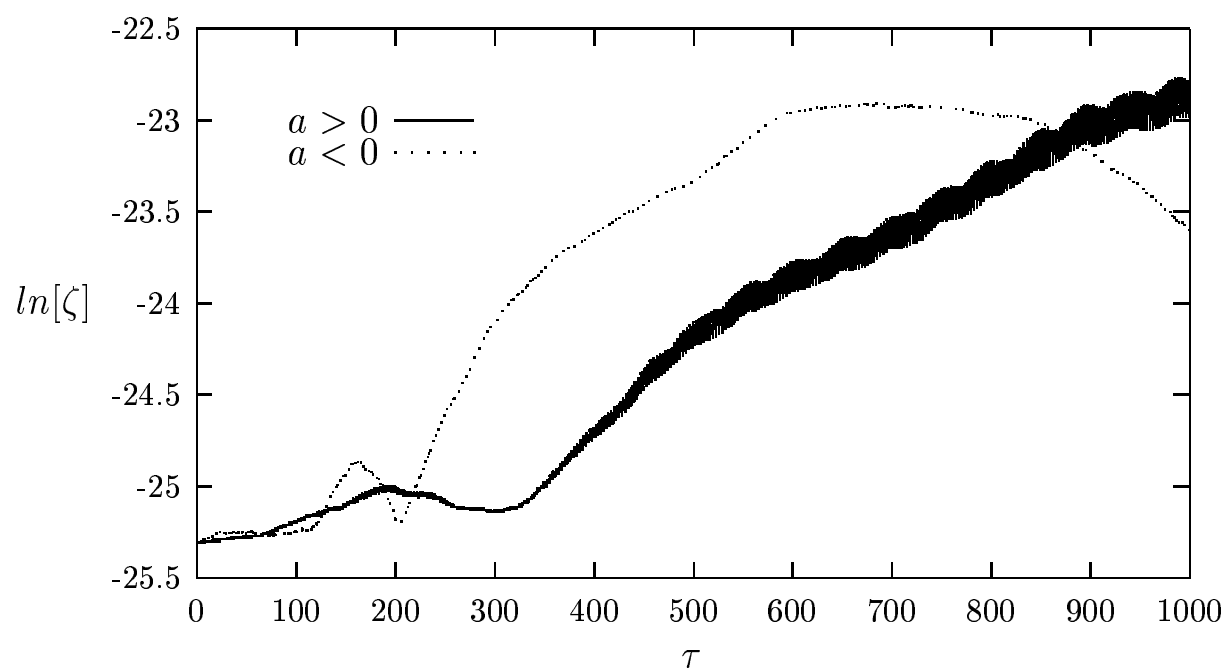


Figura 4.18: Gráfico do logaritmo da separação entre dois estados infinitesimalmente próximos. $\gamma = 1 \times 10^{-4}$ e $\xi = 2 \times 10^{-6}$. $\tau = \omega t$ e ζ são dados em unidades adimensionais.

