





**DINÂMICA NÃO-LINEAR EM SISTEMAS BOSÔNICOS  
COM INTERAÇÃO ATRATIVA DE DOIS CORPOS**

**VICTO DOS SANTOS FILHO**

**Orientador:**

**LAURO TOMIO**

**Co-orientador:**

**ARNALDO GAMMAL**



## Agradecimentos

Dedico meus sinceros agradecimentos pela concretização deste trabalho e também pelo meu desenvolvimento pessoal e profissional em toda a minha vida a pessoas muito especiais e, em particular, às que me ajudaram neste período de doutoramento.

- Ao meu Orientador Dr. Lauro Tomio, por me ter aceito como seu aluno, por ter me dado todas as melhores condições possíveis de trabalho, por sua excelente orientação, apoio, amizade, bondade e dignidade incomuns.
- Ao meu Co-orientador Dr. Arnaldo Gammal, por me ter aceito como seu aluno, por toda a sua amizade, apoio, paciência e postura notáveis, por ter me ajudado demais em minha formação e colaborado de forma decisiva com sua orientação para a concretização deste trabalho.
- Ao meu Colaborador Dr. Fatkulla Abdullaev, por ter me ajudado de forma fundamental no desenvolvimento de minha tese, pela amizade, simpatia e paciência durante nosso trabalho conjunto.
- Aos meus pais, pela vida, pelo apoio em todos os momentos, pelo amor que me deram e, principalmente, por terem me educado de forma a colocar princípios, a honra, a postura ética e a dignidade em primeiro lugar durante o viver.
- À minha irmã Valéria, pela grande amizade, por todo o apoio dado em todos os momentos, por toda a ajuda dada naqueles tristes momentos de se lidar com a língua inglesa e por todo o amor.
- À minha irmã Andréa, por ter me ajudado a me aperfeiçoar espiritualmente, a me compreender e me tornar um ser-humano melhor.
- A todos os meus antigos amigos que vivem me apoiando e estimulando até hoje, como o Dailton, o Rinaldo, Hamilton, e tantos outros, aos quais peço desculpas por não citar nominalmente, porque são tantos! Mas, com certeza, o sentimento é verdadeiro!
- A todos meus novos amigos, por toda a sua ajuda, por todo o apoio, por terem colaborado demais para minha evolução atual. Sem querer cometer injustiças, obrigado em especial aos que me ajudaram indireta ou diretamente, como o fiel e nobre Mickel, a íntegra e adorável Arlene (estes dois são tão boas pessoas e amigos

que sigo desejando que eles "caiam na real" e deixem de torcer para aquela "coisa" desonesta para a qual torcem atualmente), o elegante erudito futuro empresário Dennis, o sereno e equilibrado Emerson, o dinâmico Lúcio, o erudito e sensato João, o Santista Gente Fina (Redundância) Cristiano, as simpáticas Raka e Cristiane (a "risadinha"), o gente fina "cuca fria", carioca típico, Marcel (o bacharel), o brilhante matemático Marcos, os simpáticos Antônio, Paulo, Sérgio e Alexandre Alves, os fiéis companheiros de sala Otávio, o "boa praça" impagável, o erudito e sábio William, e o Osvaldo, o grande "jovem" legal! Ufa, espero não ter me esquecido de ninguém!

- A todos os que me ajudaram ou nas disciplinas ou com informática, como o Breno, o Alfonso, o Ricardo, o João, o Antônio, a Zezé e aos bons professores.
- A todos os novos deste ano com quem fiz amizade.
- À Dra. Maria, por seu apoio, amizade, bondade, por todo o carinho e ajuda dada em todos os momentos. Ah, também pelos presentes (que não era para dar!), pelos docinhos, bombocados, salgadinhos, bolinhos, bolos, sorvetes ... etc ... etc ... etc ... e, é lógico, pelos meus quilinhos extras ...
- A todos os funcionários do IFT que, direta ou indiretamente, colaboraram para a concretização deste trabalho.
- Ao Instituto de Física Teórica da Universidade Estadual Paulista, pelo apoio e toda a infra-estrutura.
- À Capes, pelo apoio financeiro.
- À Mística Força Positiva do Cosmos Infinito, que sempre conspira para que eu cresça, a passos lentos e com bastante sofrimento, mas sempre cada vez mais em frente ...

## Resumo

Investigamos a dinâmica da equação de Gross-Pitaevskii em sistemas atômicos com um potencial harmônico confinante e termos não-conservativos (correspondendo à dissipação e à alimentação atômica), para descrever sistemas bosônicos como condensados de Bose-Einstein com comprimento de espalhamento negativo entre dois átomos (interação atrativa). Estudamos a evolução temporal dessa equação para uma ampla escala de parâmetros não-conservativos, de dissipação e alimentação, tendo em vista a verificação de uma dinâmica complexa associada a esse formalismo não-linear de campo médio: ocorrência de caos espaço-temporal. Esse trabalho foi iniciado com a análise de um modelo de campo médio com uma parametrização já utilizada na literatura. Em seguida, analisamos a extensão desse cálculo para uma ampla classe de combinações dos parâmetros não-conservativos. Nessa pesquisa, revelamos um tipo de comportamento possível para a equação: soluções conhecidas como sóliton de Pereira-Stenflo, que são estudadas via princípio variacional e por meio de soluções numéricas exatas. Esses métodos numéricos e variacionais são utilizados para caracterizar em quais casos devem ocorrer instabilidades, resultando ou não no fenômeno de caos espaço-temporal, e em quais casos as soluções devem estar em equilíbrio, resultando em sólitons.

### Palavras Chaves:

Condensação de Bose-Einstein; Equação de Gross-Pitaevskii; Dinâmica Não-Linear; Caos Espaço-Temporal; Autosólitons.

### Áreas do conhecimento:

Dinâmica Não-Linear; Ondas de Matéria; Processos de Colisões e Interações de Átomos e Moléculas; Física Atômica e Molecular; Física Quântica.



## Abstract

We investigate the dynamics of the Gross-Pitaevskii equation in atomic systems with harmonic confining potential, with non-conservative terms corresponding to atomic dissipation and feeding, in order to describe Bose-Einstein systems with negative two-body scattering length (attractive interaction). We have studied the time evolution of the equation in a broad scale of non-conservative parameters, in face of the verification of a complex dynamics associated to this nonlinear mean-field formalism: the occurrence of space-temporal chaos. This work was initiated with the analysis of the mean-field approach with a particular parameterization considered in the literature. Next, we have extended the calculation of the model considering a more general class of non-conservative parameter combinations. In this research, we reach a new kind of possible behavior for the equation: the solutions known Pereira-Stenflo solitons, that are studied by using the variational principle and exact numerical solutions. These variational and numerical methods are considered to characterize in which cases it must be possible the occurrences of instabilities, where chaotic behavior can occur; and where we have stable solitonic solutions.

### Key words:

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

### Research Fields:

Nonlinear dynamics; Matter waves; Processes of collisions and interactions of atoms and molecules; Atomic and molecular physics; Quantum Physics.



# Índice

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>1</b>
1.1	Motivação . . . . .	2
1.2	Objetivos e abordagem teórica . . . . .	4
<b>2</b>	<b>Dinâmica Não-Linear</b>	<b>9</b>
2.1	Conceitos Fundamentais e Classificações . . . . .	9
2.2	Sistemas não-lineares de ordem $n$ . . . . .	14
2.3	Sistemas Não-Lineares Unidimensionais . . . . .	15
2.3.1	Pontos fixos e estabilidade . . . . .	16
2.3.2	Análise de estabilidade linear . . . . .	18
2.4	Sistemas Não-Lineares Bidimensionais . . . . .	20
2.4.1	Introdução . . . . .	20
2.4.2	Retratos de Fase . . . . .	21
2.4.3	Pontos Fixos e Linearização . . . . .	22
2.4.4	Estabilidade dos pontos fixos . . . . .	25
<b>3</b>	<b>Caos e Sólitos</b>	<b>27</b>
3.1	Caos . . . . .	27
3.1.1	Introdução . . . . .	27
3.1.2	Sistema de Lorenz . . . . .	28
3.1.3	Atratores . . . . .	29
3.1.4	Expoentes de Lyapunov . . . . .	32
3.1.5	Caos Espaço-Temporal . . . . .	33
3.1.6	Critério de Deïssler-Kaneko . . . . .	36
3.2	Sólitos . . . . .	37
3.2.1	Introdução . . . . .	37
3.2.2	Sólitos nas equações tipo Schrödinger não-lineares . . . . .	41
3.2.3	Sólitos de Pereira-Stenflo . . . . .	42

<b>4</b>	<b>Condensação de Gás de Bósons Aprisionados</b>	<b>43</b>
4.1	Histórico . . . . .	43
4.2	Gases condensados de metais alcalinos . . . . .	49
4.3	Gases de Bose Não-Homogêneos . . . . .	51
4.4	O gás ideal de Bose em uma armadilha harmônica . . . . .	54
4.5	Bósons aprisionados em temperatura finita . . . . .	58
4.6	Efeitos de tamanho finito . . . . .	63
4.7	Teoria de Gross-Pitaevskii . . . . .	65
4.7.1	Efeitos de interações no condensado de Bose-Einstein . . . . .	65
4.7.2	Formalismo de Gross-Pitaevskii generalizado . . . . .	70
4.8	Métodos de solução . . . . .	73
4.8.1	Método variacional independente do tempo . . . . .	73
4.9	Soluções estacionárias . . . . .	78
4.10	Transição de fase líquido-gás . . . . .	85
4.10.1	Introdução . . . . .	85
4.10.2	Transição de fase no caso estacionário . . . . .	85
<b>5</b>	<b>Instabilidade e Caos em Condensados Bosônicos</b>	<b>89</b>
5.1	Introdução . . . . .	89
5.2	Equação de Gross-Pitaevskii generalizada (EGPG) . . . . .	90
5.2.1	Métodos numéricos para a EGPG . . . . .	94
5.2.2	Caracterização de caos . . . . .	94
5.3	Parametrização de Kagan <i>et al.</i> . . . . .	95
5.3.1	Resultados e discussão . . . . .	96
5.4	Explorando a ocorrência de instabilidade na EGPG . . . . .	99
5.4.1	EGPG com $\xi > 0$ e $\gamma = 0$ . . . . .	100
5.4.2	EGPG com $\gamma > 0$ e $\xi > 0$ . . . . .	101
5.4.3	EGPG com valores intermediários de $\xi$ e $\gamma$ . . . . .	104
5.5	Conclusão . . . . .	108
<b>6</b>	<b>Autosólitons em Condensados de Bose-Einstein</b>	<b>177</b>
6.1	Introdução . . . . .	177
6.2	Sólitons de Pereira-Stenflo . . . . .	179
6.3	Método Variacional Dependente do Tempo . . . . .	183
6.4	Método dos momentos . . . . .	185
6.5	Determinação dos pontos fixos . . . . .	187
6.6	Análise de estabilidade dos pontos fixos . . . . .	188
6.7	Simulações numéricas e discussões . . . . .	191
6.8	Conclusão do capítulo . . . . .	195

<b>7 Conclusões e Perspectivas</b>	<b>199</b>
7.1 Introdução . . . . .	199
7.2 Relevância dos resultados obtidos . . . . .	201
7.3 Perspectivas . . . . .	202
<b>A Equações de Schrödinger não-lineares</b>	<b>203</b>
<b>B Condensação de Gás Ideal Homogêneo de Bósons</b>	<b>205</b>
B.1 Sistemas de Bose . . . . .	205
B.2 Gases de Bose ideais . . . . .	206
B.3 Condensação de Bose-Einstein . . . . .	209
<b>C Funções Especiais Utilizadas</b>	<b>215</b>
<b>D Métodos numéricos</b>	<b>217</b>
D.1 Método de Runge-Kutta . . . . .	217
D.2 Método de Crank-Nicolson . . . . .	219
<b>Referências</b>	<b>221</b>



# Capítulo 1

## Introdução

Ao contrário dos problemas essencialmente lineares estudados na Mecânica Quântica básica e em outras áreas da Física, no estudo de sistemas físicos complexos, como os que envolvem muitos corpos, são maiores os desafios relacionados às técnicas experimentais disponíveis, assim como às técnicas analíticas e computacionais. No estudo de tais sistemas complexos, em geral nos deparamos com equações integrais ou parciais não-lineares, de modo que necessitamos obter o domínio adequado de métodos avançados de cálculo, sejam numéricos, analíticos ou semi-analíticos. Na área experimental foram feitos grandes avanços na física e tecnologia de lasers, de vácuo, de baixas temperaturas e de confinamento magnético, que propiciam novos testes para verificação experimental de conceitos fundamentais da Mecânica Quântica, além das possibilidades de aproveitamento tecnológico. Por outro lado, houve também grandes avanços computacionais e ampla disseminação do uso de computadores, que tornaram possível a implementação de técnicas de cálculo para resolver esses problemas não-lineares complexos e compará-los com os dados experimentais cada vez mais disponíveis.

No estudo de sistemas bosônicos, as equações não-lineares do tipo Schrödinger ocupam uma posição de destaque porque descrevem uma série de fenômenos físicos interessantes, desde a física de plasmas até a física dos condensados de Bose-Einstein. Este último tema de pesquisa adquiriu uma relevância muito grande devido à realização experimental de condensados atômicos há poucos anos atrás. Devido à sua importância no cenário atual, destacamos o fenômeno de condensação, principalmente no caso relevante em que se tem interações atrativas entre dois átomos - onde a condensação era considerada inviável. Esse caso de interações atrativas ainda é de grande interesse e apresenta muitas questões em aberto, em geral, relacionadas à questão do colapso e instabilidades do condensado. Exploramos também soluções dessas equações, na teoria de campo médio, estudando sua dinâmica e estabilidade, que são de interesse matemático e numérico - computacional.

Tais estudos podem ser relevantes para a descrição de outros sistemas físicos de interesse.

## 1.1 Motivação

Recentemente, a pesquisa teórica em condensação de Bose-Einstein, um fenômeno previsto por Einstein há mais de setenta e cinco anos, recebeu um considerável apoio a partir das realizações experimentais de condensação de gases diluídos aprisionados magneticamente, formados por átomos de metais alcalinos que interagem fracamente [1, 2, 3, 4]. A condensação é o fenômeno em que todas as partículas do sistema tendem a ocupar o nível do estado fundamental.

A natureza da interação efetiva átomo-átomo nestes sistemas determina a estabilidade do estado condensado: o potencial efetivo de dois corpos é repulsivo para um comprimento de espalhamento positivo na onda  $s$  e é atrativo para um comprimento de espalhamento negativo [5].

Os átomos ultra-frios aprisionados com interação repulsiva sofrem uma transição de fase para um estado condensado de Bose estável; em alguns casos, esse fenômeno já foi constatado experimentalmente, como para o isótopo 87 do Rubídio ( $^{87}\text{Rb}$ ) [1]. Também recentemente, experimentais obtiveram êxito em atingir o estado condensado do átomo de Hidrogênio ( $^1\text{H}$ ) [6]. O Hidrogênio foi o primeiro grande candidato para se obter condensação bosônica dentre todos os gases aprisionados, mas devido a problemas como a tendência à formação de moléculas ( $\text{H}_2$ ), acabou sendo protelado no início destas pesquisas [7]. Solucionados tais problemas, tornou-se possível recentemente a realização experimental da condensação do Hidrogênio por Fried et al. [6].

A descrição desses gases com interação repulsiva é satisfatoriamente feita através da aproximação de campo médio (ACM), 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. Como veremos, a evolução temporal destas partículas é bem determinada por meio das soluções de um tipo de equação de Schrödinger não-linear denominada equação de Gross-Pitaevskii [8, 9, 10].

A condensação de Bose-Einstein para sistemas com interações efetivas de dois corpos atrativas (ou seja, sistemas em que os átomos têm um comprimento de espalhamento de dois corpos na onda  $s$  negativo) 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 qual já tinha sido previsto em estudos teóricos originais de Zakharov [11]. 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. A condensação para sistemas com interações atrativas foi recentemente realizada experimentalmente para o isótopo 7 do átomo de Lítio ( ${}^7\text{Li}$ ) [4]. Nesse caso, a teoria de Gross-Pitaevskii não consegue descrever o novo comportamento dinâmico que se apresenta, a partir dos dados obtidos experimentalmente. Podemos focar, principalmente, um dos fenômenos associados a condensados de Bose-Einstein de átomos com comprimento de espalhamento negativo: 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 notável de colapso da função de onda correspondente [12]. Neste efeito, o condensado tende a ter seu volume ou raio quadrático médio contraído até aproximadamente um ponto, o que só não ocorre devido à existência de outros efeitos físicos que se tornam relevantes nesta escala e causam uma nova expansão do estado condensado.

Para a descrição atual de um condensado de Bose-Einstein de átomos com comprimento de espalhamento na onda  $s$  negativo, consideram-se basicamente duas formas de abordagem:

- Abordagem de Hulet *et al.* [13], que se baseia nas soluções da equação quântica de Boltzmann;
- Abordagem de Kagan *et al.* [14], que corresponde a uma extensão da equação de Gross-Pitaevskii.

Apesar de ambas as abordagens ainda não estarem plenamente satisfatórias, elas já possuem as propriedades básicas a serem descritas para sistemas com  $a < 0$ , onde o fenômeno de colapso pode ser descrito.

Tendo em vista que a abordagem de Hulet *et al.* conduz a um número de átomos em desacordo com os resultados experimentais, optamos pela abordagem de Kagan *et al.* [14], na qual o número de átomos restante no sistema, após o colapso, pode se aproximar mais dos dados experimentais para valores adequados dos parâmetros da teoria, que descrevem a entrada e saída de átomos do sistema. Além disso, utilizando um apelo mais físico, deve-se notar que existe uma dinâmica complexa associada ao sistema total constituído pelas duas fases (subsistemas), a fase condensada e a não condensada, e supomos que deve ocorrer troca de partículas entre elas. Para a fase condensada, uma boa descrição

física por meio das equações não-lineares do tipo Schrödinger deve considerar termos que descrevam essa perda ou ganho de átomos do condensado, ou seja, considerar o sistema como não-conservativo.

Além dessa primeira motivação, desejava-se também realizar um estudo do comportamento dinâmico de sistemas não-lineares de uma forma ampla, visando descrever sistemas realísticos e descobrir efeitos ou fenômenos decorrentes de tal tipo de evolução temporal. Como as variações não-lineares da equação de Schrödinger têm grande aplicabilidade em muitas áreas da física, em particular em condensação de Bose-Einstein (em cujo caso, recebe o nome de equação de Gross-Pitaevskii), era natural analisar a dinâmica de sistemas regidos por essas equações e estender essa análise para suas possíveis generalizações, como as realizadas em [14]. Assim, a partir de parametrizações realísticas para descrever experiências com condensados atômicos, houve um grande interesse em se fazer um estudo mais amplo dos parâmetros utilizados de forma a abranger outras situações possíveis, bem como limitações das descrições teóricas através da equação não-linear de Schrödinger.

Uma ressalva se faz necessária quanto à expressão “condensação de Bose-Einstein” que é utilizada ao longo dessa tese. Em muitos casos, quando se trata da descrição teórica, estamos nos referindo a resultados obtidos pela descrição através do formalismo de Gross-Pitaevskii generalizado, e não necessariamente ao fenômeno real da condensação. Dessa forma, fenômenos como “caos” ou “autosólitons”, que descrevemos na tese, resultam da solução do modelo teórico, que precisariam ser verificados experimentalmente; ou, o modelo teórico para a condensação precisaria ser melhorado.

## 1.2 Objetivos e abordagem teórica

Nosso objetivo é analisar a dinâmica de sistemas descritos por equações não-lineares do tipo Schrödinger, em especial a descrição dinâmica de condensados de Bose-Einstein de gases ultra-frios aprisionados, formados por átomos que interagem atrativamente. Para tal, estudamos uma generalização da equação de Gross-Pitaevskii que inclui um potencial de aprisionamento e termos não-conservativos que visam descrever a dinâmica de entrada e saída de átomos do sistema condensado para a nuvem térmica que o envolve. Incluem-se dentro desses objetivos:

- Obter soluções para as equações estáticas (autovalores, autofunções, observáveis como o raio quadrático médio, etc.), observando-se que as soluções estacionárias são utilizadas como condições iniciais para nossos estudos da dinâmica correspondente;

- O estudo das propriedades físicas relacionadas aos observáveis considerados no caso estacionário;
- A análise da dinâmica de sistemas descritos pelas equações não-lineares e não-conservativas de Schrödinger, levando-se em conta os parâmetros utilizados na literatura e parâmetros realísticos, bem como uma ampla faixa adicional de valores;
- A análise teórica dos efeitos físicos oriundos da evolução temporal dessas equações.

No caso específico de condensação, para caracterizar o estado condensado com interações atrativas, é relevante a análise de observáveis tais como a densidade no estado fundamental (número de átomos por unidade de volume) e o raio quadrático médio. A densidade do condensado é importante para que se determine sua estabilidade, tendo em vista que há um número crítico de átomos permitido em tais sistemas. O raio quadrático médio é o mais adequado para se analisar o fenômeno do colapso. Após se atingir o número crítico  $N_c$  de átomos, o condensado sofre uma contração em um tempo extremamente pequeno, da ordem de milisegundos, o que pode ser verificado analisando a evolução temporal do raio quadrático médio, que sofre um abrupta redução com o colapso [15]. Assim, destacamos em nossos estudos a evolução no tempo desses observáveis para caracterizar o estado condensado, a fim de determinar a dinâmica desse sistema e os possíveis efeitos ou fenômenos que podem ocorrer no caso em que se tem interações atrativas entre os átomos.

Para analisar a dinâmica dos estados condensados, partimos da abordagem usada na Ref. [14], que se fundamenta, essencialmente, em uma extensão da equação de Gross-Pitaevskii, incluindo termos que descrevem as possibilidades físicas de entrada e saída de átomos desses estados, devido à **alimentação** ou **amplificação** do condensado por átomos da nuvem térmica externa que o envolve e a processos inelásticos de dois e três corpos que contribuem para a **dissipação** de átomos condensados, provocando o fenômeno de **esgotamento** ou **redução do condensado**. Em outras palavras, o estado condensado representa um sistema não-conservativo descrito pela equação de Gross-Pitaevskii generalizada ou não-conservativa.

Os Capítulos 2 e 3, que descrevemos a seguir, correspondem a revisões básicas relacionadas à tese; no Capítulo 4, fazemos uma revisão da teoria de condensação e introduzimos resultados, obtidos por colaboradores do grupo, relacionados a soluções estacionárias da equação não-linear de Schrödinger, que serviram de base para os estudos originais desta tese e suas conclusões, os quais são apresentados nos últimos três capítulos. A seguir, resumimos em detalhes o conteúdo de cada capítulo dessa tese.

- No Capítulo 2, descrevemos conceitos fundamentais da dinâmica não-linear, analisando principalmente os sistemas de equações não-lineares, suas principais

propriedades e formas de abordagem. Destacamos conceitos e técnicas que são utilizados nos outros capítulos dessa tese como, por exemplo, o conceito de ponto fixo e a técnica de linearização do sistema não-linear em torno do ponto fixo.

- No Capítulo 3, descrevemos fenômenos que surgem em sistemas não-lineares: caos e sólitons. Quanto ao caos, enfocamos especificamente o caso de problemas com graus de liberdade espacial e temporal, nos quais é possível a existência de caos espaço-temporal. Quanto aos sólitons, introduzimos um caso particular existente em meios não-conservativos denominado sóliton de Pereira-Stenflo ou autosóliton. Para escolhas adequadas dos parâmetros não-conservativos existentes na abordagem de Kagan *et al.* [14], esses dois fenômenos (caos espaço-temporal e soluções de autosólitons) foram descobertos na dinâmica da equação de Gross-Pitaevskii generalizada [16, 17, 18] para a descrição de sistemas bosônicos, sendo analisados detalhadamente nos Capítulos 5 e 6.
- No Capítulo 4, destacamos uma das principais aplicações das equações não-lineares do tipo Schrödinger: a condensação de Bose-Einstein. Assim, primeiramente fazemos uma breve revisão histórica desde sua formulação até sua recente realização experimental em gases diluídos aprisionados, para estudar, em seguida, a teoria de condensação de Bose-Einstein em gases aprisionados. Inicialmente, descrevemos o tratamento dado a um gás ideal quando aprisionado por uma armadilha de potencial harmônico (gás de Bose não-homogêneo) no caso esfericamente simétrico e também no caso com simetria cilíndrica. Destacamos ainda as modificações na dinâmica de tais sistemas quando há a presença das interações. Em seguida, destacamos a relevância da temperatura na condensação, enfocando o caso de bósons aprisionados em temperatura finita. Como a condensação desses gases diluídos ocorrem em volume finito, analisamos as implicações dessa característica nas propriedades do condensado.

Na seção 4.7, passamos a considerar o gás não-ideal, ou seja, aquele em que as interações entre seus átomos constituintes passam a ter um papel relevante na dinâmica do sistema. Para descrever o gás não-ideal, aplicamos a aproximação de campo médio, em que se faz uso da hipótese de que somente colisões binárias são relevantes para influenciar a dinâmica do condensado em temperaturas extremamente baixas. Com essa aproximação, deduzimos a equação de Gross-Pitaevskii para a evolução da função de onda do estado condensado e analisamos seus limites de validade.

Em seguida, deduzimos também uma possível generalização da equação de Gross-Pitaevskii e resolvemos essa equação com o objetivo de se obter as soluções estacionárias do condensado de Bose-Einstein e o comportamento de seus

observáveis mais importantes, tais como a energia total e o potencial químico. Para solucionar essa equação, empregamos métodos numéricos exatos e métodos semi-analíticos. Descrevemos esses métodos nos apêndices e na seção 4.8.

Como consequência da resolução da equação de Gross-Pitaevskii independente do tempo, descrevemos o fenômeno de transição de fase líquido-gás no estado condensado, como descrito na Ref. [19].

- No Capítulo 5, analisamos primeiramente a existência de caos espaço-temporal na evolução de longo tempo do condensado de Bose-Einstein de  $^7\text{Li}$  ou similar, tal como na Ref. [16], utilizando os valores para os parâmetros não-conservativos adotados na abordagem proposta por Kagan [14]. Para tal, resolvemos a equação de Gross-Pitaevskii generalizada empregando o método de Crank-Nicolson e aplicamos um critério para a demonstração da existência de caos em sistemas com graus de liberdade espacial e temporal, estabelecido anteriormente na literatura [20].

Em seguida, analisamos, tal como na Ref. [17], a dinâmica da sistemas descritos pela equação de Gross-Pitaevskii não-conservativa para uma ampla faixa de valores desses parâmetros não-conservativos, generalizando e ampliando as conclusões da Ref. [16]. Com esses estudos em uma ampla escala de valores, tornou-se possível determinar quando ocorria o fenômeno de caos espaço-temporal e também possibilitou a verificação de soluções que apresentam os efeitos de estabilidade e de instabilidade do sistema sem a presença de caos. Para caracterizar tais fenômenos relacionados a soluções instáveis e estáveis, utilizamos o método variacional dependente do tempo, que descrevemos no Capítulo 6.

- No Capítulo 6, estudamos a ocorrência de autosólitons em condensados de Bose-Einstein com processos inelásticos de dois e três corpos. Primeiramente, analisamos detalhadamente o conceito de autosóliton como proposto inicialmente por Pereira e Stenflo [21]. Em seguida, descrevemos o método variacional dependente do tempo aplicado à equação de Gross-Pitaevskii generalizada ou não-conservativa, tal como na Ref. [18]. Com o sistema de equações obtido a partir desse método, analisamos os pontos fixos, linearizamos o sistema ao redor desses pontos e determinamos as regiões do espaço de parâmetros em que as soluções são instáveis e estáveis. Essas últimas, tendo sido obtidas a partir de um equilíbrio entre os termos não-conservativos, são caracterizadas como sendo soluções solitônicas do tipo dissipativo ou autosólitons.
- Finalmente, no Capítulo 7, destacamos as principais conclusões obtidas, relevância dos resultados e perspectivas teóricas para outros trabalhos que visualizamos em sistemas não-lineares e condensados.

... a primeira parte do livro trata da introdução ao estudo da matemática, com ênfase na importância da lógica e da demonstração.

... a segunda parte trata da aritmética, com ênfase na teoria dos números e na geometria plana.

... a terceira parte trata da álgebra, com ênfase na teoria das equações e na geometria analítica.

... a quarta parte trata da geometria, com ênfase na geometria plana e na geometria espacial.

... a quinta parte trata da trigonometria, com ênfase na teoria dos triângulos e na resolução de problemas.

... a sexta parte trata da matemática aplicada, com ênfase na geometria descritiva e na geometria construtiva.

# Capítulo 2

## Dinâmica Não-Linear

### 2.1 Conceitos Fundamentais e Classificações

Neste capítulo, faremos uma revisão sobre conceitos de dinâmica não-linear que serão utilizados nos cálculos desta tese, considerando principalmente os textos de Moon [22] e Strogatz [23].

Dinâmica é a parte da Física que estuda o movimento dos corpos e seus agentes causadores. Basicamente, a Dinâmica determina a mudança ou variação dos sistemas físicos ao longo do tempo, permitindo-nos analisar se o sistema em questão tende ao equilíbrio, tem um comportamento cíclico ou evolui de uma forma mais complicada. Em geral, os sistemas físicos na natureza são suficientemente complexos, de modo que a dinâmica é descrita por equações não-lineares. Quando, na evolução de um sistema determinístico, a previsão de propriedades e observáveis não é possível, temos uma dinâmica caótica ou caos.

Há aplicações das propriedades dos sistemas dinâmicos lineares e não-lineares, caóticos ou não, em um grande número de áreas importantes, dentre as quais podemos destacar [22]

- Sistemas acústicos, ópticos e elétricos lineares e não-lineares;
- Lasers;
- Cinética química;
- Dinâmica populacional, celeste, do coração humano (e outros ritmos biológicos);
- Osciladores e análise de ruídos;
- Fenômenos como Tunelamento Josephson e Turbulência.

De acordo com o número  $n$  de variáveis dinâmicas necessárias para descrever um sistema, que caracteriza sua ordem ou dimensão, podemos ter os fenômenos e aplicações dados nas tabelas 2.1 e 2.2, conforme Ref. [23]. Como podemos notar, todos os sistemas mais simples constam da tabela 2.1. De forma simples, pode-se dizer que esses sistemas exibem crescimento, decaimento ou equilíbrio, se  $n=1$ , ou oscilações, se  $n=2$ . A classe familiar seguinte corresponde ao domínio das equações diferenciais parciais lineares; encontram-se nesse item as equações de Maxwell, do calor e da função de onda de Schrödinger. Essas equações parciais representam um infinito contínuo de variáveis porque cada ponto no espaço contribui com adicionais graus de liberdade. Embora sejam grandes, eles são tratáveis, graças a técnicas lineares tais como a análise de Fourier. Em contraste, na tabela 2.2, referente a sistemas não-lineares, encontram-se os problemas mais complicados, de acordo com a dimensão  $n$ . Quando aumentamos a dimensão de  $n=1$  para  $n=3$ , encontramos novos fenômenos a cada passo, de pontos fixos e bifurcações, quando  $n=1$ , a oscilações não-lineares, quando  $n=3$ . Em todos os casos, uma abordagem geométrica demonstra ser muito poderosa, fornecendo-nos muitas das informações que desejamos, embora, em geral, não se possa obter fórmulas analíticas como resposta.

A parte final da tabela 2.2 corresponde à fronteira da ciência; não são problemas completamente inexplorados, mas permanecem ainda com muitas questões em aberto. O comportamento dos sistemas é complicado tanto no espaço quanto no tempo, como no movimento de um fluido turbulento ou nos padrões de atividade elétrica em um coração fibrilando. Esses problemas representam desafios para a ciência, que devem ser atacados nos próximos anos com os recursos computacionais disponíveis.

Como exemplo, a condensação de Bose-Einstein envolve mais que uma dessas áreas, pois tem relação direta com sistemas de muitos corpos, óptica e ondas não-lineares, sólitons e mecânica estatística de sistemas finitos.

Os sistemas dinâmicos podem ser abordados de duas formas:

1. Equações diferenciais: Descrevem a evolução de sistemas em tempo contínuo.
2. Aplicações ou mapas iterativos: Descrevem a evolução de sistemas em tempo discreto.

Equações diferenciais são mais frequentes no estudo de sistemas dinâmicos. Os mapas iterativos, entretanto, são muito úteis, não só por fornecerem exemplos simples da ocorrência de caos como também por permitirem a análise de soluções caóticas ou periódicas de equações diferenciais.

Seja um sistema geral  $n$ -dimensional, com componentes  $x_i$  ( $i = 1, 2, \dots, n$ ) dependentes

Tabela 2.1: Possíveis dinâmicas e exemplos de sistemas lineares, conforme o número  $n$  de variáveis dinâmicas

$n=1$	Crescimento, decaimento ou equilíbrio, Crescimento exponencial, Circuito RC, Decaimento Radioativo
$n=2$	Oscilações, Osciladores lineares, Circuito RLC / Massa e Mola, Problema de 2 corpos
$n \gg 1$	Fenômenos Coletivos, Osciladores harmônicos acoplados, Física do estado sólido, Dinâmica molecular, Mecânica Estatística de Equilíbrio
Contínuo	Ondas e padrões, Elasticidade, Equações de onda, Eletromagnetismo Mecânica Quântica, Calor e difusão Acústica Fluidos viscosos

Tabela 2.2: Possíveis dinâmicas e exemplos de sistemas não-lineares, conforme o número  $n$  de variáveis dinâmicas

$n=1$	Pontos fixos, Bifurcações, Sistemas super-amortecidos, Equação logística para espécies simples
$n=2$	Pêndulo, Oscilações não-harmônicas, Ciclos limites, Eletrônica não-linear, Oscilações biológicas, Ciclos predador-presa
$n \geq 3$	Caos, Atratores estranhos (Lorenz), Problema de 3 corpos, Fractais, Aplicações ou mapas iterativos, Osciladores não-lineares forçados
$n \gg 1$	Osciladores não-lineares acoplados, Lasers / Óptica Não-Linear, Mecânica Estatística fora do equilíbrio, Física do Estado Sólido Não-Linear, Arranjos Josephson, Redes neurais, Sistema imunológico, Ecossistema, Economia
Contínuo	Complexidade Espaço-Temporal Ondas não-lineares (choques, sólitons), Plasmas, Terremotos, Teoria Quântica de Campos, Turbulência, Fibrilação, Relatividade Geral, Ondas químicas, Ondas biológicas

do tempo, para equações diferenciais ordinárias,

$$\begin{cases} \dot{x}_1 = f_1(x_1, x_2, \dots, x_n) \\ \dot{x}_2 = f_2(x_1, x_2, \dots, x_n) \\ \vdots \\ \dot{x}_n = f_n(x_1, x_2, \dots, x_n) \end{cases}, \quad (2.1)$$

onde as variáveis dinâmicas  $x_i$  podem, por exemplo, representar concentrações de produtos químicos em um reator, populações de espécies diferentes em um ecossistema ou posições e velocidades de planetas no sistema solar.

Com base no sistema (2.1), podemos classificar os sistemas dinâmicos quanto à linearidade e à dependência explícita do tempo. Quanto à primeira propriedade, temos:

1. Sistemas Lineares: São os sistemas em que todas as variáveis dinâmicas em todas as funções  $f_i$  aparecem somente com a 1ª. potência.
2. Sistemas Não-Lineares: São os sistemas em que existe pelo menos uma função  $f_i$  apresentando as variáveis dinâmicas  $x_i$  com potências maiores que 1, ou produtos ou funções de  $x_i$  (como  $x_1x_2$  ou  $\cos x_i$ ).

Quanto à dependência explícita do tempo, temos

1. Sistemas não-autônomos: São aqueles que apresentam termos dependendo explicitamente do tempo.
2. Sistemas autônomos: São aqueles que não possuem tais termos.

Muitas equações diferenciais podem ser escritas na forma (2.1). Tomemos como exemplo o oscilador amortecido, dado por

$$m \frac{d^2x}{dt^2} + b \frac{dx}{dt} + kx = 0 \quad (2.2)$$

que pode ser escrito na forma (2.1), introduzindo as variáveis  $x_1 = x$  e  $x_2 = \dot{x}$ . Assim, obtém-se um sistema denominado linear e autônomo, com a forma

$$\begin{cases} \dot{x}_1 = x_2 \\ \dot{x}_2 = -\frac{b}{m}x_2 - \frac{k}{m}x_1 \end{cases}. \quad (2.3)$$

Para a equação do oscilador harmônico forçado, dada por

$$m \frac{d^2x}{dt^2} + b \frac{dx}{dt} + kx = F \cos t, \quad (2.4)$$

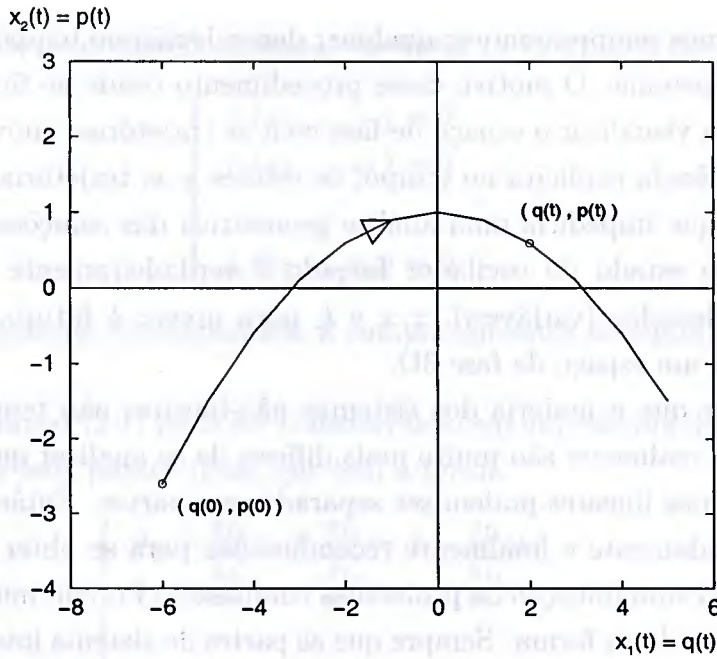


Figura 2.1: Espaço de fase e trajetórias

temos um sistema não-linear e não-autônomo, dado por

$$\begin{cases} \dot{x}_1 = x_2 \\ \dot{x}_2 = -\frac{b}{m}x_2 - \frac{k}{m}x_1 + \frac{F}{m}\cos t \end{cases} \quad (2.5)$$

A equação (2.5) é um exemplo de sistema não-autônomo, mas podemos considerá-lo como autônomo se introduzirmos uma terceira variável dinâmica  $x_3$ , substituindo o tempo, isto é, fazendo  $t = x_3$  e acrescentando ao sistema a equação  $\dot{x}_3 = 1$ .

Consideremos o sistema dado pela equação (2.1). Chamamos de **espaço de fase** associado à equação (2.1) o espaço abstrato gerado por todos os pontos de coordenadas  $(x_1, x_2, \dots, x_n)$ . Uma **trajetória** é uma curva gerada pelo ponto  $(x_1, x_2, \dots, x_n)$  ao se mover pelo espaço de fase. Basicamente, trajetórias são todas as soluções  $(x_1, x_2, \dots, x_n)$  da equação (2.1). A **ordem** ou **dimensão** de um sistema corresponde ao número de variáveis independentes desse sistema ou de seu espaço de fase. Assim, (2.1) é um sistema de  $n$ -ésima ordem ou sistema  $n$ -dimensional. O oscilador harmônico (2.2) é um sistema de segunda ordem e o oscilador forçado é de terceira ordem.

No caso de duas dimensões, precisamos de duas coordenadas no espaço de fase, que são a posição  $x_1(t) = q(t)$  e a velocidade  $x_2(t) = p(t)$ , então a solução  $(q(t), p(t))$  corresponde a um ponto se movendo ao longo de uma trajetória nesse espaço, como na figura 5.6. Um sistema não-autônomo de ordem  $n$  é um caso especial de um sistema autônomo  $(n + 1)$

dimensional. Podemos sempre remover qualquer dependência no tempo adicionando uma dimensão extra ao sistema. O motivo desse procedimento reside no fato de que torna-se possível dessa forma visualizar o espaço de fase com as trajetórias imóveis, “congeladas”. Se houvesse dependência explícita no tempo, os vetores e as trajetórias estariam sempre sendo alterados, o que impediria uma análise geométrica das soluções. Uma motivação mais física é que o estado do oscilador forçado é verdadeiramente 3D: necessitamos conhecer três coordenadas (variáveis),  $x, \dot{x}$  e  $t$ , para prever o futuro, dado o presente, o que torna natural um espaço de fase 3D.

Convém lembrar que a maioria dos sistemas não-lineares não tem solução analítica exata; tais sistemas realmente são muito mais difíceis de se analisar que os lineares. Isso ocorre porque sistemas lineares podem ser separados em partes. Então, cada parte pode ser resolvida separadamente e finalmente recombinadas para se obter a resposta, o que permite uma notável simplificação de problemas complexos. Porém, muitos fenômenos na natureza não ocorrem desta forma. Sempre que as partes do sistema interferem, cooperam ou competem, há interações não-lineares acontecendo e o princípio de superposição não mais se aplica. No domínio da física, a não-linearidade é vital para a operação de um laser, a formação de turbulência em um fluido e a supercondutividade de junções Josephson.

Nas próximas seções, passamos ao estudo da dinâmica não-linear; iniciamos com o sistema geral de ordem  $n$  dado na seção (2.1) para introduzir conceitos como o de ponto fixo e sistema linearizado. A fim de detalhar mais esses e outros pontos importantes, analisamos os casos particulares de sistemas não-lineares unidimensionais (1D), os conceitos associados e possíveis comportamentos dinâmicos; e de sistemas não-lineares bidimensionais (2D), em que analisamos conceitos e propriedades não existentes em 1D. Esses últimos são muito importantes porque permitem a generalização para o caso de ordem  $n$  ( $n$ D).

## 2.2 Sistemas não-lineares de ordem $n$

Para sistemas não-lineares de dimensão  $n$ , da forma (2.1), não é possível esboçar graficamente o espaço de fase correspondente, ao contrário dos casos particulares de sistemas não-lineares em uma ou duas dimensões. Entretanto, podemos analisar conceitos e propriedades desses sistemas generalizando os conceitos dos casos particulares, que veremos em seções posteriores. Quanto aos objetivos dessa tese, é suficiente introduzir os conceitos de ponto fixo e linearização dos sistemas (2.1).

Denominamos de ponto fixo do sistema não-linear (2.1) o ponto  $(x_1, \dots, x_n)$  que satisfaz

$$\begin{cases} f_1(x_1, \dots, x_n) = 0 \\ f_2(x_1, \dots, x_n) = 0 \\ \vdots \\ f_n(x_1, \dots, x_n) = 0 \end{cases}; \quad (2.6)$$

ou seja, são os pontos que correspondem a comportamentos de equilíbrio do sistema.

O sistema não-linear (2.1) pode ser transformado em um sistema linear correspondente em torno de um de seus pontos fixos, que tem a forma

$$\begin{cases} \dot{u}_1 = \frac{\partial f_1}{\partial x_1} u_1 + \frac{\partial f_1}{\partial x_2} u_2 + \dots + \frac{\partial f_1}{\partial x_n} u_n \\ \dot{u}_2 = \frac{\partial f_2}{\partial x_1} u_1 + \frac{\partial f_2}{\partial x_2} u_2 + \dots + \frac{\partial f_2}{\partial x_n} u_n \\ \vdots \\ \dot{u}_n = \frac{\partial f_n}{\partial x_1} u_1 + \frac{\partial f_n}{\partial x_2} u_2 + \dots + \frac{\partial f_n}{\partial x_n} u_n \end{cases}. \quad (2.7)$$

Os autovalores desse sistema determinam se o mesmo é estável ou instável, dependendo para tal dos sinais de suas partes reais. Se encontramos um autovalor com sinal positivo na parte real, o sistema acima é instável, como veremos nos casos particulares a seguir.

## 2.3 Sistemas Não-Lineares Unidimensionais

Os sistemas não-lineares 1D são aqueles da forma

$$\dot{x} = f(x) \quad (2.8)$$

onde  $x(t)$  é uma função real do tempo  $t$  e  $f(x(t))$  é uma função real suave de  $x$  não-linear. Chamamos tais equações de sistemas de primeira ordem ou unidimensionais (1D). Tendo em vista que na maioria dos casos não podemos obter uma solução analítica de (2.8), passamos então a uma abordagem geométrica que nos permita inferir propriedades do sistema.

Essencialmente, uma das técnicas mais básicas da dinâmica não-linear consiste em interpretar uma equação diferencial como um **campo vetorial**. Nós pensamos em  $t$  como o tempo,  $x$  como a posição de uma partícula imaginária movendo-se ao longo da linha real e  $\dot{x}$  como a velocidade da partícula. Então, a equação diferencial (2.8) representa um campo vetorial na linha: ela determina o vetor velocidade  $\dot{x}$  em cada ponto  $x$ . A linha real é o espaço de fase do sistema. Para esboçar o campo vetorial no espaço de fase, traçamos o gráfico de  $x$  versus  $\dot{x}$  e desenhamos setas no eixo- $x$  para indicar o vetor

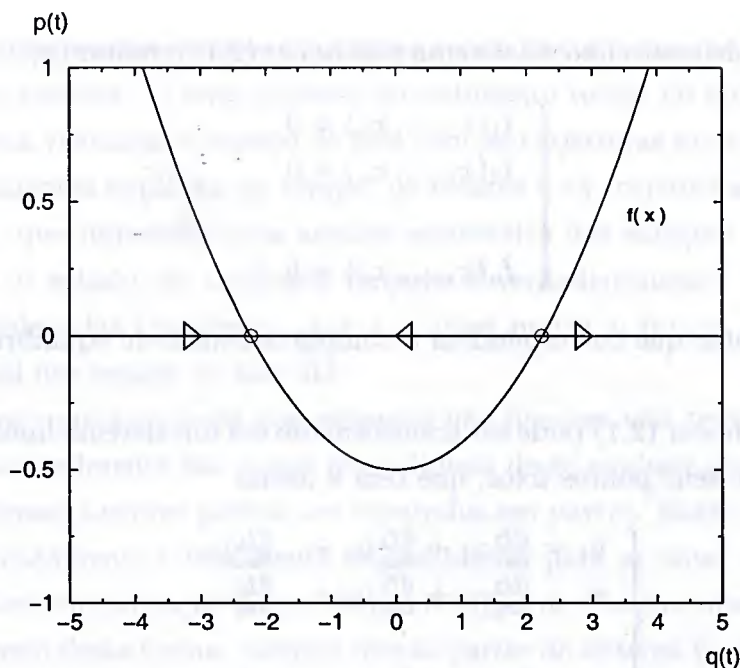


Figura 2.2: Representação do campo vetorial 1D

velocidade correspondente em qualquer  $x$ . Essa seta aponta para a direita quando  $\dot{x} > 0$  e para a esquerda quando  $\dot{x} < 0$ , como vemos na figura 2.2.

Há um modo mais físico de pensar no campo vetorial: imagine que um fluido está se deslocando estacionariamente ao longo do eixo- $x$  com uma velocidade que varia de ponto a ponto, de acordo com a regra  $\dot{x} = f(x)$ . Como mostrado na figura 2.2, o fluxo é para a direita quando  $\dot{x} > 0$  e para a esquerda no caso  $\dot{x} < 0$  e não há fluxo quando  $\dot{x} = 0$ . Esse fluido imaginário é chamado **fluido de fase**. Com essas idéias em mente, podemos compreender ao menos qualitativamente as soluções da equação diferencial (2.8). Nós apenas começamos nossa partícula imaginária em  $x_0$  e assistimos como ela é conduzida pelo fluxo.

### 2.3.1 Pontos fixos e estabilidade

Consideremos novamente a equação ou sistema geral  $\dot{x} = f(x)$ . Já vimos no tópico anterior que o fluxo é para a direita quando  $f(x) > 0$  e para a esquerda quando  $f(x) < 0$ . Para encontrar a solução para esse sistema começando em uma arbitrária condição inicial  $x_0$ , colocamos uma partícula imaginária, conhecida como **ponto de fase** em  $x_0$  e assistimos como ela é conduzida pelo fluxo. À medida em que o tempo passa, o ponto de fase se move ao longo do eixo- $x$  de acordo com alguma função  $x(t)$ . Como já vimos, essa função é chamada de trajetória a partir de  $x_0$  e representa a solução de (2.8) começando em  $x_0$ .

Outros conceitos importantes que estão intimamente associados à dinâmica dos sistemas são os de **ponto fixo** e **estabilidade** dos sistemas.

Definimos um **ponto fixo** como sendo todo ponto do espaço de fase  $x_s$  tal que

$$f(x_s) = 0 . \quad (2.9)$$

Em outras palavras, quando as trajetórias começando em um ponto arbitrário do espaço de fase tendem assintoticamente a um ponto sem fluxo, este é chamado de ponto fixo.

Os pontos fixos são muito importantes porque

1. influenciam significativamente a dinâmica do sistema;
2. correspondem a pontos de estagnação do fluxo;
3. representam soluções de equilíbrio, às vezes chamadas de soluções estacionárias, constantes ou de repouso, pois se  $x = x_s$  inicialmente, então  $x(t) = x_s, \forall t$ .

Quanto à estabilidade, podemos classificar os pontos fixos em:

- a) Pontos fixos estáveis: São aqueles em que o fluxo local dirige-se em direção a eles (também chamados atratores ou sumidouros);
- b) Pontos fixos instáveis: São aqueles em o fluxo local dirige-se deles para fora (também chamados de repulsores ou fontes).
- c) Pontos fixos semi-estáveis: São aqueles em que em um dos sentidos o fluxo afasta-se do ponto e no outro o fluxo aproxima-se do ponto.

Na figura 5.8, representamos o sistema  $\dot{x} = \sin x$ . Nesse caso, temos infinitos pontos fixos, dados por  $x_s = k\pi$ , com  $k \in \mathbb{Z}$ . Como exemplos, temos que  $x_1 = 0$  é um ponto fixo instável e  $x_2 = \pi$  é um ponto fixo estável.

No plano  $(x, \dot{x})$ , representamos com um círculo fechado ( $\bullet$ ) um ponto fixo estável; com um círculo aberto ( $\circ$ ) um ponto fixo instável e com um círculo cruzado ( $\oplus$ ) um ponto fixo semi-estável.

Dizemos que uma solução de equilíbrio é **estável** se toda perturbação suficientemente pequena ao redor dela amortece com o decorrer do tempo. Reciprocamente, uma solução de equilíbrio **instável** é aquela em que perturbações ao redor dela crescem com o tempo.

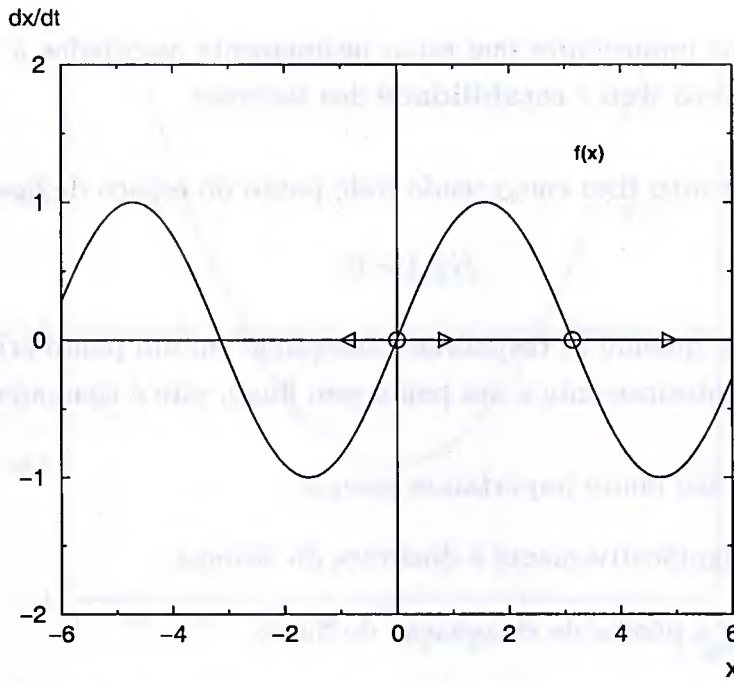


Figura 2.3: Estabilidade dos pontos fixos em  $\dot{x} = \sin x$

O equilíbrio estável é representado geometricamente por pontos fixos estáveis e o equilíbrio instável por pontos fixos instáveis. A definição de equilíbrio estável é baseada em pequenas perturbações; grandes perturbações podem não decair. Como um exemplo, supor o sistema  $\dot{x} = x^2 - 1$ , com pontos fixos  $x = \pm 1$ . Se a perturbação for tal que envie a partícula para  $x$  à direita de  $-1$ , então a partícula não decairá; de fato, o ponto de fase será repellido para  $x = +\infty$ . Para enfatizar este aspecto de estabilidade, nós dizemos que  $x_s = -1$  é **localmente estável**, mas não **globalmente estável**.

### 2.3.2 Análise de estabilidade linear

Até aqui nós temos confiado em métodos gráficos para determinar a estabilidade do ponto fixo. Entretanto, freqüentemente torna-se necessário que se tenha uma medida mais quantitativa de estabilidade, como a taxa de decaimento para um ponto fixo estável. Este tipo de informação pode ser obtida por meio do método de linearização ao redor do ponto fixo, que passamos a explicar.

Seja  $x_s$  um ponto fixo e  $\eta(t) = x(t) - x_s$  uma pequena perturbação longe de  $x_s$ . Para verificar se a perturbação cresce ou decai, deduzimos uma equação diferencial para  $\eta$ :

$$\dot{\eta} = \frac{d}{dt}(x - x_s) \Rightarrow \dot{\eta} = \dot{x} = f(x) = f(x_s + \eta) . \quad (2.10)$$

Usando a expansão de Taylor, obtemos

$$f(x) = f(x_s + \eta) = f(x_s) + \eta f'(x_s) + O(\eta^2) . \quad (2.11)$$

Se  $f'(x_s) \neq 0$ , então os termos  $O(\eta^2)$  podem ser negligenciados; além disso, sabemos que  $f(x_s) = 0$ , por definição de ponto fixo. Logo, obtém-se

$$\dot{\eta} = \eta f'(x_s) . \quad (2.12)$$

Essa equação é linear em  $\eta$  e essa técnica é chamada de **linearização sobre  $x_s$** . Ela mostra que linearização cresce exponencialmente se  $f'(x_s) > 0$  e decai se  $f'(x_s) < 0$ . Se  $f'(x_s) = 0$ , então é necessário considerar termos de segunda ordem e uma análise não-linear é necessária, com base no uso de métodos gráficos e estudo caso a caso, para determinar a estabilidade do sistema. A importância do sinal de  $f'(x_s)$  já estava clara na abordagem geométrica; a novidade é que agora temos uma medida de quão estável é o ponto fixo: isto é determinado pela magnitude de  $f'(x_s)$ , que desempenha o papel de uma taxa de variação exponencial.

Consideremos o caso anteriormente citado do sistema  $\dot{x} = \sin x$ . Os pontos fixos são dados por  $x_s = k\pi$  ( $k$  inteiro); então, para  $l$  inteiro, temos

$$f'(x_s) = \cos k\pi = \begin{cases} 1, & k = 2l \\ -1, & k = 2l + 1 \end{cases} . \quad (2.13)$$

Portanto,  $x_s$  é instável se  $k$  for ímpar e estável se  $k$  for par, o que concorda com nossa análise anterior.

Pontos fixos dominam a dinâmica de sistemas de primeira ordem. Em todos os nossos exemplos, as trajetórias se aproximam de um ponto fixo ou divergem para  $\pm\infty$ . De fato, esses são os únicos comportamentos que podem ocorrer para um campo vetorial na linha. O motivo é que as trajetória são forçadas a aumentar ou diminuir monotonicamente, ou permanecer constantes. Para colocar isso mais geometricamente, o ponto de fase (que descreve a trajetória) nunca pode inverter sua direção. Assim, a aproximação para o equilíbrio é sempre monotônica; “ultrapassagens” e oscilações amortecidas nunca podem ocorrer em sistemas de primeira ordem. Pelo mesmo motivo, oscilações não-amortecidas são impossíveis. Logo, não há soluções periódicas para  $\dot{x} = f(x)$ , a não ser que estejamos lidando com o fluxo em uma circunferência ao invés de uma linha, o que muda totalmente a topologia do problema. Neste último caso, pode-se retornar ao ponto de início e, portanto, os campos vetoriais na circunferência podem exibir soluções periódicas.

## 2.4 Sistemas Não-Lineares Bidimensionais

### 2.4.1 Introdução

Ao invés de analisar toda a complexidade de sistemas dinâmicos de uma vez, pode-se começar primeiro com a mais simples classe de sistemas de ordem superior: os sistemas dinâmicos em duas dimensões. Em sistemas bidimensionais (2D), as trajetórias têm mais graus de liberdade e, então, torna-se possível um mais amplo conjunto de comportamentos dinâmicos, que possibilitam uma compreensão melhor das possíveis dinâmicas em sistemas de dimensões superiores.

Chamamos de **plano de fase** ao plano gerado pelos pontos  $(x, y)$ . As soluções de  $\ddot{\vec{x}} = A\vec{x}$  podem ser visualizadas como trajetórias se movendo nesse plano. Considere a equação de um oscilador harmônico simples. O sistema associado

$$\begin{cases} \dot{x} = v \\ \dot{v} = -\omega^2 x \end{cases} \quad (2.14)$$

onde  $\omega^2 = k/m$ , atribui um vetor  $(\dot{x}, \dot{v}) = (v, -\omega^2 x)$  a cada ponto  $(x, v)$  e, portanto, representa um campo vetorial no plano de fase.

Assim como no caso unidimensional, é útil visualizar o campo vetorial em termos do movimento de um fluido imaginário. No caso atual, imaginamos que o fluido está se movendo estacionariamente no plano de fase com velocidade local  $(\dot{x}, \dot{v})$ . Então, para obter as trajetórias começando em  $(x_0, v_0)$ , colocamos uma partícula imaginária ou ponto de fase em  $(x_0, v_0)$  e analisamos como ela é conduzida pelo fluxo.

Um ponto de fase posto na origem permanece imóvel, portanto a origem é um ponto fixo. Mas, vemos que um ponto de fase começando em outro ponto qualquer circula ao redor da origem. Tais trajetórias formam órbitas fechadas. A figura 2.4 mostra a representação geral do campo vetorial e das trajetórias no espaço de fase.

Interpretando esses resultados fisicamente, temos que o ponto fixo  $(0, 0)$  corresponde ao equilíbrio estático do sistema - a massa está no repouso em sua posição de equilíbrio e permanecerá nessa posição para sempre, pois a mola está relaxada- e as órbitas fechadas correspondem a movimentos periódicos (oscilações da massa).

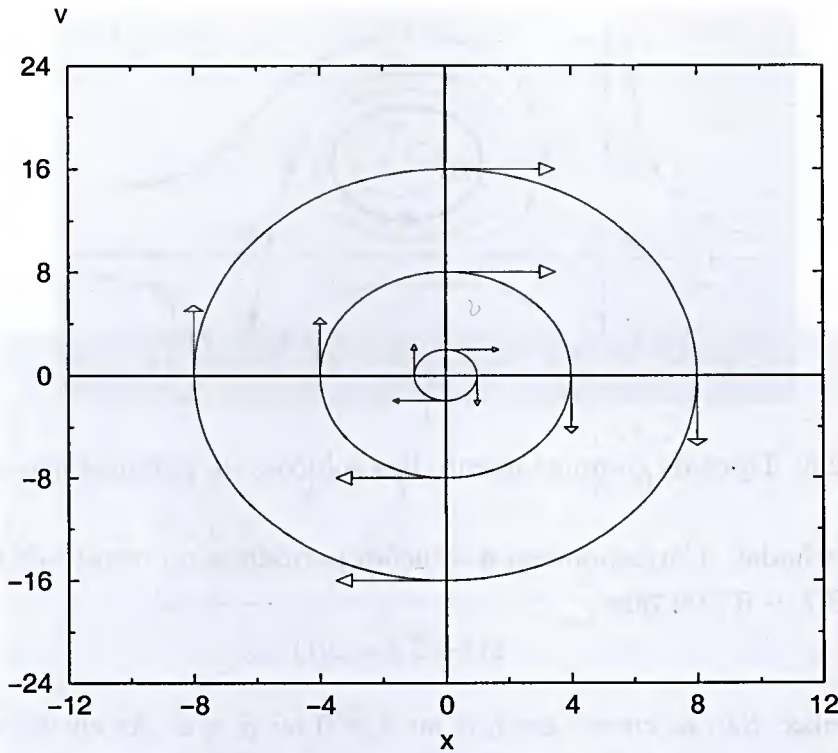


Figura 2.4: Trajetórias e campo vetorial de (2.14)

### 2.4.2 Retratos de Fase

A forma geral de um campo vetorial no plano é

$$\begin{cases} \dot{x}_1 = f_1(x_1, x_2) \\ \dot{x}_2 = f_2(x_1, x_2) \end{cases} \quad (2.15)$$

ou

$$\dot{\vec{x}} = \vec{f}(\vec{x}) \quad , \quad (2.16)$$

onde  $\vec{x} = (x_1, x_2)$  e  $\vec{f}(\vec{x}) = (f_1(\vec{x}), f_2(\vec{x}))$ , sendo  $\vec{x}$  um ponto no plano de fase e  $\dot{\vec{x}}$  o vetor velocidade neste ponto. Fluindo pelo campo vetorial, o ponto de fase traça as soluções ou trajetórias  $\vec{x}(t)$  no plano de fase. Os possíveis comportamentos podem ser vistos na figura 2.5.

Algumas das mais importantes propriedades características dos retratos de fase desses sistemas são

1. Pontos fixos: Correspondem a estados estacionários ou de equilíbrio do sistema, definidos por

$$\vec{f}(\vec{x}_s) = \vec{0} \quad ; \quad (2.17)$$

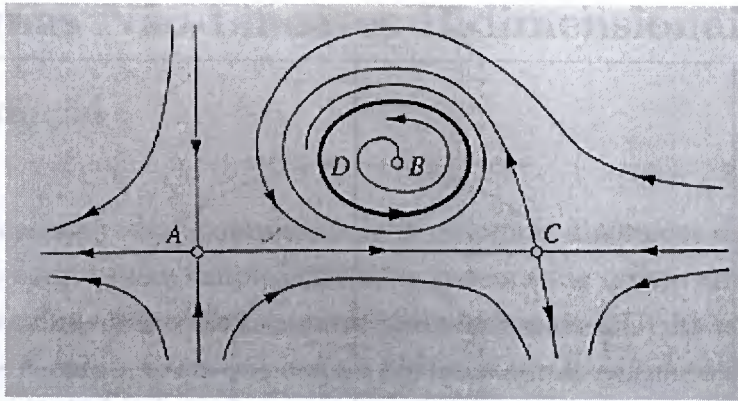


Figura 2.5: Tipos de comportamento das soluções de sistemas não-lineares

2. Órbitas fechadas: Correspondem a soluções periódicas no retrato de fase, definidas por:  $\forall t, \exists T > 0$ , tal que

$$\vec{x}(t + T) = \vec{x}(t) ; \tag{2.18}$$

3. Curvas nulas: São as curvas em que ou  $\dot{x} = 0$  ou  $\dot{y} = 0$ . As curvas nulas indicam onde o fluxo é puramente horizontal ( $\dot{y} = 0$ ) e puramente vertical ( $\dot{x} = 0$ ).

Consideremos, por exemplo, o sistema não-linear

$$\begin{cases} \dot{x} = x + e^{-y} \\ \dot{y} = -y \end{cases} . \tag{2.19}$$

Primeiro, encontramos os pontos fixos resolvendo  $\dot{x} = 0$  e  $\dot{y} = 0$ . A única solução é  $(x_s, y_s) = (-1, 0)$ . Como  $y(t) = y(0)e^{-t}$ , então  $y(t) \rightarrow 0$  quando  $t \rightarrow \infty$ . Então, deduz-se que:  $\dot{x} \cong x + 1$ , cujas soluções crescem exponencialmente, motivo pelo qual concluímos que o ponto fixo é instável. Para obter as curvas nulas, fazemos  $\dot{y} = 0$ , logo  $y = 0$ . Ao longo dessa linha, o fluxo é para a direita, onde  $\dot{x} = x + 1 > 0$ , isto é,  $x > -1$ . Similarmente, o fluxo é vertical em  $x + e^{-y} = 0$ , que ocorre na curva mostrada na figura 2.6. Na parte superior dessa curva, onde  $y > 0$ , o fluxo é para baixo. Essa figura nos dá uma boa noção do padrão de fluxo global.

### 2.4.3 Pontos Fixos e Linearização

Estendendo a idéia de linearização usada em sistemas 1D, podemos aproximar o retrato de fase perto de um ponto fixo por aquele de um sistema linear correspondente. Consideremos o sistema

$$\begin{cases} \dot{x} = f(x, y) \\ \dot{y} = g(x, y) \end{cases} , \tag{2.20}$$

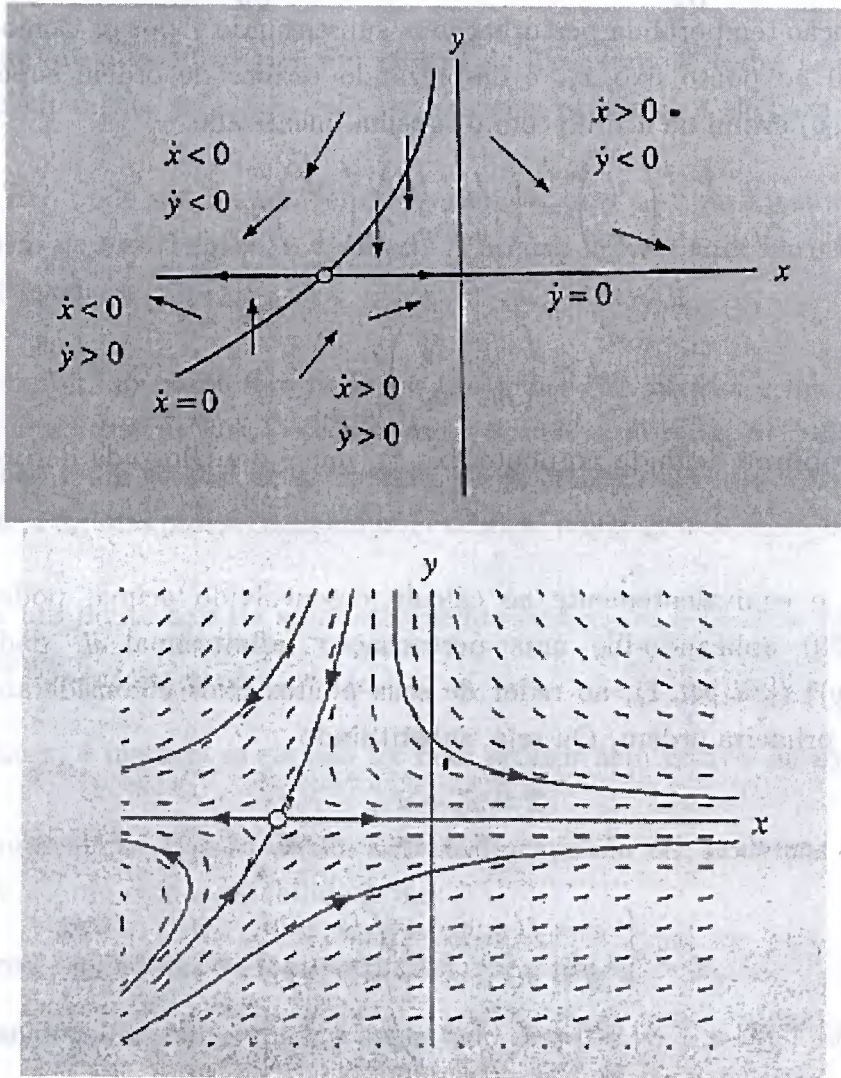


Figura 2.6: Soluções de (2.19)

com  $(x_s, y_s)$  sendo um ponto fixo ( $f(\vec{x}_s) = 0$  e  $g(\vec{x}_s) = 0$ ). Para ver se a partícula cresce ou decai, necessitamos deduzir equações diferenciais para  $u$  e  $v$ . Para  $u$ , temos

$$\dot{u} = \dot{x} = f(x_s + u, y_s + v) \Rightarrow \quad (2.21)$$

$$\dot{u} = f(x_s, y_s) + u f_x(x_s, y_s) + v f_y(x_s, y_s) + O(u^2, v^2, uv) , \quad (2.22)$$

sendo  $f_x \equiv f_x(x_s, y_s) \equiv \frac{\partial f}{\partial x}(x_s, y_s)$  e  $f_y \equiv f_y(x_s, y_s) \equiv \frac{\partial f}{\partial y}(x_s, y_s)$ . De forma análoga, obtemos a variação temporal da perturbação  $v$ , substituindo  $f$  por  $g$ . Como  $f(x_s, y_s) = 0$  e  $g(x_s, y_s) = 0$  no ponto fixo  $\vec{x}_s$ , e desprezando termos de ordem superior, o vetor perturbação  $(u, v)$  evolui de acordo com o sistema linearizado

$$\begin{pmatrix} \dot{u} \\ \dot{v} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_x & f_y \\ g_x & g_y \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}, \quad (2.23)$$

onde

$$J = \begin{pmatrix} f_x & f_y \\ g_x & g_y \end{pmatrix}_{(x_s, y_s)} \quad (2.24)$$

é a matriz **Jacobiana** definida no ponto fixo  $\vec{x}_s$ , que é o análogo da derivada  $f'(x_s)$  em sistemas 1D.

Alternativa e equivalentemente ao cálculo desenvolvido acima, pode-se linearizar o sistema (2.20) aplicando-lhe uma perturbação infinitesimal  $\vec{u}$ , dado por  $\vec{u} = (f_1(x, y), g_1(x, y))$  ( $|\vec{u}| \ll 1$ ), ao redor de seus pontos fixos e considerando os termos resultantes até primeira ordem. Ou seja, substituindo

$$\vec{x} = \vec{x}_s + \vec{u} , \quad (2.25)$$

em (2.20),

$$\begin{cases} \dot{x} = f(x_s, y_s) + f_1(x, y) \\ \dot{y} = g(x_s, y_s) + g_1(x, y) \end{cases} , \quad (2.26)$$

com as condições  $|f_1| \ll 1$  e  $|g_1| \ll 1$ , obtém-se também a matriz Jacobiana (2.24).

Nesse processo de linearização em duas dimensões, obtemos um sistema linear 2D até primeira ordem. Assim, os pontos fixos do sistema são os do tipo clássico estudados em sistemas lineares bidimensionais: nó, espiral, centro ou ponto de sela.

Pode-se mostrar que o resultado (2.24) é válido desde que os pontos fixos para o sistema linearizado não sejam centros, nós degenerados e pontos fixos não isolados, que são muito sensíveis e podem ser alterados por pequenos termos não-lineares. Mas, se (2.24) prevê uma sela, nó ou espiral, então o ponto fixo realmente o é no correspondente sistema não-linear.

### 2.4.4 Estabilidade dos pontos fixos

Dizemos que  $\vec{x}_s$  é um **ponto fixo atrator** se todas as trajetórias próximas de  $\vec{x}_s$  convergem para ele quando  $t \rightarrow \infty$ , isto é,  $\vec{x}(t) \rightarrow \vec{x}_s$  quando  $t \rightarrow \infty$ .

Se  $\vec{x}_s$  atrai todas as trajetórias no plano, ele é chamado um **atrator global**.

Dizemos que um ponto fixo  $x_s$  é um **estável de Lyapunov** se todas as trajetórias que começam suficientemente próximas dele permanecem próximas a ele para todo o tempo.

Um ponto fixo pode ser um estável de Lyapunov, mas não um atrator. Esse tipo de ponto é chamado de **neutramente estável**. A origem do oscilador harmônico simples é neutramente estável.

Reciprocamente, um ponto fixo pode ser um ponto fixo atrator e não um estável de Lyapunov, como no caso de  $\dot{\theta} = 1 - \cos \theta$ . Aqui,  $\theta_s = 0$  atrai todas as trajetórias quando  $t \rightarrow \infty$ , mas não é um estável de Lyapunov; há trajetórias que começam infinitesimalmente próximas a  $\theta_s$ , mas prosseguem em um excursão muito grande antes de retornar a  $\theta_s$ .

Chamamos um ponto fixo de **assintoticamente estável** ou **estável** se ele for atrator e estável de Lyapunov.

Dizemos que  $x_s$  é **instável** se ele não for nem atrator nem estável de Lyapunov.

Dados os autovalores  $\lambda_1$  e  $\lambda_2$  de um sistema linearizado 2D, podemos classificar seus pontos fixos de acordo com a estabilidade em:

1. Repulsores, repelidores ou fontes:  $\text{Re}(\lambda_1) > 0$  e  $\text{Re}(\lambda_2) > 0$ .
2. Atratores ou sumidouros:  $\text{Re}(\lambda_1) < 0$  e  $\text{Re}(\lambda_2) < 0$
3. Selas: Os auto-valores têm sinais opostos
4. Centros:  $\text{Re}(\lambda_1) = \text{Re}(\lambda_2) = 0$
5. Pontos fixos não isolados:  $\lambda_1 = 0$  ou  $\lambda_2 = 0$ .

Seja  $\mathcal{M}$  um espaço métrico completo e  $f: \mathcal{M} \rightarrow \mathcal{M}$  uma função contínua. Considere a iteração  $x_{n+1} = f(x_n)$  para  $x_0 \in \mathcal{M}$ . Se  $f$  satisfaz a condição de contração, então a sequência  $\{x_n\}$  converge para um ponto fixo único  $x^*$  em  $\mathcal{M}$ .

Definição 2.1. Uma função  $f: \mathcal{M} \rightarrow \mathcal{M}$  é dita ser uma contração se existe  $\alpha \in [0, 1)$  tal que  $d(f(x), f(y)) \leq \alpha d(x, y)$  para quaisquer  $x, y \in \mathcal{M}$ . Neste caso, o ponto fixo  $x^*$  é chamado de ponto fixo atrator de  $f$ .

Proposição 2.2. Se  $f: \mathcal{M} \rightarrow \mathcal{M}$  é uma contração, então a sequência  $\{x_n\}$  definida por  $x_{n+1} = f(x_n)$  converge para o ponto fixo  $x^*$  de  $f$ . Além disso,  $d(x_n, x^*) \leq \alpha^n d(x_0, x^*)$ .

Exemplo 2.3. Considere a função  $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$  definida por  $f(x) = \frac{x}{2}$ . Esta função é uma contração com  $\alpha = \frac{1}{2}$ . Portanto, a sequência  $\{x_n\}$  definida por  $x_{n+1} = \frac{x_n}{2}$  converge para o ponto fixo  $x^* = 0$ .

Exemplo 2.4. Considere a função  $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$  definida por  $f(x) = x^2$ . Esta função não é uma contração em todo  $\mathbb{R}$ , mas é uma contração no intervalo  $[0, 1]$ . Portanto, a sequência  $\{x_n\}$  definida por  $x_{n+1} = x_n^2$  converge para o ponto fixo  $x^* = 0$  para qualquer  $x_0 \in [0, 1]$ .

Exemplo 2.5. Considere a função  $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$  definida por  $f(x) = x + 1$ . Esta função não é uma contração. Portanto, a sequência  $\{x_n\}$  definida por  $x_{n+1} = x_n + 1$  não converge para um ponto fixo.

Exemplo 2.6. Considere a função  $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$  definida por  $f(x) = x + \sin(x)$ . Esta função não é uma contração. Portanto, a sequência  $\{x_n\}$  definida por  $x_{n+1} = x_n + \sin(x_n)$  não converge para um ponto fixo.

Exemplo 2.7. Considere a função  $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$  definida por  $f(x) = x + \cos(x)$ . Esta função não é uma contração. Portanto, a sequência  $\{x_n\}$  definida por  $x_{n+1} = x_n + \cos(x_n)$  não converge para um ponto fixo.

Exemplo 2.8. Considere a função  $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$  definida por  $f(x) = x + \sin(x) + \cos(x)$ . Esta função não é uma contração. Portanto, a sequência  $\{x_n\}$  definida por  $x_{n+1} = x_n + \sin(x_n) + \cos(x_n)$  não converge para um ponto fixo.

Exemplo 2.9. Considere a função  $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$  definida por  $f(x) = x + \sin(x) + \cos(x) + \sin(x)$ . Esta função não é uma contração. Portanto, a sequência  $\{x_n\}$  definida por  $x_{n+1} = x_n + \sin(x_n) + \cos(x_n) + \sin(x_n)$  não converge para um ponto fixo.

Exemplo 2.10. Considere a função  $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$  definida por  $f(x) = x + \sin(x) + \cos(x) + \sin(x) + \cos(x)$ . Esta função não é uma contração. Portanto, a sequência  $\{x_n\}$  definida por  $x_{n+1} = x_n + \sin(x_n) + \cos(x_n) + \sin(x_n) + \cos(x_n)$  não converge para um ponto fixo.

# Capítulo 3

## Caos e Sólitons

Dois fenômenos importantes e de grande interesse surgem na análise da dinâmica de sistemas não-lineares: caos e sólitons. O primeiro só pode ocorrer para sistemas com três ou mais graus de liberdade, enquanto que o segundo tem sido amplamente estudado e descoberto na dinâmica de equações unidimensionais. Com base nas referências [22, 23, 24, 25, 26], analisaremos nesse capítulo ambos os fenômenos e casos particulares importantes que têm relação direta com o formalismo que será utilizado em outros capítulos.

### 3.1 Caos

#### 3.1.1 Introdução

Caos é o fenômeno não-linear caracterizado por um comportamento aperiódico ao longo de um tempo suficientemente grande em sistemas determinísticos que apresentam dependência sensível das condições iniciais. Vamos analisar mais detalhadamente os conceitos que acabamos de mencionar: (1) comportamento aperiódico de longo tempo, (2) sistema determinístico e (3) dependência sensível das condições iniciais.

##### 1. Comportamento aperiódico de longo tempo

Dizemos que um sistema dinâmico apresenta comportamento aperiódico de longo tempo quando há trajetórias que não convergem para pontos fixos, órbitas periódicas ou quasiperiódicas quando  $t \rightarrow \infty$ . Dada uma condição inicial aleatória, as trajetórias aperiódicas devem ocorrer com probabilidade não-nula.

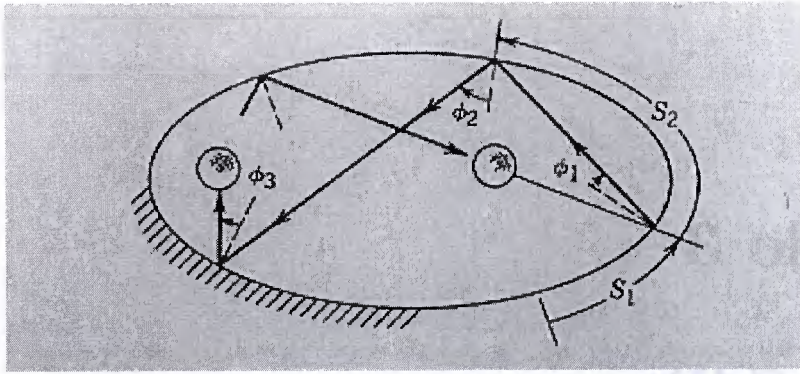


Figura 3.1: Movimento caótico em uma mesa de bilhar elíptica

## 2. Sistemas determinísticos

Um sistema determinístico é aquele em que não há condições iniciais ou parâmetros imprevisíveis (aleatórios ou de ruído). O comportamento irregular surge da não-linearidade do sistema.

## 3. Dependência sensível das condições iniciais

Um sistema apresenta dependência sensível das condições iniciais quando duas de suas trajetórias, mesmo estando extremamente próximas ou quase indistinguíveis, separam-se de forma exponencial.

Como um exemplo, consideremos uma bola de bilhar ideal (onde a rotação de corpo rígido foi negligenciada) que colide com os lados de uma mesa de bilhar com forma elíptica, como na figura 3.1. Quando se assume impacto elástico, a energia permanece constante, mas a bola pode vagar na mesa sem repetir exatamente os movimentos anteriores em certas mesas elípticas.

### 3.1.2 Sistema de Lorenz

Um exemplo clássico de sistema caótico é o sistema de Lorenz, dado por

$$\begin{cases} \dot{x} = \sigma(y - x) \\ \dot{y} = rx - y - xz \\ \dot{z} = xy - bz \end{cases}, \quad (3.1)$$

onde  $\sigma > 0$ ,  $r > 0$  e  $b > 0$  são parâmetros do sistema em análise. Ed Lorenz [23] deduziu a equação (3.1) em 1963 com base em um modelo simplificado de convecção na atmosfera. O sistema de Lorenz também surge em modelos de lasers e dinamos, bem como em

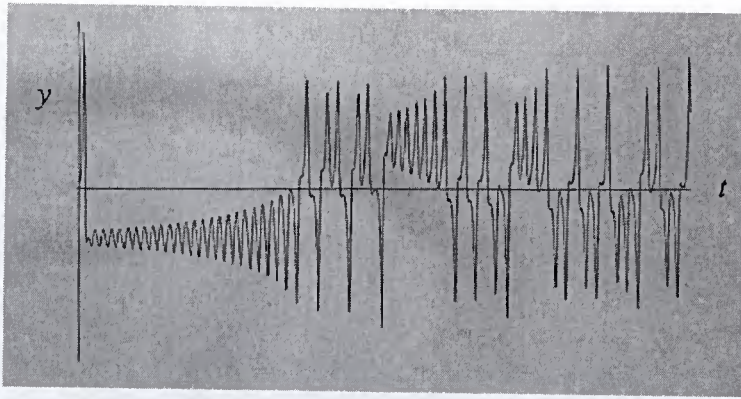


Figura 3.2: Gráfico da variável dinâmica  $y$  de um sistema de Lorenz, que exibe comportamento caótico [23].

outros sistema físicos. Lorenz descobriu que este sistema determinístico aparentemente simples exibe uma dinâmica extremamente irregular. A figura 3.2 exibe o comportamento da variável dinâmica  $y$  de um sistema de Lorenz ao longo do tempo. O comportamento irregular de longo tempo indica a existência de caos.

Esse sistema é muito importante tanto do ponto de vista matemático como histórico, por ter originado o estudo de caos.

### 3.1.3 Atratores

Os estados físicos determinísticos do movimento dinâmico são caracterizados por três tipos de atratores clássicos. Denominamos tais estados de atratores porque se alguma forma de amortecimento ocorre, os transientes decaem e o sistema é atraído para um entre três movimentos dinâmicos possíveis: (1) equilíbrio; (2) movimento periódico (ou ciclo limite) e (3) movimento quasiperiódico. Um atrator é um conjunto para o qual todas as trajetórias vizinhas convergem. Mais precisamente, definimos um atrator como um conjunto fechado  $\mathcal{A}$  que satisfaz três propriedades:

1.  $\mathcal{A}$  é invariante: qualquer trajetória  $x(t)$  que inicia em  $\mathcal{A}$  permanece em  $\mathcal{A}$ ,  $\forall t$ .
2.  $\mathcal{A}$  atrai um conjunto aberto de condições iniciais: há um conjunto aberto  $U$  contendo  $\mathcal{A}$  tal que se  $\vec{x}(0) \in U$ , então a distância de  $x(t)$  a  $\mathcal{A}$  tende a zero quando  $t \rightarrow \infty$ . Isto significa que  $\mathcal{A}$  atrai todas as trajetórias que começam suficientemente próximas a ele. O maior conjunto  $U$  com tal propriedade é chamado de **bacia de atração** de  $\mathcal{A}$ .
3.  $\mathcal{A}$  é **minimal**: Dizemos que um conjunto é minimal se não há subconjunto próprio

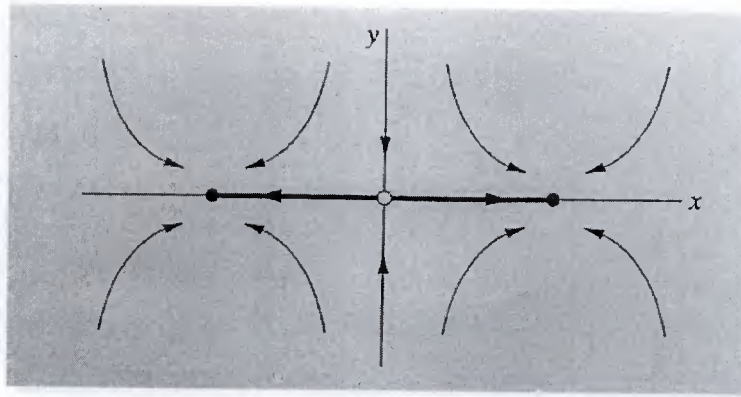


Figura 3.3: Espaço de fase de (3.2) e o conjunto  $I$  [23].

de  $\mathcal{A}$  que satisfaz as propriedades 1 e 2.

Considere o sistema

$$\begin{cases} \dot{x} = x - x^3 \\ \dot{y} = -y \end{cases} \quad (3.2)$$

e seja  $I$  o intervalo  $-1 \leq x \leq 1, y = 0$ . Podemos verificar que  $I$  é invariante e atrai um conjunto aberto de condições iniciais, mas não é um atrator. O retrato de fase é mostrado na figura 3.3. Há pontos fixos estáveis nos pontos extremos  $(\pm 1, 0)$  de  $I$  e um ponto de sela na origem. Vemos nessa figura que  $I$  é invariante: qualquer trajetória que começa em  $I$  fica em  $I$  para sempre. Além do mais,  $I$  certamente atrai um conjunto aberto de condições iniciais - ele atrai todas as trajetórias no plano  $xy$ . Assim, a propriedade 2 é também satisfeita. Mas,  $I$  não é um atrator porque não é minimal. Os pontos fixos estáveis  $(\pm 1, 0)$  são subconjuntos próprios de  $I$  que também satisfazem as propriedades 1 e 2. Esses pontos são os únicos atratores para o sistema. Portanto, mesmo que um conjunto atraia qualquer trajetória, ele pode não ser atrator porque pode não ser minimal - ele pode conter atratores menores.

Os atratores clássicos são todos associados com objetos geométricos clássicos no espaço de fase: o estado de equilíbrio é associado com um ponto; o ciclo limite ou movimento periódico é associado com uma curva fechada e o movimento quasiperiódico com uma superfície no espaço de fase 3D.

Nosso objetivo a seguir é descrever um novo tipo de movimento em dinâmica não-linear que não se enquadra nos atratores clássicos acima. Esta nova classe de movimentos é caótica, ou seja, não é previsível quando há uma incerteza pequena na condição inicial e é freqüentemente associada com um estado de movimento chamado de **atrator estranho**.

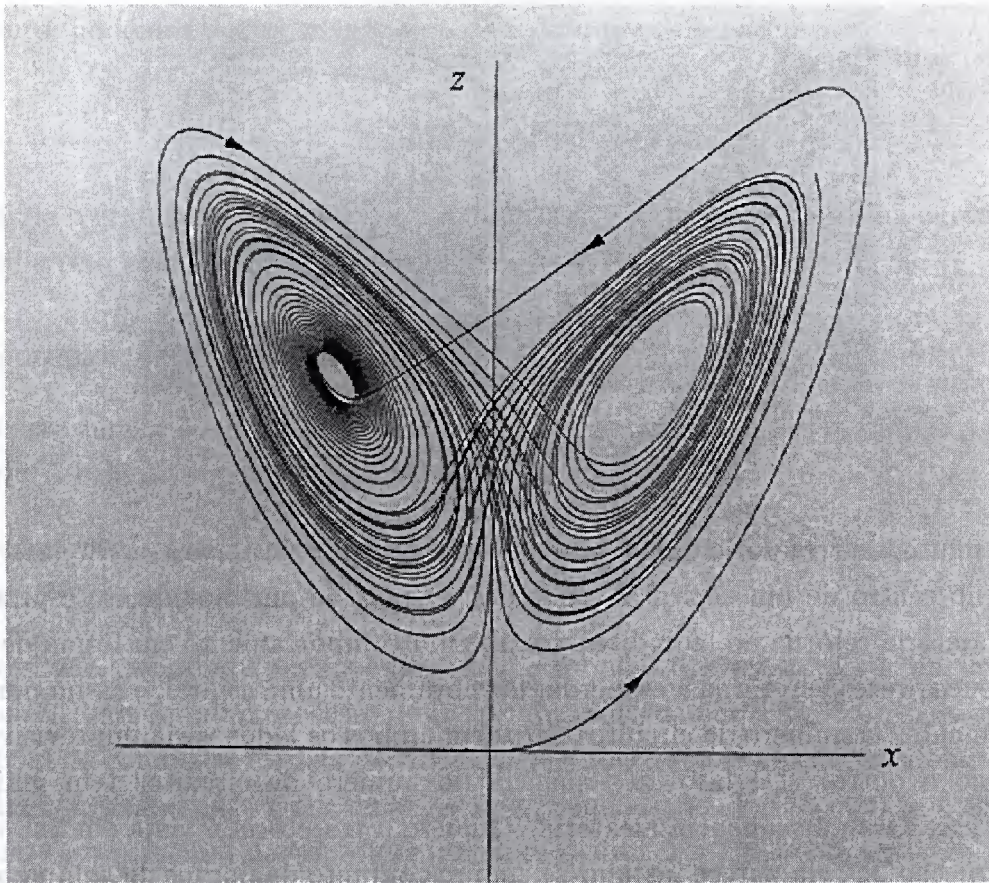


Figura 3.4: Atrator estranho do sistema de Lorenz (3.3).

Definimos um **atrator estranho** como um atrator que exibe sensível dependência de condições iniciais. Eles foram originalmente chamados estranhos porque são associados com objetos geométricos chamados conjuntos fractais. Em um espaço de fase 3D, o conjunto fractal de um atrator estranho parece uma coleção de um conjunto infinito de superfícies paralelas, algumas separadas por distâncias que se aproximam dos infinitesimais.

Como exemplo, o sistema de Lorenz

$$\begin{cases} \dot{x} = 10y - 10x \\ \dot{y} = 28x - y - xz \\ \dot{z} = xy - \frac{8}{3}z \end{cases}, \quad (3.3)$$

apresenta em seu espaço de fase 3D o comportamento de um atrator estranho, como se pode notar na figura 3.4.

A trajetória apresentada parece atravessar-se repetidamente, mas isto é apenas uma ilusão devido à projeção da trajetória tridimensional no plano. Em 3D, não ocorrem auto-intersecções.

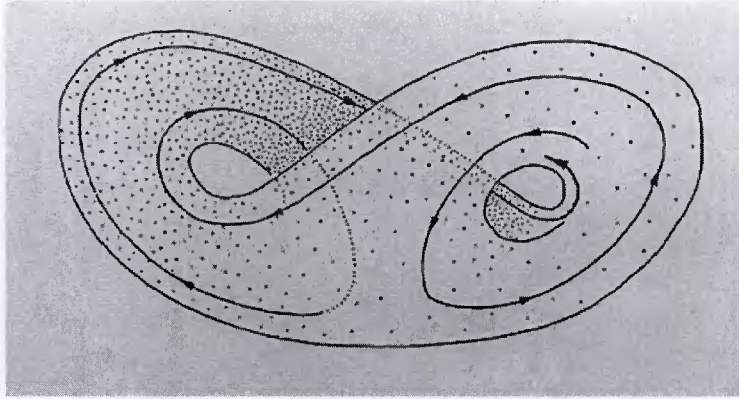


Figura 3.5: Gráfico 3D de (3.3) [23].

Nessa figura, a trajetória inicia próximo da origem, vira para a direita, e então mergulha no centro de um espiral à esquerda. Depois de um movimento espiral muito lento, a trajetória retorna ao lado direito, exibe um comportamento em forma de espiral, girando poucas vezes, e retorna à esquerda, faz novamente uma espiral, e assim por diante, indefinidamente. O número de circuitos feitos em ambos os lados varia imprevisivelmente de um ciclo a outro. De fato, a seqüência do número de circuitos tem muitas das características de uma seqüência aleatória. Quando a trajetória é vista em 3D, ao invés de uma projeção 2D, ela parece instalar-se em um conjunto de pontos de volume zero que possui a forma de um par de asas de borboleta. A figura 3.5 mostra a forma desse atrator estranho.

### 3.1.4 Expoentes de Lyapunov

A fim de caracterizar a existência de caos, definimos parâmetros chamados expoentes de Lyapunov [24, 23, 22]. Para tornar as idéias mais precisas, suponhamos que, em um sistema aperiódico, deixemos os transientes decaírem, de modo que a trajetória está sobre o atrator. Seja  $\vec{x}(t)$  um ponto no atrator no tempo  $t$  e  $\vec{y}(t)$  um ponto infinitesimalmente próximo no início da evolução, ou seja,  $\vec{x}(t) = \vec{y}(t) + \vec{\delta}(t)$ , com  $|\vec{\delta}(0)| \ll 1$ . Se o sistema é caótico, a separação  $\vec{\delta}$  cresce como

$$|\vec{\delta}(t)| \cong |\vec{\delta}(0)| e^{\lambda t} \quad (3.4)$$

com  $\lambda > 0$ . O número  $\lambda$  é o chamado expoente de Lyapunov. Em outras palavras, trajetórias vizinhas separam-se rapidamente de forma exponencial. Para um período de tempo longo, perdem-se as informações sobre o sistema inicial.

Portanto, podemos definir o expoente de Lyapunov como a função

$$\lambda = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \ln \frac{|\vec{\delta}(t)|}{|\vec{\delta}(0)|}. \quad (3.5)$$

Traçando o gráfico de  $\lambda$  contra  $t$ , como na figura 3.6, encontramos uma curva próxima a uma linha reta com uma inclinação positiva de valor  $\lambda$ .

É importante ressaltar que:

- A curva nunca é exatamente uma reta, apresentando sempre ondulações devido às variações da divergência exponencial ao longo do atrator;
- A divergência exponencial deve parar quando a separação se torna comparável ao diâmetro do atrator;

Na verdade, existem  $n$  expoentes de Lyapunov diferentes para um sistema  $n$  dimensional. Para definir o espectro de Lyapunov, consideremos a evolução de uma esfera infinitesimal de condições iniciais perturbadas. Durante sua evolução, a esfera se tornará distorcida, transformando-se em um elipsóide. Sendo  $\delta_k(t)$ ,  $k = 1, \dots, n$ , o comprimento do  $k$ -ésimo eixo principal do elipsóide, podemos definir o  $k$ -ésimo expoente de Lyapunov como sendo

$$\lambda_k = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \ln \frac{|\vec{\delta}_k(t)|}{|\vec{\delta}_k(0)|}. \quad (3.6)$$

Assim, quando calculamos o espectro de expoentes de Lyapunov, se obtivermos um desses valores positivo, podemos concluir que o sistema é caótico.

### 3.1.5 Caos Espaço-Temporal

Sistemas físicos regidos por equações diferenciais parciais podem apresentar um tipo de comportamento caótico que chamamos de caos espaço-temporal, devido ao comportamento aperiódico de tempo longo que tais sistemas apresentam em seus graus de liberdade tanto temporal quanto espacial.

Até o momento, uma definição clara de caos espacial ou complexidade não é ainda universalmente aceita. Para alguns, esse fenômeno é evidenciado por um aumento na dimensão fractal do atrator dinâmico associado com um número crescente de funções modais espaciais acopladas. Para outros, a medida desse tipo de caos envolve uma perda da correlação espacial ou um aumento na entropia espacial [25].