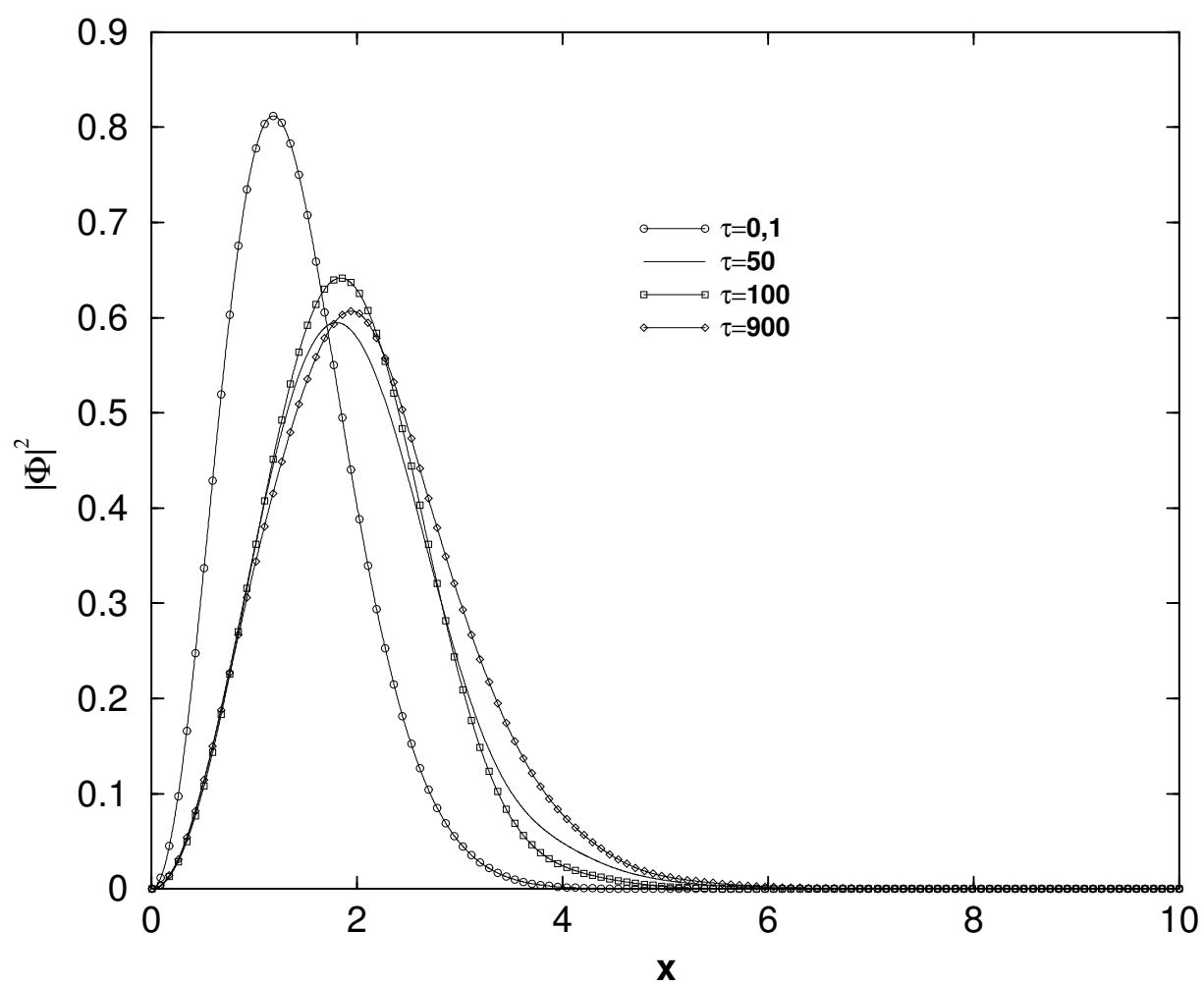


Figura 4.19: $|\Phi|^2$ como função da posição x . Para $a > 0$, $\gamma = 1 \times 10^{-4}$ e $\xi = 2 \times 10^{-6}$.