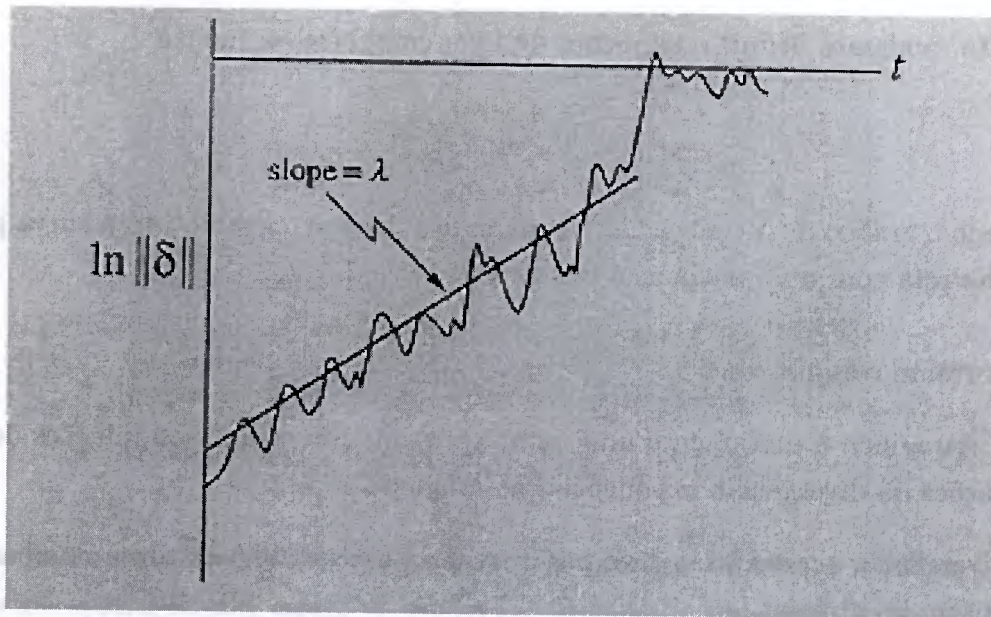


Figura 3.6: Gráfico para determinar o expoente de Lyapunov [23].

Mesmo assim, podemos tomar como sendo uma boa conceituação de **caos espaço-temporal** a de um fenômeno não-linear caracterizado por um comportamento aperiódico tanto temporal quanto espacial, para intervalos de tempo grandes, em um sistema determinístico que apresenta dependência sensível das condições iniciais.

Quando os padrões temporais são regulares e periódicos, esperam-se padrões espaciais também regulares. Entretanto, quando os eventos temporais são caóticos, pode-se ter dois tipos de comportamento:

- Em alguns sistemas físicos, todas as partículas são coerentes espacialmente mesmo que elas se comportem caoticamente no tempo;
- Em outros, como no caso de fluidos turbulentos, tem-se tanto complexidade temporal quanto espacial.

Até recentemente (aproximadamente 1987), a maioria das pesquisas em caos estava restrita à dinâmica temporal [22]. Mas, para sistemas físicos descritos por equações diferenciais parciais deve-se lidar simultaneamente com o espaço e o tempo. Como muitos sistemas físicos atualmente em estudo são descritos por equações diferenciais parciais, tem havido muito mais trabalhos de pesquisa nesta área.

Mesmo assim, estudos de dinâmica caótica espaço-temporal estão ainda em estágio exploratório. Esses estudos não têm gerado um tipo de ferramenta genérica e ou resultados que possam ser aplicados a diferentes problemas físicos do mesmo modo que na dinâmica

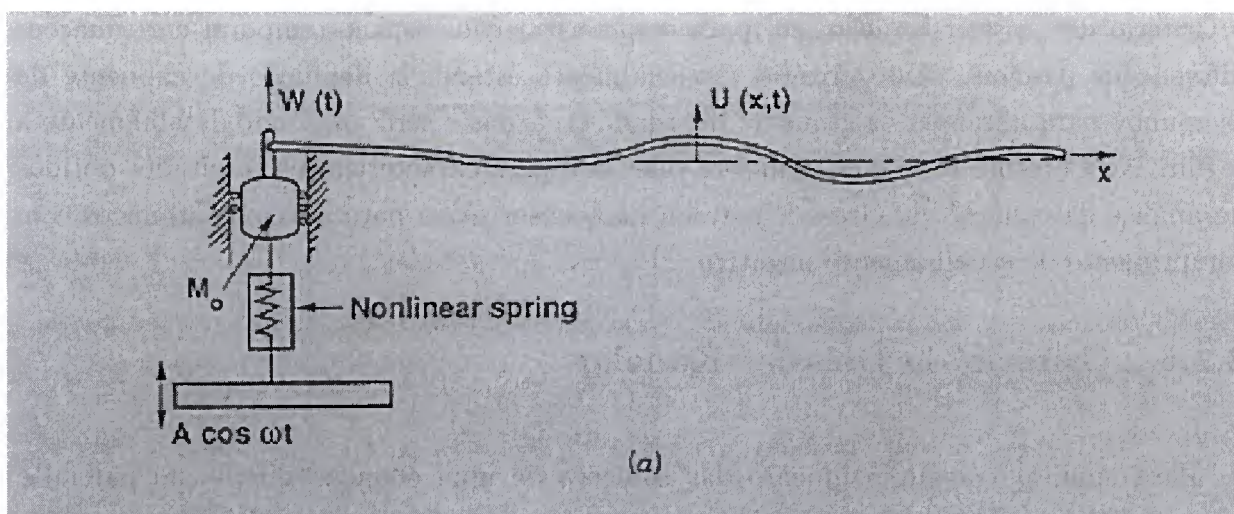


Figura 3.7: Modelo do guia de ondas para armazenar a dinâmica caótica temporal em um padrão espacial [22].

temporal.

Esse campo abrange atualmente um grande número de problemas físicos, desde ondas em superfícies em fluidos estacionários e instabilidades eletrohidrodinâmicas em cristais líquidos até o que seja, talvez, o mais importante fenômeno em que ocorre caos espaço-temporal, a turbulência plenamente desenvolvida.

Como um simples exemplo de como o caos espacial pode surgir naturalmente em sistemas físicos, vamos considerar o caso de um guia de ondas, cujo modelo é mostrado na figura 3.7. Basicamente, temos um oscilador não-linear conectado a um guia de ondas semi-infinito linear e não-dispersivo (como uma corda ou um guia de transmissão elétrica). Se o oscilador está fracamente conectado ao guia de ondas, então os movimentos caóticos do oscilador no tempo, dado por  $W(t)$ , serão espacialmente armazenados no guia de ondas na forma de ondas lineares movendo-se para a direita, da forma  $u(x, t) = f(x - ct)$ .

As condições de contorno entre o oscilador e o guia de ondas pode resultar em uma história temporal armazenada como informação na onda espacial

$$u(x, t) = AW \left( t - \frac{x}{c} \right). \quad (3.7)$$

Este modelo do guia de ondas representa um paradigma do fenômeno de caos espacial.

Uma questão que surge naturalmente é de como vamos caracterizar o comportamento caótico em sistemas com graus de liberdade espacial e temporal. Para isso, foram desenvolvidas algumas técnicas, principalmente relacionadas com o conceito de mapas acoplados. Dado o caráter discreto necessário em tais abordagens, é mais prático aplicar

o Critério de Deissler-Kaneko [20] para caracterizar caos espaço-temporal em equações diferenciais parciais. Este critério essencialmente estende a definição de expoente de Lyapunov para abranger os graus de liberdade espaciais e será analisado detalhadamente a seguir. No Capítulo 5, esse critério será relevante para caracterizar os resultados obtidos da análise da equação de Gross-Pitaevskii não-conservativa para sistemas atômicos com comprimento de espalhamento negativo.

### 3.1.6 Critério de Deissler-Kaneko

Para analisar o comportamento das soluções de uma equação diferencial parcial e provar que ele é caótico, um critério útil sugerido por Deissler e Kaneko [20] se verifica numericamente o começo de comportamento caótico da solução da equação de Schrödinger não-linear, conhecida como equação de Ginzburg-Landau. Neste trabalho, é mostrado que, para uma escolha adequada dos parâmetros a dinâmica do sistema pode apresentar um comportamento caótico. Para caracterizar o comportamento caótico para uma equação diferencial parcial, foi definida a função  $\zeta$ :

$$\zeta(\tau) \equiv \left( \int_0^L |\delta\Phi(x, \tau)|^2 dx \right)^{1/2}, \quad (3.8)$$

onde  $L$  é o comprimento do sistema e  $\delta\Phi(x, \tau)$  a perturbação infinitesimal sobre o estado  $\Phi(x, \tau)$ . A perturbação  $\delta\Phi(x, \tau)$  é calculada numericamente evoluindo-se a perturbação inicial  $\delta\Phi(x, 0)$  com valores aleatórios extremamente pequenos por todo o comprimento do sistema. Em outras palavras, seja  $Y$  uma variável aleatória e  $F(y) = P(Y \leq y)$  sua função distribuição, onde  $y$  é um número real positivo. Então, temos

$$\delta\Phi(x, 0) = \epsilon \cdot \left( \frac{1}{2} - F(y) \right); \quad (3.9)$$

com  $\epsilon \ll 1$ .

A inclinação média do logaritmo desta função, quando plotada como função do tempo, nos dá o maior expoente de Lyapunov do sistema [20]. O comportamento caótico é caracterizado por uma inclinação positiva. Considere, por exemplo, a equação de Schrödinger não-linear quártica:

$$\frac{\partial\Psi}{\partial t} = a\Psi - v_g \frac{\partial\Psi}{\partial x} + b \frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} - c |\Psi|^2 \Psi - d |\Psi|^4 \Psi. \quad (3.10)$$

onde  $a$ ,  $b$  e  $c$  são números complexos e  $v_g$  representa a velocidade de grupo do modo mais instável do sistema.

O expoente de Lyapunov estendido é obtido a partir da figura 3.8. Nessa figura, é traçado o logaritmo da separação entre estados muito próximos, como dado em (3.8) e (3.9), contra o tempo de evolução da função  $\Psi$ .

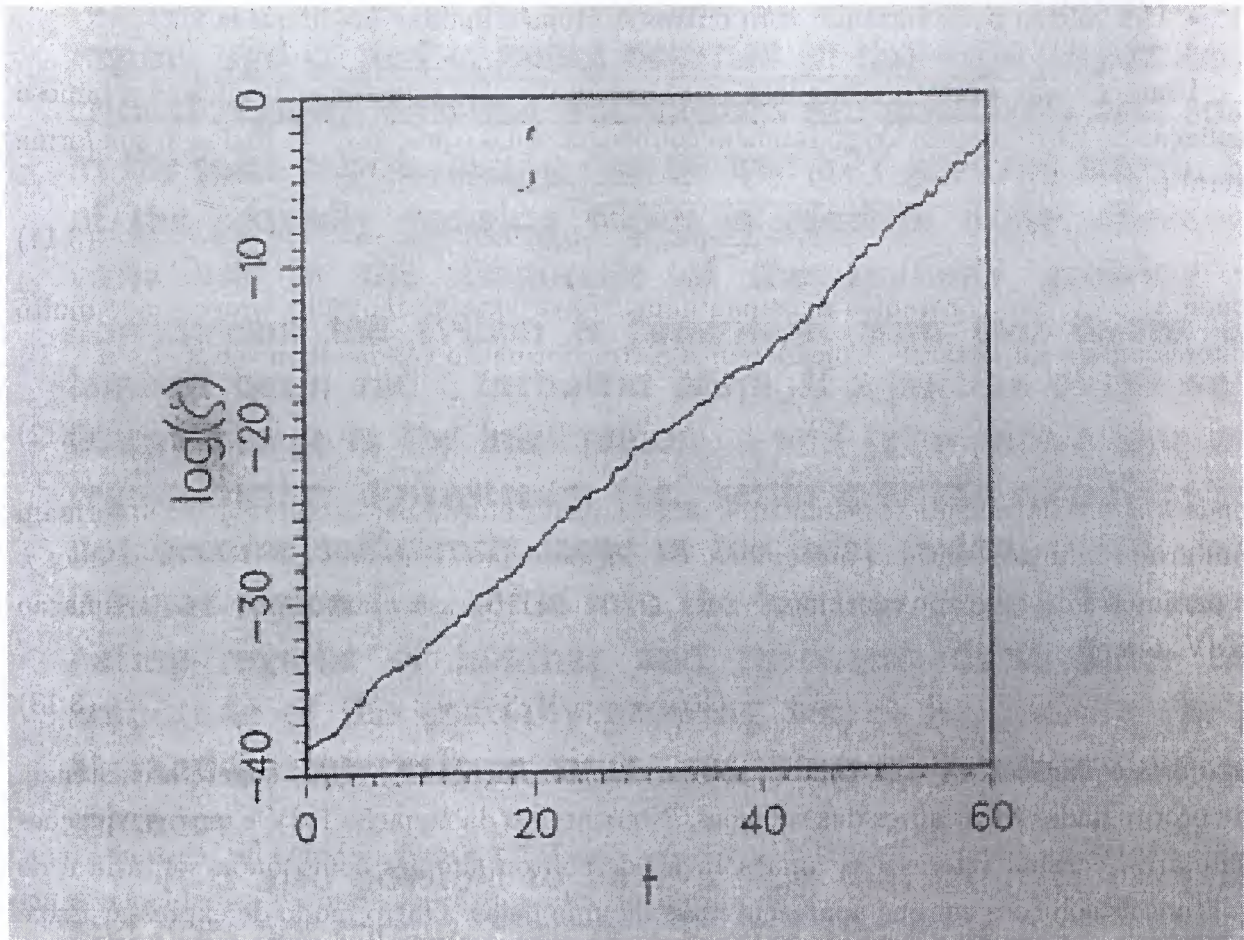


Figura 3.8: Separação entre estados muito próximos, como dado em (3.8) e (3.9), para a equação de Schrödinger não-linear quártica (3.10).

Como se tem uma inclinação média positiva, concluímos que esse sistema apresenta caos espaço-temporal.

## 3.2 Sólitos

### 3.2.1 Introdução

Embora não seja fácil dar uma definição compreensiva e precisa de um sólito, conforme explicado em [26], o termo é associado a qualquer solução de um sistema ou equação não-linear que apresente as seguintes propriedades:

- Um sólito representa uma onda de forma permanente;
- Um sólito é localizado, de modo que espacialmente ele se aproxima de zero ou de uma constante no infinito;

- Um sóliton pode interagir com outros sólitons e manter sua identidade.

Uma equação protótipo, modelo ou representativa de soluções solitônicas é a famosa equação de Korteweg-de Vries, também conhecida como equação KdV, dada em sua forma geral por

$$u_t + \frac{\alpha\beta}{\gamma}uu_x + \frac{\beta}{\gamma^3}u_{xxx} = 0, \quad (3.11)$$

onde  $\alpha$ ,  $\beta$  e  $\gamma$  são constantes reais não nulas. Essa equação tem uma propriedade muito interessante e importante. Consideremos a transformação  $G_k$  das variáveis  $x$ ,  $t$  e  $u$

$$X = kx, \quad T = k^3t, \quad U = k^{-2}u, \quad (3.12)$$

onde  $k \neq 0$ . Claramente, os elementos dessa transformação para todo real  $k \neq 0$  formam um grupo infinito, contínuo ou também conhecido como Grupo de Lie. Nós chamamos  $k$  o parâmetro deste grupo contínuo. Agora, se aplicarmos essa transformação  $G_k$  à equação KdV, temos

$$U_T + \frac{\alpha\beta}{\gamma}UU_X + \frac{\beta}{\gamma^3}U_{XXX} = 0; \quad (3.13)$$

isto é, a equação KdV é invariante sob as transformações  $G_k$ , o que sugere a existência de propriedades invariantes das soluções. No contexto da equação KdV e outras equações similares, é usual referir-se a uma solução de sóliton simples como onda solitária e de sólitons às soluções em que aparecem mais de uma delas. Outro modo de expressar isso é dizer que um sóliton torna-se uma onda solitária quando está infinitamente separada de qualquer outro sóliton.

É importante frisar que é comum encontrar equações que apresentem termos não-lineares e dissipativos (proporcionais a derivadas pares de  $u$ ), enquanto que outras possuem termos não-lineares e dispersivos (proporcionais a derivadas ímpares de  $u$ ) e que apresentam sólitons ordinários como possíveis soluções. Esse é o caso, por exemplo, da equação KdV ( $u_t + uu_x + u_{xxx}$ ) = 0, que aceita como solução a onda harmônica

$$u(x, t) = e^{i(kx - \omega t)} \quad (3.14)$$

se tiver como relação de dispersão

$$\omega = k - k^3 \quad (3.15)$$

onde  $k$  é o número de onda e  $\omega$  a frequência da onda.

A onda solitária, assim chamada porque ela freqüentemente ocorre como uma entidade única e localizada, foi observada pela primeira vez por J. Scott Russell no canal de Edinburgh-Glasgow, em 1834. Russell também executou alguns experimentos de laboratório, gerando ondas solitárias colocando um peso em um dos extremos de um

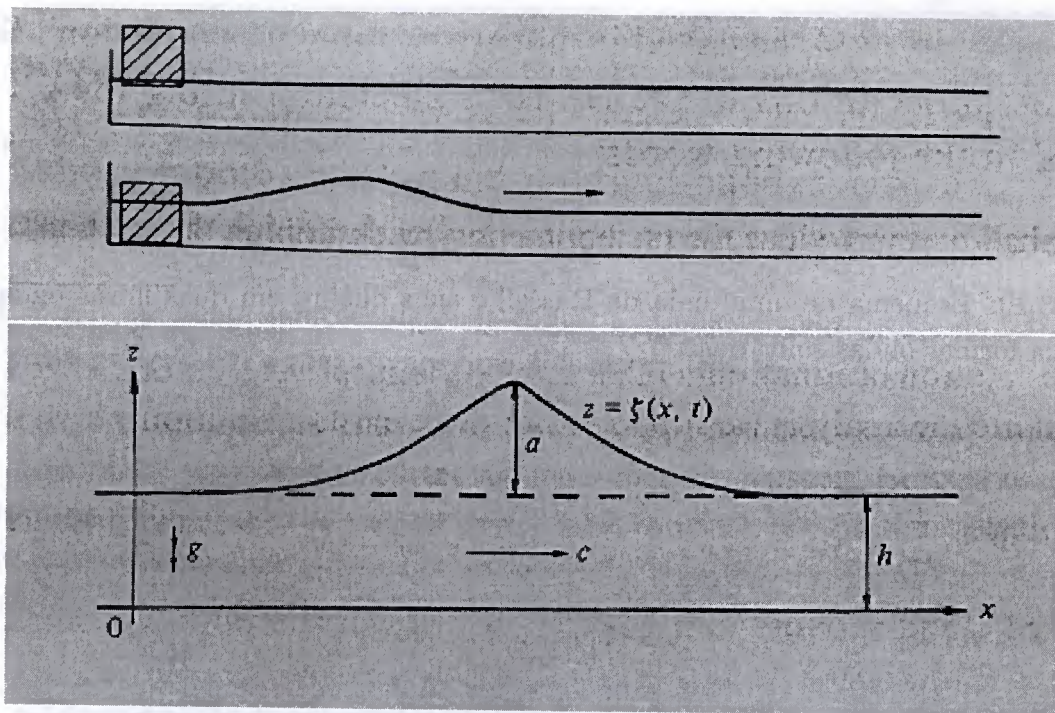


Figura 3.9: Diagrama do experimento de Russell para gerar uma onda solitária.

canal aquático, tal como na figura 3.9. Dessa experiência, Russell deduziu empiricamente que a velocidade  $c$  da onda solitária podia ser obtida de

$$c = \sqrt{g(h + a)} , \quad (3.16)$$

onde  $a$  é a amplitude da onda,  $h$  a profundidade não-perturbada do canal e  $g$  a aceleração da gravidade. Dela, conclui-se que ondas mais altas viajam mais rápido.

Boussinesq (1871) e Lord Rayleigh (1876) deduziram um perfil para a onda de Russell deste experimento, dado por

$$z(x, t) = a \cosh^{-2} \beta(x - ct) , \quad (3.17)$$

onde  $\beta^{-2} = 4h^2(h + a)/3a$  para qualquer  $a > 0$ . Esse perfil é estritamente válido somente se  $\frac{a}{h} \ll 1$ . Esses autores, entretanto, não escreveram uma equação simples para  $\zeta(x, t)$ , admitindo (3.17) como solução. Este passo final foi dado por Korteweg & de Vries em 1895. Eles mostraram que se  $\epsilon$  e  $\sigma$  fossem pequenos, teríamos

$$\zeta_t = \frac{3}{2} \left( \frac{g}{h} \right)^{1/2} \left( \zeta \zeta_x + \frac{1}{3} \sigma \zeta_{xxx} \right) , \quad (3.18)$$

onde  $\sigma$  incorpora a tensão superficial  $T$ , na forma

$$\sigma = \frac{1}{3} - \frac{Th}{g\rho} , \quad (3.19)$$

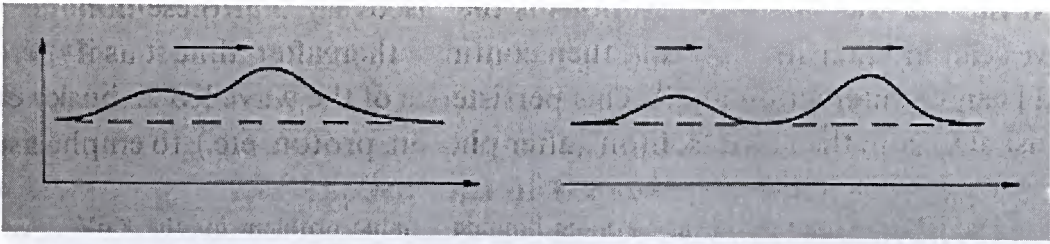


Figura 3.10: Esquema de uma onda de Russell e suas quebra em duas novas ondas que tendem a formar ondas solitárias.

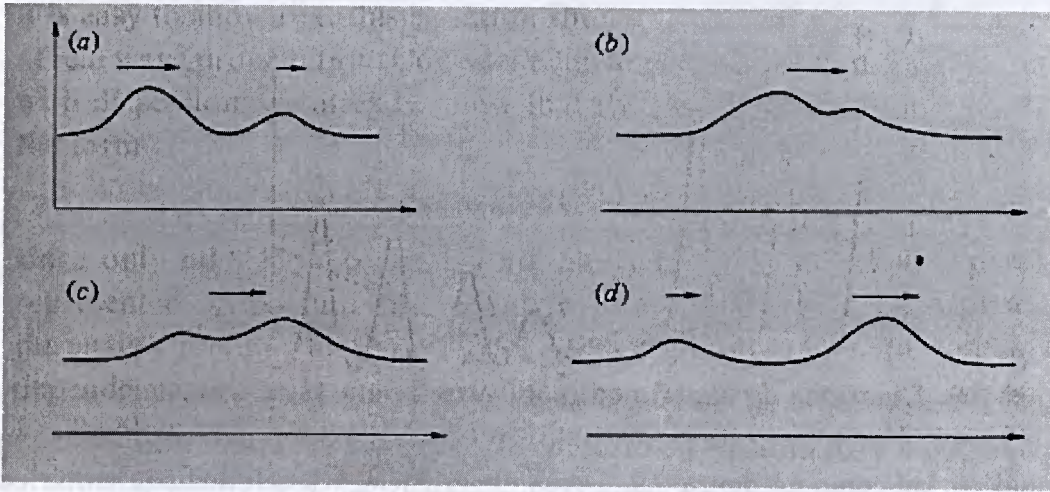


Figura 3.11: Esquema das interações de dois sólitons.

e  $x$  é dado por

$$x = \chi + \varphi \left( \frac{g}{h} \right)^{1/2} t, \quad (3.20)$$

sendo  $\rho$  a densidade do líquido (freqüentemente  $T \ll \frac{1}{3}g\rho h^2$ ),  $\varphi$  um parâmetro independente e  $\chi$  uma coordenada escolhida para se mover junto com a onda.

Algumas das mais notáveis propriedades dos sólitons são aquelas que envolvem suas interações. Para compreendê-la melhor, observe o diagrama da figura 3.10. Nele, temos um perfil inicial de uma onda de Russell que evolui em duas ondas que se movem distanciando-se entre si e se aproximando de ondas solitárias individuais quando  $t \rightarrow \infty$ . Esta propriedade apenas já é um tanto surpreendente, mas outra propriedade notável pode ser observada. Se iniciarmos com um perfil como o da figura 3.10, mas com a onda mais alta à esquerda da mais baixa, vemos que a primeira alcança a segunda, interage com ela e a ultrapassa, sendo que ambas mantêm intactas suas formas após todo o processo.

### 3.2.2 Sólitons nas equações tipo Schrödinger não-lineares

A equação não-linear, tipo Schrödinger\*, da forma

$$i \frac{\partial u}{\partial t}(x, t) + \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x, t) + \nu u(x, t) |u(x, t)|^2 = 0 \quad (3.21)$$

onde  $\nu = \pm 1$ , apresenta soluções de onda solitária. Consideremos o caso do termo não-linear positivo ( $\nu = +1$ ) e procuremos uma solução da forma

$$u(x, t) = r(x, t) \exp \{i[\theta(x, t) + nt]\}, \quad (3.22)$$

onde  $r(x - ct)$  e  $\theta(x - ct)$  são funções reais,  $c$  e  $n$  constantes reais.

Então, pode-se mostrar que existem soluções de onda solitária da forma

$$u(x, t) = a \exp \left\{ i \left[ \frac{1}{2} c(x - ct) + nt \right] \right\} \cosh^{-1} \left[ \frac{a(x - ct)}{\sqrt{2}} \right] \quad (3.23)$$

sempre que  $a^2 = 2(n - \frac{1}{4}c^2) > 0$ .

Da mesma forma, para o caso do termo não-linear negativo ( $\nu = -1$ ), pode-se mostrar que existem soluções de onda solitária da forma

$$r^2(\xi) = m - 2\kappa^2 \cosh^{-2} \kappa \xi \quad (3.24)$$

$$c \tan \theta(\xi) = -2\kappa \tanh \kappa \xi, \quad (3.25)$$

para todo  $c$ , onde  $\xi = x - ct$ ,  $n = -m$  e  $\kappa = \frac{1}{2}(2m - c^2)^{1/2}$ , com  $m > \frac{1}{2}c^2$ .

É importante também destacar que a equação (3.21), assim como a equação KdV, possui propriedades de invariância sob as transformações:

$$\begin{cases} t' = t + \lambda, & x' = x, & u' = u; \\ t' = t, & x' = x + \lambda, & u' = u; \\ t' = \lambda^2 t, & x' = \lambda x, & u' = \lambda^{-1} u; \end{cases} \quad (3.26)$$

para  $\lambda \neq 0$ .

---

\*Ver Apêndice A para uma discussão de casos especiais desse tipo de equação.

### 3.2.3 Sólitons de Pereira-Stenflo

Um tipo particular de sólíton que difere dos sólítons ordinários anteriormente descritos é o chamado sólíton dissipativo, autosólíton ou simplesmente sólíton de Pereira-Stenflo. Em resumo, Pereira e Stenflo analisaram a equação de Schrödinger não-linear (3.21) em um modelo contendo processos de amplificação (crescimento) e dissipação (amortecimento). Nessa análise, primeiramente consideraram métodos para tratar a aproximação ao equilíbrio de uma solução localizada (sólíton). Subseqüentemente, eles encontraram um sólíton de equilíbrio exato.

Este sólíton difere dos sólítons não-amortecidos usuais em uma fase proporcional aos parâmetros de crescimento e amortecimento. Até ordens superiores desses parâmetros, a amplitude e a largura são também afetadas, mas a forma de secante hiperbólica, característica das soluções da equação (3.21), não é modificada. Analisaremos detalhadamente a equação de Pereira-Stenflo e suas soluções solitônicas no Capítulo 6.

Todos os conceitos analisados nos Capítulos 2 e 3, direta ou indiretamente, têm relação importante com os cálculos descritos nos Capítulos 5 e 6; em especial os fenômenos de caos espaço-temporal, sólítons de Pereira-Stenflo, sistemas não-lineares, pontos fixos, linearização e estabilidade em torno do ponto fixo.

## Capítulo 4

# Condensação de Gás de Bósons Aprisionados

### 4.1 Histórico

No período entre 1925 a 1965, as idéias sobre condensação de Bose-Einstein desenvolveram-se inicialmente com o objetivo específico de compreender o fenômeno de superfluidez, observado no  $^4\text{He}$ . Grande controvérsia sobre a existência de condensação no  $^4\text{He}$  desenrolou-se nesse período; os favoráveis à idéia acreditavam que a condensação de Bose-Einstein seria a responsável pelo fenômeno de superfluidez enquanto que os contrários, como Landau, recusavam-na e propunham outros modelos para sua descrição.

Na década de 90, a realização experimental da condensação de Bose-Einstein em sistemas de gases alcalinos aprisionados evidenciou que a condensação é um fenômeno relacionado com o de superfluidez, já que recentemente foram detectados vórtices [30]. No  $^4\text{He}$ , a transição de fase do estado normal para o estado superfluido, que ocorre abaixo da temperatura crítica  $T_c = 2,18 \text{ K}$ , é entendida também como devida a uma ocupação macroscópica do estado com  $\vec{p} = \vec{0}$ ; ou seja, devido a uma condensação de Bose-Einstein. Assim, tanto o entendimento do hélio superfluido como o da condensação de Bose-Einstein se fundamentam em uma descrição de gases imperfeitos a baixas temperaturas. Essas características propiciaram o uso da teoria de condensação de Bose-Einstein para a descrição da superfluidez, conforme a Ref. [27]. Segundo Griffin [28], praticamente não há dúvidas atualmente de que a superfluidez no  $^4\text{He}$  é causada pela existência da condensação de Bose-Einstein. Embora não haja uma observação direta, evidências da existência de condensação de Bose-Einstein no hélio líquido surgiram através dos experimentos de espalhamento de nêutrons, a partir da análise das distribuições de momento dos átomos feita por Sokol [31].

Nesse pequeno resumo histórico, baseado em um trabalho de revisão de Griffin [28] e

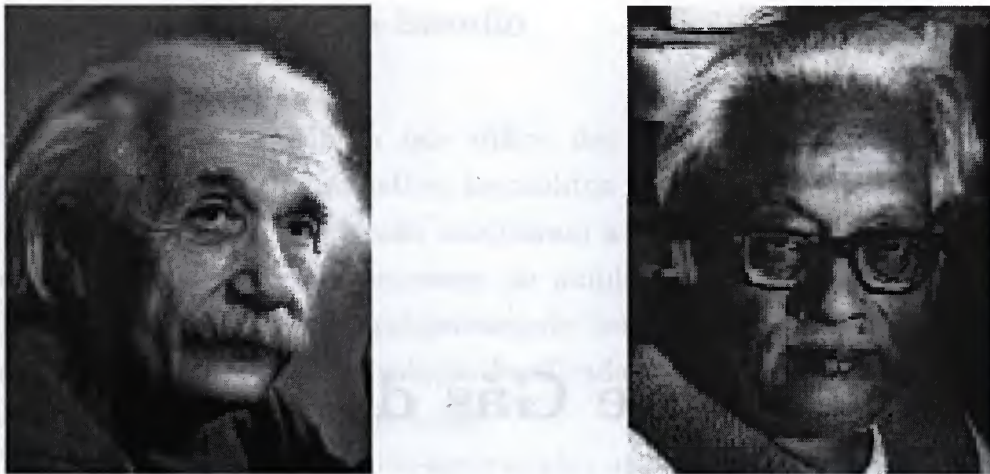


Figura 4.1: Albert Einstein e Satyendra Nath Bose, os precursores da condensação de espécies atômicas.

em um resumo de Ketterle *et al.* [29], destacamos a evolução dos principais conceitos associados à condensação de Bose-Einstein, como o de função de onda macroscópica descrevendo o condensado. Em seguida, destacamos a forte revitalização que ocorreu para a teoria de condensação de Bose-Einstein com a descoberta desse fenômeno em gases atômicos diluídos aprisionados, quase trinta anos depois da chamada “era dourada” (1957-1965), em que a pesquisa teórica em gases condensados de Bose com interações evoluiu significativamente.

Podemos dizer que a pesquisa sobre a condensação iniciou-se com o artigo de S. N. Bose em 1924 [32], em que 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 [33] (o segundo de um total de três artigos que escrevera sobre mecânica estatística de um gás monoatômico ideal) em que foi analisado o fenômeno de condensação de átomos, que desde então passou a ser conhecido como condensação de Bose-Einstein.

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 que essas possuam. 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. É interessante observar que, segundo Griffin [28], E. Schrödinger soube do trabalho de de Broglie lendo esse artigo de Einstein, de forma que podemos dizer que a equação da onda de Schrödinger desenvolveu-se a partir do artigo de condensação de Einstein.

Embora as propriedades de gases de Bose ordinários tenham sido extensivamente estudadas na década posterior ao artigo de 1925 de Einstein, nada mais foi feito sobre condensação de Bose-Einstein até 1938, aparentemente devido às críticas de Uhlenbeck de que transições de fase não poderiam ocorrer em sistemas finitos. Até Einstein acabou aceitando essa argumentação, pelo fato de que transições de fase de segunda ordem, que poderiam fornecer uma explicação alternativa, não eram ainda bem entendidas.

No período de 1935 a 1937, Fritz London (com a ajuda de seu irmão Heinz London) introduziu uma teoria para a supercondutividade baseada na idéia de uma função de onda macroscópica. Essas idéias influenciaram decisivamente o desenvolvimento da teoria microscópica BCS. Elaborada por J. Bardeen, L. N. Cooper e J. R. Schriffer em 1957, a teoria BCS descreve o fenômeno de supercondutividade em ligas metálicas como sendo gerado pela formação dos chamados “pares de Cooper”, que corresponde aos sistemas bosônicos gerados pelo acoplamento de pares de elétrons livres dos metais. Esses pares se movimentam praticamente sem dissipar energia e são os responsáveis pelo efeito macroscópico chamado de supercondutividade.

Em uma conferência em Amsterdam no final de 1937, tornou-se clara a natureza de transições de fase de segunda ordem e até Uhlenbeck acabou se arrependendo de sua crítica ao artigo de Einstein. Ao mesmo tempo, trabalhos experimentais daqueles anos mostravam superfluidez no hélio líquido  $^4\text{He}$ , abaixo de uma temperatura de transição  $T_c \cong 2,18\text{K}$  [34, 35], com crescentes evidências de que abaixo desta temperatura o  $^4\text{He}$  apresentava propriedades muito estranhas, como viscosidade zero em pequenos canais, condutividade térmica infinita, etc. Tudo isso levou London a estudar o artigo de Einstein e postular que alguma espécie de condensação de Bose-Einstein estava envolvida na estranha transição de fase existente no  $^4\text{He}$ . London propôs que se descrevesse a superfluidez e a supercondutividade através do conceito de função de onda macroscópica.

Em contato com as idéias de London, seu amigo Tisza introduziu o conceito de dois fluidos no  $^4\text{He}$ , ou seja, que o condensado de Bose-Einstein atuava como um novo grau de liberdade coletivo, que poderia se mover coerentemente sem atrito e, assim, dar origem ao comportamento superfluido. Tisza baseou-se no modelo microscópico do gás de Bose ideal para desenvolver sua hidrodinâmica de dois fluidos, que consistia na noção de uma mistura de um fluido normal e um superfluido no hélio líquido.

Os trabalhos experimentais sobre superfluidez no hélio foram publicados na Nature em 1938 [34, 35], assim como os trabalhos de London e Tisza, sendo que a sugestão da relevância de condensação de Bose-Einstein no  $^4\text{He}$  propiciou grande interesse por

pesquisas nessa área desde então. Segundo Griffin [28], dois artigos de Tisza publicados em 1940, sobre uma hidrodinâmica de dois fluidos, são impressionantes até hoje, já que podia explicar todos os experimentos envolvendo superfluididez. Entretanto, a ausência de um modelo microscópico nessas teorias, que as tornasse compatíveis com a Interpretação de Copenhague \* [36], fez com que as idéias de London e Tisza parecessem antiquadas. Somente com o trabalho de Bogoliubov de 1947 [38] e de Oliver Penrose de 1951 [37] suas teorias se adquiriram consistência, tornando-se completas no início dos anos 60.

O artigo de Bogoliubov de 1947 [38] foi de grande importância na área, embora tenha levado cerca de uma década para ser reconhecido. O cálculo de Bogoliubov mostrou que o condensado de Bose-Einstein não sofria muitas alterações devido às interações existentes, ao se considerar um gás de Bose diluído interagindo fracamente; porém, tais interações alteravam completamente o comportamento do sistema na escala de longo comprimento de onda. O tratamento dado por Bogoliubov de um gás de Bose diluído passou a ser realmente reconhecido com o aparecimento da teoria BCS para supercondutividade em 1957 [39], pelas analogias entre as teorias.

Na pesquisa sobre o hélio líquido, um artigo de Landau publicado em 1941 [40] introduziu uma nova hidrodinâmica para descrever fenômenos superfluidos de baixa frequência e também a idéia de que o líquido poderia ser descrito em termos de um gás de quasipartículas interagindo fracamente, com um espectro de energia relativamente simples: fônons e rôtons. Landau também introduziu a idéia de modos coletivos, distintos das excitações elementares ou quasipartículas.

No início dos anos 50, a teoria de Landau-Khalatnikov (LK) tinha ofuscado o modelo de London-Tisza, que ainda carecia de uma descrição microscópica da interação entre átomos. Até hoje, a teoria de Landau-Khalatnikov de hélio superfluido é a teoria padrão para descrever suas propriedades. Por outro lado, desde os anos 60, a maioria dos teóricos tem visto a teoria LK como uma teoria fenomenológica cuja base microscópica está na existência de um parâmetro de ordem macroscópico de Bose.

Sendo um incondicional adepto da Interpretação de Copenhague, Landau atacou o trabalho de Tisza em 1949 [41], relutando em aceitar a idéia de um condensado de Bose como sendo relevante para o hélio superfluido. Aparentemente, Landau nunca mudou oficialmente essa sua visão contrária à idéia de London de que uma teoria de hélio super-

---

\*Nessa interpretação, que corresponde à Mecânica Quântica Moderna, é fundamental o conceito de vetor estado, que caracteriza aspectos microscópicos dos sistemas físicos.

fluido poderia ser desenvolvida iniciando-se de um gás de Bose ideal<sup>†</sup>.

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. Eles também estimaram o valor da amplitude do parâmetro de ordem  $n_c$  em  $T = 0$  usando a função de onda do estado fundamental devido a Feynman. Tal estimativa não mudou muito em quarenta anos. Valores experimentais convincentes de  $n_c$  foram obtidos somente nos anos 80, usando espalhamento inelástico de nêutrons para extrair a distribuição de momentos  $n_p$  dos átomos de  $^4\text{He}$ , e mostram que  $n_c \rightarrow 0$  quando  $T \rightarrow T_c$ .

Feynman escreveu muitos 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 houve muitos e importantes estudos teóricos atacando o problema do gás condensado de Bose, muito embora fosse um sistema previsto apenas teoricamente na época, mas não realizado experimentalmente. Destacam-se, por exemplo, dois artigos de Beliaev de 1957 em que ele descreve não haver diferenças qualitativas entre o hélio líquido e um gás não-ideal de Bose. Trinta anos depois, muitos desses trabalhos foram relevantes para a pesquisa de gases não-ideais aprisionados. Assuntos relevantes como modelos hidrodinâmicos para a descrição de condensados, a relação superfluides-condensação e a descrição da supercondutividade como um tipo de condensação de Bose-Einstein têm sido estudados ainda hoje [43, 27, 44].

Nesse período, um desenvolvimento muito importante para gases aprisionados foi aquele devido a Pitaevskii (1959-1961). Além da contribuição relevante para a área com sua equação para o parâmetro de ordem, a principal contribuição de Pitaevskii foi a de uma função de onda macroscópica que poderia depender da posição e do tempo, sem dúvida inspirada na função de onda de Ginzburg e Landau em sua teoria pioneira de supercondutores espacialmente não-homogêneos.

Após esse período de grande desenvolvimento teórico, iniciou-se intensa pesquisa experimental para a obtenção de uma forma pura de condensado de Bose-Einstein, sem as complicações de se lidar com um líquido, ou seja, a meta de se encontrar esse efeito em um gás. Essa pesquisa desenvolveu-se bastante na década de 80 até meados dos anos 90. Antes de 1995, os principais sistemas em estudo eram:

---

<sup>†</sup>Embora, segundo Griffin [28], haja indícios em um artigo de Beliaev [42] do contrário

- Excitons (excitações do tipo buraco-elétron ou  $h^+e^-$ ) em semicondutores;
- Átomos de Hidrogênio;
- Gases diluídos de metais alcalinos.

As primeiras tentativas de se obter condensação de Bose-Einstein de gases atômicos foram feitas para um promissor candidato, o Hidrogênio  $^1\text{H}$ , há mais de quinze anos atrás.

Nos experimentos, os átomos de Hidrogênio eram inicialmente resfriados, depois aprisionados por um campo magnético e, por fim, resfriados por evaporação. Essa técnica se aproximou bastante de uma observação de condensação de Bose-Einstein, mas ainda não o suficiente devido ao efeito de recombinação de átomos individuais que formavam moléculas [7]. Posteriormente, aplicando semelhantes procedimentos em hidrogênio polarizado em spin, foram obtidas as primeiras observações de condensação de Bose-Einstein em  $^1\text{H}$  [6].

Outros sistemas podem apresentar este estado. Por exemplo, evidências para condensação de Bose-Einstein no  $^4\text{He}$  foram encontrados a partir da análise da distribuição de momentos dos átomos, através de experimentos de espalhamento de nêutrons [45]. Nos últimos anos, a condensação de Bose-Einstein também tem sido investigada em gases de paraexcitons em semicondutores [46], mas é muito difícil encontrar nestes sistemas uma assinatura experimental clara e precisa do estado condensado.

Assim, devido a tais problemas tecnológicos nos casos do Hidrogênio e dos excitons, os sistemas mais promissores eram os gases de metais alcalinos. De fato, devido ao grande desenvolvimento tecnológico nas áreas de laser, confinamento magnético e óptico e resfriamento de átomos, foi realizado com sucesso em 1995 o primeiro experimento em que se obtinha a condensação de Bose-Einstein em gases de Bose diluídos aprisionados magneticamente. Eric Cornell e Carl Wieman (figura 4.2), da Universidade do Colorado, conseguiram obter o estado condensado a partir de uma nuvem térmica de átomos de  $^{87}\text{Rb}$  [1].

No mesmo ano, obteve-se sucesso também com o átomo de  $^{23}\text{Na}$ , com Davis *et al.* [2], do Instituto de Tecnologia de Massachusetts (MIT). Esses dois casos representavam condensados estáveis devido ao comprimento de espalhamento positivo das interações entre átomos. Ainda em 1995, um grupo da Universidade de Rice, liderado por R. Hulet, conseguiu evidências de condensação de Bose-Einstein com átomos de  $^7\text{Li}$  [3]; um caso diferente do anterior que apresentava instabilidade para um número grande de átomos devido ao sinal negativo do comprimento de espalhamento da interação entre os átomos. Acompanhando os recentes sucessos experimentais em condensados atômicos, as pesquisas teóricas foram reativadas, dessa vez no sentido de simular as condições experimentais, que no caso de sistemas com interações de dois corpos atrativas necessitavam de um

baseados em laser, como resfriamentos a laser e aprisionamento óptico-magnético, desenvolvidos na década de 80. Tais átomos são adequados para se usar técnicas de laser porque suas transições óticas podem ser excitadas pelos lasers disponíveis e também porque eles têm uma estrutura interna de níveis de energia favorável para resfriamento a temperaturas muito baixas. Após serem aprisionados, suas temperaturas podem ser diminuídas ainda mais por resfriamento evaporativo. Combinando ambos os métodos de resfriamento a laser e evaporativo, pode-se atingir as temperaturas e densidades exigidas para a condensação de Bose-Einstein.

Conforme ressalta a ref. [8], é válido observar que, nas condições acima, a configuração de equilíbrio do sistema seria a fase sólida. Assim, para que a fase condensada seja observada, tem-se que manter o sistema em uma fase de gás metaestável por um tempo suficientemente longo. Isso é possível porque colisões de três corpos são eventos raros em gases frios e diluídos, cujo tempo de vida é, então, longo o suficiente para realizar os experimentos.

Até o momento, a condensação de Bose-Einstein foi obtida com os seguintes elementos:  $^{87}\text{Rb}$  [1],  $^{23}\text{Na}$  [2],  $^7\text{Li}$  [3, 4],  $^1\text{H}$  [6] e recentemente com  $^{85}\text{Rb}$  [47]. Intensa pesquisa experimental está sendo realizada atualmente em vapores com Césio, Potássio e Hélio metaestável [8].

### 4.3 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 representam sistemas de tamanho finito, com 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  $\omega_h$  fornece uma escala de comprimento característica para o sistema,

$$a_h = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_h}}, \quad (4.1)$$

da ordem de poucos micro-metros para as amostras disponíveis. No caso do  $^{87}\text{Rb}$  e do  $^{23}\text{Na}$ , 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, por exemplo, uma extensão axial média de 0,3 mm).

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

1. O estado condensado aparece 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, freqüências de oscilações coletivas, etc.
2. O papel importante desempenhado pelas interações de dois corpos. Apesar da natureza muito diluída desses gases (tipicamente, a distância média entre átomos é mais 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, como mostrado na figura 4.4.

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.

Com as recentes descobertas experimentais, foram verificadas previsões teóricas, assim como observadas várias propriedades não usuais da teoria de muitos corpos, para gases de Bose não-ideais na presença de confinamento harmônico, abrindo novas perspectivas para estudos teóricas em física, envolvendo áreas como física atômica, óptica quântica, mecânica estatística, fenômenos não-lineares em física matemática e física da matéria condensada.

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 da Teoria de Gross-Pitaevskii. Tal teoria é chamada de **Aproximação de Campo Médio (ACM)**. A aproximação de campo médio para o parâmetro de ordem fornece equações relativamente simples para descrever os fenômenos relevantes associados com a 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

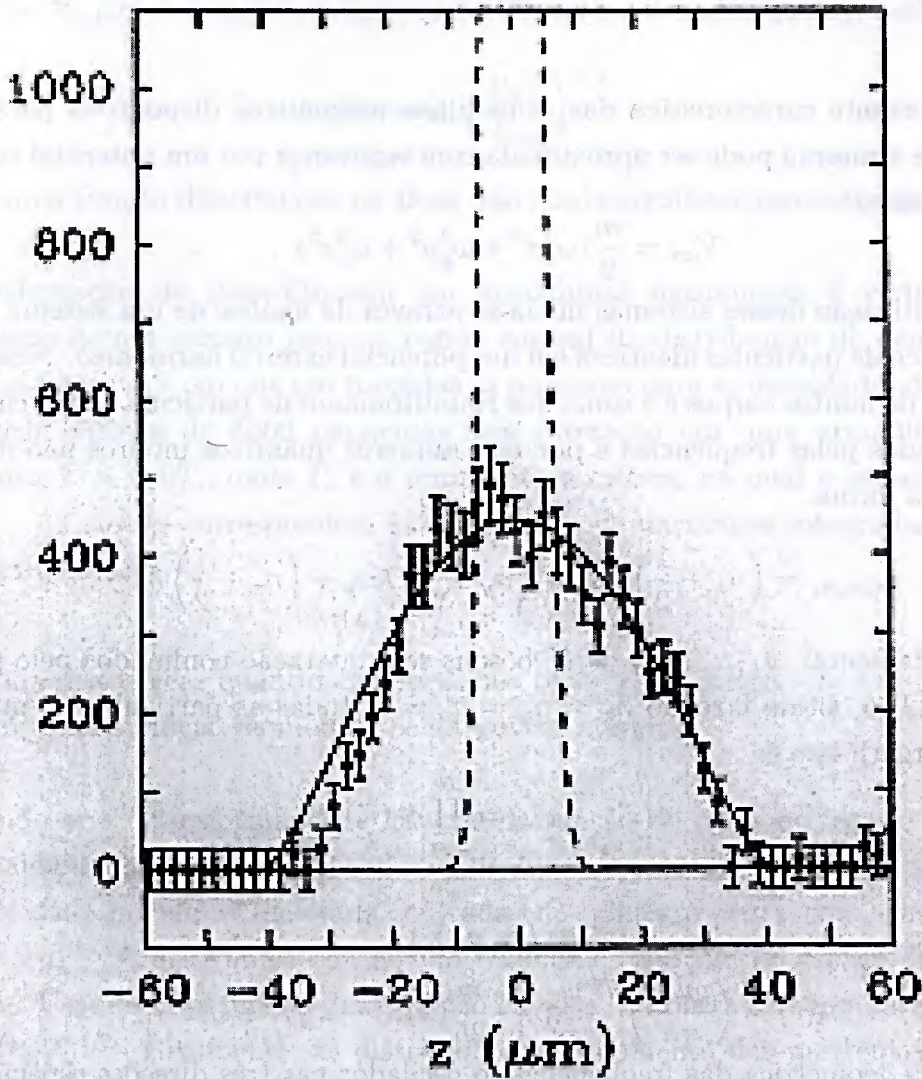


Figura 4.4: Densidade de distribuição de  $8 \times 10^4$  átomos de  $^{23}\text{Na}$  em uma armadilha, como função da coordenada axial. A linha sólida corresponde à previsão da teoria de campo médio para interações de dois corpos. A linha tracejada mostra a previsão para um gás ideal. Pontos com suas respectivas barras de erros correspondem a dados experimentais, conforme Ref. [48]. A figura indica o papel desempenhado pela interação de dois corpos na redução da densidade central e no aumento do tamanho da nuvem.

dos efeitos de interações de dois corpos a gases diluídos em temperatura zero, podendo ser generalizada para também explorar efeitos térmicos [8].