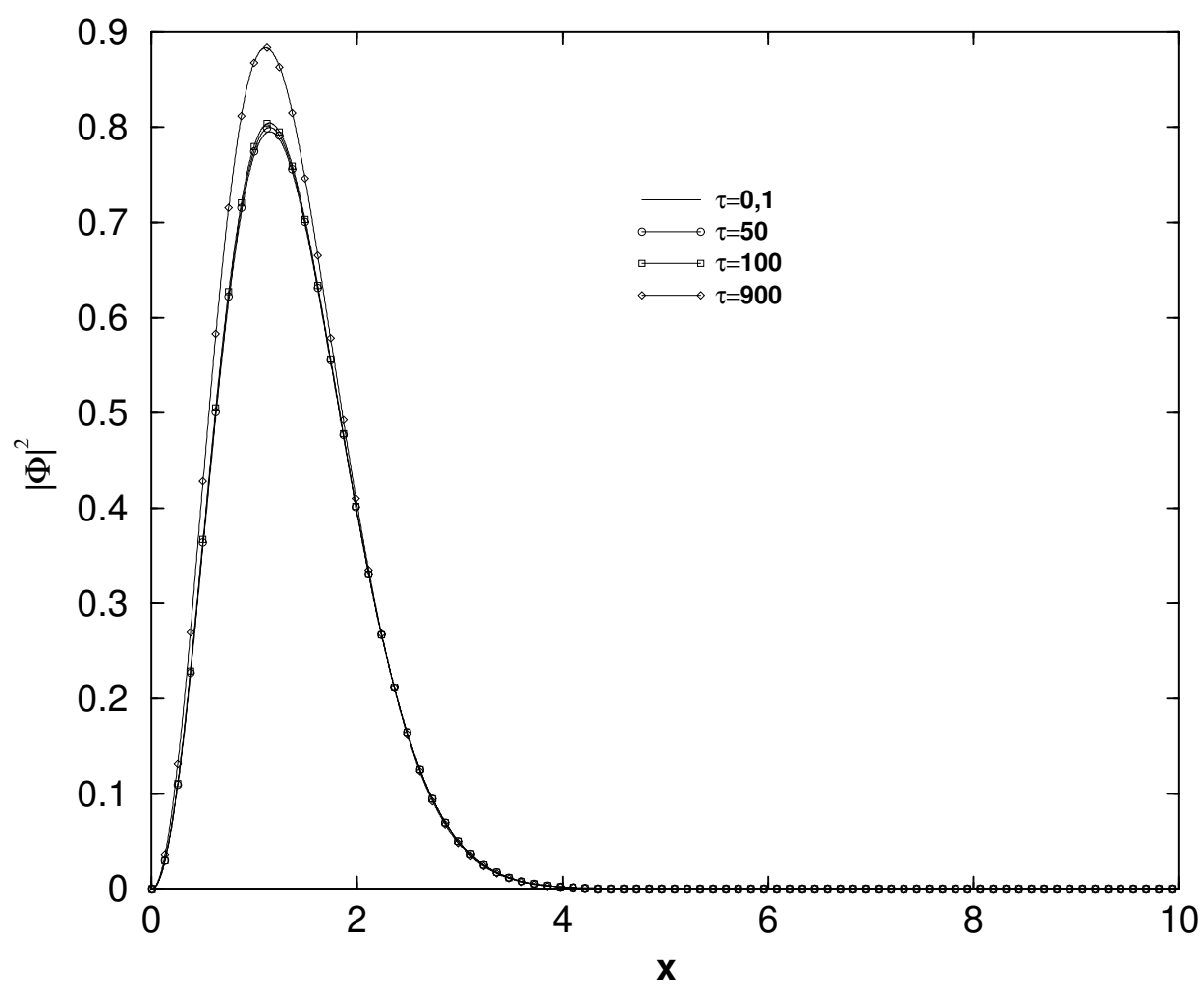


Figura 4.20: $|\Phi|^2$ como função da posição x . Para $a < 0$, $\gamma = 1 \times 10^{-4}$ e $\xi = 2 \times 10^{-6}$.

Capítulo 5

Conclusão

Neste trabalho, estudamos uma equação não-linear que descreve sistemas condensados não-conservativos, a equação de Gross-Pitaevskii generalizada. Pesquisamos a estabilidade de sistemas condensados com interação atrativa ou repulsiva.

No caso estacionário, resolvemos a equação de Gross-Pitaevskii pelo método de *shooting*-Runge-Kutta e verificamos muitas propriedades das soluções de um condensado de Bose-Einstein, já descritas anteriormente na literatura. Por exemplo, verificamos o número crítico de partículas no caso atrativo, usando método numérico exato e pelo método variacional de Ritz. No caso dinâmico, usamos o método de Crank-Nicolson e o método variacional dependente do tempo.

No caso estacionário, resolvemos a equação de Gross-Pitaevskii, por técnicas numéricas e variacionais estacionárias, para interação de dois corpos atrativa ou repulsiva e potencial de aprisionamento harmônico ou anarmônico. Verificamos os seguintes resultados:

- Inexistência de número crítico de partículas no caso repulsivo;
- Existência do número crítico de partículas no caso atrativo;
- Confirmação de resultados obtidos na literatura;
- Determinação dos observáveis para confinamento anarmônico e da variação do número crítico de partículas com a potência da armadilha (por exemplo, no caso de confinamento linear, temos um aumento de 38% em relação ao caso harmônico).

No caso dinâmico, resolvemos a equação de Gross-Pitaevskii generalizada (EGPG) considerando sistemas atômicos condensados com as seguintes características:

- Comprimento de espalhamento de dois corpos positivo ou negativo;

- Aprisionados por um potencial esférico harmônico ou anarmônico;
- Alimentação atômica a partir da nuvem externa que envolve o condensado, parametrizada por γ ;
- Dissipação por recombinação de três corpos ou colisões inelásticas de três corpos, parametrizada por ξ ;
- Dissipação atômica por relaxação dipolar ou colisões inelásticas de dois corpos, parametrizada por μ .

Tanto no caso variacional quanto no numérico, com exceção do caso caótico, encontramos os seguintes comportamentos dinâmicos no caso de interação de dois corpos atrativa:

- Variação inicial da magnitude da função de onda do condensado com posterior estabilidade das soluções para longos intervalos de tempo, caracterizados como autosólitons (ou sólitons de Pereira-Stenflo), aplicando-se métodos numéricos exatos ou o método variacional dependente do tempo;
- Instabilidade após os intervalos de soluções estacionárias ou constantes;
- Instabilidades sem a presença de colapsos ou caos;
- Ciclos de crescimento e colapso da função de onda do condensado;
- Seqüências de colapsos;
- Instabilidade com crescimento acentuado da magnitude da função de onda do condensado, caracterizado como caos espaço-temporal

No caso caótico, analisamos evoluções suficientemente grandes para a variável adimensional de tempo, de no mínimo $\tau \cong 500$ (unidades de tempo), pois nosso objetivo era verificar a estabilidade do sistemas descritos pela EGPG e, em particular, averiguar a presença de caos espaço-temporal, já verificada na literatura.

A partir dos resultados numéricos exatos apresentados, concluímos que o fenômeno de caos espaço-temporal deve ocorrer na descrição de sistemas condensados de interação atrativa para γ intenso ($\gamma \sim 0.1$), $\gamma > \xi$ e grande razão γ/ξ . Para γ intenso, o fenômeno de caos pode surgir quando ξ assume valores inferiores ao parâmetro de alimentação por cerca de duas ordens de grandeza. Além desse comportamento, verificamos a propriedade de estabilização do sistema (autosóliton) e diversos tipos de instabilidades como, por exemplo, seqüências de colapsos.

No caso repulsivo, constatamos:

- Decaimentos simples quando a dissipação é muito maior que o efeito de expansão devido ao termo de campo médio e o efeito de alimentação pela nuvem térmica externa;
- Crescimento simples do número de partículas e do tamanho do sistema, quando os termos dissipativos são muito pequenos face aos termos de expansão e alimentação;
- Caos espaço-temporal, verificado no caso em que a alimentação é muito grande ($\gamma = 0.1$).
- Autosólitons, obtidos tanto no cálculo numérico exato como no variacional.

Quanto aos cálculos variacionais dinâmicos, concluímos que a técnica é extremamente útil na descrição qualitativa das possíveis dinâmicas do sistema, inclusive conseguindo reproduzir os casos com colapsos (embora não seja possível evoluir mais a partir da ocorrência desse efeito).

Usando o ansatz gaussiano no método variacional dependente do tempo para a equação não-conservativa, estudamos a possibilidade de existência de sólitons dissipativos em condensados de Bose-Einstein 3D aprisionados, na presença de processos inelásticos de dois e três corpos, relacionados aos efeitos de relaxação dipolar e recombinação por três corpos. Por meio desse método, deduzimos expressões para os parâmetros do autosóliton e obtivemos as soluções do sistema pelo método de Runge-Kutta. As simulações numéricas da equação de Gross-Pitaevskii 3D generalizada com termos dissipativos não-lineares e de alimentação estão em concordância com as previsões da aproximação variacional dependente do tempo, quando os valores dos parâmetros são tais que a estabilização é atingida. Concluindo, mostramos que a transição de um ponto instável para estável depende apenas da magnitude dos parâmetros de alimentação e de dissipação por recombinação de três corpos. Consideramos também efeitos dissipativos de dois corpos que modelam as perdas por relaxação dipolar e que podem ser associados com valores medidos em gases de ^7Li ultra-frios.