## 4.4 O gás ideal de Bose em uma armadilha harmônica

Uma importante característica das armadilhas magnéticas disponíveis para átomos alcalinos é que a mesma pode ser aproximada com segurança por um potencial confinante do tipo harmônico

$$V_{ext} = \frac{m}{2}(\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2) . \quad (4.2)$$

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 autovalores são dados pelas frequências e por três números quânticos inteiros não-negativos,  $n_x$ ,  $n_y$  e  $n_z$ , na forma

$$\epsilon_{n_x n_y n_z} = \left(n_x + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega_x + \left(n_y + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega_y + \left(n_z + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega_z . \quad (4.3)$$

O estado fundamental  $\phi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)$  de  $N$  bósons sem interação confinados pelo potencial harmônico (4.2) é obtido fazendo  $n_x = n_y = n_z = 0$  (todas as partículas no mais baixo estado de energia), isto é

$$\phi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = \prod_{i=1}^N \phi_0(\vec{r}_i) , \quad (4.4)$$

onde

$$\vec{r}_i \equiv (x_i, y_i, z_i) , \quad (4.5)$$

$$\phi_0(\vec{r}) = \left(\frac{m\omega_h}{\pi\hbar}\right)^{3/4} \exp\left[-\frac{m}{2\hbar}(\omega_x x^2 + \omega_y y^2 + \omega_z z^2)\right] \quad (4.6)$$

e  $\omega_h$  é a média geométrica das frequências do oscilador nas três direções espaciais, dada por

$$\omega_h = \sqrt[3]{\omega_x \omega_y \omega_z} . \quad (4.7)$$

A distribuição de densidade, então, torna-se

$$n(\vec{r}) = N |\phi_0(\vec{r})|^2 \quad (4.8)$$

e seu valor cresce com  $N$ . O tamanho da nuvem é independente de  $N$  e é fixado pelo comprimento do oscilador harmônico (4.1), que corresponde à largura média da Gaussiana na equação (4.4). Esta é a primeira escala de comprimento importante do sistema. Nos experimentos disponíveis,  $a_h \cong 1\mu m$ .

A temperaturas não-nulas ( $T > 0$ ), somente parte dos átomos ocupam o estado mais baixo, sendo os demais distribuídos nos estados excitados. O raio da nuvem térmica é maior que  $a_h$ . Uma estimativa grosseira pode ser obtida assumindo  $k_B T \gg \hbar\omega_h$  ( $k_B =$  constante de Boltzmann) e  $n_{nuvem}(r) \cong \exp(-V_{ext}/k_B T)$  (distribuição de Boltzmann clássica). Se  $V_{ext}(r) = \frac{1}{2}m\omega_h^2 r^2$ , a largura da Gaussiana é maior que  $a_h$ , sendo dada por

$$R_T = a_h \left( \frac{k_B T}{\hbar\omega_h} \right)^{1/2}. \quad (4.9)$$

O uso de uma função distribuição de Bose não muda significativamente esta estimativa.

A condensação de Bose-Einstein em armadilhas harmônicas é verificada com o aparecimento de um estreito pico na região central da distribuição de densidade, como indicado na figura 4.5, em que são traçadas as previsões para as densidades do condensado e da nuvem térmica de 5000 partículas sem interação em uma armadilha esférica à temperatura  $T = 0,9T_c$ , onde  $T_c$  é a temperatura crítica, na qual o estado condensado ocorre [8]. As curvas correspondem às densidades de partículas integradas ao longo de uma direção, ou seja

$$n(z) = \int dx n(x, 0, z). \quad (4.10)$$

Esta é uma das típicas quantidades medidas, onde  $x$  é a direção do feixe de luz usado para medir a distribuição de momentos da nuvem atômica.

Tomando-se a Transformada de Fourier da função de onda do estado fundamental, pode-se calcular a distribuição de momento dos átomos no condensado. Para um gás ideal, ela é dada por uma Gaussiana centrada em momento zero e com uma largura proporcional a  $a_h^{-1}$ . A distribuição da nuvem térmica é, também no espaço dos momentos, mais larga. Usando uma função distribuição clássica, encontra-se que a largura é proporcional a  $(k_B T)^{1/2}$ . Realmente, as distribuições de momento das partículas condensadas e não-condensadas de um gás ideal em armadilhas harmônicas têm exatamente a mesma forma que as distribuições de densidade  $n_0$  e  $n_T$  na figura 4.5.

O aparecimento de um condensado como um pico estreito tanto no espaço das coordenadas quanto no espaço dos momentos é uma característica extremamente peculiar de gases de Bose aprisionados, que difere do caso de um gás uniforme, onde as partículas condensariam em um estado de momento nulo. Nesse caso, a condensação de Bose-Einstein não pode revelar-se no espaço das coordenadas, já que partículas condensadas e não-condensadas preenchem o mesmo volume. De fato, a condensação de Bose-Einstein tem sido detectada em ambos os espaços associada a um pico estreito sobre uma distribuição mais larga. No espaço dos momentos, mede-se a densidade da nuvem em expansão com

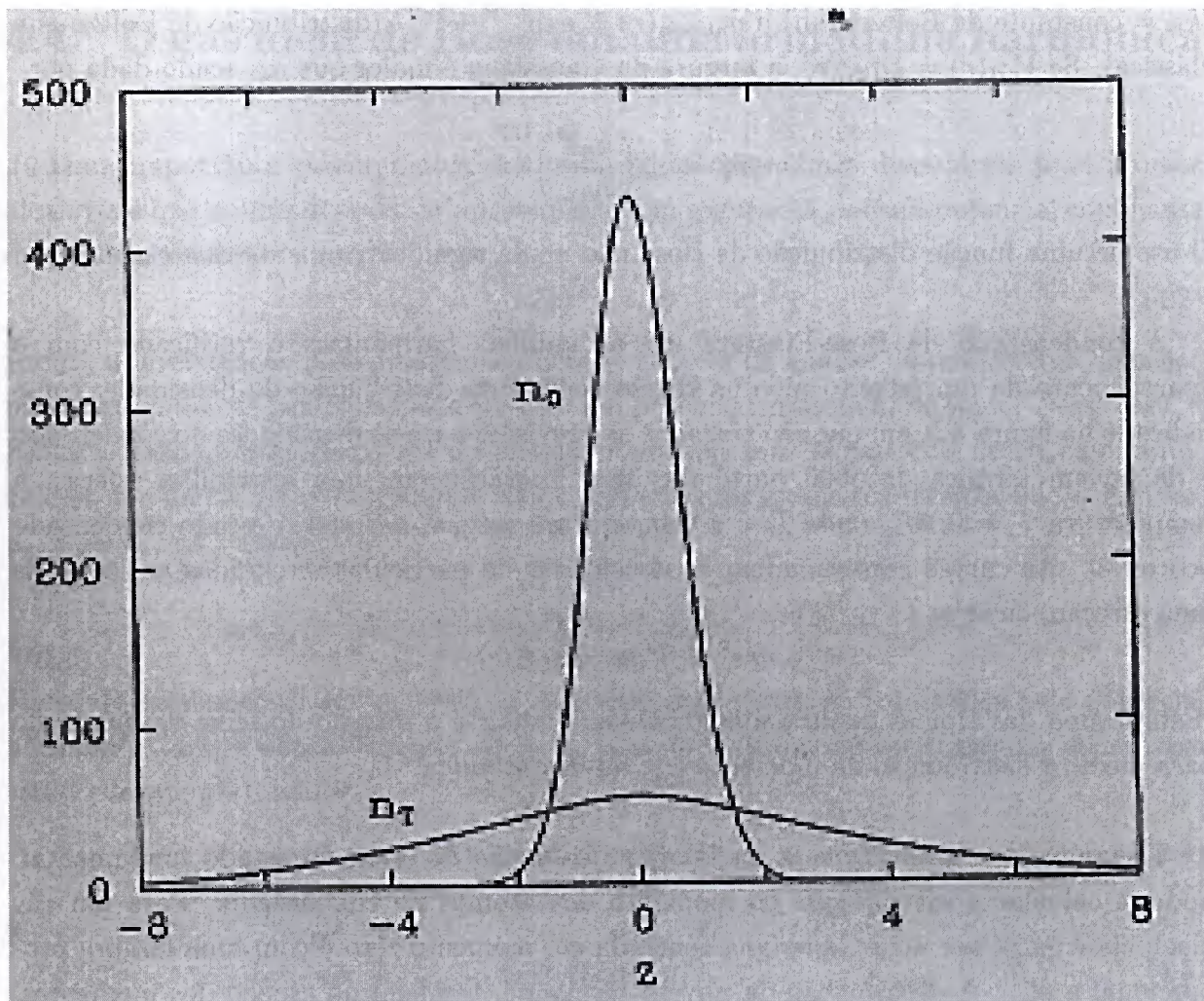


Figura 4.5: Previsões para a densidade da coluna de 5000 bósons sem interação em uma armadilha esférica à temperatura  $T = 0,9T_c$ . A curva mais estreita com acentuado pico central corresponde à densidade do condensado e a curva mais larga corresponde à densidade da nuvem térmica. O eixo  $x$  corresponde à direção  $z$  em unidades de  $a_h$  e o eixo  $y$  à densidade integrada ao longo de  $x$ , em unidades de  $a_h^{-2}$ . A densidade é normalizada ao número de átomos. As mesmas curvas podem ser identificadas com as distribuições de momento das partículas condensadas e não-condensadas, substituindo-se a abscissa e a ordenada por  $p_z$  (em unidades de  $a_h^{-1}$ ) e pela distribuição de momento (em unidades de  $a_h^2$ ), respectivamente [8].

absorção de luz, após desligar a armadilha e deixar o condensado expandir livremente. Se as partículas não interagem, a expansão é balística e a distribuição espacial da nuvem em expansão pode ser diretamente relacionada à distribuição de momento inicial. No espaço das coordenadas, mede-se diretamente a densidade dos átomos na armadilha por meio de espalhamento dispersivo de luz. Em ambos os casos, o aparecimento de um pico estreito é a principal assinatura da condensação.

A forma do campo confinante também fixa a simetria do problema. Pode-se usar armadilhas com simetria axial ou esférica. Os primeiros experimentos com  $^{87}\text{Rb}$  [1] e  $^{23}\text{Na}$  [2] foram realizados com simetria axial. Neste caso, pode-se definir uma coordenada axial  $z$  e uma radial  $\rho = (x^2 + y^2)^{1/2}$ , com as frequências correspondentes sendo  $\omega_z$  e  $\omega_\rho = \omega_x = \omega_y$ . Para determinar a assimetria da armadilha nestes casos, define-se

$$\lambda = \frac{\omega_z}{\omega_\rho} . \quad (4.11)$$

Para  $\lambda < 1$ , a armadilha tem a forma de um charuto, enquanto que para  $\lambda > 1$  a forma de um disco. Em termos de  $\lambda$ , o estado fundamental de bósons sem interação pode ser reescrito como

$$\phi_0(\vec{r}) = \frac{\lambda^{1/4}}{\pi^{3/4} a_\rho^{3/2}} \exp \left[ -\frac{1}{2a_\rho^2} (\rho^2 + \lambda z^2) \right] , \quad (4.12)$$

onde  $a_\rho = (\hbar/m\omega_\rho)^{1/2}$  é o comprimento do oscilador harmônico no plano  $xy$  e, como  $\omega_\rho = \lambda^{-1/3}\omega_h$ , tem-se também  $a_\rho = \lambda^{1/6}a_h$ . A Transformada de Fourier de (4.12) é dada por

$$\tilde{\phi}_0(\vec{p}) \propto \exp \left[ -\frac{a_\rho^2}{2\hbar^2} \left( p_\rho^2 + \frac{1}{\lambda} p_z^2 \right) \right] . \quad (4.13)$$

A partir de (4.13), pode-se calcular as larguras radial e axial médias, cuja razão, denominada “razão de aspecto”, é dada por

$$R = \sqrt{\lambda} = \left( \frac{p_z^2}{p_\rho^2} \right)^{1/2} . \quad (4.14)$$

A razão de aspecto  $R$  é fixada pelo parâmetro de assimetria da armadilha. Assim, a forma da nuvem em expansão no plano  $xz$  é uma elipse. Se as partes estão termicamente distribuídas entre muitos autoestados de energia superior, a função distribuição delas seria isotrópica no espaço dos momentos, de acordo com o princípio de equipartição; em outras palavras,  $R = 1$ . De fato, a ocorrência de anisotropia no pico do condensado foi interpretada desde o começo como uma assinatura de condensação de Bose-Einstein. Assim, a escolha de uma simetria axial torna-se muito útil para dar mais evidências de condensação de Bose-Einstein. Os valores medidos da razão de aspecto podem chegar a ser até 50% maiores que a previsão do modelo sem interação, mas pode-se ter uma

boa concordância somente incluindo a interação átomo-átomo, que afeta a dinâmica da expansão. Entretanto, o modelo sem interação, somente devido à anisotropia, já apresenta importantes resultados com relação ao efeito de condensação de Bose-Einstein.

## 4.5 Bósons aprisionados em temperatura finita

À temperatura  $T$ , o número total de partículas na isocoleção grancanônica é dado por

$$N = \sum_{n_x, n_y, n_z} \frac{1}{\exp[\beta(\epsilon_{n_x n_y n_z} - \mu)] - 1} \quad (4.15)$$

e a energia total é dada por

$$E = \sum_{n_x, n_y, n_z} \frac{\epsilon_{n_x n_y n_z}}{\exp[\beta(\epsilon_{n_x n_y n_z} - \mu)] - 1}, \quad (4.16)$$

onde  $\mu$  é o potencial químico e  $\beta = (k_B T)^{-1}$ . Abaixo de uma dada temperatura, a população do mais baixo estado torna-se macroscópica, o que corresponde ao começo da condensação de Bose-Einstein. O cálculo da temperatura crítica, a fração de partículas no estado mais baixo (**fração do condensado**) e outras quantidades termodinâmicas começa a partir de (4.15) e (4.16) usando o espectro  $\epsilon_{n_x n_y n_z}$  apropriado [49]. Mas, a mecânica estatística desses gases não é tão simples como se possa imaginar, devido ao tamanho finito e à não-homogeneidade desses sistemas. Como decorrência desse fato, surgem muitos problemas interessantes como a impossibilidade da aplicação da definição usual de limite termodinâmico (aumentar o número de partículas  $N$  e o volume com a densidade média sendo mantida constante).

Como no caso de um gás de Bose uniforme (ver Apêndices B e C para uma descrição da teoria de condensação de Bose-Einstein para gases ideais homogêneos), é conveniente separar o mais baixo autovalor  $\epsilon_{000}$  da soma (4.15) e chamar de  $N_0$  o número de partículas nesse estado. Este número pode ser macroscópico, isto é, da ordem de  $N$ , quando o potencial químico se torna igual à energia do mais baixo estado

$$\mu_c = \frac{3}{2} \hbar \bar{\omega}, \quad (4.17)$$

onde  $\bar{\omega}$  é a média aritmética das frequências de aprisionamento

$$\bar{\omega} = \frac{\omega_x + \omega_y + \omega_z}{3}. \quad (4.18)$$

Assim, concluímos que

$$N = N_0 + \sum_{n_x, n_y, n_z \neq 0} \frac{1}{e^{\beta \hbar (\omega_x n_x + \omega_y n_y + \omega_z n_z)} - 1}. \quad (4.19)$$

Para avaliar a soma explícita, geralmente assume-se que o espaçamento de níveis torna-se muito menor quando  $N \rightarrow \infty$ , de modo que se pode substituir (4.19) por

$$N = N_0 + \int_0^\infty \frac{dn_x dn_y dn_z}{e^{\beta \hbar (\omega_x n_x + \omega_y n_y + \omega_z n_z)} - 1} . \quad (4.20)$$

Esta hipótese corresponde a uma descrição semiclássica dos estados excitados. Sua validade implica que as energias de excitação relevantes contribuindo para a soma (4.20) são muito maiores que o espaçamento de níveis fixado pelas frequências do oscilador. A precisão da aproximação semiclássica (4.20) é boa se o número de átomos aprisionados é grande e  $k_B T \gg \hbar \omega_h$ .

Resolvendo-se (4.20), encontra-se

$$N = N_0 + \zeta(3) \left( \frac{k_B T}{\hbar \omega_h} \right)^3 , \quad (4.21)$$

onde  $\zeta(n)$  é a função de Riemann (ver Apêndice B) e  $\omega_h$  é a média geométrica, equação (4.7).

Impondo-se que  $N_0 \rightarrow 0$  na transição, pode-se obter a partir de (4.21) a temperatura de transição para a condensação de Bose-Einstein

$$T_c = \frac{\hbar \omega_h}{k_B} \left( \frac{N}{\zeta(3)} \right)^{1/3} = 0,94 \hbar \omega_h N^{1/3} , \quad (4.22)$$

ou seja,  $T_c \propto \omega_h N^{1/3}$ .

Para  $T > T_c$ , o potencial químico é menor que  $\mu_c$  e dependente de  $N$ , enquanto que a população do estado mais baixo é da ordem de 1 ao invés de  $N$ .

O limite termodinâmico para esses sistemas é obtido fazendo-se  $N \rightarrow \infty$ ,  $\omega_h \rightarrow 0$  e simultaneamente mantendo constante o produto  $N \omega_h^3$ . Com esta definição, a temperatura de transição é bem definida no limite termodinâmico. Inserindo a expressão (4.22) para  $T_c$  em (4.21), obtém-se a expressão da fração de condensado para  $T < T_c$

$$\frac{N_0}{N} = 1 - \left( \frac{T}{T_c} \right)^3 . \quad (4.23)$$

O mesmo resultado pode ser também obtido reescrevendo (4.20) como uma integral na energia, na forma

$$N = N_0 + \int_0^\infty \frac{\rho(\epsilon) d\epsilon}{e^{\beta \epsilon} - 1} , \quad (4.24)$$

onde  $\rho(\epsilon)$  é a densidade de estados. A integral (4.24) pode ser calculada usando o espectro (4.3), donde se obtém

$$\rho(\epsilon) = \frac{1}{2} \frac{\epsilon^2}{(\hbar \omega_h)^3} . \quad (4.25)$$

Inserindo este valor em (4.24), encontra-se novamente (4.21).

Para obter a energia total do sistema, devemos calcular

$$N = \int_0^\infty \frac{\epsilon \rho(\epsilon) d\epsilon}{e^{\beta\epsilon} - 1}, \quad (4.26)$$

para a qual encontra-se o resultado

$$E = 3Nk_B T_c \frac{\zeta(4)}{\zeta(3)} \left(\frac{T}{T_c}\right)^4. \quad (4.27)$$

A partir da energia, pode-se calcular outras quantidades termodinâmicas como o calor específico e a entropia.

Esses resultados podem ser comparados com a teoria de gases uniformes de Bose. Neste caso, os autoestados da Hamiltoniana são ondas planas de energia  $\epsilon = \frac{p^2}{2m}$ , com a densidade de estados  $\rho$  dada por  $\rho(\epsilon) = \frac{1}{(2\pi)^2} V \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \sqrt{\epsilon}$ , onde  $V$  é o volume.

A soma (4.15) fornece

$$\frac{N_0}{N} = 1 - \left(\frac{T}{T_c}\right)^{3/2}, \quad (4.28)$$

$$T_c = \frac{2\pi\hbar^2}{k_B m} \left(\frac{N}{V\zeta(3/2)}\right)^{2/3}, \quad (4.29)$$

e

$$E = \frac{3}{2} N k_B T_c \frac{\zeta(5/2)}{\zeta(3/2)} \left(\frac{T}{T_c}\right)^{5/2}, \quad (4.30)$$

Outra quantidade de interesse, que pode ser facilmente calculada usando a aproximação semiclássica, é a densidade de estados térmicos  $n_T(\vec{r})$ . A soma de  $n_T(\vec{r})$  com a densidade do condensado  $n_0(\vec{r})$ , dada por

$$n_0(\vec{r}) = N_0 |\phi_0(\vec{r})|^2, \quad (4.31)$$

nos dá a densidade total

$$n(\vec{r}) = n_0(\vec{r}) + n_T(\vec{r}). \quad (4.32)$$

Em  $T < T_c$  e no limite termodinâmico, a densidade térmica é dada pela integral sobre o espaço de momentos

$$n_T(\vec{r}) = \int d\vec{p} (2\pi\hbar)^{-3} \frac{1}{e^{\beta\epsilon(\vec{p}, \vec{r})} - 1}, \quad (4.33)$$

onde a energia semiclássica no espaço de fase é dada por

$$\epsilon(\vec{p}, \vec{r}) = \frac{p^2}{2m} + V_{ext}(\vec{r}). \quad (4.34)$$

Assim, obtém-se

$$n_T(\vec{r}) = \lambda_T^{-3} g_{3/2}(e^{-\beta V_{ext}(\vec{r})}), \quad (4.35)$$

onde o comprimento de onda térmico é dado por

$$\lambda_T(\vec{r}) = \sqrt{\frac{2\pi\hbar^2}{mk_B T}}, \quad (4.36)$$

e  $g_{3/2}$  é a função especial descrita no Apêndice B.

Integrando-se  $n_T(\vec{r})$  sobre o espaço, obtém-se novamente o número reduzido de átomos termicamente  $N - N_0 = N(T/T_c)^3$ , dado em (4.23). Do mesmo modo, obtém-se também a distribuição de partículas térmicas no espaço de momentos, dada por

$$n_T(\vec{p}) = (\lambda_T m \omega_h)^{-3} g_{3/2}(e^{-\frac{\beta p^2}{2m}}). \quad (4.37)$$

Dessa análise, concluímos que há duas escalas relevantes de energia para o gás ideal: a da temperatura de transição  $k_B T_c$  e a do espaçamento médio de níveis  $\hbar\omega_h$ .

De (4.22), vê-se claramente que  $k_B T_c$  pode ser muito maior que  $\hbar\omega_h$ . Nas armadilhas disponíveis, com  $N$  variando de alguns milhares a vários milhões, a temperatura de transição é cerca de 20 a 200 vezes maior que  $\hbar\omega_h$ , o que significa que a aproximação semiclássica nestes sistemas deve funcionar bem em uma ampla e útil escala de temperaturas. A frequência  $\nu_h$  é fixada pelo potencial de aprisionamento e varia tipicamente de dezenas a centenas de Hertz. Isto dá  $\hbar\omega_h$  da ordem de poucos nK. Em um dos experimentos realizados no JILA (Joint Institute for Laboratory Astrophysics), o espaçamento de níveis médio era cerca de 9 nK, correspondendo a uma temperatura crítica de aproximadamente 300 nK com 40.000 átomos de  $^{87}\text{Rb}$  na armadilha [50]. Podemos observar que, para um gás ideal, o potencial químico é da mesma ordem de  $\hbar\omega_h$ , como mostrado pela equação (4.17). Entretanto, como veremos, seu valor depende significativamente da interação átomo-átomo e, conseqüentemente, fornecerá uma terceira importante escala de energia.

O modelo de oscilador harmônico sem interação guiou os experimentais ao valor adequado da temperatura crítica, sendo o valor medido muito próximo ao do gás ideal (4.22) e a ocupação do estado condensado macroscopicamente grande abaixo de  $T_c$ , como previsto por (4.23) para a fração de condensado (veja figura 4.6 de um experimento no JILA [50]), em que ocorre a transição abrupta citada em  $\frac{T}{T_c} \sim 1$ .

Muitos trabalhos têm sido realizados atualmente levando em conta a termodinâmica dos condensados, procurando determinar as frações de condensado, a temperatura crítica, as correções necessárias e o limite de validade dos modelos utilizados [51, 52, 53, 54]. Apesar de já se ter problemas relacionados com a calibração de temperatura, uma comparação mais quantitativa entre teoria e experimento requer a inclusão de dois efeitos principais: o número finito de partículas e o fato de que elas estão interagindo. Nas seções a seguir, analisamos esses dois efeitos.

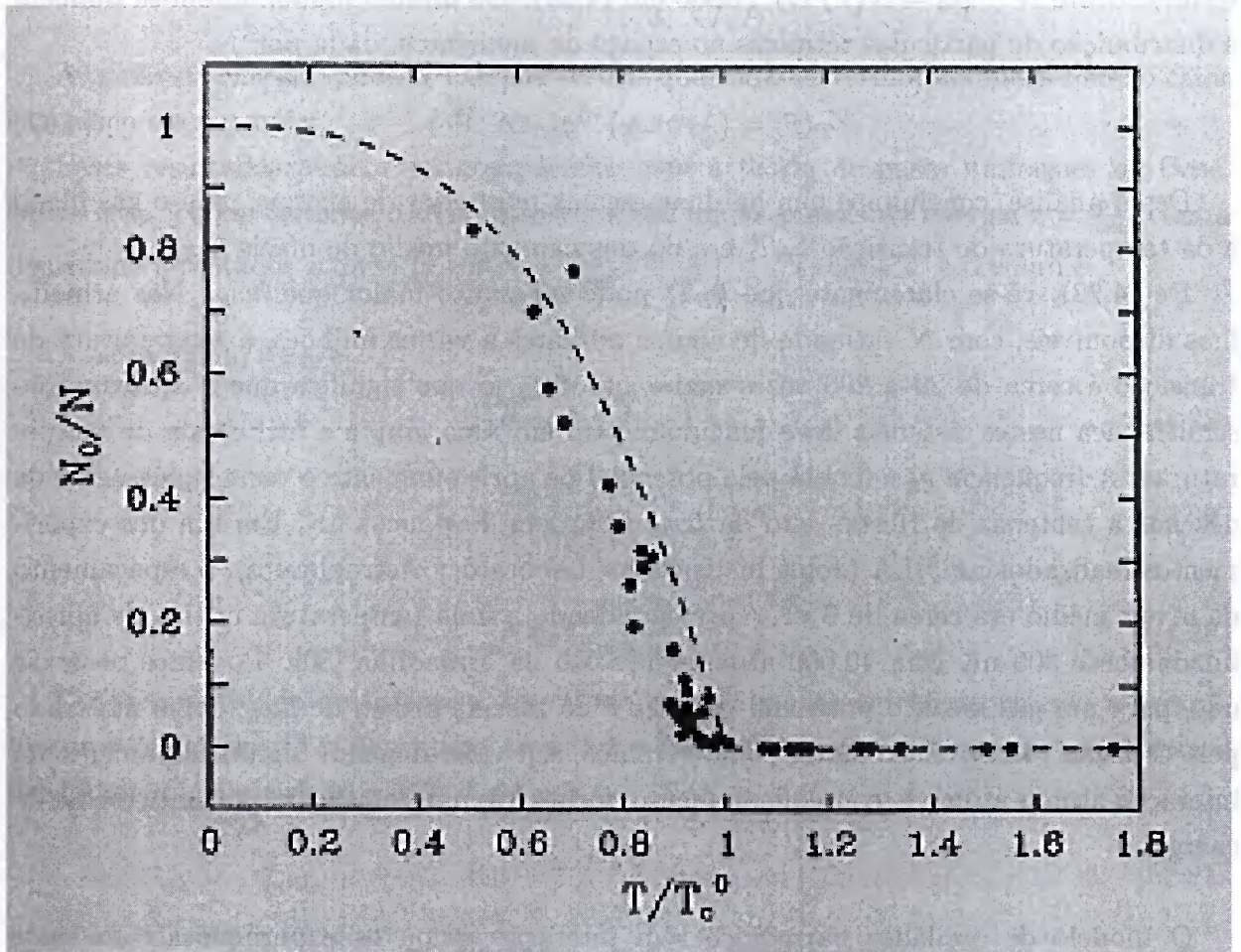


Figura 4.6: Fração condensada de átomos de  $^{87}\text{Rb}$  como função de  $T/T_c$ , no JILA [50]. Os pontos correspondem a dados experimentais de [50] e a curva ao modelo do gás ideal não-uniforme, dado pela equação (4.23).

## 4.6 Efeitos de tamanho finito

O número de átomos que pode ser posto nas armadilhas não é verdadeiramente macroscópico. Até agora, os experimentos têm sido realizados com um máximo de aproximadamente  $10^7$  átomos (muito abaixo do número de Avogadro). Em conseqüência, o limite termodinâmico nunca é atingido e um dos efeitos é a ausência de descontinuidades nas funções termodinâmicas [8, 55]. Então, a condensação de Bose-Einstein nesses gases aprisionados não é, estritamente falando, uma transição de fase. Na prática, entretanto, a ocupação microscópica do estado de mais baixa energia ocorre de um modo um tanto abrupto quando a temperatura é diminuída e pode ser observada, como se pode constatar na figura 4.6. A transição é na verdade suave se comparada às predições do limite  $N \rightarrow \infty$ . É interessante observar também que  $N$  finito implica em um sistema potencialmente mais rico, porque novos regimes interessantes podem ser explorados, mesmo nos casos onde não há transição de fase real no limite termodinâmico.

Para trabalhar a termodinâmica de um gás de Bose sem interação, tudo o que se necessita é o espectro de níveis de partícula única nas funções de distribuição de Bose. Trabalhando na isocoleção gran-canônica, por exemplo, o número médio de átomos é dado pela soma (4.15) e não é necessário tomar o limite  $N \rightarrow \infty$ . De fato, a soma explícita executada numericamente [56] nos mostra que a fração de condensado  $N_0/N$  é menor que a previsão do limite termodinâmico (4.23) e, como esperado, a transição é arredondada (ver figura 4.7 para um exemplo com  $N=1000$ ).

Efeitos de tamanho finito são significativos somente para valores um tanto pequenos de  $N$ , menores que aproximadamente  $10^4$ . Em cálculos anteriores [56], verificou-se também, quanto à ocupação dos primeiros níveis excitados, que a fração de átomos nesses estados desaparece para  $N \rightarrow \infty$  e é muito pequena já para  $N$  da ordem de 100.

A primeira correção para a expressão (4.23) para a fração de condensado pode ser avaliada analiticamente estudando o limite de grandes valores de  $N$  na soma (4.15), de onde se conclui que

$$\frac{N_0}{N} = 1 - \left(\frac{T}{T_c}\right)^3 - \frac{3\bar{\omega}\zeta(2)}{2\omega_h[\zeta(3)]^{2/3}} \left(\frac{T}{T_c}\right)^2 N^{-1/3}. \quad (4.38)$$

Para a menor ordem, efeitos de tamanho finito decrescem como  $N^{-1/3}$  e dependem da razão

$$R_\omega = \frac{\bar{\omega}}{\omega_h}. \quad (4.39)$$

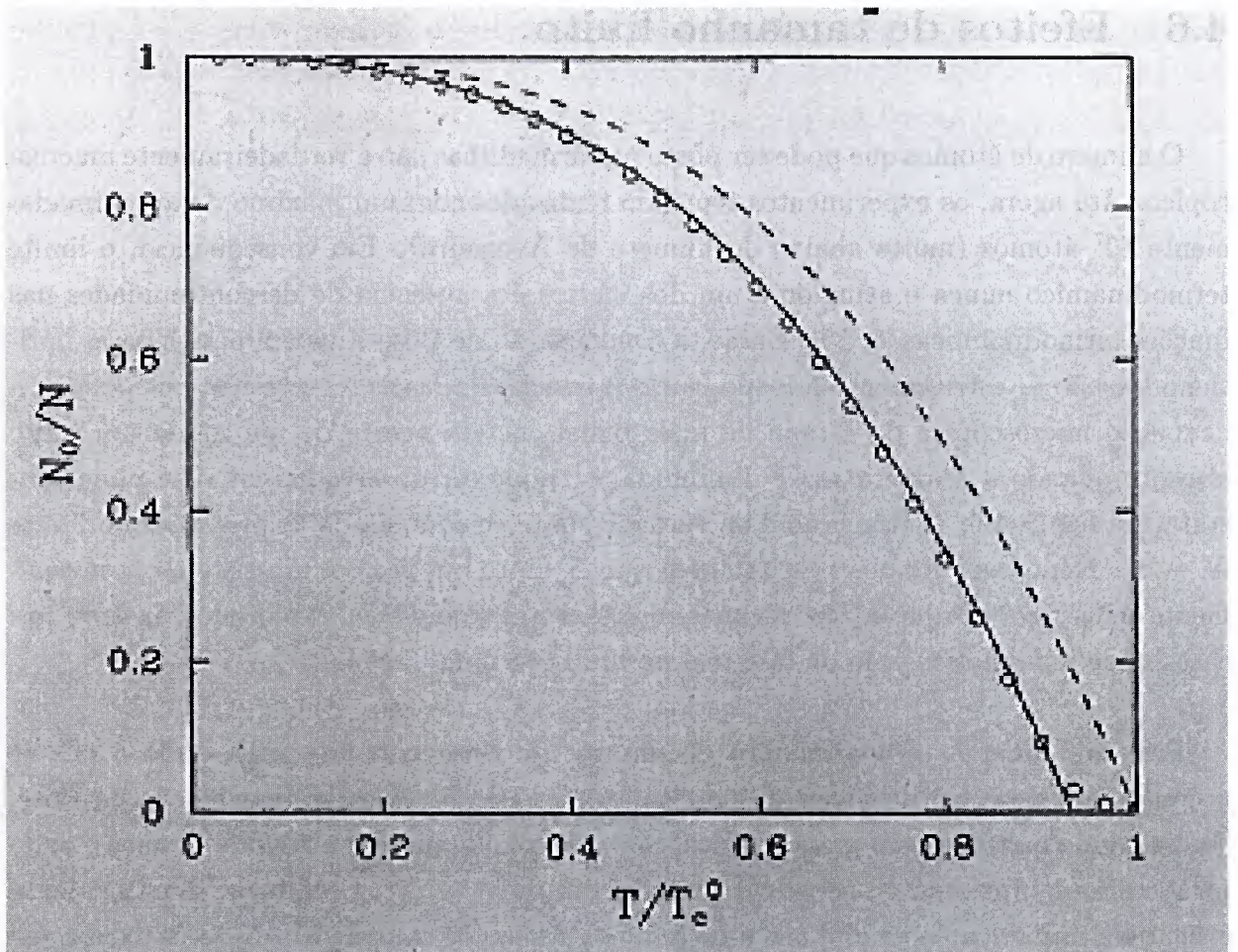


Figura 4.7: Fração de condensado versus  $T/T_c$  para um gás ideal confinado. A linha pontilhada correspondente ao limite termodinâmico, a linha sólida corresponde à equação (4.38) e os pontos correspondem a um cálculo exato quântico para 1000 partículas sem interação [56].

Para uma armadilha axialmente simétrica, esta razão depende do parâmetro de deformação  $\lambda = \omega_z/\omega_\rho$  como

$$R_\omega = \frac{\lambda + 2}{3\lambda^{1/3}}. \quad (4.40)$$

Para  $N = 1000$ , a previsão (4.38) já é indistinguível do resultado exato obtido por soma explícita sobre os estados excitados do Hamiltoniano de oscilador harmônico, com exceção de uma região estreita perto de  $T_c$  onde correções de ordem superior devem ser incluídas para se obter o resultado exato. Isto é bem ilustrado na figura 4.7, onde traçamos a previsão (4.38) com o cálculo exato obtido diretamente da Equação (4.15). Ambas as previsões são também comparadas com o limite termodinâmico (4.23).

Efeitos de tamanho finito reduzem a fração de condensado e, assim, provocam um

abaixamento da temperatura de transição quando comparada ao do limite  $N \rightarrow \infty$ . Anulando-se o lado esquerdo de (4.38), pode-se estimar a variação da temperatura crítica até a ordem  $N^{-1/3}$

$$\frac{\delta T_c}{T_c} = -\frac{\bar{\omega}\zeta(2)}{2\omega_h[\zeta(3)]^{2/3}}N^{-1/3} \cong -0,73R_\omega N^{-1/3}. \quad (4.41)$$

Outro problema que merece ser mencionado com relação ao tamanho finito do sistema é a equivalência entre isocoleções estatísticas diferentes e o problema de flutuações. No limite termodinâmico, as isocoleções grancanônica, canônica e microcanônica<sup>‡</sup> devem fornecer os mesmos resultados. Entretanto, essa equivalência não é assegurada quando  $N$  é finito. As diferenças entre as previsões das isocoleções microcanônica e grancanônica de um gás aprisionado, para a dependência da temperatura com a fração de condensado, são pequenas já para  $N \sim 1000$  [57]. As flutuações do número de átomos no condensado são muito mais sensíveis à escolha da isocoleção [58]. A inclusão das interações de dois corpos pode, entretanto, mudar esse cenário significativamente [59].

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.

## 4.7 Teoria de Gross-Pitaevskii

### 4.7.1 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 [8]

$$\hat{H} = \int d\vec{r} \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}) \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{ext}(\vec{r}) \right] \hat{\Psi}(\vec{r}) + \frac{1}{2} \int d\vec{r} d\vec{r}' \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}) \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}') V(\vec{r} - \vec{r}') \hat{\Psi}(\vec{r}') \hat{\Psi}(\vec{r}), \quad (4.42)$$

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.

<sup>‡</sup>A isocoleção canônica é aquela em que todos os sistemas constituintes da coleção estão em contato com um reservatório de calor de temperatura conhecida  $T$ . A isocoleção microcanônica é aquela representando um sistema isolado em equilíbrio, ou seja, os sistemas estão distribuídos de modo que suas energias  $E_r$  satisfaçam  $E < E_r < E + \delta E$ . A isocoleção grancanônica é aquela em que os sistemas podem ter qualquer número de partículas, com o número médio determinado pelas condições externas ao sistema (isto é análogo ao caso canônico, em que a energia média de um sistema é determinado pela temperatura do reservatório de calor com o qual ele está em contato).

O estado fundamental do sistema pode ser calculado diretamente, começando da Hamiltoniana (4.42). 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 muito “pesado” ou, até mesmo, impraticável para sistemas com valores muito grandes de  $N$  [60, 61] (muito maiores que, por exemplo,  $10^4$  átomos). Uma abordagem diferente para a condensação de Bose-Einstein foi proposta na Ref. [62]. Nessa abordagem, mostra-se como se pode obter toda informação sobre o fenômeno de condensação de Bose-Einstein a partir das funções de campo de Green no espaço de momentos, calculadas em momento zero.

Uma abordagem que simplifica a análise de sistemas condensados é a aproximação de campo médio. A aproximação de campo médio é geralmente desenvolvida para sistemas com interação a fim de superar o problema de resolver exatamente a equação de Schrödinger completa de muitos corpos. Além da conveniência da simplificação numérica, a ACM permite que se entenda o comportamento de um sistema em termos de um conjunto de parâmetros que possuem um significado físico claro. Isto é particularmente verdadeiro no caso de bósons aprisionados. Realmente, a ACM é muito efetiva em fornecer previsões quantitativas para as propriedades estatísticas, dinâmicas e termodinâmicas desses gases aprisionados.

A idéia básica para a descrição de campo médio de um gás de Bose diluído foi formulada por Bogoliubov em 1947. 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

$$\hat{\Psi}(\vec{r}) = \sum_{\alpha} \psi_{\alpha}(\vec{r}) a_{\alpha} , \quad \hat{\Psi}^{\dagger}(\vec{r}) = \sum_{\alpha} \psi_{\alpha}^{*}(\vec{r}) a_{\alpha}^{\dagger} , \quad (4.43)$$

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

$$\hat{a}_{\alpha}^{\dagger} | n_0, n_1, \dots, n_{\alpha}, \dots \rangle = \sqrt{n_{\alpha} + 1} | n_0, n_1, \dots, n_{\alpha} + 1, \dots \rangle , \quad (4.44)$$

$$\hat{a}_{\alpha} | n_0, n_1, \dots, n_{\alpha}, \dots \rangle = \sqrt{n_{\alpha}} | n_0, n_1, \dots, n_{\alpha} - 1, \dots \rangle , \quad (4.45)$$

onde  $n_{\alpha}$ , o número de átomos no estado de partícula única  $\alpha$ , são os autovalores do operador número

$$\hat{n}_{\alpha} = \hat{a}_{\alpha}^{\dagger} \hat{a}_{\alpha} . \quad (4.46)$$

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

$$[\hat{a}_{\alpha}, \hat{a}_{\beta}^{\dagger}] = \delta_{\alpha, \beta} , \quad [\hat{a}_{\alpha}, \hat{a}_{\beta}] = 0 \text{ e } [\hat{a}_{\alpha}^{\dagger}, \hat{a}_{\beta}^{\dagger}] = 0 . \quad (4.47)$$

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

$$\hat{a}_0 = \hat{a}_0^\dagger = \sqrt{N_0} . \quad (4.48)$$

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  $\Psi'$  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 [38] para o caso da configurações dependentes do tempo e não-uniformes é dada por

$$\hat{\Psi}(\vec{r}, t) = \Psi(\vec{r}, t) + \hat{\Psi}'(\vec{r}, t) , \quad (4.49)$$

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,

$$\Psi(\vec{r}, t) \equiv \langle \hat{\Psi}(\vec{r}, t) \rangle , \quad (4.50)$$

cujo módulo fixa a densidade do condensado:

$$n_0(\vec{r}, t) = |\Psi(\vec{r}, t)|^2 . \quad (4.51)$$

A função  $\Psi(\vec{r}, t)$  também possui uma fase bem definida e, similarmente ao caso de gases uniformes, isto corresponde a assumir a ocorrência de uma quebra de simetria de escala no sistema de muitos corpos

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**, caracterizando o comportamento de longo alcance fora da diagonal da matriz densidade de uma partícula

$$\rho_1(\vec{r}', \vec{r}, t) = \langle \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}', t) \hat{\Psi}(\vec{r}, t) \rangle . \quad (4.52)$$

De fato, a decomposição (4.49) implica o comportamento assintótico

$$\lim_{|\vec{r}' - \vec{r}| \rightarrow \infty} \rho_1(\vec{r}', \vec{r}, t) = \Psi^*(\vec{r}', t) \Psi(\vec{r}, t) . \quad (4.53)$$

A função de onda do condensado em um sistema de tamanho finito tem um claro significado: ela pode de fato ser determinada através da diagonalização da matriz densidade de um corpo

$$\int d\vec{r}' \rho_1(\vec{r}', \vec{r}) \Psi_i(\vec{r}') = N_i \Psi_i(\vec{r}) . \quad (4.54)$$

e corresponde à autofunção  $\Psi_i$  com o maior autovalor  $N_i$ .

A decomposição (4.49) 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 (4.42), a partir da qual chega-se a

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\Psi}(\vec{r}, t) = [\hat{\Psi}(\vec{r}, t), \hat{H}] \Rightarrow \quad (4.55)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\Psi}(\vec{r}, t) = \left[ -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_{ext}(\vec{r}) + \int d\vec{r}' \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}', t) V(\vec{r}' - \vec{r}) \hat{\Psi}(\vec{r}', t) \right] \hat{\Psi}(\vec{r}, t) . \quad (4.56)$$

Então, temos que substituir o operador  $\hat{\Psi}$  pelo campo clássico  $\Psi$ . 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 (4.56) por uma interação efetiva

$$V(\vec{r}' - \vec{r}) = \lambda_2 \delta(\vec{r}' - \vec{r}) , \quad (4.57)$$

onde a constante de acoplamento  $\lambda_2$  está relacionada ao comprimento de espalhamento  $a$  por

$$\lambda_2 = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m} . \quad (4.58)$$

O uso do potencial efetivo (4.57) na equação (4.56) é compatível com a substituição de  $\hat{\Psi}$  por  $\Psi$  e produz a seguinte equação fechada para o parâmetro de ordem

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) = \left( -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_{ext}(\vec{r}) + \lambda_2 |\Psi(\vec{r}, t)|^2 \right) \Psi(\vec{r}, t) . \quad (4.59)$$

Esta equação do tipo Schrödinger não-linear é conhecida como **equação de Gross-Pitaevskii (EGP)** [9]. 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. A equação de Gross-Pitaevskii (4.59) pode também ser obtida usando o procedimento variacional

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = \frac{\delta E}{\delta \Psi^*}, \quad (4.60)$$

onde a energia funcional  $E$  é dada por

$$E[\Psi] = \int d\vec{r} \left[ \frac{\hbar^2}{2m} |\nabla \Psi|^2 + V_{ext}(\vec{r}) |\Psi|^2 + \frac{\lambda_2}{2} |\Psi|^4 \right]. \quad (4.61)$$

O primeiro termo na integral (4.61) é a energia cinética do condensado  $E_{cin}$ , o segundo é a energia do oscilador harmônico  $E_h$ , enquanto que a última é a energia de interação de campo médio  $E_{int}$ . Note-se que o termo de campo médio  $E_{int}$  corresponde à primeira correção na expansão virial para a energia do gás. No caso de potenciais interatômicos de alcance finito e não negativos, limites rigorosos para este termo foram obtidos por Dyson (1967), Lieb e Yngvason (1998) [63].

O parâmetro adimensional que controla a validade da aproximação de gás diluído, exigido para a dedução da Equação (4.56), é o número de partículas em um volume de espalhamento  $|a|^3$ . Isto pode ser escrito como

$$\chi = \bar{n} |a|^3, \quad (4.62)$$

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  $^{23}\text{Na}$  [64],  $a = 5,77$  nm para  $^{87}\text{Rb}$  [65] e  $a = -1,45$  nm para  $^7\text{Li}$  [66]. Valores típicos de densidade variam de  $10^{13}$  a  $10^{15}$   $\text{cm}^{-3}$ , 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  $\chi$  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  $N \hbar \omega_h$  e, assim,  $E_{cin} \sim N a_h^{-2}$ . Finalmente, encontra-se

$$\frac{E_{int}}{E_{cin}} \propto \frac{N |a|}{a_h}. \quad (4.63)$$

Este é o parâmetro que expressa a importância da interação átomo-átomo comparada com a energia cinética. Ele pode ser facilmente maior que um mesmo quando  $\chi \ll 1$ , de

modo que muitos gases diluídos podem exibir também um importante comportamento não ideal. Nos primeiros experimentos com átomos de  $^{87}\text{Rb}$  no JILA [1] a razão  $r_a = |a|/a_h$  era de aproximadamente  $7 \times 10^{-3}$ , com  $N$  da ordem de alguns milhares. Assim, a razão (4.63) é maior que um. Nos experimentos com  $^7\text{Li}$  em Rice [4], 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 [2], o número de átomos no condensado é muito grande ( $10^6 - 10^7$ ) e a razão (4.63) varia de  $10^3$  a  $10^4$ .

Com a hipótese de que  $\hat{\Psi}' \equiv 0$ , a teoria de Gross-Pitaevskii é estritamente válida somente no limite de temperatura zero, quando todas as partículas estão no condensado. O comportamento estático e o comportamento dinâmico de tais sistemas no formalismo de Gross-Pitaevskii serão analisados nas seções e capítulos seguintes, assim como uma generalização dessa teoria, descrita a seguir.

#### 4.7.2 Formalismo de Gross-Pitaevskii 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 [9], caracterizada pela inclusão de um termo proporcional ao quadrado da densidade, correspondente à interação de três corpos.

A seguir, reduzimos essa equação a uma equação adimensional para, em seguida, obter numericamente as suas soluções na onda  $s$ . Como particularmente observado em [67], 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 [68].

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 [9]:

$$L = \int d^3r \left[ \frac{i\hbar}{2} \Psi^\dagger(\vec{r}) \frac{\partial \Psi(\vec{r})}{\partial t} - \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial \Psi^\dagger(\vec{r})}{\partial t} \Psi(\vec{r}) + \frac{\hbar^2}{2m} \Psi^\dagger(\vec{r}) \nabla^2 \Psi(\vec{r}) - \frac{m}{2} \omega^2 r^2 |\Psi(\vec{r})|^2 \right] + L_I, \quad (4.64)$$

onde a Lagrangiana de interação efetiva  $L_I$  para átomos bosônicos em temperatura ultra-

baixas, incluindo espalhamento de dois e três corpos em energia zero, é escrita como

$$\begin{aligned}
 L_I = & -\frac{1}{2} \int d^3 r_1 d^3 r_2 d^3 r'_1 d^3 r'_2 \Psi^\dagger(\vec{r}'_1) \Psi^\dagger(\vec{r}'_2) \Psi(\vec{r}_1) \Psi(\vec{r}_2) \\
 & \times \langle \vec{r}'_{12} | T^{(2)}(0) | \vec{r}_{12} \rangle \delta^3(\vec{r}'_1 + \vec{r}'_2 - \vec{r}_1 - \vec{r}_2) \\
 & - \frac{1}{3!} \int d^3 r_1 d^3 r_2 d^3 r_3 d^3 r'_1 d^3 r'_2 d^3 r'_3 \Psi^\dagger(\vec{r}'_1) \Psi^\dagger(\vec{r}'_2) \Psi^\dagger(\vec{r}'_3) \Psi(\vec{r}_1) \Psi(\vec{r}_2) \Psi(\vec{r}_3) \\
 & \times \left\langle \vec{r}'_{12} \vec{R}'_3 \left| T^{(3)}(0) - \sum_{j < k} T_{jk}^{(2)}(0 - K_i) \right| \vec{r}_{12} \vec{R}_3 \right\rangle \delta^3(\vec{R}'_{123} - \vec{R}_{123}) ,
 \end{aligned} \tag{4.65}$$

sendo  $\vec{r}_{12}$  e  $\vec{R}_3$  as coordenadas relativas, dadas por  $\vec{r}_{12} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$  e  $\vec{R}_3 = \vec{r}_3 - (\vec{r}_1 + \vec{r}_2)/2$  e  $\vec{R}_{123} \equiv (\vec{r}_1 + \vec{r}_2 + \vec{r}_3)$ .  $T^{(3)}(0)$  e  $T_{jk}^{(2)}(0)$  são as correspondentes matrizes  $T$  de três e dois corpos para o par  $jk$ , que são avaliadas em energia zero. A matriz  $T$  de dois corpos para cada par  $jk$  é subtraída de  $T^{(3)}(0)$  para evitar dupla contagem e  $K_i$  é o operador energia cinética para a partícula  $i$ . Em nossa descrição, a armadilha atômica é dada por um potencial harmônico rotacionalmente simétrico, com frequência angular  $\omega$  e  $L_I$  nos dá as interações atômicas efetivas até três partículas.

Nós podemos aproximar a Lagrangiana de interação efetiva acima em baixas densidades fazendo-se a média das matrizes  $T$  sobre as coordenadas relativas, considerando que o comprimento de onda térmico é muito maior que as distâncias de interação características. Logo:

$$\begin{aligned}
 L_I = & -\frac{1}{2} \int d^3 r'_1 d^3 r_{12} \langle \vec{r}'_{12} | T^{(2)}(0) | \vec{r}_{12} \rangle \int d^3 r |\Psi(\vec{r})|^4 \\
 & - \frac{1}{3!} \int d^3 r'_1 d^3 R'_3 d^3 r_{12} d^3 R_3 \left\langle \vec{r}'_{12} \vec{R}'_3 \left| T^{(3)}(0) - \sum_{j < k} T_{jk}^{(2)}(0 - K_i) \right| \vec{r}_{12} \vec{R}_3 \right\rangle \\
 & \times \int d^3 r |\Psi(\vec{r})|^6 .
 \end{aligned} \tag{4.66}$$

As integrações das matrizes  $T$  sobre as coordenadas relativas nos dão os elementos de matriz de momento nulo

$$\int d^3 r'_1 d^3 r_{12} \langle \vec{r}'_{12} | T^{(2)}(0) | \vec{r}_{12} \rangle = (2\pi)^3 \langle \vec{p}_{12} = 0 | T^{(2)}(0) | \vec{p}_{12} = 0 \rangle = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m} , \tag{4.67}$$

onde  $a$  é o comprimento de espalhamento de dois corpos. Para a matriz  $T$  de três corpos relacionada, temos

$$\begin{aligned}
 & \int d^3 r'_1 d^3 R'_3 d^3 r_{12} d^3 R_3 \left\langle \vec{r}'_{12} \vec{R}'_3 \left| T^{(3)}(0) - \sum_{j < k} T_{jk}^{(2)}(0 - K_i) \right| \vec{r}_{12} \vec{R}_3 \right\rangle \\
 & = (2\pi)^6 \left\langle \vec{p}_{12} = 0; \vec{P}_3 = 0 \left| T^{(3)}(0) - \sum_{j < k} T_{jk}^{(2)}(0 - K_i) \right| \vec{p}_{12} = 0; \vec{P}_3 = 0 \right\rangle \\
 & = 2\lambda_3 ,
 \end{aligned} \tag{4.68}$$

onde  $\lambda_3$  é um parâmetro efetivo da intensidade da interação de três corpos.

A equação de Schrödinger não-linear, que descreve a função de onda do condensado na aproximação de campo médio, é obtida da Lagrangiana efetiva dada na equação (4.64). Considerando a interação na equação (4.66) e as definições (4.67) e (4.68), ela pode ser escrita como [69]

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \frac{m}{2} \omega^2 r^2 - \frac{4\pi\hbar^2 |a|}{m} |\Psi(\vec{r})|^2 + \lambda_3 |\Psi(\vec{r})|^4 \right] \Psi(\vec{r}) = \mu \Psi(\vec{r}), \quad (4.69)$$

onde  $\mu$  é o potencial químico, fixado pelo número de átomos  $N$  no estado condensado

$$\int d^3r |\Psi(\vec{r})|^2 = N. \quad (4.70)$$

As escalas físicas apresentadas na equação (4.69) podem ser facilmente reconhecidas trabalhando-se com equações adimensionais. Reescalando (4.69) para a solução na onda  $s$ , obtemos a equação independente do tempo

$$\left[ -\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{4}x^2 - \frac{|\Phi(x)|^2}{x^2} + g_3 \frac{|\Phi(x)|^4}{x^4} \right] \Phi(x) = \beta \Phi(x), \quad (4.71)$$

onde

$$x \equiv \sqrt{2m\omega/\hbar} r \quad \Phi(x) \equiv \sqrt{8\pi|a|} r \Psi(\vec{r}). \quad (4.72)$$

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

$$\beta \equiv \frac{\mu}{\hbar\omega} \quad \text{and} \quad g_3 \equiv \lambda_3 \hbar\omega \left[ \frac{m}{4\pi\hbar^2 a} \right]^2 \quad (4.73)$$

e a normalização para  $\Phi(x)$ , obtida da equação (5.2), define um número  $n$  relacionado ao número de átomos  $N$ :

$$\int_0^\infty dx |\Phi(x)|^2 = n, \quad \text{onde} \quad n \equiv 2N|a| \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}. \quad (4.74)$$

As condições de contorno em (4.71) são dadas por [70]

$$\Phi(0) = 0 \quad \text{and} \quad \Phi(\infty) \sim C \exp \left[ -x^2/4 + (\beta - 1/2) \ln(x) \right]. \quad (4.75)$$

## 4.8 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, usando o algoritmo de Crank-Nicolson. Estes dois últimos métodos serão aplicados no Capítulo 6. Os algoritmos numéricos empregados estão descritos no Apêndice D.

É importante ressaltar que resolvemos a equação de Gross-Pitaevskii generalizada no caso tridimensional com simetria esférica. No entanto, o caso tridimensional tem sido considerado também em simetria cilíndrica por vários autores (ver, por exemplo, [71] e [72]), com o objetivo de melhor descrever as experiências. A mesma equação tem sido resolvida também em outras dimensões (ver, por exemplo, [73] e [74]).

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

### 4.8.1 Método variacional independente do tempo

Consideremos um fluido de  $N$  bósons regido pela equação

$$\mu\Psi = \frac{p^2}{2m}\Psi + \frac{m\omega^2 r^2}{2}\Psi + \lambda_2 N |\Psi|^2 \Psi + \lambda_3 N^2 |\Psi|^4 \Psi, \quad (4.76)$$

onde  $\Psi \equiv \Psi(\vec{r})$  e  $\Psi$  é normalizada a 1. Esta expressão representa uma equação de campo médio com uma interação efetiva ou uma interação de dois e três corpos. Se tivermos  $\lambda_2 < 0$ , o sistema apresenta interações de dois corpos atrativas e, caso contrário, interações de dois corpos repulsivas. Se  $\lambda_2 > 0$  e  $\lambda_3 < 0$ , o sistema sofre uma transição de fase líquido-gás, que analisaremos ainda nesse capítulo.

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

$$E = N \langle \Psi | \left( \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 r^2}{2} \right) | \Psi \rangle + \frac{\lambda_2 N^2}{2} \int d^3r |\Psi|^4 + \frac{\lambda_3 N^3}{3} \int d^3r |\Psi|^6. \quad (4.77)$$

Para obter a solução, devemos minimizar  $E$  ou resolver a equação (4.76). Vamos assumir na equação (4.77) a forma gaussiana para  $\Psi$ , tendo o parâmetro variacional  $\sigma$ :

$$\Psi(\vec{r}) = \frac{m\omega_h}{(\pi\hbar\sigma^2)^{3/4}} \exp\left(\frac{-m\omega_h r^2}{2\hbar\sigma^2}\right). \quad (4.78)$$

Nesse caso, o valor do raio quadrático médio é dado por

$$\langle r^2 \rangle = \frac{\hbar}{m\omega_h} \left(\frac{3\sigma^2}{2}\right). \quad (4.79)$$

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

$$E = \hbar\omega_h N \left[ \frac{3}{4} \left(\sigma^2 + \frac{1}{\sigma^2}\right) - \frac{n}{4\sqrt{\pi}\sigma^3} + \frac{2n^2 g_3}{9\sqrt{3}\pi\sigma^6} \right]. \quad (4.80)$$

Minimizando  $E$  em relação a  $\sigma$ , ou seja

$$\left. \frac{\partial E}{\partial \sigma} \right|_{\sigma_0} = 0, \quad (4.81)$$

obtemos o polinômio

$$\sigma_0^8 - \sigma_0^4 + \frac{n}{2\sqrt{\pi}}\sigma_0^3 - \frac{8n^2 g_3}{9\pi\sqrt{3}} = 0. \quad (4.82)$$

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  $\sigma_0$ .

As expressões para  $\mu$  e  $\rho_c$  são dadas por

$$\mu = \hbar\omega_h \left[ \frac{3}{4} \left(\sigma_0^2 + \frac{1}{\sigma_0^2}\right) - \frac{n}{2\sqrt{\pi}\sigma_0^3} + \frac{2n^2 g_3}{3\pi\sqrt{3}\sigma_0^6} \right] \quad (4.83)$$

e

$$\rho_c = N \left(\frac{m\omega_h}{\pi\hbar}\right)^{3/2} \frac{1}{\sigma_0^3}. \quad (4.84)$$

A frequência de oscilações coletivas é dada variacionalmente em função da frequência do oscilador  $\omega_h$  por

$$\omega_{col} = \omega_h \sqrt{\frac{2}{3} \frac{1}{N\hbar\omega_h} \left. \frac{\partial^2 E}{\partial \sigma^2} \right|_{\sigma_0}}. \quad (4.85)$$

Assim, para o caso particular  $\lambda_3 = 0$ , temos

$$\omega_{col} = \omega_h \sqrt{5 - \frac{1}{\sigma_0^4}}. \quad (4.86)$$

Dessa forma, o valor do número crítico pode ser obtido analiticamente nessa abordagem variacional [75], 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 (4.82) com  $\lambda_3 = 0$  nos fornece

$$n_c = \sqrt{\pi} \left[ \frac{8}{5} \left(\frac{1}{5}\right)^{1/4} \right] = 1,8965. \quad (4.87)$$

O valor do potencial químico crítico é dado por

$$\mu_c = \frac{\sqrt{5}}{10} \hbar \omega_h . \quad (4.88)$$

Os comportamentos desses observáveis variacionais para  $\lambda_3 = 0$  são dados nas figuras 4.8 e 4.9. Na figura 4.8, temos quatro gráficos independentes, onde a energia total  $E$  é dada em unidades de  $N\hbar\omega/n$ ; o potencial químico  $\mu$  em unidades de  $\hbar\omega$ ; o raio quadrático médio  $\langle r^2 \rangle$  em unidades de  $\hbar/m\omega_h$ ; e a densidade central  $\rho_c$  em unidades de  $N(m\omega_h/\hbar)^{3/2}$ . Na figura 4.9, temos o comportamento das frequências coletivas em unidades da frequência do oscilador  $\omega_h$ .

Resolvendo o polinômio (4.82), nós obtemos uma ou mais soluções  $\sigma(N)$ , correspondendo a regiões em que a energia pode apresentar uma, duas ou três soluções estáveis, como pode-se ver na figura 4.10. Nessa figura, ilustramos os possíveis comportamentos da energia como função de  $n$  e de  $\sigma$ , tanto no caso variacional quanto por meio de cálculo numérico, para um valor arbitrariamente pequeno da interação de três corpos, escolhido como  $g_3 = 5 \times 10^{-3}$ . Na parte inferior, podemos analisar as diferenças entre os cálculos variacional (sólido) e numérico (tracejado) da energia contra o número de átomos reduzido  $n$ . Na parte superior, temos cinco gráficos da energia variacional contra o parâmetro variacional  $\sigma$  para cinco valores de  $n$  mostrados no gráfico inferior. Na região (I), na qual o número de átomos é ainda pequeno, a força de dois corpos atrativa é dominante em relação à força de três corpos atrativa e apenas um mínimo da energia variacional  $E$  como função do parâmetro variacional  $\sigma$  é encontrado. O mesmo ocorre para  $g_3 = 0$ . Quando  $n$  é aumentado (região II), dois mínimos aparecem na energia  $E(\sigma)$ . Um máximo instável é também encontrado entre os dois mínimos. O mínimo de menor energia é estável, enquanto que a solução correspondente ao menor  $\sigma$  é metaestável. Esta solução tem uma densidade maior e, conseqüentemente, o caráter metaestável justifica-se pela força de três corpos repulsiva que passa a ser relevante em densidades maiores. O número mínimo  $n$  para o surgimento do estado metaestável é caracterizado pelo ponto de inflexão na energia como uma função de  $\sigma$ . Para maiores valores de  $n$ , três soluções variacionais são encontradas, como se pode ver na parte inferior da figura 4.10. Os potenciais de confinamento e atrativo de dois corpos dominam o estado condensado na fase estável de baixa densidade até o ponto de cruzamento (C). Neste ponto, a solução metaestável mais densa torna-se degenerada na energia com a solução estável de menor densidade e uma transição de fase de primeira ordem ocorre. Visto que as duas soluções diferem por suas densidades, esta transição é análoga a uma transição de fase líquido-gás para a qual a diferença de densidades entre o líquido e o gás é o parâmetro de ordem. No cálculo variacional, isso ocorre no número de transição  $n \cong 1,3$ , enquanto que a solução numérica da equação de Schrödinger não-linear fornece  $n \cong 1,2$ . Na região (III), observamos dois mínimos locais com energias diferentes, um ponto estável de maior

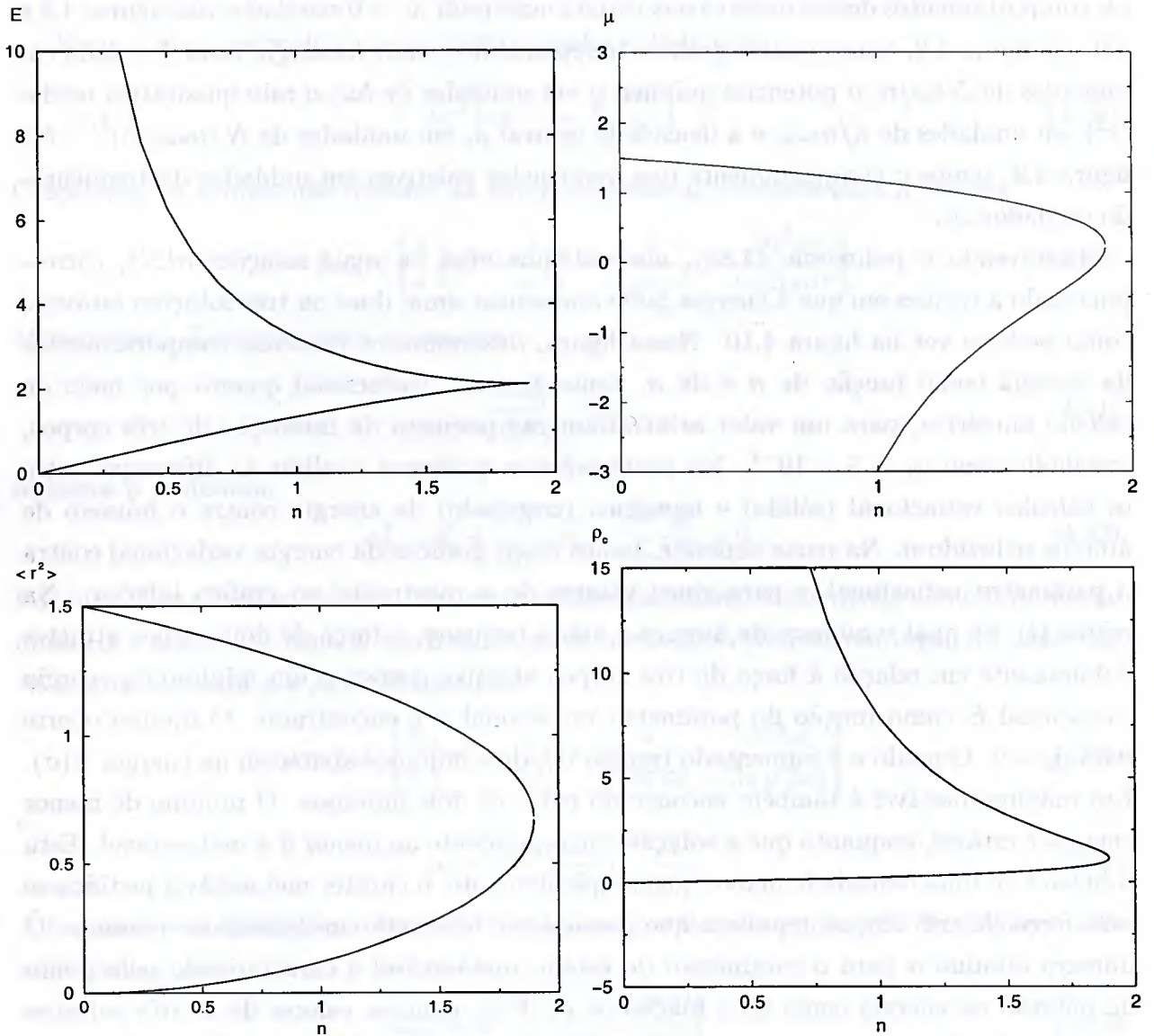


Figura 4.8: Energia  $E$ , potencial químico  $\mu$ , densidade central  $\rho_c$  e raio quadrático médio  $\langle r^2 \rangle$ , sem interação de três corpos, obtidos por meio do método variacional.  $E$  em unidades de  $N\hbar\omega/n$ ;  $\mu$  em unidades de  $\hbar\omega$ ;  $\langle r^2 \rangle$  em unidades de  $\hbar/m\omega_h$ ; e  $\rho_c$  em unidades de  $N(m\omega_h/\hbar)^{3/2}$ .

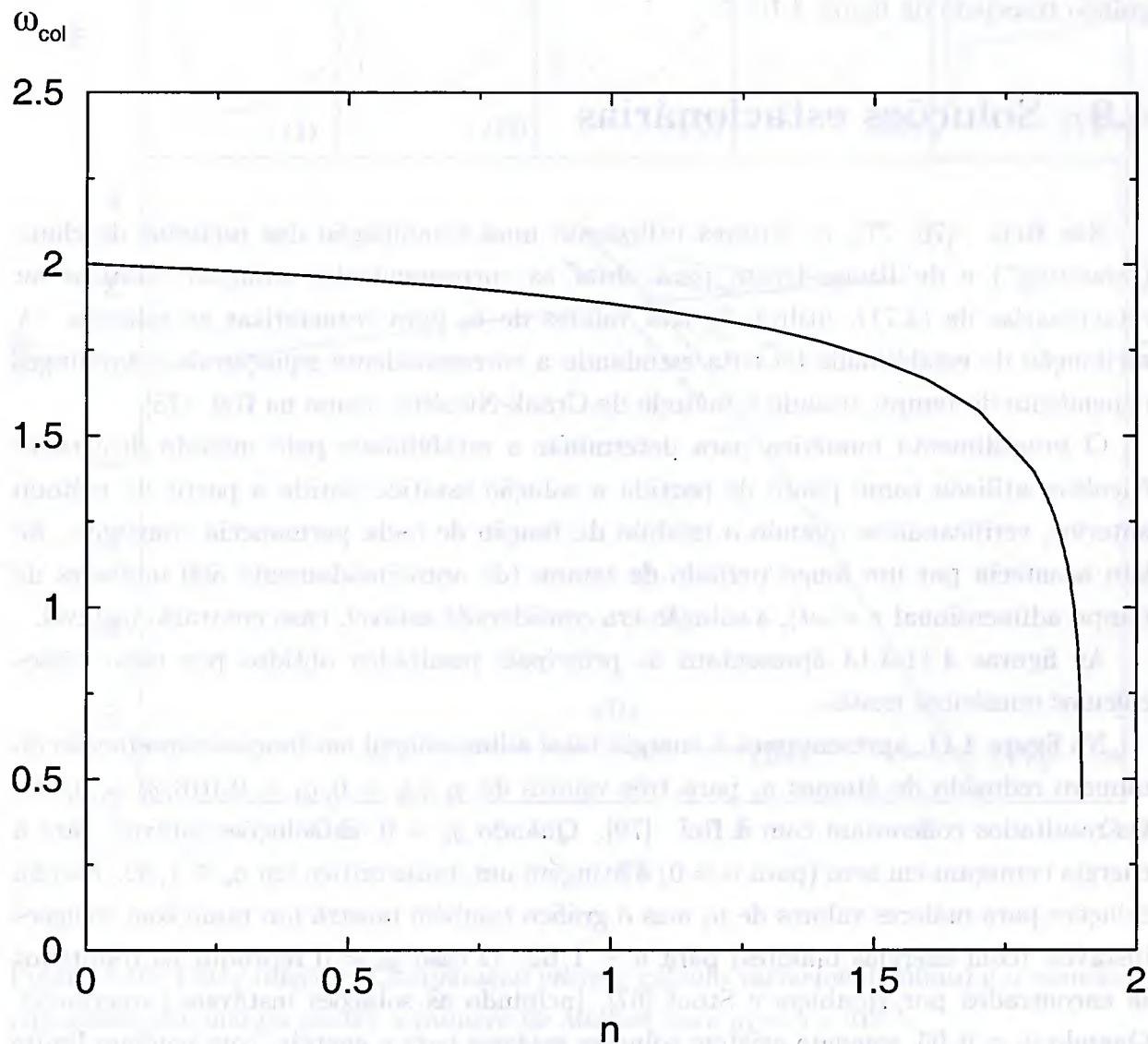


Figura 4.9: Frequência de oscilações coletivas  $\omega_{col}$ , em unidades da frequência do oscilador  $\omega_h$ , obtida variacionalmente. O número crítico é dado por  $n_c = 1,8965$ .

densidade e um ponto metaestável de menor densidade. A solução metaestável desaparece no máximo no contorno entre as regiões (III) e (IV). Nas regiões (III) e (IV), a repulsão de três corpos estabiliza uma solução densa contra o colapso induzido pela atração de dois corpos. As características qualitativas da solução variacional são claramente verificadas pela solução numérica da equação não-linear de Schrödinger, conforme podemos ver no gráfico tracejado da figura 4.10.

## 4.9 Soluções estacionárias

Nas Refs. [76, 77], os autores utilizaram uma combinação dos métodos de chute (“shooting”) e de Runge-Kutta para obter as correspondentes soluções estáticas ou estacionárias de (4.71), utilizando três valores de  $g_3$  para caracterizar as soluções. A atribuição de estabilidade foi feita estudando a correspondente equação de Schrödinger dependente do tempo, usando o método de Crank-Nicolson, como na Ref. [78].

O procedimento numérico para determinar a estabilidade pelo método de Crank-Nicolson utilizou como ponto de partida a solução estática obtida a partir do método anterior, verificando-se quando o módulo da função de onda permanecia constante. Se isto acontecia por um longo período de tempo (de aproximadamente 500 unidades de tempo adimensional  $\tau = \omega t$ ), a solução era considerada estável, caso contrário instável.

As figuras 4.11-4.14 apresentam os principais resultados obtidos por meio desses cálculos numéricos exatos.

Na figura 4.11, apresentamos a energia total adimensional em função como função do número reduzido de átomos  $n$ , para três valores de  $g_3$  ( $g_3 = 0$ ;  $g_3 = 0,016$ ;  $g_3 = 0,03$ ). Os resultados concordam com a Ref. [79]. Quando  $g_3 = 0$ , as soluções estáveis para a energia começam em zero (para  $n = 0$ ) e atingem um limite crítico em  $n_c \cong 1,62$ . Não há soluções para maiores valores de  $n$ , mas o gráfico também mostra um ramo com soluções instáveis (com energias maiores) para  $n \leq 1,62$ . O caso  $g_3 = 0$  reproduz os resultados já encontrados por Houbiers e Stoof [67], incluindo as soluções instáveis (superiores). Quando  $g_3 = 0,03$ , somente existem soluções estáveis para a energia, com nenhum limite no número de átomos, com um máximo em  $n \sim 2$ . Assim, este e valores maiores de  $g_3$  já representam um domínio do termo quártico na interação da equação (4.71). O caso mais interessante, representado na figura 4.11, ocorre para  $g_3 = 0,016$ , pois neste caso observamos uma região do gráfico onde podemos ter até três soluções para o mesmo  $n$ . A inserção desta figura amplia a região do gráfico onde, para  $g_3 = 0,016$ , as soluções tornam-se instáveis (entre A e B) ou metaestável (entre A e C ou B e C). No ponto C, a transição de fase ocorre de uma fase menos densa (gás) para uma fase mais densa (líquida), que na figura 4.12 serão representadas, respectivamente, pelos pontos  $C_G$  e  $C_L$ .

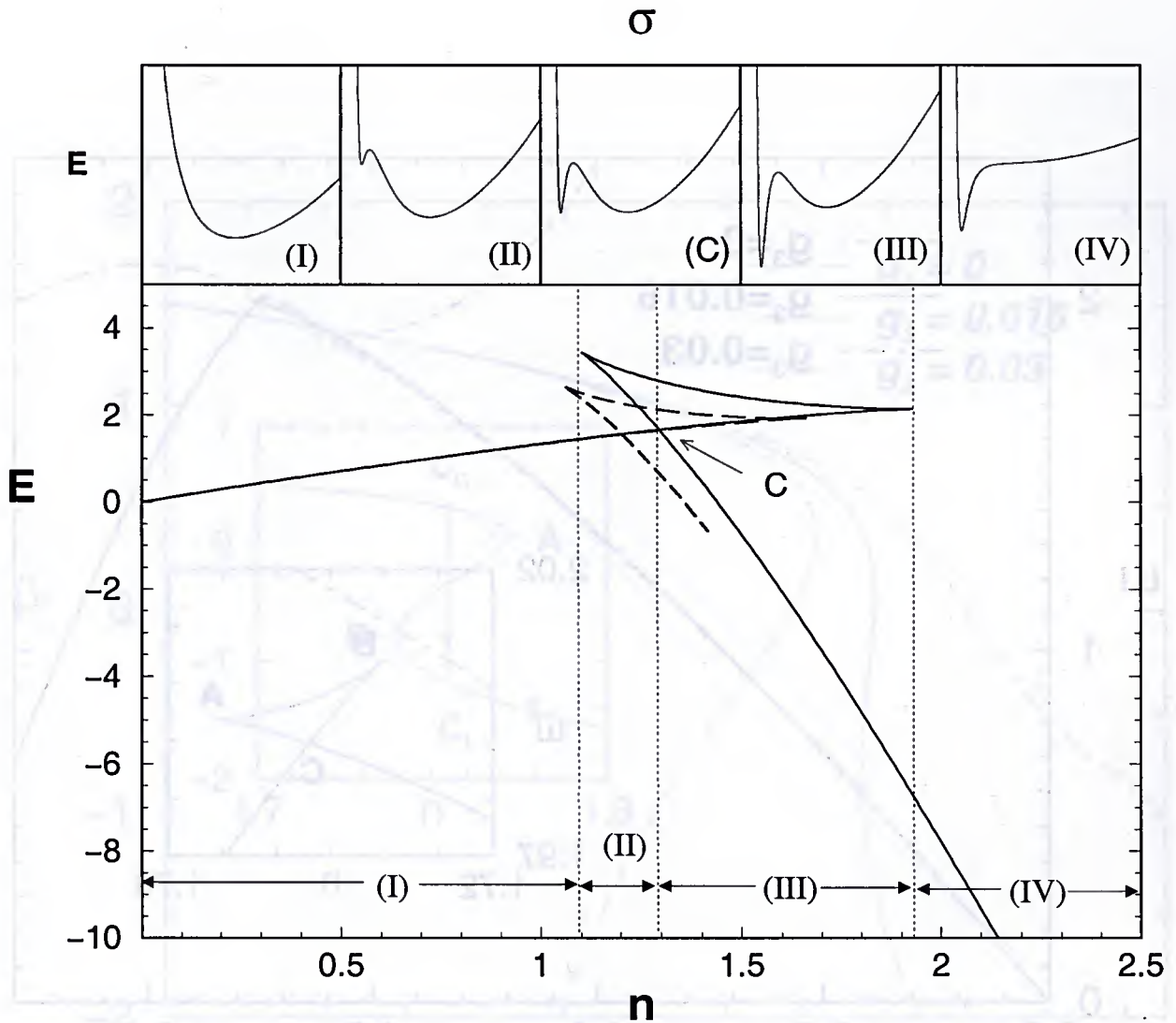


Figura 4.10: Parte inferior: Comparação entre o cálculo variacional(sólido) e o numérico (tracejado) da energia contra o número de átomos para  $g_3 = 5 \times 10^{-3}$ .

Parte superior: Cinco gráficos da energia variacional contra o parâmetro variacional  $\sigma$  para cinco valores de  $n$  mostrados no gráfico inferior: (I) corresponde à região de  $n$  pequeno com apenas uma solução estável encontrada; (II) corresponde à região de  $n$  pequeno onde se observam três extremos da energia; (III) corresponde à região de grande  $n$  com três extremos da energia; (IV) corresponde à região de grande  $n$  com apenas uma solução estável e (C) corresponde a um valor de  $n$  tal que encontram-se duas soluções estáveis com a mesma energia.

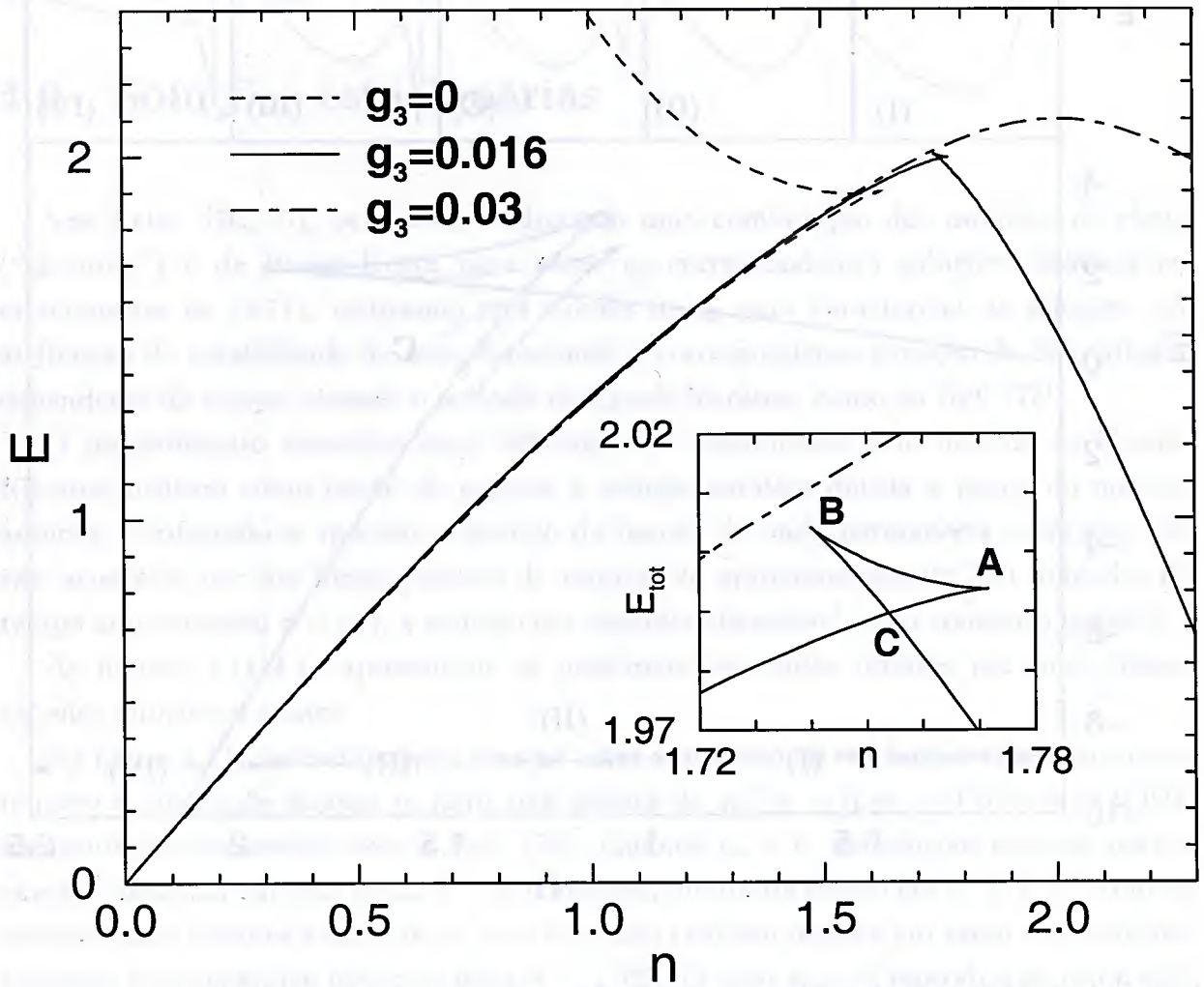


Figura 4.11: Energia total do condensado, dada em unidades de  $\hbar\omega / (2|a|\sqrt{(2m\omega/\hbar)})$ , como função de  $n$ . A linha ligando A e B na inserção corresponde à região instável mostrada na figura 4.12.

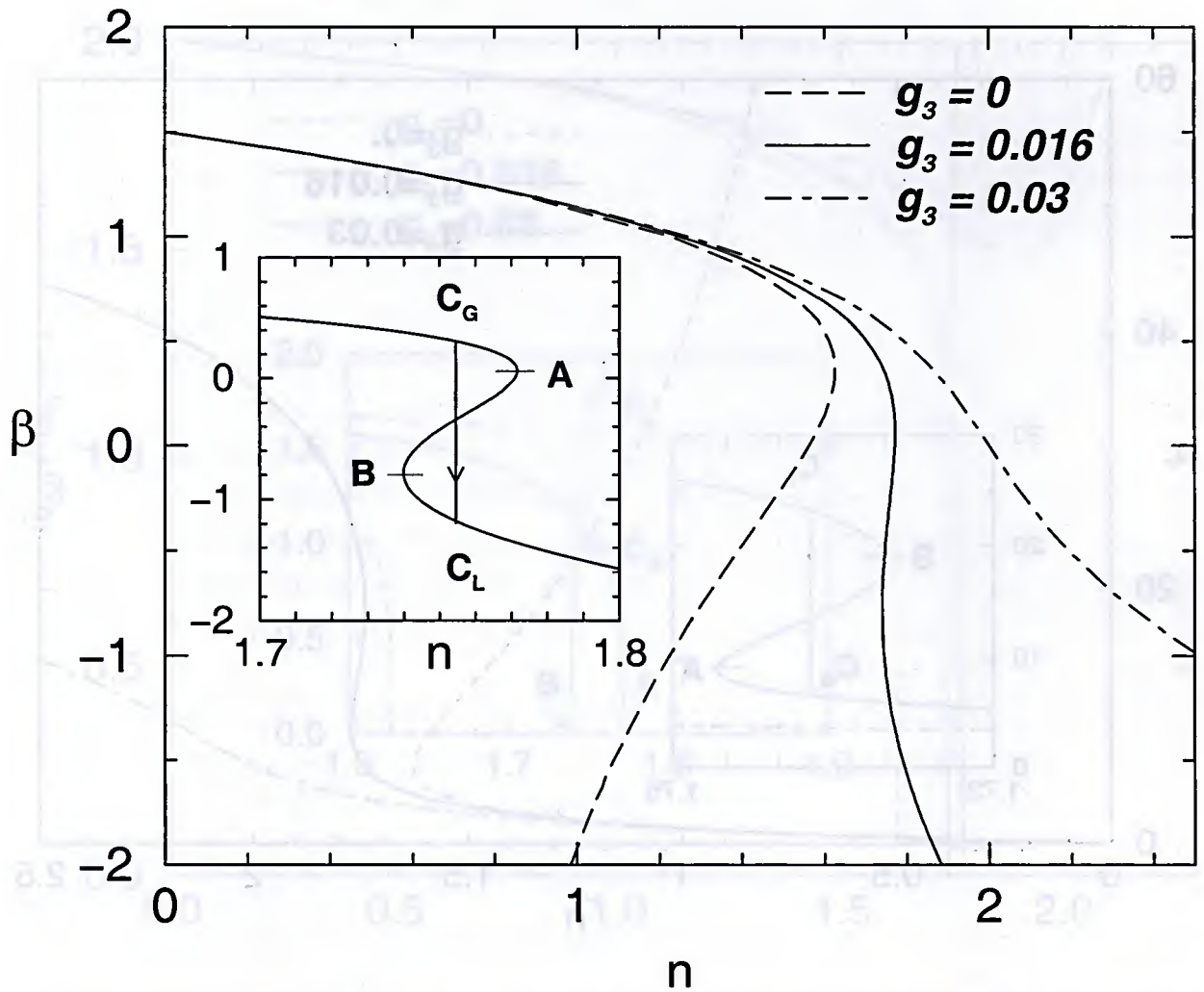


Figura 4.12: Potencial químico  $\beta$  em unidades de  $\hbar\omega$  como uma função de  $n$  [ver equações (4.73) and (4.74)].

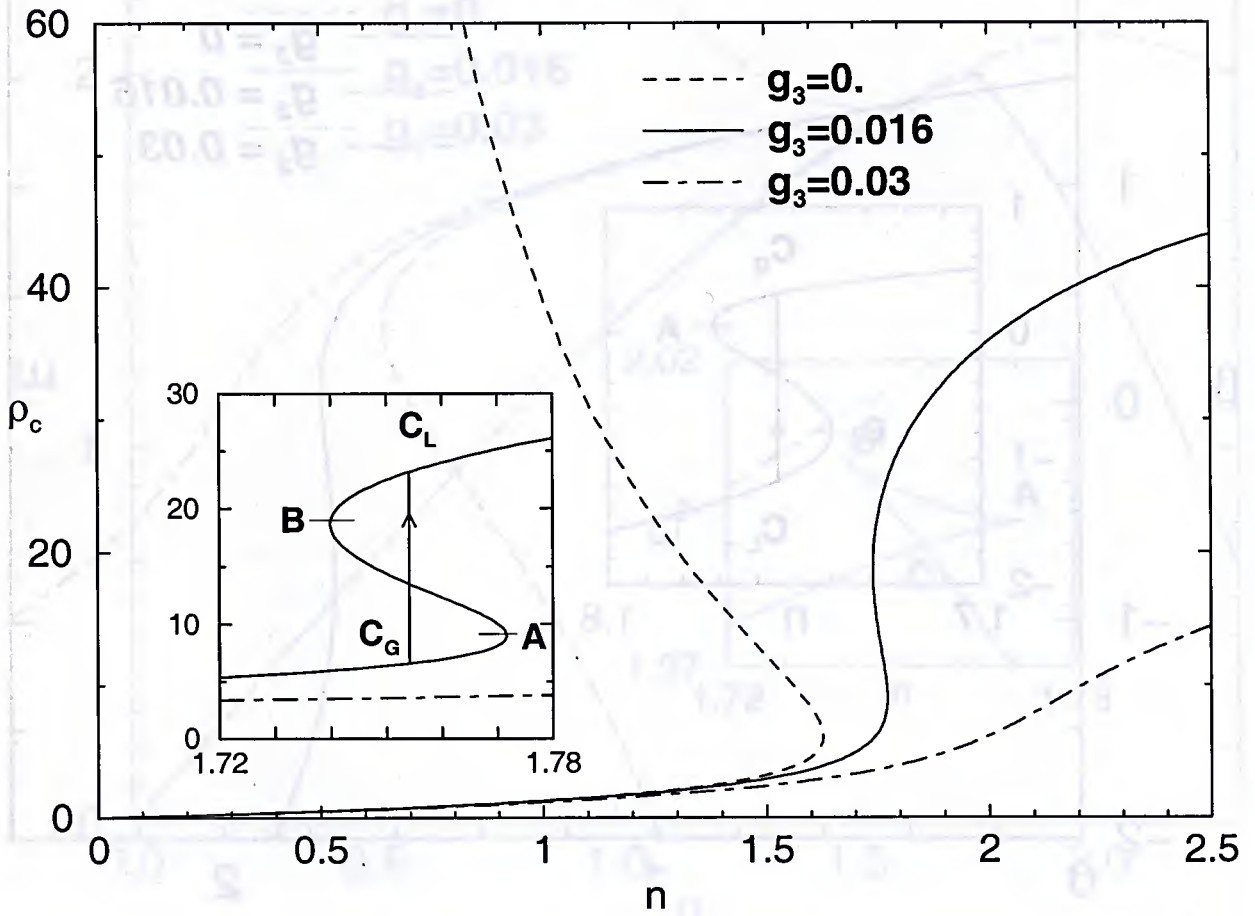


Figura 4.13: Densidade central, dada em unidades de  $N \left( \frac{m\omega\hbar}{\pi\hbar} \right)^{3/2}$ , como função do número reduzido de átomos  $n$ .

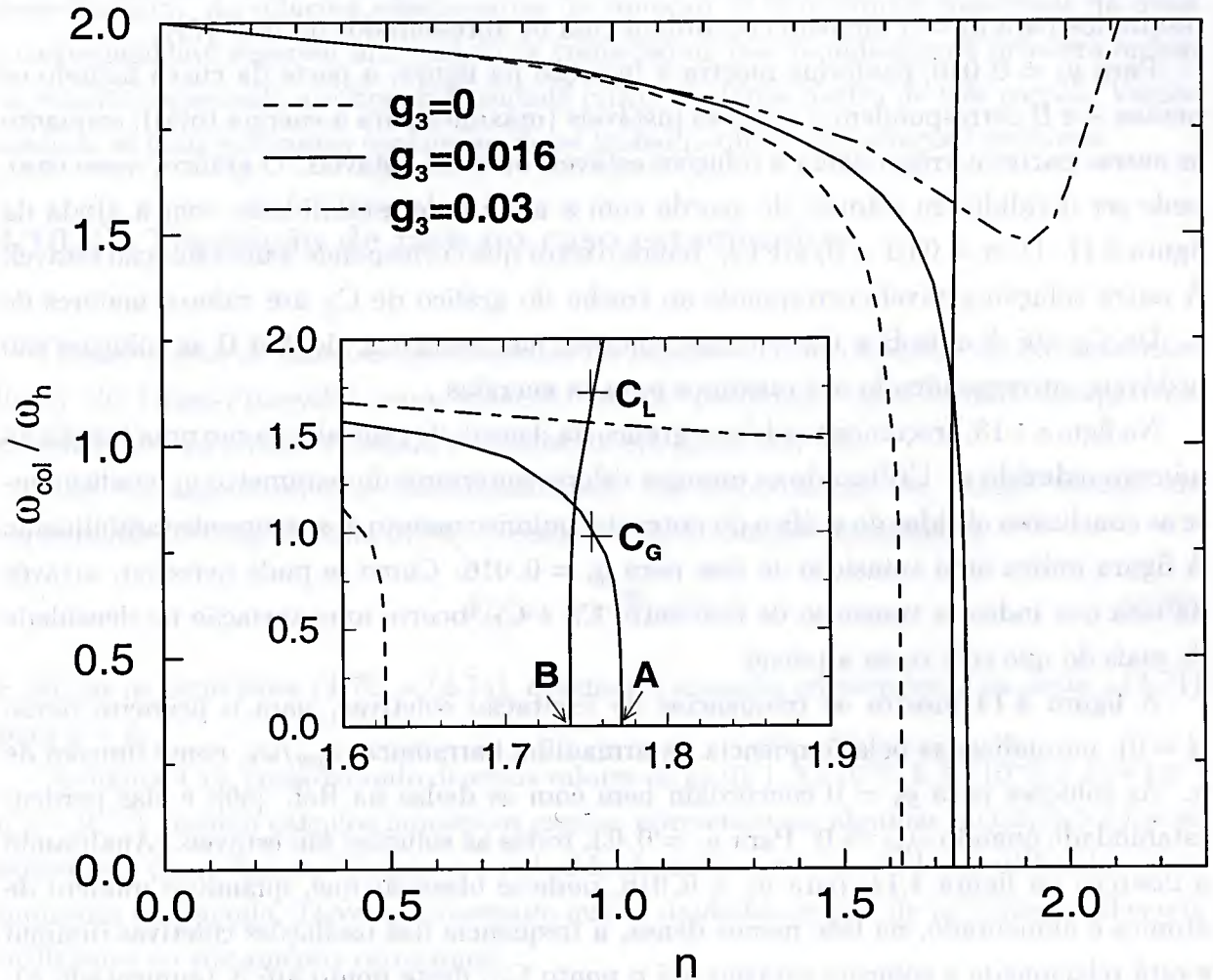


Figura 4.14: Frequências das mais baixas excitações coletivas (com  $l = 0$ ) como função de  $n$ .

Na figura 4.12, apresentamos o potencial químico adimensional  $\beta$  como função de  $n$ . O cálculo concorda com o resultado apresentado na Ref. [70], com o número máximo de átomos limitado a  $n_c \approx 1,62$ <sup>§</sup>. Como podemos ver, para  $n \leq n_c$  temos três soluções possíveis, onde temos duas soluções correspondentes a mínimos para a energia total. Na inserção, com uma reta entre  $C_G$  e  $C_L$  estamos indicando o ponto de transição de fase mencionado no parágrafo anterior, que será discutido na próxima seção. Nota-se que, para  $g_3 = 0,03$ , a função da energia em termos de  $n$  é sempre unívoca e estável. Nossos resultados para  $g_3 = 0$  também concordam com os apresentados na Ref. [79].