Referências Bibliográficas

- [1] S. N. Bose, Z. Phys. B **26**, 178 (1924).
- [2] A. Einstein, Berl. Ber. **22**, 261 (1924); A. Einstein, Berl. Ber. **23**, 3, 18 (1925).
- [3] A. Griffin, *A Brief History of Our Understanding of BEC: From Bose to Beliaev*, (Lecture in Varenna Summer School, 1998), cond-mat/9901123.
- [4] A. F. R. T. Piza, *Condensados Atômicos de Bose-Einstein*, (Curso de Verão - IFUSP, 2002).
- [5] N. N. Bogoliubov, J. Phys. U.S.S.R., **11**, 23 (1947).
- [6] V.L. Ginzburg e L.P. Pitaevskii, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **34**, 1240(1958) [Sov. Phys. JETP **7**, 858 (1958)]; L.P. Pitaevskii, Sov. Phys. JETP **13**, 451 (1961); E.P. Gross, J. Math. Phys. **4**, 195 (1963).
- [7] M.H. Anderson, J.R. Ensher, M.R. Matthews, C.E. Wieman, E.A. Cornell, Science **269**, 198 (1995).
- [8] M.-O. Mewes, M.R. Andrews, N.J. van Druten, D.M. Kurn, D.S. Durfee e W.Ketterle, Phys. Rev. Lett. **77**, 3969 (1995).
- [9] C.C. Bradley, C.A. Sackett, J.J. Tollet e R.G. Hulet, Phys. Rev. Lett. **75**, 1687 (1995).
- [10] D. G. Fried, T. C. Killian, L. Willmann, D. Landhuis, S. C. Moss, D. Kleppner e T. J. Greytak, Phys. Rev. Lett. **81**, 3811 (1998).
- [11] C.C. Bradley, C.A. Sackett e R.G. Hulet, Phys. Rev. Lett. **78**, 985 (1997); C.C. Bradley, C.A. Sackett, J.J. Tollet e R.G. Hulet, Phys. Rev. Lett. **79**, 1170 (1997).
- [12] S. L. Cornish, N. R. Claussen, J. L. Roberts, E. A. Cornell e C. E. Wieman, Phys. Rev. Lett. **85**, 1795 (2000); J. L. Roberts, N. R. Claussen, S. L. Cornish, E. A. Donley, E. B. G. Levi, Phys. Today, Agosto, 17 (2000).

- [13] A. Roberts *et al.*, Science **292**, 461 (2001); F. D. P. Santos *et al.*, Phys. Rev. Lett. **86**, 3459 (2001).
- [14] G. Modugno *et al.*, Science **294**, 1320 (2001).
- [15] T. Weber *et al.*, Science **299**, 232 (2003).
- [16] Y. Takasu *et al.*, Phys. Rev. Lett. **91**, 040404 (2003).
- [17] M. Greiner, C. A. Regal and D. S. Jin, Nature **426**, 527 (2003).
- [18] S. Jochim *et al.*, Science **302**, 2101 (2003); M. W. Zwierlein *et al.*, Phys. Rev. Lett. **91**, 250401 (2003).
- [19] F. Dalfovo, S. Giorgini, L. P. Pitaevskii e S. Stringari, Rev. Mod. Phys. **71**, 463 (1999).
- [20] P. W. Courteille, V. S. Bagnato, V. I. Yukalov, Laser Phys., Vol. II **6**, 659 (2001).
- [21] K. Huang, *Statistical Mechanics*, 2nd ed. (John Wiley and Sons, New York, 1987); H. B. Callen, *Thermodynamics and an introduction to thermostatistics* 2nd ed. (John Wiley and Sons, New York, 1985).
- [22] D. M. Ceperley, Rev. Mod. Phys. **71**, S438 (1999).
- [23] W. Krauth, Phys. Rev. Lett. **77**, 3695 (1996).
- [24] E. Tiesinga, C. J. Williams, P. S. Julienne, K. M. Jones, P. D. Lett e W. D. Phillips, J. Res. Natl. Inst. Stand. Technol. **101**, 105 (1996).
- [25] H. M. J. M. Boesten, C. C. Tsai, J. R. Gardner, D. J. Heinzen e B. J. Verhaar, Phys. Rev. A **55**, 636 (1997).
- [26] E. R. I. Abraham, W. I. McAlexander, C. A. Sackett e R. G. Hulet, Phys. Rev. Lett. **74**, 1315 (1995).
- [27] R.J. Deissler, J. Stat. Phys. **54**, 1459 (1989).
- [28] M. Edwards e K. Burnett, Phys. Rev. A **51**, 1382 (1995); P.A. Ruprecht, M.J. Holland, K. Burnett e M. Edwards, Phys. Rev. A **51**, 4704 (1995).
- [29] M. Houbiers e H.T.C. Stoof, Phys. Rev. A **54**, 5055 (1996).
- [30] A. Gammal, T. Frederico, L. Tomio e P. Chomaz, J. Phys. B **33**, 4053 (2000).
- [31] G. Baym e C.J. Pethick, Phys. Rev. Lett. **76**, 6 (1996).