Para  $g_3 = 0,016$ , conforme mostra a inserção na figura, a parte da curva ligando os pontos A e B correspondem a soluções instáveis (máximos para a energia total), enquanto as outras partes correspondem a soluções estáveis ou meta-estáveis. O gráfico, nesse caso, pode ser dividido em setores, de acordo com a análise de estabilidade, com a ajuda da figura 4.11. De  $n = 0$  ( $\beta = 0$ ) até  $C_G$ , temos o setor que corresponde a uma solução estável. A outra solução estável corresponde ao trecho do gráfico de  $C_L$  até valores maiores de  $n$ . De  $C_G$  até A e de B a  $C_L$  obtemos soluções meta-estáveis; de A a B as soluções são instáveis, correspondendo aos máximos para as energias.

Na figura 4.13, traçamos também o gráfico da densidade central  $\rho_c$  como uma função do número reduzido  $n$ . Utilizando os mesmos valores anteriores do parâmetro  $g_3$ , confirmam-se as conclusões obtidas do gráfico do potencial químico quanto aos setores de estabilidade. A figura indica uma transição de fase para  $g_3 = 0,016$ . Como se pode perceber, através da reta que indica a transição de fase entre  $C_G$  e  $C_L$ , ocorre uma variação na densidade de mais do que três vezes a inicial.

A figura 4.14 mostra as frequências de excitação coletivas, para o primeiro modo ( $l = 0$ ), normalizadas pela frequência da armadilha harmônica,  $\omega_{col}/\omega_h$ , como funções de  $n$ . As soluções para  $g_3 = 0$  concordam bem com as dadas na Ref. [80]; e elas perdem estabilidade quando  $\omega_{col} \rightarrow 0$ . Para  $g_3 = 0,03$ , todas as soluções são estáveis. Analisando a inserção da figura 4.14, para  $g_3 = 0,016$ , pode-se observar que, quando o número de átomos é aumentado, na fase menos densa, a frequência das oscilações coletivas diminui e está relacionada a soluções estáveis até o ponto  $C_G$ ; deste ponto até A (aumentado  $n$ ), a frequência continua a diminuir a zero, mas agora relacionada a soluções metaestáveis. Como já analisado nas figuras anteriores, é provável que ocorram transições de fase de  $C_G$  a  $C_L$  (ou das soluções metaestáveis, dadas nos ramos  $C_G$ -A e B- $C_L$  até as soluções estáveis correspondentes com  $n$  fixo).

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

<sup>§</sup>O parâmetro  $n$  é igual ao  $|C_{nl}^{3D}|$  da Ref. [70].

## 4.10 Transição de fase líquido-gás

### 4.10.1 Introdução

Na Ref. [19], os autores estudaram os efeitos de uma interação de três corpos repulsiva em um sistema de átomos ultra-frios aprisionados no estado condensado de Bose-Einstein. As soluções estacionárias da equação de Schrödinger não-linear na onda  $s$  correspondente sugerem um cenário de transição de fase líquido-gás de primeira ordem no estado condensado até uma intensidade crítica da força efetiva de três corpos. Vamos analisar as mais relevantes conclusões desse trabalho quanto às soluções estáticas.

### 4.10.2 Transição de fase no caso estacionário

Consideremos as soluções estacionárias da extensão correspondente da equação não-linear de Gross-Pitaevskii para número fixo de partículas, sem termos dissipativos, estendendo uma análise relatada previamente em Refs. [79, 76].

Essa equação é obtida variacionalmente, na aproximação de campo médio, da correspondente Lagrangiana (4.66). Considerando a solução estacionária

$$\Psi(\vec{r}, t) = e^{-\frac{i\mu t}{\hbar}} \phi(\vec{r}) . \quad (4.89)$$

e válidas as expressões (4.72) a (4.74), obtemos a equação adimensional na onda  $s$  (4.71) para  $a < 0$ .

Na figura 4.15, considerando diversos valores de  $g_3$  ( $0$ ;  $1,2 \times 10^{-2}$ ;  $1,5 \times 10^{-2}$ ;  $1,83 \times 10^{-2}$  e  $2 \times 10^{-2}$ ), usando cálculos numéricos exatos, apresentamos algumas quantidades físicas relevantes, como funções do número reduzido de átomos  $n$ . As unidades utilizadas estão indicadas na legenda. Deve ser observado que as unidades de  $\rho_c$  e de  $\langle x^2 \rangle$  diferem das que utilizamos no tratamento variacional.

Para  $g_3 = 0$ , esses cálculos reproduzem o resultado apresentado nas Referências [70, 77, 67], com o número máximo dos átomos limitado por  $n_c \approx 1,62$ . Como mostrado na figura, para  $0 < g_3 < 1,83 \times 10^{-2}$ , a densidade, o potencial químico e o raio quadrático médio apresentam uma retrocurvatura típica de uma transição de fase de primeira ordem. Essas transições de fase, que são verificadas para cada  $g_3$  através dos pontos de cruzamento no gráfico de  $E$  contra  $n$ , correspondem a construções de Maxwell no diagrama de  $\beta$  contra  $n$ , conforme já indicado no

Neste ponto, um condensado equilibrado deve sofrer uma transição de fase do ramo que com pequeno  $n$  para o ramo com grande  $n$ . O sistema nunca deveria explorar a parte de retrocurvatura do diagrama porque, como vimos na figura 4.15, ela é um extremo

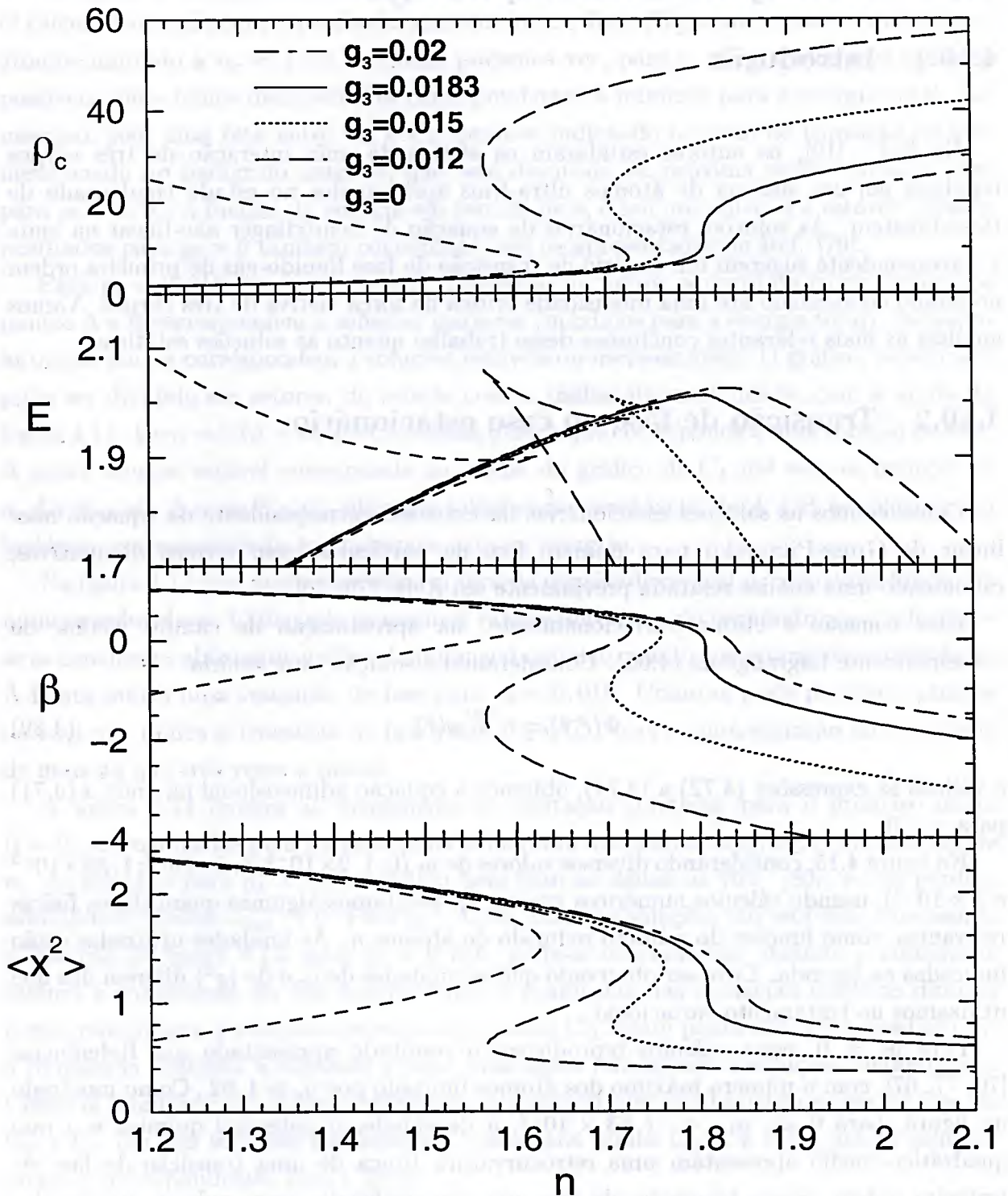


Figura 4.15: Densidade central  $\rho_c$  em unidades  $(m\omega_h)/(4\pi|a|\hbar)$ , energia total  $E$  em unidades  $(N/n)\hbar\omega_h$ , potencial químico  $\beta$  em unidades  $\hbar\omega_h$  e raio quadrático médio  $\langle x^2 \rangle$  em unidades  $\hbar/(2m\omega_h)$ , como funções do número reduzido de átomos  $n$ .

instável da energia. Desta figura, é claro que o primeiro ramo corresponde aos raios grandes, densidades pequenas e potenciais químicos positivos, enquanto que o segundo ramo apresenta uma configuração mais compacta, com um raio menor, uma densidade maior e um potencial químico negativo.

Isto justifica o termo gás para primeiro e o termo líquido para o segundo. Entretanto, nós queremos enfatizar que ambas as soluções são fluidos quânticos. Com  $g_3 = 1,2 \times 10^{-2}$  a fase de gás ocorre para  $n < 1,64$  e a fase líquida para  $n > 1,64$ . Para  $g_3 > 0,0183$  todas as curvas apresentadas são bem comportadas e uma única fase fluida é observada. Em  $g_3 \approx 0,0183$  e  $n \approx 1,8$ , as soluções estáveis, metaestáveis e instáveis são praticamente as mesmas. Isto corresponde a um ponto crítico associado com uma transição de fase de segunda ordem. Neste ponto, as derivadas de  $\beta$ , de  $\rho_0$  e de  $\langle x^2 \rangle$  em função de  $n$  divergem.

Pode-se checar também que os cálculos com a expressão variacional de  $\langle x^2 \rangle$ ,  $\rho_c$  e  $\beta$  estão em bom acordo com os descritos na figura 4.15, uma vez verificadas as correspondentes conversões de unidades utilizadas para  $\langle x^2 \rangle$  e  $\rho_c$ .

No gráfico inferior da figura 4.16, nós vemos que o contorno limite separando as duas fases no plano definido por  $n$  e  $g_3$  e o ponto crítico em  $n \approx 1,8$  e  $g_3 \approx 0,0183$ . No gráfico superior, vemos o contorno da região proibida na densidade central.

A característica física principal da força repulsiva de três corpos é a de impedir o colapso do condensado para o número de partículas acima do número crítico encontrado com somente interações atrativas de dois corpos. O potencial repulsivo de três corpos tende a superar a atração do potencial de dois corpos em distâncias curtas, porque a interação repulsiva é proporcional a  $x^{-4}$ , enquanto que o potencial de dois corpos é proporcional a  $x^{-2}$ .

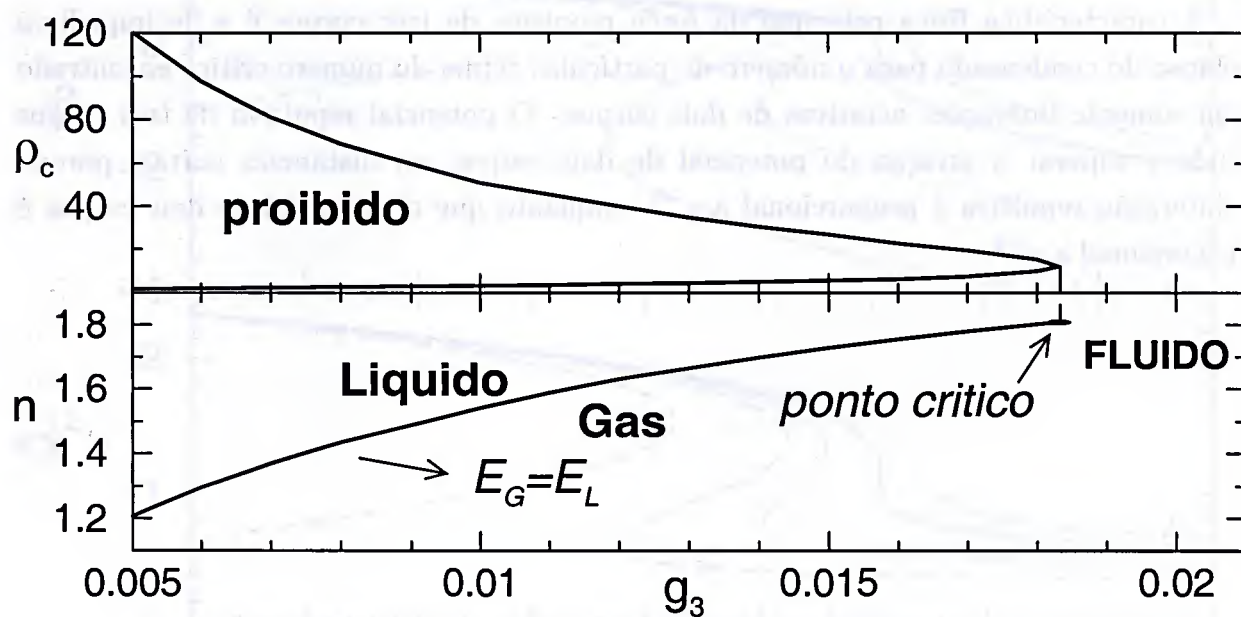


Figura 4.16: Diagrama de fase do condensado de Bose para a densidade central  $\rho_0$  e o número reduzido de átomos  $n$ , em unidades adimensionais.

## Capítulo 5

# Instabilidade e Caos em Condensados Bosônicos

### 5.1 Introdução

Investigamos a dinâmica da equação de Gross-Pitaevskii com um potencial de aprisionamento e com termos de dissipação e de alimentação atômica aplicada a condensados atômicos de Bose-Einstein com comprimento de espalhamento negativo ( $a < 0$ ). Partindo de parâmetros adotados na literatura (Kagan *et al.*) [14] para a simulação dos experimentos do grupo de Rice, e em vista da perspectiva de alteração experimental do comprimento de espalhamento de dois corpos, procuramos fazer um estudo mais abrangente da dinâmica da equação, estudando uma ampla escala para os parâmetros de dissipação e alimentação. Nessa pesquisa, encontramos um novo comportamento na escala de evolução de longo tempo no formalismo de campo médio para a descrição de condensados de Bose-Einstein: o número de átomos pode ultrapassar o limite de estabilidade estático conhecido nesse fenômeno, para um grande número de combinações desses parâmetros. Calculando o expoente de Lyapunov para esses sistemas com graus de liberdade espacial e temporal e estudando observáveis tais como o número de partículas foi possível caracterizar os sistemas e diagnosticar os casos onde o formalismo indica caos espaço-temporal em sistemas condensados de Bose-Einstein aprisionados.

Inicialmente [16], consideramos a parametrização proposta por Kagan *et al.* para condensados de  $^7\text{Li}$ ; em seguida, analisamos a extensão desse cálculo [17] para uma ampla classe de combinações dos parâmetros não-conservativos com o objetivo de determinar os possíveis comportamentos dinâmicos que poderiam ser observados em sistemas bosônicos não-conservativos. Verificamos os casos de estabilidade das soluções, bem como casos de instabilidade, uma parte dos quais dando origem ao fenômeno de caos espaço-temporal.

Nosso trabalho consistiu em classificar os regimes das parametrizações que estabilizavam as soluções, assim como os regimes em que existiam instabilidades, casos nos quais a ocorrência do fenômeno de caos espaço-temporal poderia ser detectada (ou observada).

## 5.2 Equação de Gross-Pitaevskii generalizada (EGPG)

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 [4] que a condensação de Bose-Einstein é viável em sistemas atômicos aprisionados, mesmo com interações atrativas, como no caso do  $^7\text{Li}$ . Neste caso, conforme previsto numericamente [70], 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  $^7\text{Li}$ , como descrito em [81]. 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.

Uma simulação teórica deste processo foi considerada na Ref. [14], por Kagan *et al.*, através da equação de Gross-Pitaevskii incluindo termos não-conservativos, para descrever a evolução temporal da função de onda do condensado de átomos de  $^7\text{Li}$  [82]. Neste trabalho, foi considerada apenas dissipação por recombinação de três corpos, devendo-se observar que o valor numérico dessa quantidade está superestimado e que é significativa a perda de átomos por interações de dois corpos, como se pode inferir de trabalhos posteriores [15, 83].

Como observado em [82], mesmo considerando o comportamento similar qualitativo da simulação teórica feita na Ref. [14] e as medidas experimentais relacionadas, ainda há uma sensível diferença entre as previsões com relação ao número restante de átomos no condensado após o colapso. É também descrito em [82] que os resultados obtidos na Ref. [14] poderiam ser “um primeiro indicador de uma dinâmica complexa dos condensados de Bose-Einstein em um gás com interações atrativas”. Isto nos sugeriu fortemente estudar a evolução do condensado de  $^7\text{Li}$  por longos períodos, através da solução numérica da equação de Schrödinger não-linear correspondente, com a mesma parametrização utilizada

em [14]. Esta equação inclui dois termos (imaginários) não-conservativos: um deles, linear, relacionado à alimentação do condensado a partir da nuvem térmica fora do equilíbrio; o outro, não-linear e dissipativo, correspondendo à recombinação de três corpos. A mesma parametrização no caso inicial seria útil para calibrar os nossos códigos computacionais, já que poderíamos comparar os resultados com os já obtidos por Kagan *et al.* [14]. O objetivo seguinte era aumentar o período de evolução da equação de modo a serem alcançados tempos suficientemente longos para que se facilitassem as comparações com os resultados experimentais.

Um de nossos principais objetivos foi o de analisar o modelo dado na Ref. [14] e as conseqüências da correspondente parametrização. Realmente, é muito relevante construir um modelo realístico para descrever o processo de crescimento e colapso do condensado para sistemas atômicos com interações de dois corpos atrativa. Neste caso, o termo cinético é significativo comparado aos termos do potencial efetivo, ao contrário do caso atrativo em que se pode fazer a aproximação de desprezar o termo cinético. A aproximação de campo médio tem sido considerada como uma boa aproximação no equilíbrio termodinâmico, como observado em um cálculo quântico de Monte Carlo na Ref. [61]; entretanto, a validade desta aproximação pode ser questionável em um cenário dinâmico complexo fora do equilíbrio. No presente estudo, como será mostrado, para certos regimes dos parâmetros não-lineares, a aproximação de campo médio pode levar a um comportamento caótico. Este é um fato novo que deve ser considerado em quaisquer aperfeiçoamentos do modelo. É também bem conhecido 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. [20, 84]. Como mostrado na Ref. [84], para um apropriado conjunto de parâmetros, pequenos erros da ordem do arredondamento crescem rapidamente e saturam em valores comparáveis em magnitude à amplitude da própria função de onda, o que conduz a sérias instabilidades numéricas das soluções. Deissler e Kaneko, na Ref. [20], desenvolveram um critério útil e conveniente para diagnosticar caos espaço-temporal na equação de Schrödinger não-linear, que se baseia na determinação da evolução temporal de uma função definida pela integral do módulo quadrado da diferença entre funções de onda com condições iniciais infinitesimalmente próximas. A inclinação média desta função em escala logarítmica, quando traçada como função do tempo, nos fornece o maior expoente de Lyapunov, um parâmetro que indica a existência ou não de caos.

Na Ref. [19], uma dinâmica complexa de condensados de átomos de  ${}^7\text{Li}$  foi numericamente observada na evolução temporal do número de átomos no condensado. Verificou-se uma alta sensibilidade da precisão numérica com a mudança dos parâmetros, de modo que quando uma interação repulsiva de três corpos era considerada, os resultados

numéricos eram mais estáveis para o condensado. Posteriormente, verificou-se que a precisão numérica diminuía muito rápido aumentando-se o módulo da intensidade de uma interação de três corpos atrativa. Este resultado preliminar deu origem à suspeita de um possível comportamento caótico da equação de Schrödinger não-linear em estudo.

Descrevemos a seguir a proposta de Kagan *et al.* para analisar a evolução temporal de um condensado de Bose-Einstein de átomos de  ${}^7\text{Li}$  aprisionados, bem como os resultados e conclusões obtidos em nossos cálculos utilizando tal parametrização.

A equação de Gross-Pitaevskii pode ser generalizada para incluir termos não-conservativos - isto é, termos com números complexos puros como coeficientes - ou, alternativamente, podemos considerar a equação de Ginzburg-Landau em três dimensões com um potencial harmônico esférico de aprisionamento e atribuir números puros complexos aos parâmetros  $a$  e  $d$  (ver Apêndice A). Em ambos os casos, obtém-se a equação que pode descrever um condensado de Bose-Einstein em uma armadilha magnética para comprimentos de espalhamento negativo, a equação de Gross-Pitaevskii generalizada ou não-conservativa (EGPG), dada por

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \left[ -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + \frac{m\omega^2 r^2}{2} - \frac{4\pi\hbar^2 |a|}{m} |\Psi|^2 + iG_\gamma - iG_\mu |\Psi|^2 - iG_\xi |\Psi|^4 \right] \Psi, \quad (5.1)$$

onde  $\Psi = \Psi(\vec{r}, t)$ ,  $G_\xi$  é o parâmetro de dissipação de átomos do sistema por colisões inelásticas de três corpos,  $G_\mu$  é o parâmetro de dissipação atômica do sistema por colisões inelásticas de dois corpos,  $G_\gamma$  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 atrativa 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 (5.1) é normalizada ao número total de átomos  $N(t)$ :

$$\int d^3r |\Psi(\vec{r}, t)|^2 = N(t). \quad (5.2)$$

Com os termos não-conservativos, esse número de átomos não mais se conserva.

Em nossos estudos neste capítulo, não analisaremos o caso de dissipação atômica por relaxação dipolar ( $G_\mu = 0$ ). Assim, temos como termos não-conservativos acrescentados à EGP, respectivamente, o decréscimo na densidade devido à recombinação de três corpos (parametrizado por  $G_\xi$ ) e a alimentação atômica do condensado pela nuvem térmica externa (parametrizada por  $G_\gamma$ ). 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  ${}^{87}\text{Rb}$ ,  ${}^{23}\text{Na}$  ou  ${}^1\text{H}$

[1, 2, 6]. Por outro lado, a introdução de termos não-conservativos, que leva à EGPG, é necessária para descrever a condensação de  ${}^7\text{Li}$  [3, 4] ou de sistemas que tenham interação de dois corpos atrativa, bem como nos casos com interação repulsiva em que o número de partículas do sistema não é conservado [85].

A equação (5.1) foi proposta em [14] por Kagan *et al.* para descrever os resultados experimentais, obtidos na Universidade de Rice pelo grupo de Hulet [15], para condensados de  ${}^7\text{Li}$ .

A fim de reconhecer facilmente as escalas físicas existentes na equação (5.1) 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

$$x \equiv \sqrt{2m\omega/\hbar}|\vec{r}|, \quad \tau \equiv \omega t, \quad (5.3)$$

onde  $x$  e  $\tau$  são, respectivamente, o raio e o tempo adimensionais e  $\omega$  é a frequência da armadilha harmônica.

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

$$\Phi(x, \tau) \equiv \sqrt{8\pi|a|}|\vec{r}|\Psi(\vec{r}, t). \quad (5.4)$$

Os parâmetros de amplificação  $G_\gamma$  e de dissipação  $G_\xi$  são redefinidos em forma adimensional por

$$\gamma = G_\gamma \frac{2}{\hbar\omega}, \quad (5.5)$$

$$\xi = G_\xi \frac{\hbar\omega}{2} \left[ \frac{m}{4\pi\hbar^2 a} \right]^2. \quad (5.6)$$

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

$$i \frac{\partial \Phi}{\partial \tau} = \left[ -\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{4}x^2 - \frac{|\Phi|^2}{x^2} - 2i\xi \frac{|\Phi|^4}{x^4} + i\frac{\gamma}{2} \right] \Phi. \quad (5.7)$$

Com as transformações (5.3) a (5.7), a função de onda adimensional  $\Phi(x, \tau)$  é normalizada ao número reduzido de átomos, definido por

$$n(\tau) \equiv 2N(t)|a|\sqrt{2m\omega/\hbar}, \quad (5.8)$$

ou seja, temos a condição de normalização

$$\int_0^\infty dx |\Phi(x, \tau)|^2 = n(\tau). \quad (5.9)$$

Nossos estudos tiveram por objetivo verificar a estabilidade da EGPG com  $a < 0$ , de modo a analisar condensados em que há um número máximo crítico de átomos aprisionados no nível do estado fundamental (casos com  $a < 0$ ). Sendo assim, fixamos o sinal do termo de campo médio na equação (5.7) como sendo negativo e iniciamos a análise com a parametrização de Kagan *et al.*. Outras possibilidades de parametrização também serão descritas em seções a seguir.

### 5.2.1 Métodos numéricos para a EGPG

Para obter as soluções da equação (5.7), nós utilizamos tanto métodos aproximados semi-analíticos como métodos numéricos exatos. Lembrando que estamos considerando o caso dinâmico, para as soluções numéricas da equação (5.7) o algoritmo de Crank-Nicolson semi-implícito é o mais apropriado devido à sua estabilidade (ver Apêndice D). Esse método numérico é descrito, por exemplo, na Ref. [86] para problemas não-lineares. Usamos em nossos cálculos a mesma condição inicial para o número de átomos no condensado ( $N(t)/N_c = n(\tau)/n_c = 0,75$ ) da Ref. [14].

Assim, resolvemos a EGPG adimensional (5.7) com  $a < 0$  fixo (coeficiente do termo de campo médio proporcional a  $|\Psi|^2$  parametrizado a um), calculamos o número de átomos e o raio quadrático médio para várias combinações dos parâmetros não-conservativos  $\xi$  e  $\gamma$ , traçamos os gráficos do espaço de fase para a raiz do raio quadrático médio e para a função  $\zeta(\tau)$ . Primeiramente, estudamos o caso da parametrização de Kagan *et al.*, considerando uma longa evolução do sistema. Em seguida, estendemos esse estudo para uma ampla escala de valores de  $\gamma$  e  $\xi$ , que analisaremos. Nesse espectro amplo do espaço de parâmetros  $(\gamma, \xi)$ , analisado tendo em vista a perspectiva de aplicação do modelo a sistemas atômicos mais gerais, encontram-se os valores de Kagan *et al.* e valores realísticos, de acordo com os dados experimentais atuais.

Como veremos a seguir, para muitos casos é possível explicar propriedades tais como o número crítico de átomos no condensado, mas na evolução de longo tempo os cálculos mostram um comportamento caótico da função de onda do condensado, com a separação das trajetórias aumentando exponencialmente. Observa-se também que o número de átomos no estado fundamental excede o número crítico estático, o que indica que estados excitados devem estar sendo populados. Para a caracterização de caos, descrevemos a seguir o critério adotado.

### 5.2.2 Caracterização de caos

Para caracterizar o comportamento caótico da equação espaço-temporal (5.7) para um dado par de parâmetros  $(\gamma, \xi)$ , calculamos o equivalente do maior expoente de Lyapunov das equações diferenciais ordinárias, como dado em [20] e analisado no Capítulo 3. Como vimos, 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

$$\zeta(\tau) = \left( \int_0^L |\delta\Phi(x, \tau)|^2 dx \right)^{1/2}. \quad (5.10)$$

A inclinação média do logaritmo de  $\zeta$  em função de  $\tau$  nos dá o maior expoente de Lyapunov estendido [20] em um período de tempo arbitrário. O comportamento caótico de um dado sistema é caracterizado por uma inclinação positiva dessa função. Note-se que, por esta definição, é possível ter diferentes comportamentos ao longo do tempo; assim, por exemplo, é possível em um dado intervalo de tempo o comportamento do sistema ser normal e em outro, caótico.

É também importante verificar a existência de ciclos de crescimento e colapso do condensado para sistemas atômicos com interações átomo-átomo atrativas (processo descrito na Ref. [14], para os valores deles dos parâmetros não-conservativos) para outros valores dos parâmetros não-conservativos. Assim, nós determinamos na escala analisada quando uma dinâmica de colapsos aparece e quando ela não está presente.

Nas próximas seções, nós mostramos os gráficos do espaço de fase desses sistemas, seus observáveis, o número de átomos normalizado pelo número crítico  $N/N_c$  e o raio quadrático médio  $X^2 = \langle x^2 \rangle$ , bem como o expoente de Lyapunov para todo o espectro na escala estudada em uma seqüência predeterminada de informações. Em todos os casos analisados, a dinâmica do condensado foi calculada para uma longa escala de tempo adimensional de evolução, precisamente  $\tau = 500$  (no caso da parametrização de Kagan *et al.* evoluiu-se o sistema até  $\tau = 1000$ ). Iniciamos na próxima seção o estudo da parametrização de Kagan *et al.* considerando uma evolução do sistema vinte vezes maior que a considerada na Ref. [14].

### 5.3 Parametrização de Kagan *et al.*

Nós começamos nosso estudo dinâmico considerando a equação de Schrödinger não-linear dada em (5.7) para descrever átomos aprisionados com interação de dois corpos atrativa; nessa equação, foi desconsiderada a dissipação por colisões inelásticas de dois corpos (parametrizada por  $\mu$ ), ou seja,  $G_\mu \stackrel{N}{=} \mu = 0$ , para possibilitar a comparação com os resultados da Ref. [14]. Assim, os dois termos não-conservativos que foram acrescentados são para levar em conta, respectivamente, a diminuição da densidade devido à recombinação de três corpos (parametrizada por  $\xi$ ) e a alimentação do condensado a partir da nuvem térmica fora do equilíbrio (parametrizada por  $\gamma$ ).

Em unidades adimensionais, como dado na equação (2) de [19], a equação de Schrödinger radial não-linear na onda  $s$  (5.7) pode ser resolvida numericamente aplicando-se métodos numéricos exatos ou métodos semi-analíticos.

Kagan e seu grupo adotaram  $\gamma = 10^{-1}$  e  $\xi = 10^{-3}$  como sendo os prováveis valores para a descrição da dinâmica de troca de partículas no sistema condensado-nuvem térmica.

Devemos observar que, para o gás condensado de  ${}^7\text{Li}$ , sabe-se atualmente que o parâmetro de alimentação  $\gamma = 10^{-1}$  é aproximadamente duas ordens de grandeza maior que o valor realístico e o parâmetro de dissipação  $\xi = 10^{-3}$  usado na Ref. [14] é cerca de duas ou três ordens de magnitude maior que o experimental [87]. Para nosso estudo geral, nós temos incluído na escala analisada os parâmetros dados em Ref. [14] para comparação e os mais realísticos parâmetros para checagem, na perspectiva de aplicação do modelo a sistemas atômicos mais gerais. Nós devemos notar que, em princípio, como discutido por Cornish *et al.* na Ref. [47], é possível alterar experimentalmente a interação de dois corpos por meio de luz ou campo magnético induzido, e conseqüentemente afetar a taxa de recombinação de três corpos. Cornish *et al.* obtiveram um condensado estável de  ${}^{85}\text{Rb}$  de até  $10^4$  átomos invertendo o sinal do comprimento de espalhamento do sistema por meio de ressonâncias Feshbach induzidas por campo magnético. Com relação ao parâmetro de alimentação  $\gamma$ , o comportamento caótico é muito sensível ao aumento de tal parâmetro. Um possível controle experimental deste parâmetro seria extremamente relevante para vários estudos visando novos efeitos bem como aplicações.

### 5.3.1 Resultados e discussão

Na figura 5.1 \*, mostramos a evolução do número de átomos para  $\omega t \leq 1000$  (vinte vezes maior que o tempo máximo considerado na figura 1 da Ref. [14]). Como já explicado por Kagan e seu grupo, alguns colapsos dinâmicos ocorrem com frequência  $\sim \omega$ . Contudo, uma análise mais cuidadosa de tais colapsos dinâmicos mostra que o número de pequenos picos começa a dobrar após cada forte colapso, em uma espécie de padrão fractal, como se pode observar na inserção da figura 5.1. O padrão de duplicação observado é também revelado pela evolução temporal da densidade central, que é dada por  $\rho_c(t) \equiv N|\Psi(0, t)|^2$ , na figura 5.2. As fortes flutuações observadas na densidade aumentam para tempos grandes. Esses resultados apóiam a conjectura de que o sistema, duplicando os picos indefinidamente, começa a excitar todo o espectro de frequências.

Pode-se também observar uma notável característica na figura 5.1: o número de átomos

---

\*Devido ao número excessivo de gráficos deste capítulo e para facilitar a leitura e a análise dos resultados, optamos por colocá-los após as conclusões, no final do capítulo.

no condensado ultrapassa o limite crítico estático na escala de longo tempo <sup>†</sup>.

Em uma situação dinâmica, dever-se-ia notar que o número de átomos pode crescer além de  $N_c$ , o que não é possível no caso estático. O número  $N_c$  refere-se ao limite crítico para o número de átomos no estado fundamental; entretanto, os estados excitados permitem mais átomos que o estado fundamental, como mostrado na Ref. [77]. Assim, o número de átomos maior que o limite crítico estático (depois de algum período de tempo) deve ser interpretado como se nem todas as partículas estivessem no estado fundamental, mas que os estados excitados estão também se tornando populados.

Depois de um longo período de tempo ( $\omega t > 100$ ), pode-se observar que o número de átomos permanece maior que  $N_c$ ; um resultado que é consistente com a interpretação de que uma grande fração das partículas estão populando o primeiro estado radial excitado. Dentro da mesma interpretação, outros estados excitados podem se populados em um período de tempo suficientemente maior. Como consequência, na escala de longo tempo, a representação de um condensado com os átomos no estado fundamental não é mais válida, visto que o processo de alimentação está populando os estados excitados. Este cenário é também confirmado pelos grandes valores do raio quadrático médio alcançado pelo condensado, como mostrado na figura 5.3.

Os resultados apresentados mostram que estudos adicionais são necessários para quantificar as possíveis limitações do modelo dado em [14], ao se tentar descrever condensados de Bose-Einstein com interações átomo-átomo atrativa. Como verificado na figura 5.3, o crescimento acima do valor crítico é fortemente dependente dos parâmetros não-conservativos.

Dever-se-ia observar também que na Ref. [14], eles consideraram o caso de um parâmetro  $\gamma$  dependente do tempo, decrescente, que mostra saturação pouco após o começo dos colapsos. Efetivamente, este é um caminho que se pode tentar para uma melhor descrição dos dados experimentais, junto com um estudo mais geral dos parâmetros nos termos não-lineares da equação de Schrödinger não-linear.

Um observável particularmente interessante, para analisar melhor o comportamento dinâmico da equação 5.7 é o raio quadrático médio. Nós definimos este observável em unidades adimensionais por  $X(\tau) \equiv \sqrt{\langle x^2(\tau) \rangle}$ . Na figura 5.3, nós traçamos os gráficos de  $\frac{d}{d\tau} X(\tau)$  como uma função de  $X(\tau)$ , para um conjunto de valores dos parâmetros  $\gamma$  ( $\gamma = 10^{-1}$ ;  $\gamma = 2 \times 10^{-2}$ ;  $\gamma = 5 \times 10^{-2}$  e  $\gamma = 10^{-2}$ ). Em todos os casos, as funções de onda foram evoluídas até  $\omega t = 1000$  e a intensidade da interação de três corpos dissipativa é mantida fixa em  $\xi = 10^{-3}$ . Na figura 5.3, vemos que uma estrutura dinâmica complexa começa a aparecer quando o valor do parâmetro  $\gamma$  aumenta. Para  $\tau = 0$ ,  $\sqrt{\langle x^2(\tau) \rangle}$  tem valor próximo de 1, 52 e  $\frac{d}{d\tau} \sqrt{\langle x^2(\tau) \rangle}$  é zero, em todos os casos. Inicialmente, para  $\gamma = 10^{-2}$ ,

<sup>†</sup>Este comportamento não é observado nas soluções numéricas da equação quântica de Boltzmann representadas na figura 1 da Ref. [82]

o raio diminui até um centro perto de 1,34 com derivada nula, então ele começa a oscilar com raio maior, mas mantendo o centro fixo. Um comportamento similar é encontrado  $\gamma < 10^{-2}$ . Para valores maiores de  $\gamma$ , o centro da oscilação em  $X$  cresce até um ponto que ele atinge um atrator em raios muito grandes. No caso de  $\gamma = 10^{-1}$ , por exemplo, o gráfico claramente assemelha-se a um comportamento caótico com um atrator estranho, que fica ao redor de  $X(\tau) \sim 23$ . Nós observamos uma rápida transição no padrão da trajetória, quando comparado com os resultados obtidos para  $\gamma = 10^{-2}$  e  $\gamma = 0,012$ , em um gráfico similar. Isto nos dá uma indicação da existência de uma escala crítica de valores para o parâmetro  $\gamma$  para a transição da ordem ao caos. Uma clara assinatura experimental do começo do caos será um aumento não contínuo do raio até valores muito grandes, comparado a valores típicos do estado fundamental, como nós encontramos para  $\gamma > 2 \times 10^{-2}$ . Além disso, como mais um importante indício da presença de caos no sistema, podemos observar o comportamento das trajetórias no mapa de Lorenz para os observáveis do sistema, definido por

$$E_{n+1} = f(E_n) . \quad (5.11)$$

Em particular, na figura 5.4 vemos o mapa de Lorenz da energia total do sistema condensado, que nos revela um interessante comportamento fractal das trajetórias. Como sabemos, assim como um ponto no espaço de fase representa um movimento estacionário e uma circunferência um movimento periódico (atratores clássicos), um fractal indica a presença de um atrator estranho associado ao sistema. Porém, o comportamento caótico deste sistema, para o atual conjunto de parâmetros, será verificado através de cálculos do maior expoente de Lyapunov generalizado, definido no Capítulo 3 e na seção 5.2.2.

Note-se que mantivemos fixo o parâmetro de dissipação  $\xi$  da equação (5.7); entretanto, a indicação da transição ao caos pode também ser encontrada variando-se  $\xi$  com  $\gamma$  fixo. Em outras palavras, mantendo-se fixo  $\gamma$  em um certo valor não nulo, um comportamento similar é atingido quando diminuimos o valor do parâmetro  $\xi$ . Nosso objetivo a seguir é avaliar a possível existência de caos espaço-temporal na evolução temporal da EGPG associada à descrição de condensados atômicos aprisionados, considerando o critério de Deissler-Kaneko. Para analisar o comportamento das soluções e provar que ele é caótico segundo esse critério, basta encontrar uma inclinação positiva do expoente de Lyapunov estendido associado à função  $\zeta(\tau)$ .

O cálculo de  $\delta\Phi$ , como descrito em [20], pode também ser relacionado à excitação de modos coletivos por uma perturbação infinitesimal da função de onda. O começo do comportamento caótico pode ser interpretado como o aumento da magnitude das excitações coletivas, ou alternativamente, como a criação de muitos estados de quasipartículas [88, 89]. Estas equações de campo médio deveriam ser válidas para tempos onde a geração de quasipartículas (redução do condensado) seja pequena.

A principal diferença entre a equação de Ginzburg-Landau e a equação (5.7) é a presença da armadilha na última. A similaridade destas equações levou-nos a considerar o critério usado na Ref. [20], aplicando a equação (5.10) às funções de onda obtidas de (5.7). Nós agora estamos interessados principalmente em estudar a evolução temporal da função de onda do condensado para um comprimento de espalhamento de dois átomos negativo, através da investigação da precisão numérica dos resultados para certos parâmetros usados. Assim, nós variamos os parâmetros de modo que nós pudéssemos relacioná-los com a física já discutida por outros autores e também acessível experimentalmente. Considerando um exemplo geral, é mais natural manter fixo o valor do parâmetro dissipativo de três corpos  $\xi$  ( $\xi = 10^{-3}$ , como na Ref. [14]), e estudar a escala de valores para o parâmetro de alimentação.

Para calcular (5.10), nós usamos a mesma função de onda inicial  $\Phi(x, \tau)$  como na Ref. [14], isto é, com número inicial de átomos igual a  $0,75N_c$ . Esta função de onda inicial foi também evoluída acrescentando-se uma pequena perturbação aleatória  $\delta\Phi(x, 0) \sim 10^{-14}$ . A diferença entre a função de onda e a função de onda perturbada dá a separação das trajetórias  $\delta\Phi(x, \tau)$ , que é usada para obter nossos resultados na equação (5.10), mostrados na figura 5.5. Como se pode observar, há um aumento aproximadamente exponencial em  $\zeta$  quando o tempo aumenta, para todos os casos apresentados com  $\gamma > 10^{-2}$ , de modo que nós podemos concluir a existência de comportamento caótico associado à equação (5.7). Isto é melhor caracterizado para  $\gamma = 10^{-1}$ . Isto confirma a suspeita levantada quando eram analisados os resultados obtidos nas figuras 5.1-5.4, bem como pode-se claramente obter desses resultados os valores do parâmetro de alimentação para o sistema se tornar caótico.

Assim, como se pode inferir das figuras 5.1-5.4 e comprovar matematicamente através dos resultados apresentados na figura 5.5, concluímos que o condensado de Bose-Einstein para a parametrização adotada na Ref. [14] apresenta o fenômeno de caos espaço-temporal.

## 5.4 Explorando a ocorrência de instabilidade na EGPG

A ampliação do estudo de parametrizações da EGPG pressupõe uma varredura no espaço de parâmetros  $(\gamma, \xi)$  desde os valores de Kagan *et al.* até valores extremamente pequenos (realísticos). Em um estudo sistemático, primeiramente desligamos  $\gamma$  e estudamos o comportamento do sistema para o parâmetro de dissipação  $\xi$  variando de  $10^{-1}$  a  $10^{-5}$  (seção 5.4.1). Em seguida, mostramos os resultados para ambos os parâmetros ligados, considerando os casos em que: (1)  $\gamma$  é maior que  $\xi$  por ordens de magnitude (seção

5.4.2); (2)  $\xi$  é maior que  $\gamma$  por ordens de magnitude (seção 5.4.2); (3) ambos os parâmetros possuem valores intermediários na escala analisada de aproximadamente cinco ordens de grandeza (seção 5.4.2). Em todas as 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 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.

#### 5.4.1 EGPG com $\xi > 0$ e $\gamma = 0$

Inicialmente, resolvemos a EGPG (5.7) com  $\gamma = 0$  e  $\xi$  arbitrário não nulo e positivo. Na figura 5.6, nós temos o comportamento no espaço de fase para grandes valores de  $\xi$ , entre  $10^{-1}$  e  $8 \times 10^{-1}$ . Como não temos alimentação de átomos no sistema, a grande dissipação provoca a contínua perda de átomos do sistema e o espaço de fase mostra que todas as trajetórias convergem para uma região quase circular; à medida em que o tempo passa, o raio decresce cada vez mais e seu ponto central se desloca para a direita quando  $\xi$  aumenta.

Quando  $\xi$  assume valores menores, de aproximadamente  $10^{-2}$  até  $10^{-4}$  (ver figura 5.7, para alguns exemplos representativos), as trajetórias têm o seguinte comportamento: elas oscilam, entrelaçam-se em uma propagação helicoidal e fluem para a direita, preenchendo uma região do espaço de fase cuja extensão depende da intensidade de  $\xi$ .

Dois importantes observáveis para caracterizar o sistema, o número de átomos normalizado pelo número de átomos crítico do caso estático  $N/N_c$  e o raio quadrático médio  $X(\tau)$  têm seus gráficos traçados nas figuras 5.8 a 5.10, respectivamente. Como esperado, quanto menor for o parâmetro de dissipação, maior será o tempo necessário para eliminar os átomos do condensado; também, o número de átomos atingido, e no qual se tem um aparente equilíbrio, é maior quanto menor for  $\xi$ . A diminuição em  $N/N_c$  é aproximadamente linear para valores muito menores de  $\xi$  ( $10^{-4}$  e  $10^{-5}$ ) e aproximadamente exponencial à medida em que  $\xi$  cresce. Observa-se, por exemplo, que o número de átomos inicial é reduzido em quase 75% para  $\xi \cong 10^{-1}$  e quase 47% para  $\xi \cong 10^{-3}$  no tempo final  $\tau = 500$ .

As figuras 5.9 e 5.10 mostram que  $X$  aumenta quando  $N/N_c$  diminui, como deveria ser quando se tem interações atrativas. Quando oscila mais intensamente quando o tempo e  $\xi$  aumentam, atingindo um máximo entre 2,9 e 3,2 para maiores valores de  $\xi$ . O expoente de Lyapunov pode ser obtido da figura 5.11, onde não se observa nenhum crescimento exponencial.

### 5.4.2 EGPG com $\gamma > 0$ e $\xi > 0$

Analisaremos a seguir a equação 5.7 completa, isto é, a equação não-conservativa de Gross-Pitaevskii (EGPG) com ambos os parâmetros de alimentação e dissipação não nulos. O principal objetivo é caracterizar a dinâmica do condensado de Bose-Einstein para átomos bosônicos com  $a < 0$ , procurando verificar a propriedade observada experimentalmente da existência de um número crítico de átomos no condensado, acima do qual o sistema sofre um colapso, e em quais casos ocorrem instabilidades que levam ao caos. Também é um objetivo importante o estudo do comportamento dinâmico do sistema para valores extremamente pequenos dos parâmetros, casos mais realísticos que correspondem aos estimados experimentalmente.

Nesse estudo, era intuitivo que deveria haver uma competição entre os parâmetros não-conservativos e que, dependendo da ordem de suas magnitudes em cada combinação, a dinâmica poderia ser significativamente diferente, muitas das quais podendo levar ao caos. Realmente, não somente tal argumento pôde ser verificado, mas também justifica-se a motivação inicial deste trabalho, pois encontramos uma ampla classe de combinações dos parâmetros para a EGPG em que foram observadas indicações claras de caos na escala de evolução de longo tempo do sistema. Consideremos inicialmente valores pequenos de  $\gamma$ .

No caso em que  $\gamma$  é muito pequeno, como  $\gamma = 10^{-5}$  ou  $\gamma = 10^{-4}$ , os gráficos do espaço de fase são muito similares. Para uma intensa dissipação (cerca de  $10^{-1}$ ), as trajetórias fazem um movimento helicoidal até que todas convergem para uma região de forma aproximadamente elíptica com centro em aproximadamente  $X \cong 1,72$  (figura 5.12). Para  $\xi = 10^{-2}$ , as trajetórias helicoidais convergem aproximadamente para a mesma região de centro  $X \cong 1,72$ , mas sem intensidade para formar uma região de convergência elíptica (figura 5.12). Para menores valores, nós temos o comportamento mostrado na figura 5.13, onde pode ser observada a formação de um movimento helicoidal e a propagação das trajetórias para uma região de convergência em aproximadamente  $X \cong 1,67$ .

Os gráficos nas figuras 5.14, 5.15 e 5.16 nos dão o raio quadrático médio  $X$ , o número de átomos (normalizado)  $N/N_c$  e o expoente de Lyapunov para esses casos, respectivamente. Em todos esses casos, o aumento da função  $\zeta$ , quando ocorre, não é exponencial. Somente quando  $\xi$  é da mesma ordem de magnitude se percebe um pequeno aumento, de cerca de 2 unidades em escala logarítmica.