- [32] A.L. Fetter e J.D. Walecka, *Quantum Theory of Many - Particle Systems* (McGraw-Hill, New York, 1971).
- [33] F. Kh. Abdullaev, A. Gammal, L. Tomio e T. Frederico, *Phys. Rev. A* **63**, 043604 (2001). cond-mat/0102018.
- [34] C. Huepe, S. Métens, G. Dewel, P. Borckmans and M. E. Brachet, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 1616 (1999).
- [35] A. Gammal, T. Frederico e L. Tomio, *Phys. Rev. E* **60**, 2421 (1999).
- [36] P.A. Ruprecht, M. Edwards, K. Burnett e C.W.Clark, *Phys. Rev. A* **54**, 4178 (1996).
- [37] S. M. Holz, V. S. Filho, L. Tomio and A. Gammal, *Nonlinear Schrödinger Equation with Power-Law Confining Potencial*, em preparação.
- [38] V. S. Filho, A. Gammal, L. Tomio e T. Frederico, *Phys. Rev. A* **62**, 033605 (2000); L. Tomio, Victo S. Filho, A. Gammal e T. Frederico, *Nucl. Phys. A* **684**, 681-683 (2001).
- [39] V. S. Filho, A. Gammal, L. Tomio e T. Frederico, *Modern Challenges on Quantum Optics*, Heidelber Springer-Verlag Lecture Notes LNP **575**, 384 (2001); A. Gammal, V. S. Filho, L. Tomio e T. Frederico, “*Nonlinearity and Disorder: Theory and Applications*” *NATO Advanced Research*, Kluwer Academic Publishers, 61 (2001).
- [40] Victo S. Filho, *Dinâmica Não-Linear em Sistemas bosônicos com Interação Atrativa de Dois Corpos*, Tese de Doutorado - IFT, 2001.
- [41] J. M. Gerton, D. Strekalov, I. Prodan e R. G. Hulet, *Nature* **408**, 692 (2000).
- [42] Y. Kagan, A.E. Muryshev e G.V. Shlyapnikov, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 933 (1998).
- [43] M.J. Ablowitz, C.M. Schober e B.M. Herbst, *Phys. Rev. Lett.* **71**, 2683 (1993); M.J. Ablowitz, B.M. Herbst e C.M. Schober, *Physica A* **228**, 212 (1996).
- [44] R.J. Deissler e K. Kaneko, *Phys. Lett. A* **119**, 397 (1987); H.R. Brand e R.J. Deissler, *Phys. Rev. E* **58**, R4064 (1998).
- [45] E. A. Burt, R. W. Ghrist, C. J. Myatt, M. J. Holland, E. A. Cornell e C. E. Wieman, *Phys. Rev. Lett* **79**, 337 (1997).
- [46] F.Kh. Abdullaev, *Theory of Solitons in Inhomogeneous Media*, (Wiley, Chichester, 1994).
- [47] N.R. Pereira e L. Stenflo, *Phys. Fluids* **20**, 1733 (1977).

- [48] G. Agrawal, *Nonlinear Fiber Optics*, (Academic Press, New York, 1994).
- [49] F.Kh. Abdullaev, S.A. Darmanyany e P.K. Khabibullaev, *Optical Solitons*, (Springer-Verlag, Heidelberg, 1993).
- [50] M.V. Fabrikant, *Wave Motion* **2**, 355 (1980).
- [51] D. Anderson, F. Cattani e M. Lisak, *Phys. Scripta* **T82**, 32 (1999).
- [52] J.J.G. Ripoll e V.M. Perez-Garcia, *Phys. Rev. A* **59**, 2220 (1999).