Os gráficos do número de átomos na figura 5.15 corroboram tal conclusão. Em todos os casos em que  $\xi$  é maior que  $\gamma$ , sem exceção, há perda de átomos do sistema, quase linearmente para  $\xi$  muito pequeno e exponencialmente quando  $\xi$  aumenta. Para  $\xi$  igual a  $\gamma$ , nós temos um aparente equilíbrio e quando  $\xi < \gamma$  há um aumento linear do

número de átomos, sem indicações de caos espaço-temporal. Os resultados são coerentes e compatíveis com os do caso  $\gamma = 0$ .

No caso de  $X$ , o comportamento característico principal é de um aumento da forma arcotangente hiperbólico, mas com um crescente comportamento oscilatório quando  $\xi$  aumenta. Para  $\xi$  muito pequeno, sua evolução é aproximadamente linear. Analisando os gráficos, pode-se perceber que somente para um valor muito pequeno de  $\xi$  ( $\xi \cong 10^{-4}$  ou menor) o padrão oscilatório torna-se praticamente inexistente. É válido notar que as escalas atingidas tanto em  $X$  quanto em  $N/N_c$  são praticamente indistinguíveis para  $\xi = 10^{-4}$  e  $\xi = 10^{-5}$ .

O mesmo comportamento é observado para aumentos de  $\gamma$  da mesma ordem de grandeza. Por exemplo, para  $\gamma = 3 \times 10^{-4}$ , não há diferenças na física dos observáveis, no espaço de fase e na evolução da função  $\zeta$ . A única diferença, obviamente, é a de que se atinge um maior número de átomos para um  $\gamma$  maior, embora seja pequena a diferença (máximo valor local  $N/N_c \cong 0,85$ ), enquanto que para  $\gamma = 10^{-4}$  atinge-se um valor máximo de  $N/N_c \cong 0,78$  em  $\tau = 500$  (ver figura 5.17). A figura 5.18 mostra a função  $\zeta$  e a figura 5.19 mostra o raio quadrático médio para esse caso.

Analisando os gráficos do expoente de Lyapunov, podemos concluir que nenhum caos é observado nesses casos.

Vamos analisar agora o caso  $\gamma = 8 \times 10^{-4}$ . É interessante notar que na escala de tempo considerada, este é o menor valor em que claramente aparece o fenômeno de colapso, mas apenas para uma longa evolução temporal e  $\xi$  pequeno ( $\xi = 10^{-5}$ ), como nós podemos ver na figura 5.20. Isto indica que o mesmo deverá ocorrer nos casos analisados anteriormente, quando há um aumento progressivo do número de átomos no sistema, desde que se estenda a duração do tempo de evolução. O colapso ocorre em aproximadamente  $\tau \cong 390$ , o que causa uma grande desordem no sistema, como se pode confirmar pelo abrupto salto em  $X$  e a subsequente oscilação, extremamente irregular (figuras 5.21a e 5.21b).

De acordo com as outras características e propriedades estudadas, não há significativas mudanças na física envolvida. Como deveria ser, dado um  $\xi$  fixo, o número de átomos atinge um valor maior quanto maior for  $\gamma$ , com exceção do caso em que ocorre o colapso. Neste caso, esse número diminui abruptamente de  $N/N_c \cong 1$  a  $N/N_c \cong 0,58$ , aumentado novamente para  $N/N_c \cong 0,61$  em  $\tau = 500$ . O raio quadrático médio nos casos sem colapso não mostra mudanças significativas em seu comportamento também, sendo muito similar ao caso  $\xi = 3 \times 10^{-4}$ . Mas, no caso com colapso, há uma clara descontinuidade em  $\tau = 390$ , a partir da qual o sistema oscila demais e de forma muito irregular, como se pode ver na figura 5.21b.

O espaço de fase é o mesmo que nos casos anteriores, com exceção do caso  $\xi = 10^{-5}$  (figura 5.22), em que há uma concentração aleatória dos pontos em  $X \cong 10$ ; tal desordem é característica dos casos em que o colapso ocorre. Além disso, não há crescimento expo-

nencial das funções de onda nos gráficos de  $\zeta$  (figura 5.23), o que indica a inexistência de caos na escala de longo tempo (com exceção, talvez, do caso  $10^{-5}$  em que o sistema pode apresentar caos em uma escala de tempo maior).

Vamos considerar o caso de grande  $\gamma$  ( $\gamma = 10^{-1}$ ) e grande  $\xi$  ( $\xi = 10^{-1}$  ou maior). O comportamento no espaço de fase é mostrado na figura 5.24. Os parâmetros, em geral, contrabalançam-se entre si, o que resulta na convergência das trajetórias para uma região oval ou elipsoidal entre  $X = 9$  e  $X = 16$ . Mesmo assim, o sistema apresenta uma desordem que pode indicar um sinal de comportamento caótico. Esta conclusão é confirmada nos gráficos da figura 5.25 calculando-se o expoente de Lyapunov estendido, onde as inclinações são positivas, mas muito pequenas.

O número de átomos apresenta uma rápida queda no tempo inicial, após a qual ele permanece em equilíbrio, como se pode notar na figura 5.26. Como podemos observar na figura, o tempo para o decaimento inicial é praticamente independente do valor da taxa de dissipação  $\xi$  (para  $\xi \geq \gamma$ ). O comportamento de equilíbrio posterior ao decaimento, inicialmente não esperado em nossas simulações, foi também verificado em muitos outros casos. Esses casos semelhantes apresentam um interessante equilíbrio permanente, comportamento que será explicado no próximo capítulo. O crescimento posterior ao equilíbrio mostrado na 5.26 indica um limiar de comportamento caótico, confirmado na figura 5.25, e de população de estados excitados.

O raio quadrático médio  $X$  (figura 5.27) apresenta um rápido crescimento inicial, após o qual o sistema fica estável, com seu valor constante no tempo até o rápido crescimento final, confirmando o mesmo tipo de comportamento visto no gráfico do número de átomos.

Quando nós analisamos o caso em que  $\xi$  apresenta uma ou duas ordens menores de magnitude, nós podemos ver que o comportamento caótico começa a aparecer à medida em que se diminui  $\xi$ , sendo evidente para  $\xi = 10^{-3}$ , analisando o espaço de fase (figuras 5.28 e 5.29) ou os observáveis (figuras 5.30 e 5.31). Em outras palavras, quanto menor o valor de  $\xi$ , maior será o expoente de Lyapunov e, conseqüentemente, teremos caos no sistema. É importante observar que nos casos em que  $\xi \sim 10^{-2}$ , ao contrário do caso com  $\xi \sim 10^{-1}$ , observa-se um comportamento limiar para o caos a partir de valores pequenos do tempo (expoente de Lyapunov positivo, mas muito pequeno), com um lento e progressivo aumento em  $N/N_c$  e em  $\ln \zeta(\tau)$ .

A existência de caos pode ser provada com a verificação do sinal positivo do expoente de Lyapunov nesses casos (figura 5.32), principalmente no caso  $\xi = 10^{-3}$ . Quanto menor

for  $\xi$ , mais deslocado para a direita o gráfico do espaço de fase se apresenta (ou seja, maiores os valores atingidos do raio quadrático médio) e maior o expoente de Lyapunov, o que permite caracterizar mais facilmente o sistema como caótico, como ocorre no caso  $\xi = 10^{-3}$ .

Pode-se confirmar, analisando o comportamento do raio quadrático médio do sistema na figura 5.31, que para uma ordem menor de magnitude de  $\xi$  ( $\xi \sim 10^{-2}$ ), o raio quadrático médio  $X^2$  apresenta lento e progressivo aumento a partir de  $\tau \cong 100$ , tal como no caso do número de átomos, e que para  $\xi = 10^{-3}$  há um abrupto salto, o que indica um grande valor positivo do expoente de Lyapunov e existência de caos no sistema.

É interessante analisar também os comportamentos dinâmicos diferentes nos gráficos da evolução temporal do número de átomos no condensado. Em todos os casos, com exceção do caso  $\xi = 5 \times 10^{-3}$ , cujo comportamento é muito similar aos casos anteriormente mencionados com  $\xi \sim 10^{-1}$ , nós temos, para tempos inferiores a  $\tau = 50$ , um rápido aumento, um declínio oscilatório até um valor mínimo, a partir do qual o aumento é acentuado e altamente oscilatório. Quando  $\xi$  diminui, acentua-se tal comportamento e, como se pode perceber na figura 5.30, o fenômeno de colapso da função de onda do condensado claramente aparece para  $\xi = 10^{-3}$ , após o qual o número de átomos cresce rapidamente.

Vamos considerar agora  $\xi$  muito pequeno (cerca de  $10^{-4}$  ou  $10^{-5}$ ). A figura 5.33 indica que o raio quadrático médio sofre uma abrupta transição para valores muito altos ( $X^2 \cong 500$ ). No caso do número de átomos, nós vemos que há o fenômeno de colapso (ao redor de  $\tau = 50$ ) quando se atinge um valor crítico. Por exemplo, para  $\xi = 5 \times 10^{-4}$ , temos uma seqüência de pequenos colapsos após o qual o número de átomos aumenta significativamente, como podemos ver na figura 5.34.

Um comportamento diferente ocorre, entretanto, quando se atinge a escala de  $10^{-5}$ . Nesta escala, nós temos também os colapsos iniciais, seguidos de um aumento acentuado em  $N/N_c$  até que se atinja a estabilidade em  $N/N_c \cong 5$ ; porém, a partir de aproximadamente  $\tau \cong 175$  uma nova rápida transição para um estado de maior número de átomos (aproximadamente  $N/N_c \cong 18$ ) ocorre, a partir do qual verifica-se um aumento lento e progressivo em  $N/N_c$  até  $\tau = 500$ . Nós podemos concluir, analisando os gráficos da figura 5.35 em todos esses casos, que o sistema tem comportamento caótico, como se pode verificar pelo sinal positivo dos expoentes de Lyapunov em todos eles.

### 5.4.3 EGPG com valores intermediários de $\xi$ e $\gamma$

Para valores médios ou intermediários do parâmetro  $\gamma$  (na escala analisada), ou seja,  $10^{-2}$  ou  $10^{-3}$ , temos uma espécie de miscelânea das propriedades anteriormente analisadas. Quanto mais próximo de  $\gamma = 10^{-1}$  (casos de  $\gamma = 5 \times 10^{-2}$  e  $\gamma = 8 \times 10^{-2}$  mostrados),

mais similares a aquele são os padrões de  $N/N_c$ ,  $X$  e  $\ln \zeta$ , como se pode perceber nos gráficos das figuras 5.36, 5.37 e 5.38. Em relação à existência de caos, quanto menor for  $\xi$ , maiores são os valores positivos dos expoentes de Lyapunov, indicando a existência de caos espaço-temporal.

Quanto maior  $\xi$ , menores os expoentes positivos de Lyapunov do sistema (ver figuras 5.38 e 5.39 para uma análise). O número de átomos apresenta o mesmo comportamento físico que nos casos anteriores, com pequenas diminuições dos valores atingidos a cada instante. Há colapsos e crescimento exponencial nos casos em que  $\gamma > \xi$ ; já nos casos em que  $\xi > \gamma$  e  $\xi \cong \gamma$ , nós temos quedas em curto tempo e um comportamento estacionário no longo tempo. Pode-se perceber um comportamento diferente ocorrendo a partir de  $\xi = 10^{-2}$ . Inicialmente, há um pequeno aumento; em seguida, um decaimento fortemente oscilatório em torno de um valor menor ao redor de  $N/N_c \cong 0,7$ ; a partir de aproximadamente  $\tau = 180$ , temos um novo, lento e progressivo crescimento. O valor  $\xi = 10^{-2}$  aparentemente representa o valor de transição para o comportamento de aumentos acentuados, colapsos e caos.

Os gráficos de  $X$  confirmam essas conclusões a respeito do comportamento caótico nesses sistemas. Para pequenos valores de  $\xi$ , há uma transição abrupta para grandes valores de  $X$ , com uma subsequente grande irregularidade, o que indica caos. Para  $\xi$  próximo a  $\gamma$ ,  $X$  é pequeno e aproximadamente constante, aumentando somente na escala de longo tempo (aproximadamente  $\tau \cong 150$ ). Todos os padrões existentes  $\gamma = 10^{-1}$  são mantidos.

É interessante comentar as mudanças existentes no espaço de fase. Para  $\gamma = 8 \times 10^{-2}$  e  $\xi$  superior, repetem-se os comportamentos das trajetórias dos casos em que  $\gamma = 10^{-1}$ , com a formação de uma pequena região oval ou elíptica em  $X \cong 1,8$  (ver figura 5.40 para análise), com posterior propagação das trajetórias para regiões de maiores valores de  $X$ , devido ao aumento em  $X$  que ocorre nesses casos ao final da evolução do sistema, perto de  $\tau \cong 500$ . Quando  $\xi$  diminui, sinais de comportamento caótico são claros (ver figuras 5.41 e 5.42 para tais comportamentos); pode-se perceber que há uma nítida região oval em menores valores de  $X$  e que, à medida em que se diminui  $\xi$ , ocorre a propagação oscilatória das trajetórias para valores maiores de  $X$ , com o conseqüente desaparecimento das soluções bem comportadas dentro da região oval.

Vamos considerar os casos em que  $\gamma < 5 \times 10^{-2}$ . A análise do número de átomos não apresenta significativas alterações; somente a intensidade das transições dos casos quase estacionários para os casos com colapso são mais suaves quando  $\gamma$  diminui (ver figura 5.43 como referência). Para  $\gamma = 10^{-2}$ , tem-se o comportamento já descrito de estabilidade permanente até  $\tau = 500$  em todos os casos com  $\xi > 10^{-3}$ ; a partir desse valor crítico de  $\xi$  tem-se muitos colapsos e picos para todos os valores pequenos de  $\xi$ . Especificamente, para  $\xi = 8 \times 10^{-4}$  há uma única diferença significativa em relação aos outros casos: um colapso

depois de um intervalo de valor constante para  $N/N_c$ . Para grande  $\xi$ , os mesmos padrões de comportamento anterior são encontrados, mas há casos de aumento sem colapsos ou colapsos muito fracos (por exemplo, para  $\xi = 10^{-4}$ ), como podemos ver na figura 5.44. Não há mudanças significativas em  $X$ ; apenas quando  $\gamma = 3 \times 10^{-2}$  e  $\xi = 8 \times 10^{-3}$  há uma enorme oscilação no raio quadrático médio quando comparado com os casos  $\gamma \cong \xi$  (ver figura 5.45 para uma análise).

No caso  $\gamma = 3 \times 10^{-2}$  também há um colapso bem visível e um salto abrupto no raio quadrático médio para valores de  $\gamma$  duas ordens de grandeza menor (ver figura 5.45).

Para  $\gamma \sim 10^{-2}$ , não há caos para  $\xi > \gamma$  e  $\xi \sim \gamma$ , mas somente para  $\xi < \gamma$ , a partir de aproximadamente  $\xi \cong 10^{-3}$ . Este comportamento pode ser verificado nos gráficos dos expoentes de Lyapunov na figura 5.46 ou nos gráficos do espaço de fase para pequenos valores de  $\xi$  (ver figura 5.47), muito similar aos casos anteriores, mas com a formação de uma região aproximadamente oval à medida em que se aumenta  $\xi$ . Esta região consolida-se para valores de  $\xi$  a partir de aproximadamente  $\xi = 8 \times 10^{-3}$ , o que indica o desaparecimento do comportamento caótico (ver figura 5.48). Intensificando  $\xi$  até  $\xi \sim \gamma$ , obtém-se a formação de trajetórias helicoidais e a convergência para uma região de convergência, que se desloca para a direita quando  $\xi$  fica maior, como nas figuras de outros valores de  $\gamma$  (ver figura 5.49 para análise).

Para  $\gamma = 3 \times 10^{-3}$ , o espaço de fase é o mostrado nas figuras 5.50, 5.51 e 5.52. As trajetórias formadas são helicoidais, convergindo para uma região de maiores valores de  $X$ , quando  $\xi$  é aumentado (ver figura 5.50). Com um valor muito pequeno de  $\xi$ , há o comportamento das trajetórias preenchendo o espaço de fase com pouca extensão, mostrando um aparente processo de formação das trajetórias helicoidais (ver figura 5.51). Para intenso  $\xi$ , as trajetórias convergem para uma região aproximadamente oval ao redor de  $X \cong 1,7$ . Somente para  $\xi$  muito pequeno ( $\xi = 10^{-4}$  ou  $\xi = 10^{-5}$ ), um movimento altamente desordenado aparece, sinal do fenômeno de colapso (ver figura 5.52). Na realidade, analisando os gráficos do número de átomos, nós vemos que uma série de colapsos em ambos os casos e os mesmos comportamentos anteriormente já analisados nos outros casos (ver figura 5.53 para análise).

O comportamento de  $X$  é similar aos dos casos anteriores (ver figura 5.54 para análise) e a única diferença ocorre para esses dois valores muito pequenos de  $\xi$ , em que há uma seqüência de saltos abruptos em  $X$  correspondendo a cada colapso (ver figura 5.55 para análise).

Para  $\gamma = 5 \times 10^{-3}$ , nós temos os seguintes comportamentos no espaço de fase: (1) um movimento helicoidal das trajetórias até a convergência para uma região mais próxima a  $X \cong 1,7$ , para  $\xi \sim 10^{-2}$  (ver figura 5.56); (2) a propagação das trajetórias para valores menores de  $X$  até a formação de uma região oval ou elíptica, quando se tem  $\xi = 8 \times 10^{-4}$  (ver figura 5.57); (3) a formação das trajetórias consolidam-se e elas preenchem uma re-

gião maior, em que  $|\frac{dX}{dt}|$  passa de aproximadamente 10 a aproximadamente 75, quando se atinge  $\xi = 5 \times 10^{-4}$  (ver figura 5.58).

Quanto ao expoente de Lyapunov, não há crescimento exponencial da função  $\zeta$  nos casos analisados, com exceção dos casos em que  $\xi \leq 10^{-4}$ ; entretanto, este aumento ocorre por estágios no longo tempo, sem crescimento acentuado em qualquer intervalo de tempo (ver figuras 5.59 e 5.60 para análise). Para cada colapso, esses casos apresentam uma seqüência de saltos e plataformas que aumentam lentamente, o que indica um possível limiar de comportamento caótico. Esta seqüência de colapsos pode ser vista nos gráficos da figura 5.61, em que pode ser notado que o número final não atinge valores maiores que o inicial, apesar dos muitos colapsos (aproximadamente 1, 75).

Outra interessante propriedade aparece para  $\xi = 5 \times 10^{-4}$  correspondendo a um declínio no longo tempo depois de um intervalo de solução constante, indicando um predomínio da dissipação sobre a alimentação no longo tempo, formando uma espécie de “patamar” (ver figura 5.61). Tal comportamento já havia ocorrido em outros casos anteriores, mas para intervalos de tempos menores. Nesse caso específico, o raio quadrático médio apresenta uma intensa oscilação correspondendo ao intervalo de declínio do número de átomos e indicando que o sistema passou de uma região de estabilidade das soluções com valores de  $\gamma$  um pouco menores para uma de instabilidade das soluções, como se pode ver na figura 5.62. Para valores de  $\xi$  muito pequenos ( $\xi = 10^{-4}$  ou  $\xi = 10^{-5}$ ), podemos verificar também na figura 5.63 do raio quadrático médio a seqüência de colapsos vista na figura 5.61 do número de átomos. A cada colapso, ocorre uma diminuição de  $X$ , posterior aumento rápido e subsequente oscilação intensa.

Para  $\gamma = 10^{-3}$ , quando  $\xi$  cresce as trajetórias helicoidais começam a se formar e propagar para a direita, convergindo para um região oval ao redor de  $X \cong 1,7$  para  $\xi \cong 10^{-2}$ , como nos casos anteriores.

Somente para  $\xi = 10^{-5}$ , há uma mudança na dinâmica, isto é, as trajetórias apresentam-se com grande desordem e concentram-se aleatoriamente em uma região do espaço de fase, nesse caso quase circular, em torno de  $X \cong 10$ , o que indica novamente não o começo de caos, mas a presença de um colapso. De fato, isto é confirmado analisando os gráficos de  $N/N_c$  e  $X$  (ver figuras 5.65 e 5.66).

A outra curva crescente na figura 5.65 parece indicar que, para um maior tempo de evolução, um colapso deve ocorrer, o que só não ocorreu porque com um valor maior de  $\xi$  tem-se um atraso para se atingir o número crítico de átomos. Assim, neste caso, nenhuma das combinações apresenta caos, embora haja um salto abrupto em  $\zeta$  para  $\xi = 10^{-5}$  e lentos aumentos subsequentes, ao menos na escala de tempo considerada.

## 5.5 Conclusão

A partir dos resultados numéricos (cálculos exatos) apresentados nesse capítulo, concluímos que o fenômeno de caos espaço-temporal deve ocorrer na descrição de sistemas condensados, na aproximação de campo médio; principalmente para  $\gamma > \xi$  e grande razão  $\gamma/\xi$ . Para  $\gamma$  intenso, o fenômeno de caos pode surgir quando  $\xi$  assume valores inferiores ao parâmetro de alimentação por cerca de duas ordens de grandeza.

No caso específico analisado da parametrização de Kagan *et al.*, temos que essa razão vale  $\gamma/\xi = 100$ ; ou seja, a alimentação é muito intensa e supera em duas ordens de grandeza a dissipação por recombinação de três corpos. Assim, como se pôde verificar dos gráficos de observáveis, da análise do espaço de fase correspondente e do mapa de Lorenz; e comprovar pela verificação do sinal positivo do expoente de Lyapunov estendido, a parametrização de Kagan *et al.* exhibe, na escala de evolução de longo tempo, o comportamento de caos espaço-temporal.

Observa-se também que, em alguns casos a transição ao caos ocorre por estágios, depois de uma série de colapsos no sistema. Quando não ocorre caos, podemos ter o sistema entrando em um estado de equilíbrio para tempos longos ( $\tau = \omega t \sim 100$ ) ou apresentando instabilidades como oscilações de amplitude crescente, decaimentos ou crescimentos após um período de equilíbrio. As regiões de estabilidade e instabilidade podem ser melhor definidas e entendidas através do método variacional, variando da mesma forma os parâmetros da EGPG, que é o objetivo do estudo que segue no próximo capítulo. Assim, o objetivo seguinte é o de explicar o que ocorre nos sistemas regidos pela EGPG nos casos em que se atinge, após um certo tempo de evolução do sistema, um valor constante dos observáveis (equilíbrio). Procuraremos, através do formalismo variacional, verificar em que condições as soluções de instabilidade - que podem inclusive levar ao caos - e de estabilidade acontecem e o que representam fisicamente essas soluções de estabilidade do sistema.



Resultados (Figuras) do Capítulo

FIGURA 5.1. Evolução temporal da energia condensada (linha contínua) e da energia total (linha tracejada) para  $\mu = 1000$ . Os parâmetros são  $\alpha = 10^{-4}$ ,  $\beta = 10^{-4}$ . São mostrados os primeiros 1000 passos de integração com passo  $\Delta t = 10$ , sendo o intervalo de observação  $t \in [0, 1000]$ .

### 5.5 Conclusão

A seguir, apresentamos algumas conclusões sobre a estabilidade dos condensados bosônicos. Primeiro, mostramos que a estabilidade depende da interação entre os termos de interação e de dispersão. Segundo, discutimos a possibilidade de instabilidade para  $\mu > 0$  e  $\mu < 0$ . Por fim, apresentamos algumas conclusões sobre a estabilidade dos condensados bosônicos em situações de interação forte.

No caso de interação fraca, a estabilidade depende da interação entre os termos de interação e de dispersão. Para  $\mu > 0$ , a estabilidade é garantida para qualquer valor de  $\mu$ . Para  $\mu < 0$ , a estabilidade é garantida para valores de  $\mu$  pequenos. A estabilidade é garantida para valores de  $\mu$  pequenos e para valores de  $\mu$  grandes. A estabilidade é garantida para valores de  $\mu$  pequenos e para valores de  $\mu$  grandes. A estabilidade é garantida para valores de  $\mu$  pequenos e para valores de  $\mu$  grandes.

Quando a interação é forte, a estabilidade depende da interação entre os termos de interação e de dispersão. Para  $\mu > 0$ , a estabilidade é garantida para qualquer valor de  $\mu$ . Para  $\mu < 0$ , a estabilidade é garantida para valores de  $\mu$  pequenos. A estabilidade é garantida para valores de  $\mu$  pequenos e para valores de  $\mu$  grandes. A estabilidade é garantida para valores de  $\mu$  pequenos e para valores de  $\mu$  grandes. A estabilidade é garantida para valores de  $\mu$  pequenos e para valores de  $\mu$  grandes.

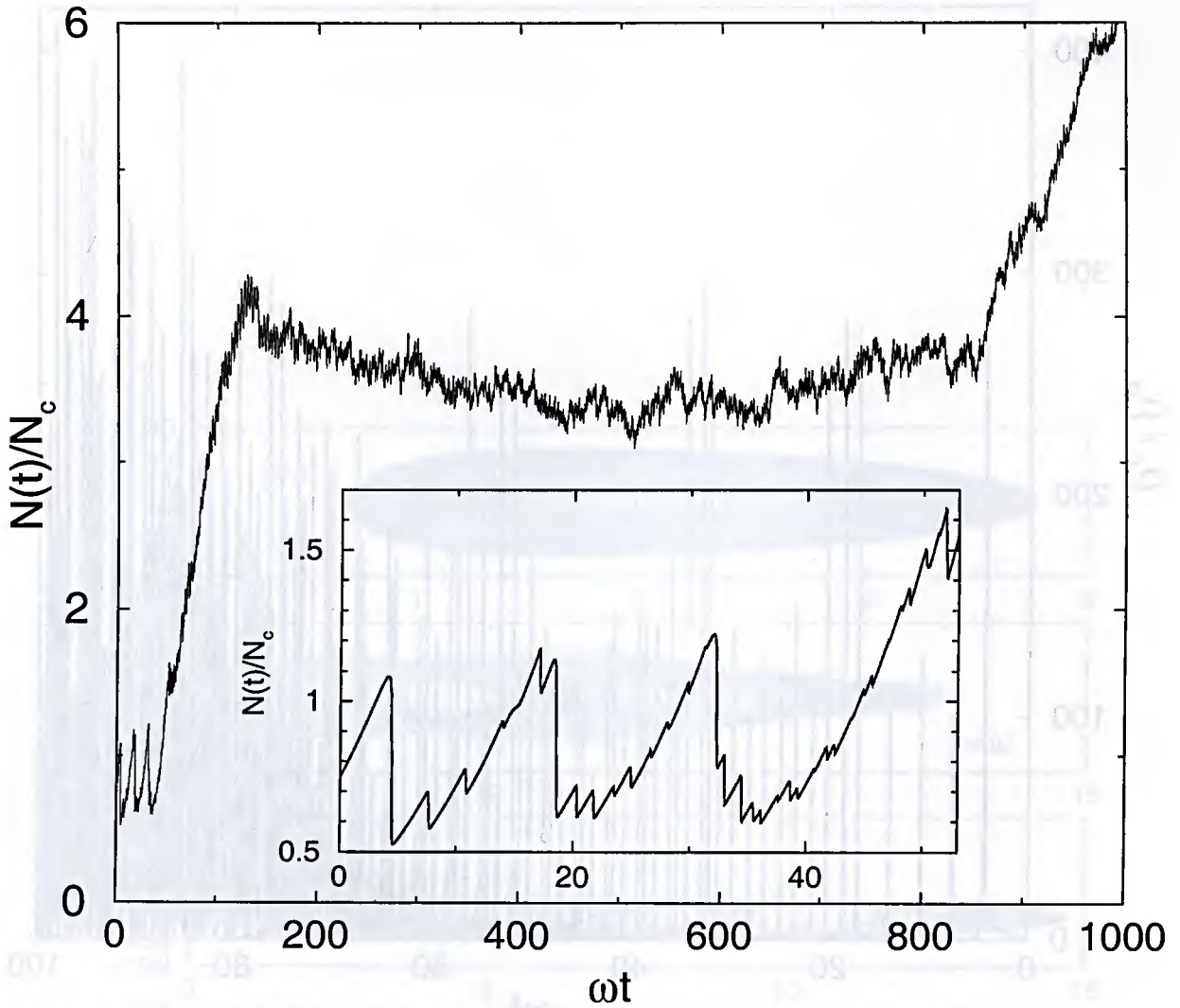


Figura 5.1: Número de átomos condensados como função do tempo para  $\omega t \leq 1000$ . Os parâmetros são  $\gamma = 10^{-1}$  e  $\xi = 10^{-3}$ . Um padrão de duplicação é observado para  $\omega t < 50$ , como mostrado na inserção.

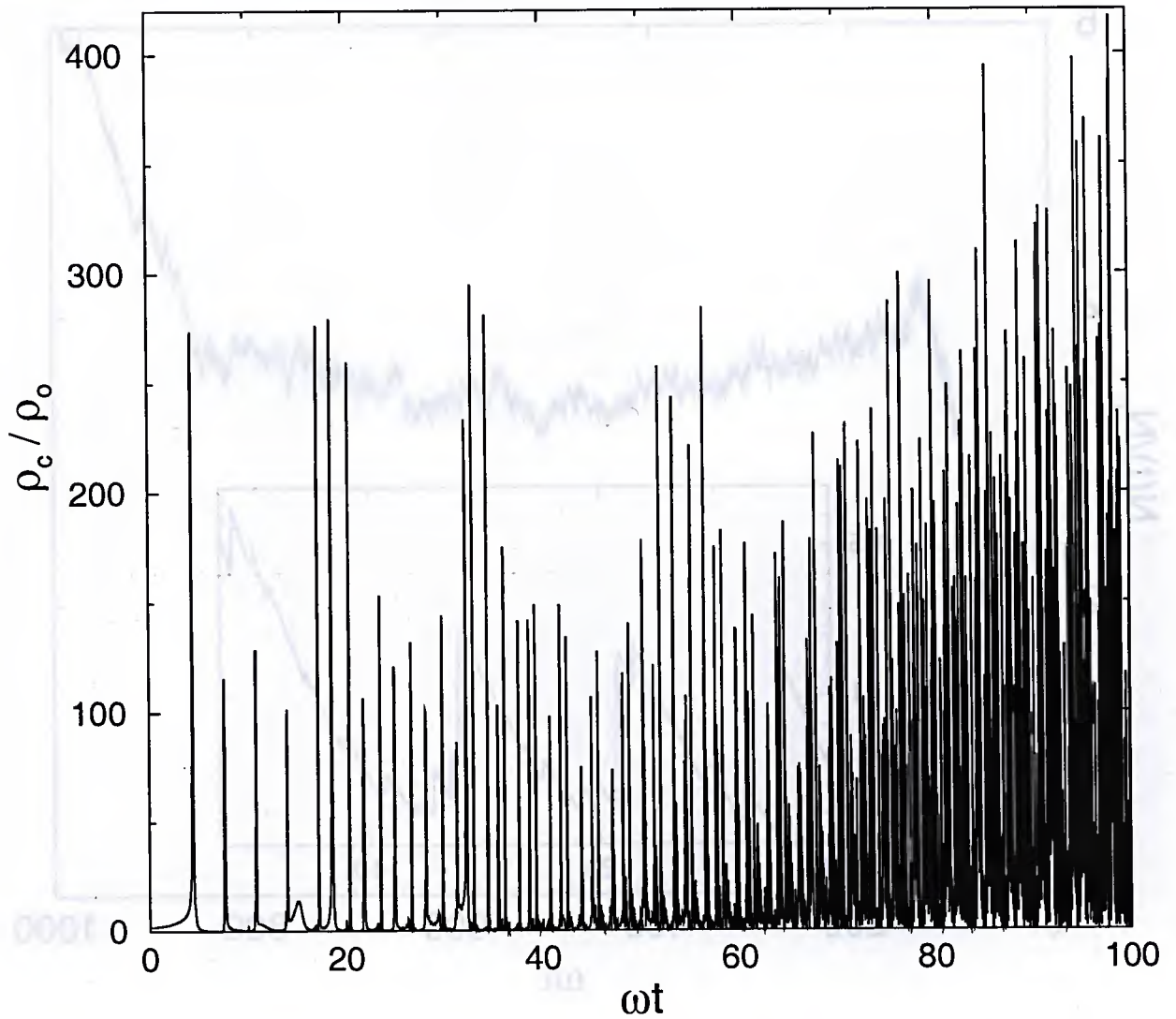


Figura 5.2: A densidade central  $\rho_c(t) \equiv N|\Psi(0,t)|^2$ , traçada como função de  $\omega t$ , para  $\omega t < 100$ .  $\rho_0$  é definida por  $\rho_0 \equiv (1/4\pi a)(m\omega/\hbar)$ .

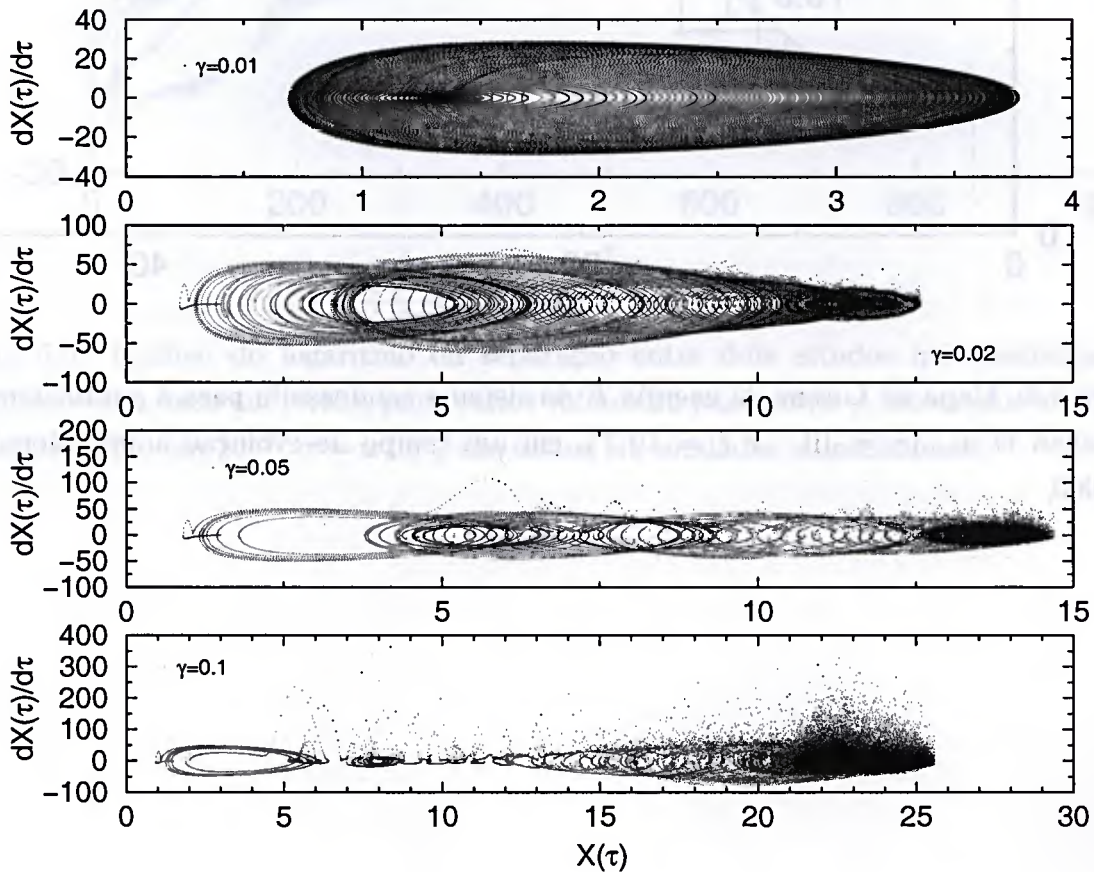


Figura 5.3: Gráficos do espaço de fase para o raio quadrático médio, dado por  $X(\tau) \equiv \sqrt{\langle x^2(\tau) \rangle}$ , em unidades adimensionais, para um conjunto de valores do parâmetro de alimentação  $\gamma$ . Em todos os casos, as funções de onda foram evoluídas até  $\omega t = 1000$  e  $\xi = 10^{-3}$ .

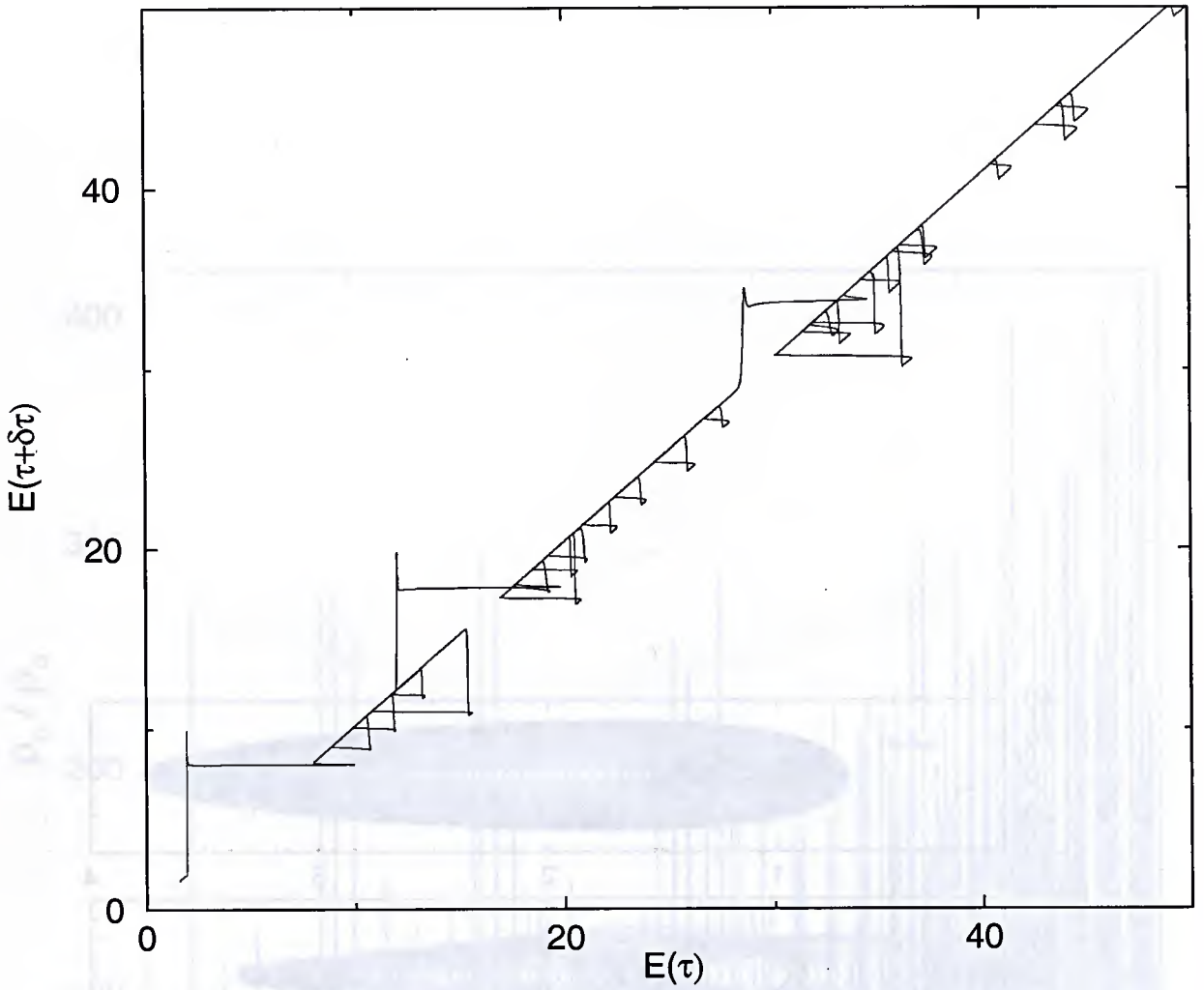


Figura 5.4: Mapa de Lorenz da energia  $E$  do sistema condensado para a parametrização de Kagan *et al.* ( $\gamma = 10^{-1}$  e  $\xi = 10^{-3}$ ), em um tempo de evolução adimensional até  $\tau = 1000$ .

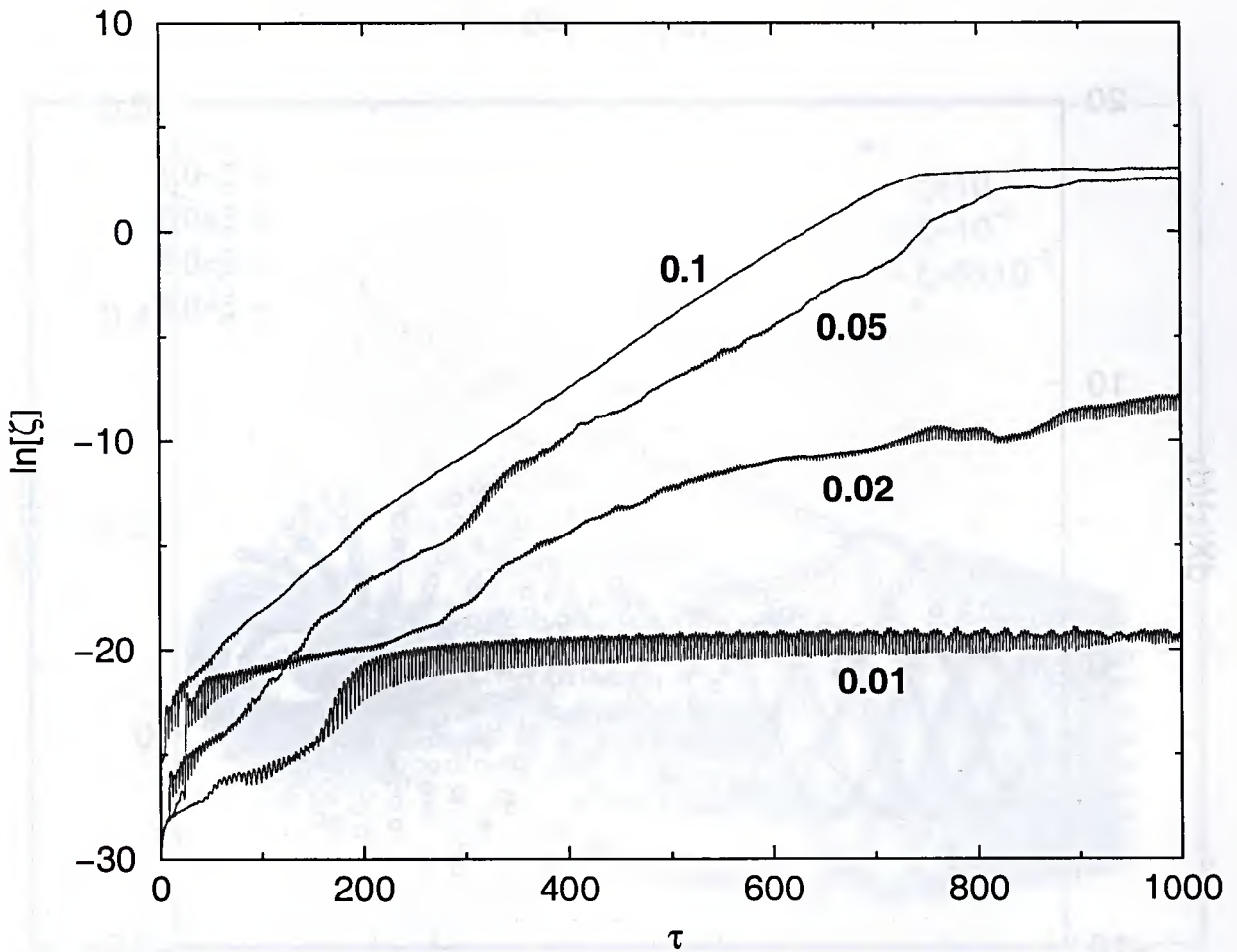


Figura 5.5: Gráfico do logaritmo da separação entre dois estados infinitesimalmente próximos, como dado em (5.10), para vários valores do parâmetro  $\gamma$ , mostrados na figura.  $\xi$  é mantido fixo em  $10^{-3}$ .  $\tau = \omega t$  e  $\zeta$  são dados em unidades adimensionais.

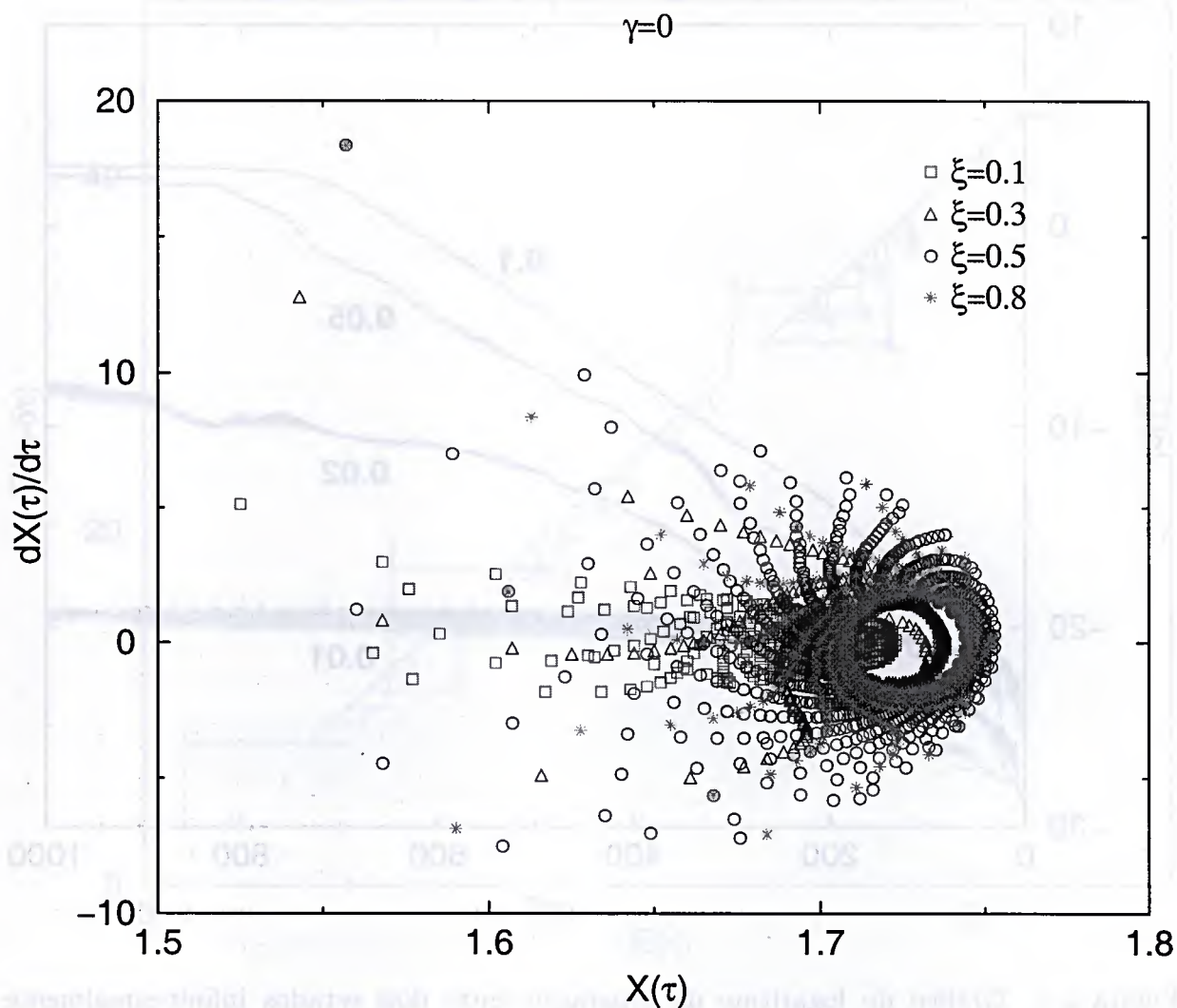


Figura 5.6: Espaço de fase para o raio quadrático médio  $X(\tau) \equiv \sqrt{\langle x^2(\tau) \rangle}$ , (adimensional), para um conjunto de (grandes) valores do parâmetro de dissipação  $\xi$ , fixado  $\gamma = 0$ .

$$\gamma=0$$

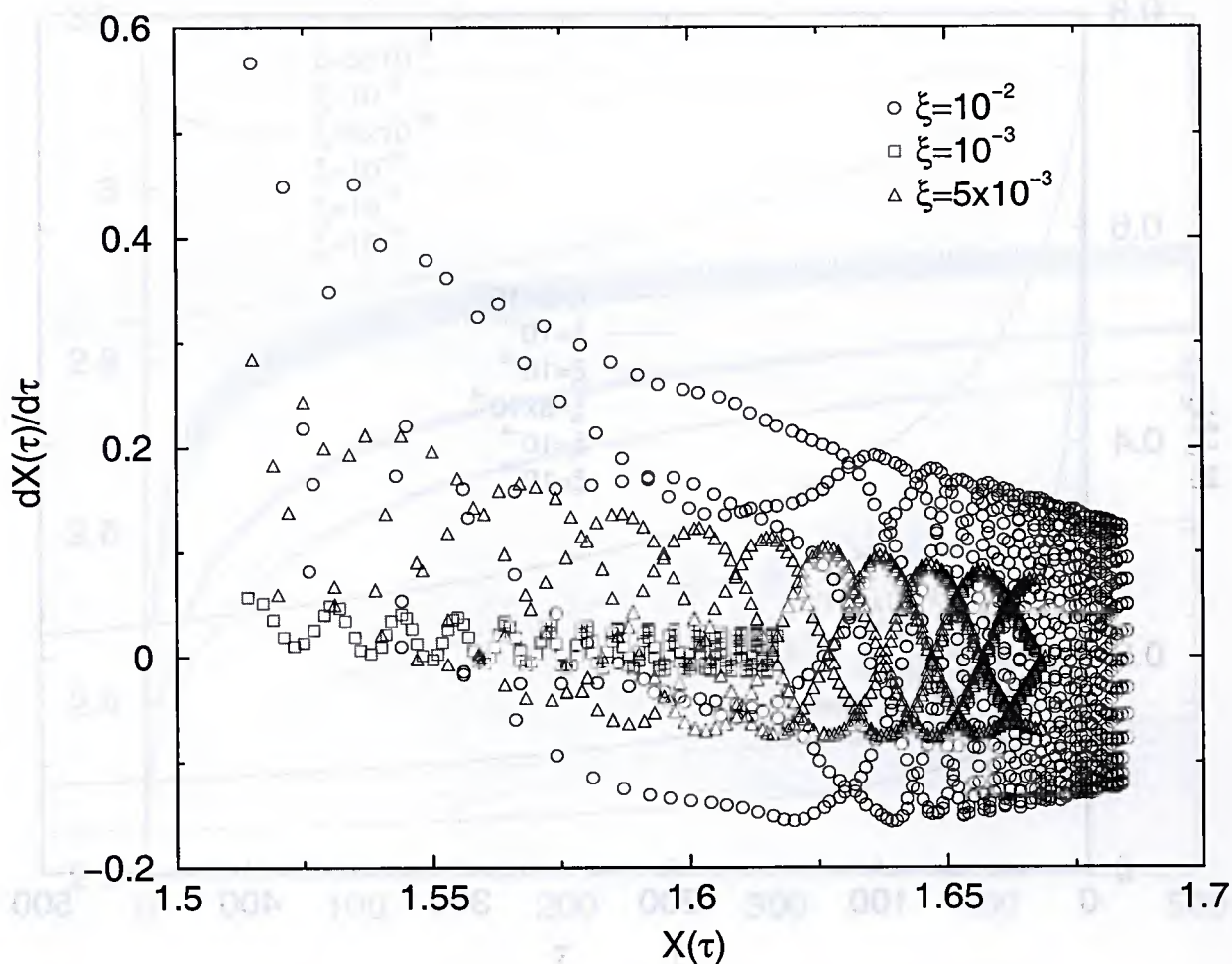


Figura 5.7: Espaço de fase para o raio quadrático médio  $X(\tau) \equiv \sqrt{\langle x^2(\tau) \rangle}$  (adimensional); para um conjunto de (pequenos) valores do parâmetro de dissipação  $\xi$ , fixado  $\gamma = 0$ .

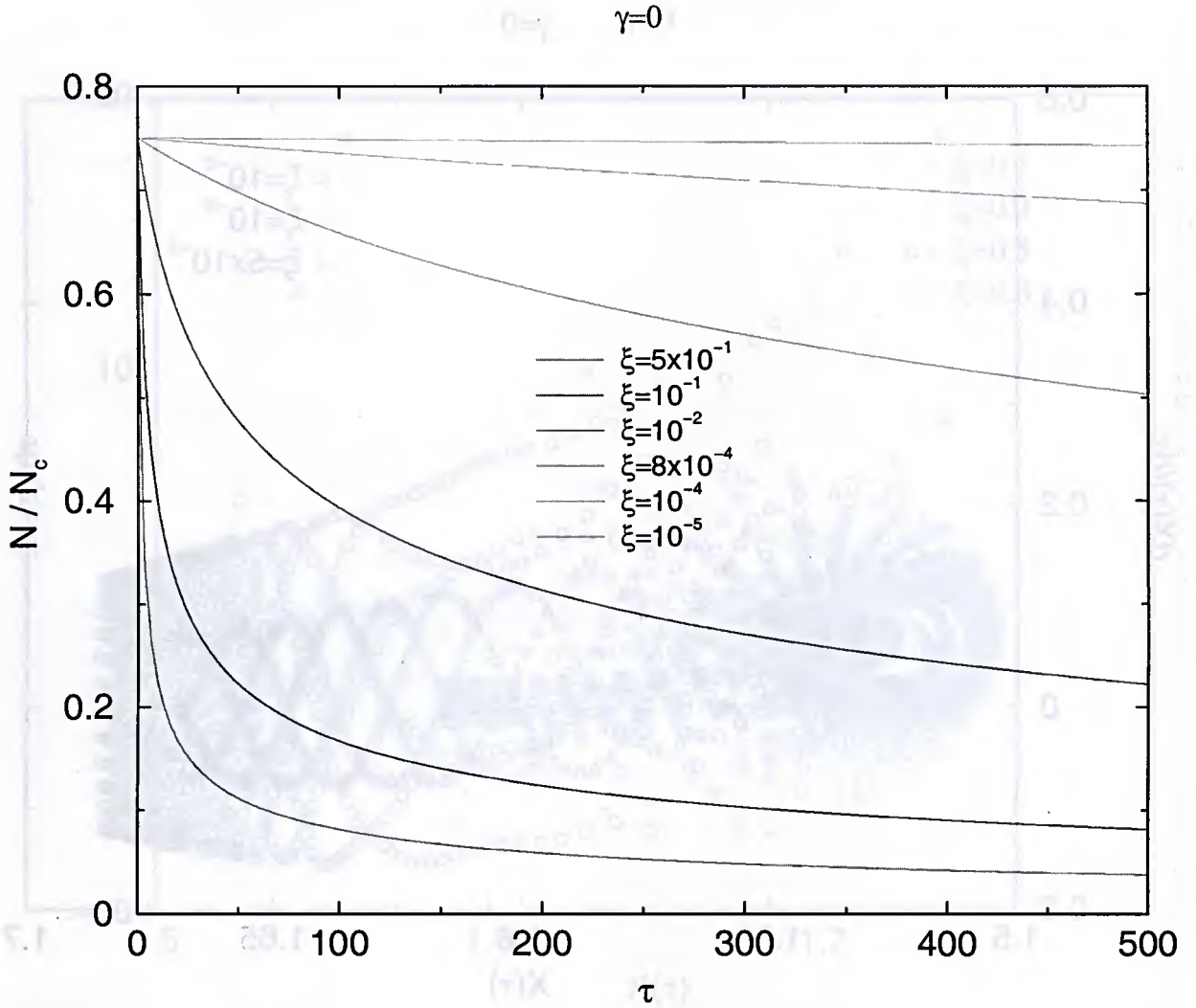


Figura 5.8: Número de átomos como função do tempo para  $\tau = \omega t \leq 500$ ,  $\gamma = 0$  e um conjunto de valores de  $\xi$ .

$$\gamma=0$$

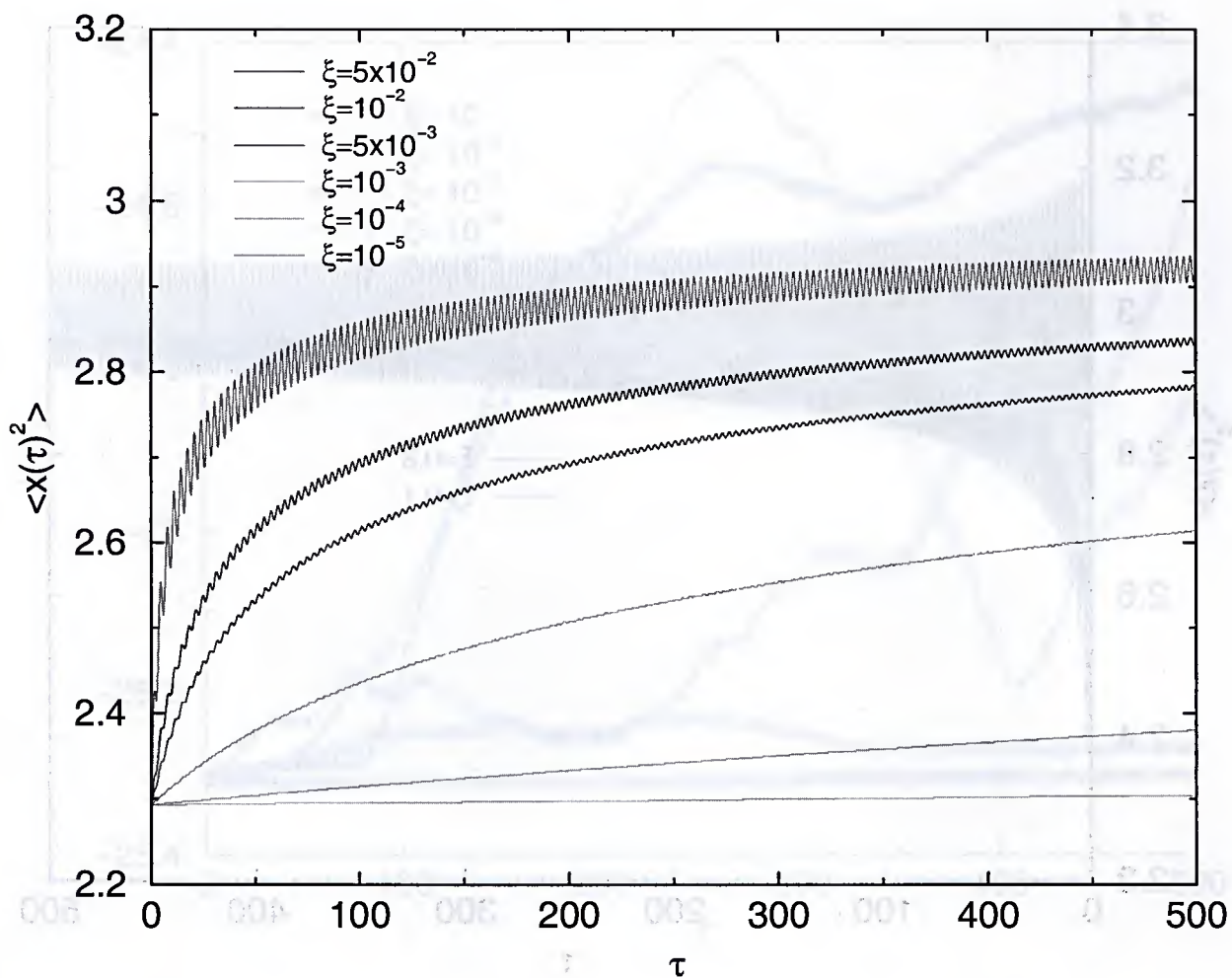


Figura 5.9: Raio quadrático médio  $\langle X(\tau)^2 \rangle$  como função do tempo para  $\tau = \omega t \leq 500$ ,  $\gamma = 0$  e um conjunto de valores de  $\xi$ .

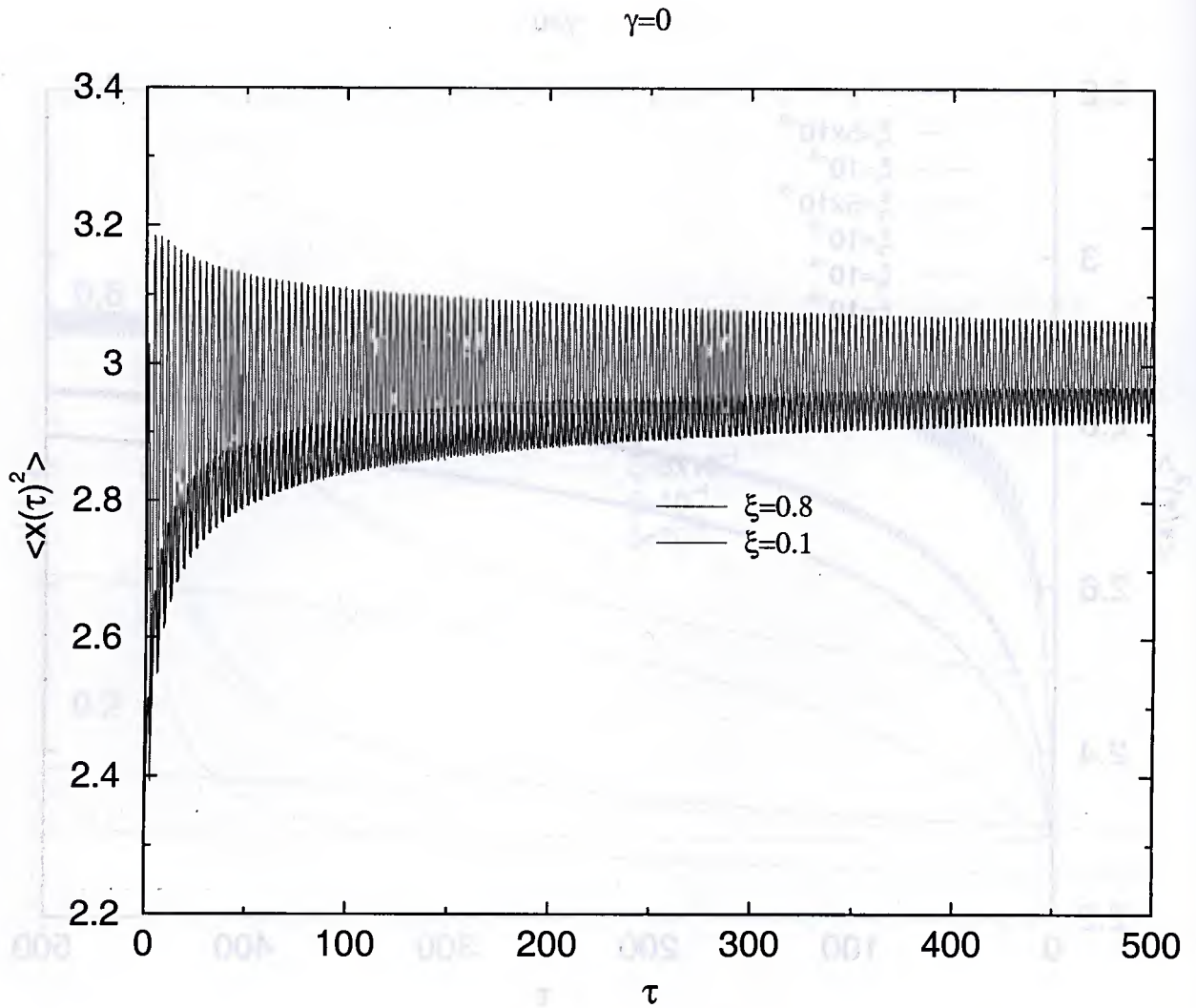


Figura 5.10: Raio quadrático médio  $X(\tau)^2$  como função do tempo para  $\tau = \omega t \leq 500$ ,  $\gamma = 0$  e dois valores intensos de  $\xi$ .

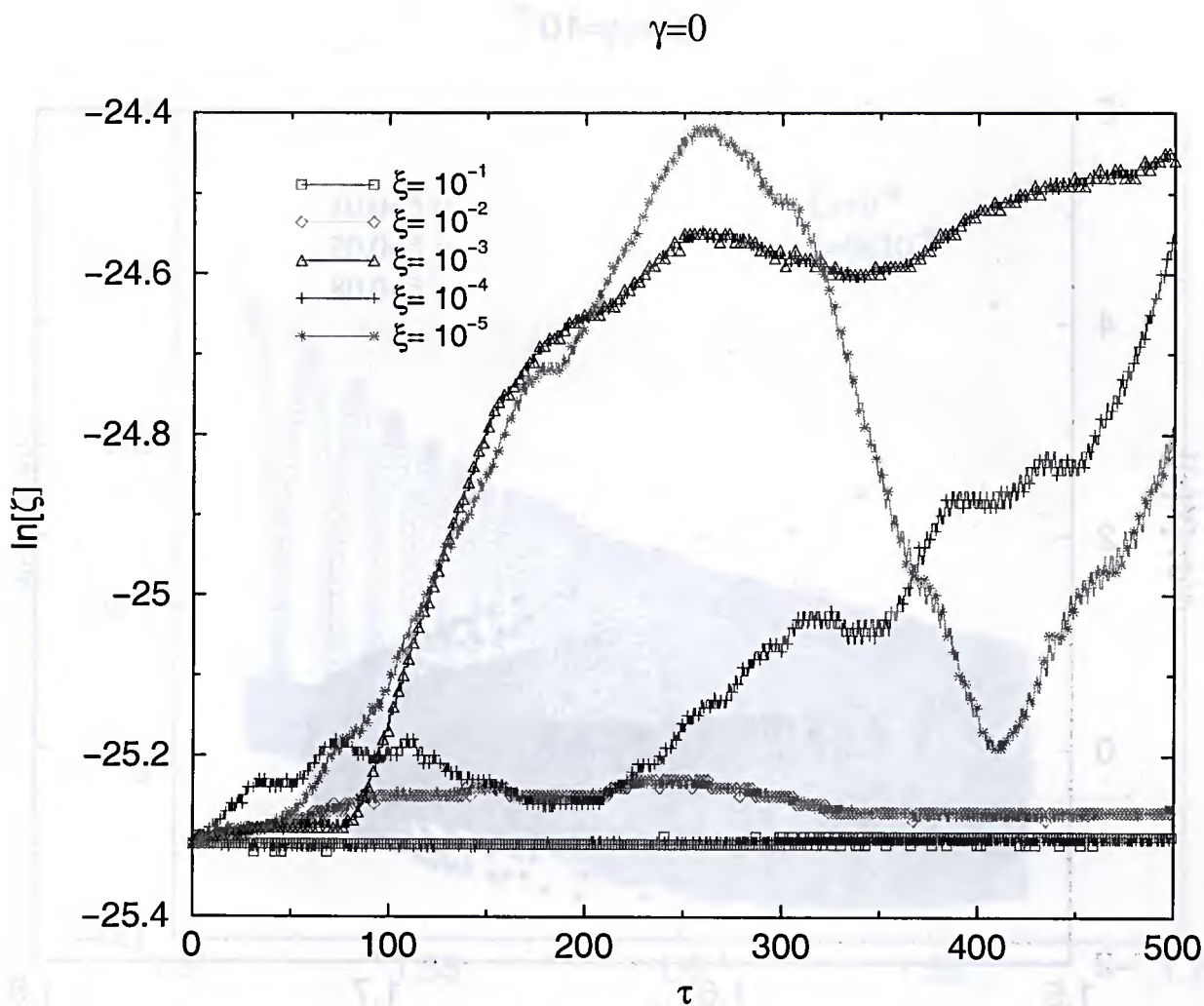


Figura 5.11: Gráfico logarítmico da separação entre dois estados vizinhos, como dado pela Eq. (5.10), para vários valores do parâmetro  $\xi$ , com  $\gamma = 0$ .

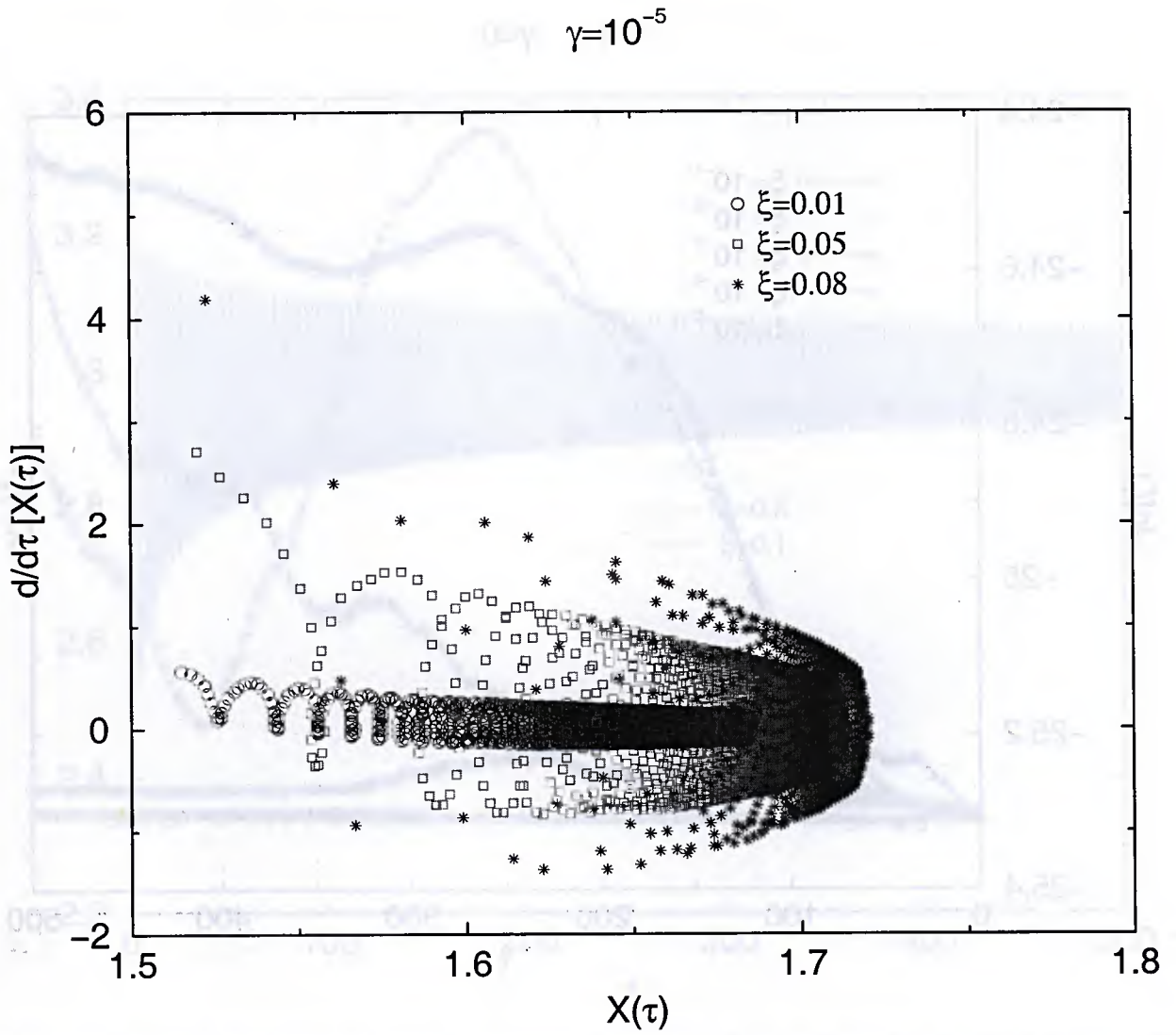


Figura 5.12: Espaço de fase para o raio quadrático médio  $X(\tau) \equiv \sqrt{\langle x^2(\tau) \rangle}$  (adimensional), para um conjunto de valores menores do parâmetro de dissipação  $\xi$ , fixado  $\gamma = 10^{-5}$ .

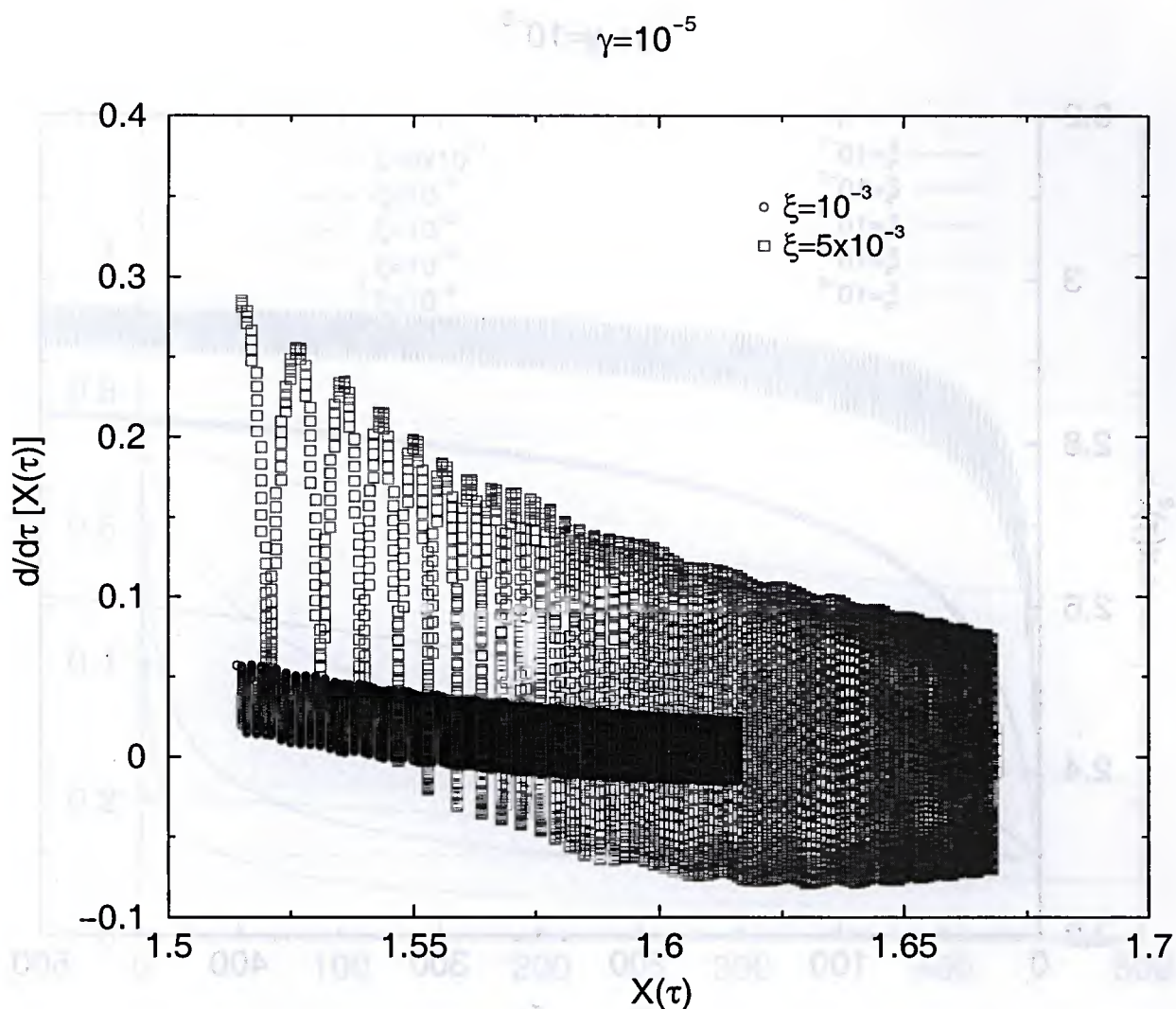


Figura 5.13: Espaço de fase para o raio quadrático médio  $X(\tau) \equiv \sqrt{\langle x^2(\tau) \rangle}$  (adimensional), para um conjunto de valores muito menores do parâmetro de dissipação  $\xi$ , fixado  $\gamma = 10^{-5}$ .

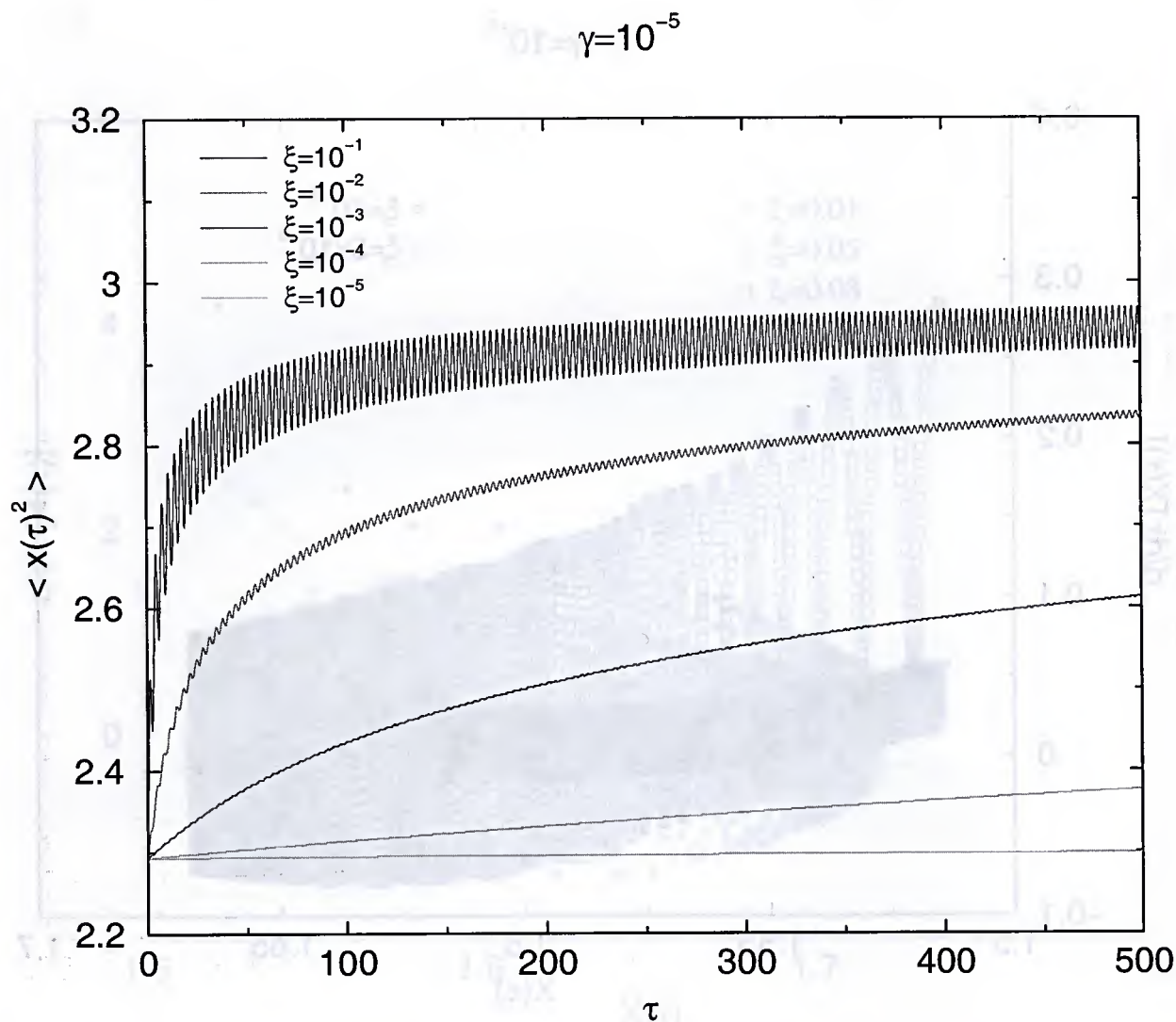


Figura 5.14: Raio quadrático médio  $X(\tau)^2$  como função do tempo para  $\tau = \omega t \leq 500$ ,  $\gamma = 10^{-5}$  e um conjunto de valores de  $\xi$ .

$$\gamma = 10^{-4}$$

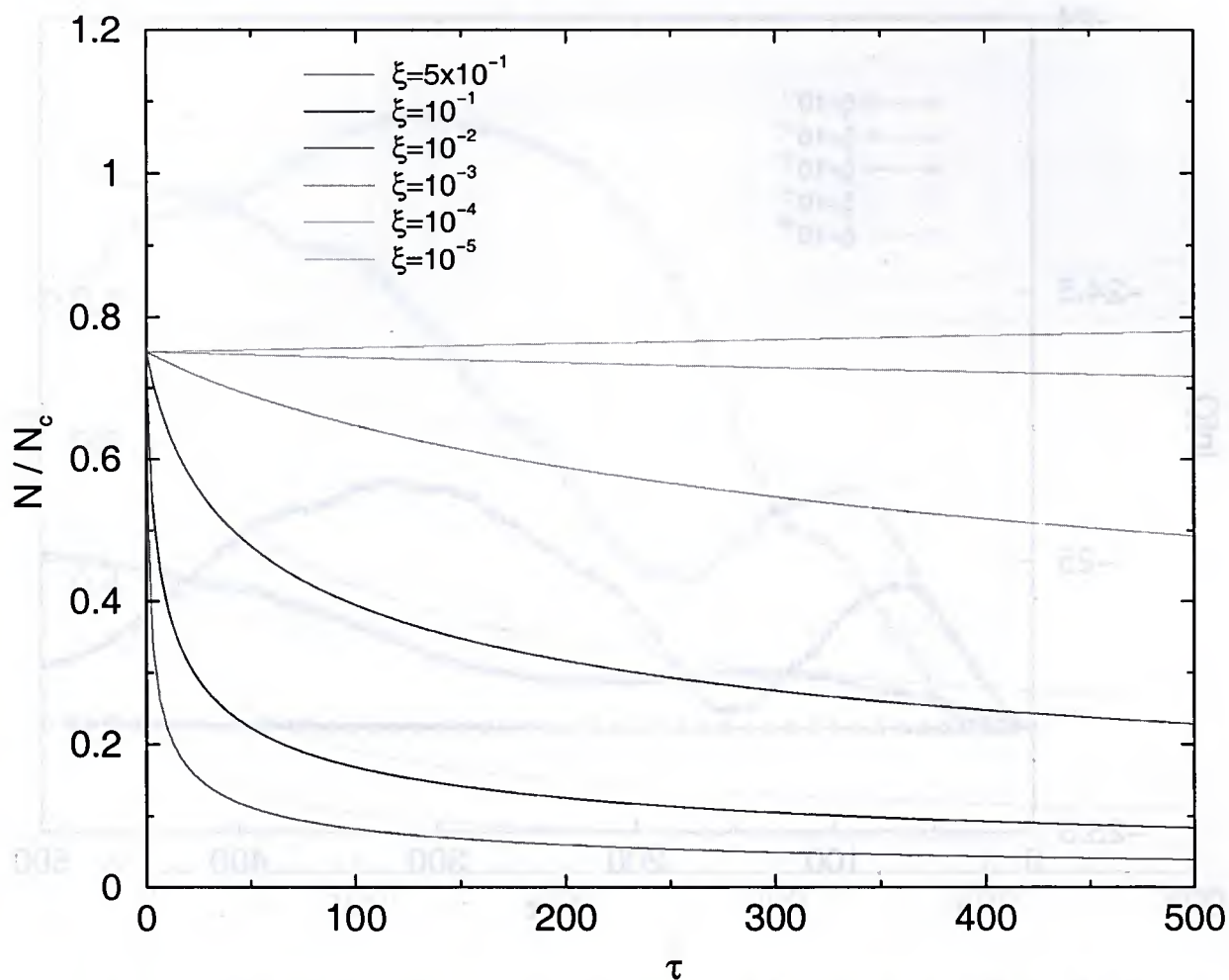


Figura 5.15: Número de átomos como função do tempo para  $\tau = \omega t \leq 500$ ,  $\gamma = 10^{-4}$  e um conjunto de valores de  $\xi$ .

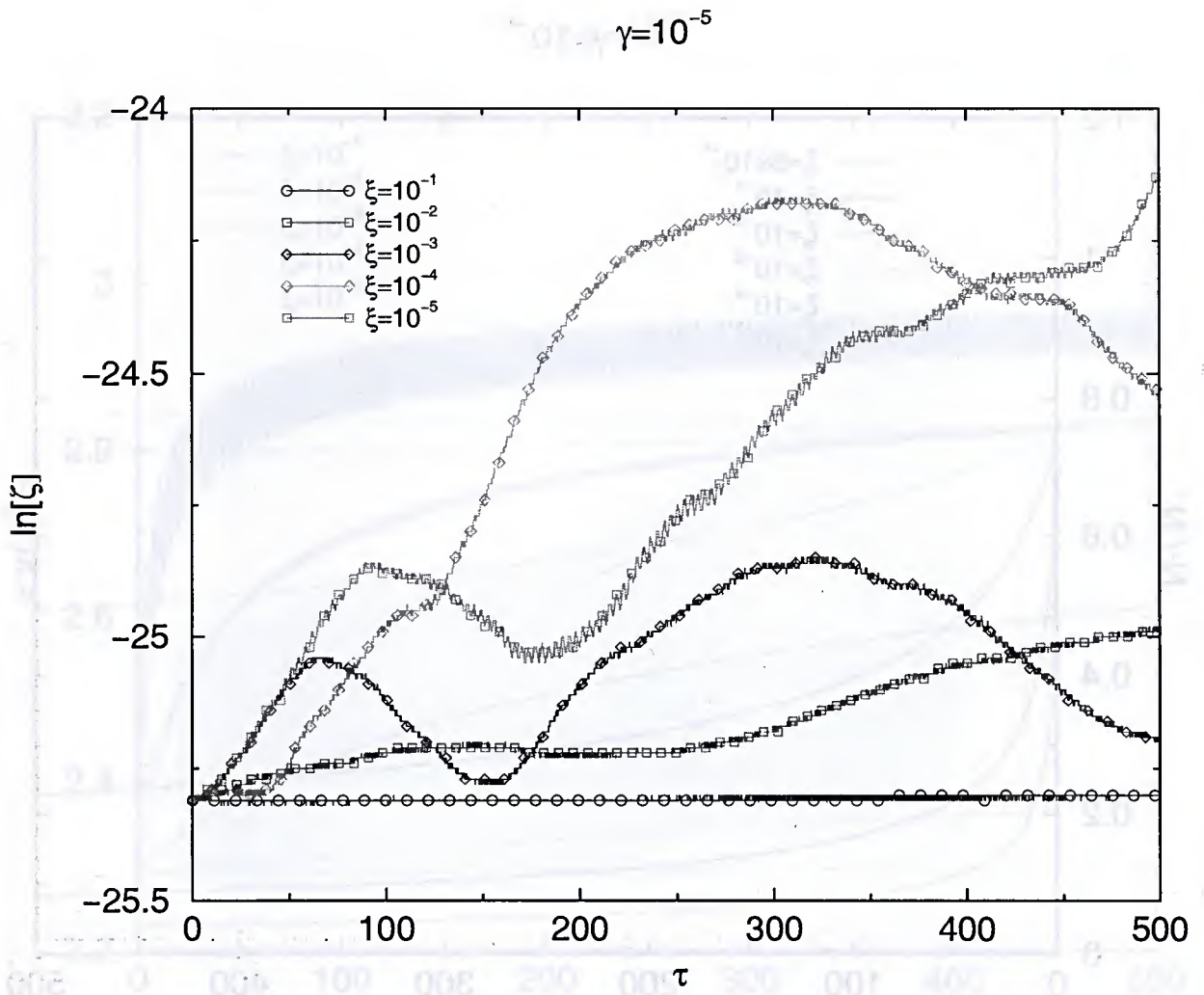


Figura 5.16: Gráfico logarítmico da separação entre dois estados vizinhos, como dado pela Eq. (5.10), para um conjunto de valores do parâmetro  $\xi$ , com  $\gamma = 10^{-5}$ .

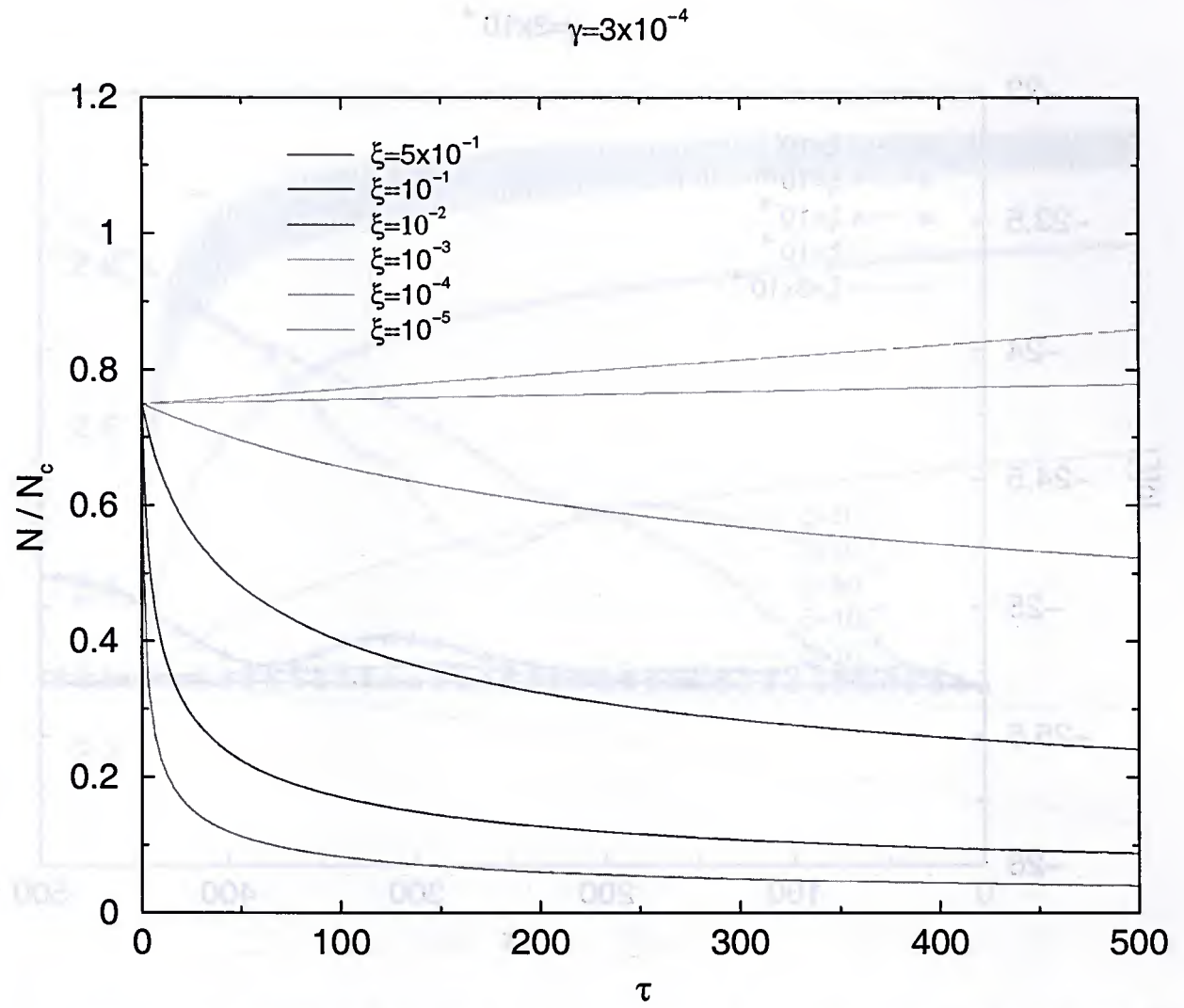


Figura 5.17: Número de átomos como função do tempo para  $\tau = \omega t \leq 500$ ,  $\gamma = 3 \times 10^{-4}$  e um conjunto de valores de  $\xi$ .

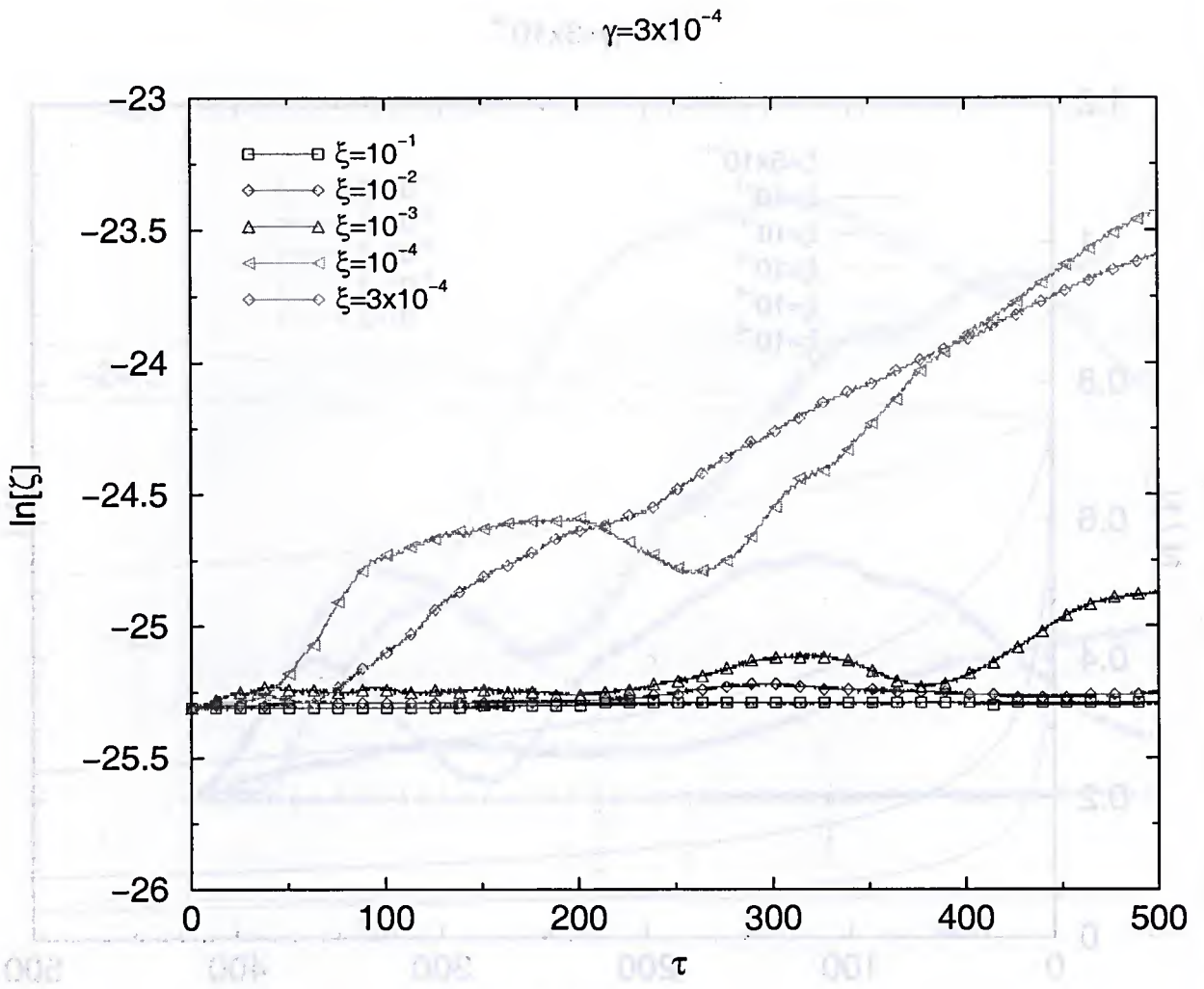


Figura 5.18: Gráfico logarítmico da separação entre dois estados vizinhos, como dado pela Eq. (5.10), para um conjunto de valores do parâmetro  $\xi$ , com  $\gamma = 3 \times 10^{-4}$ .

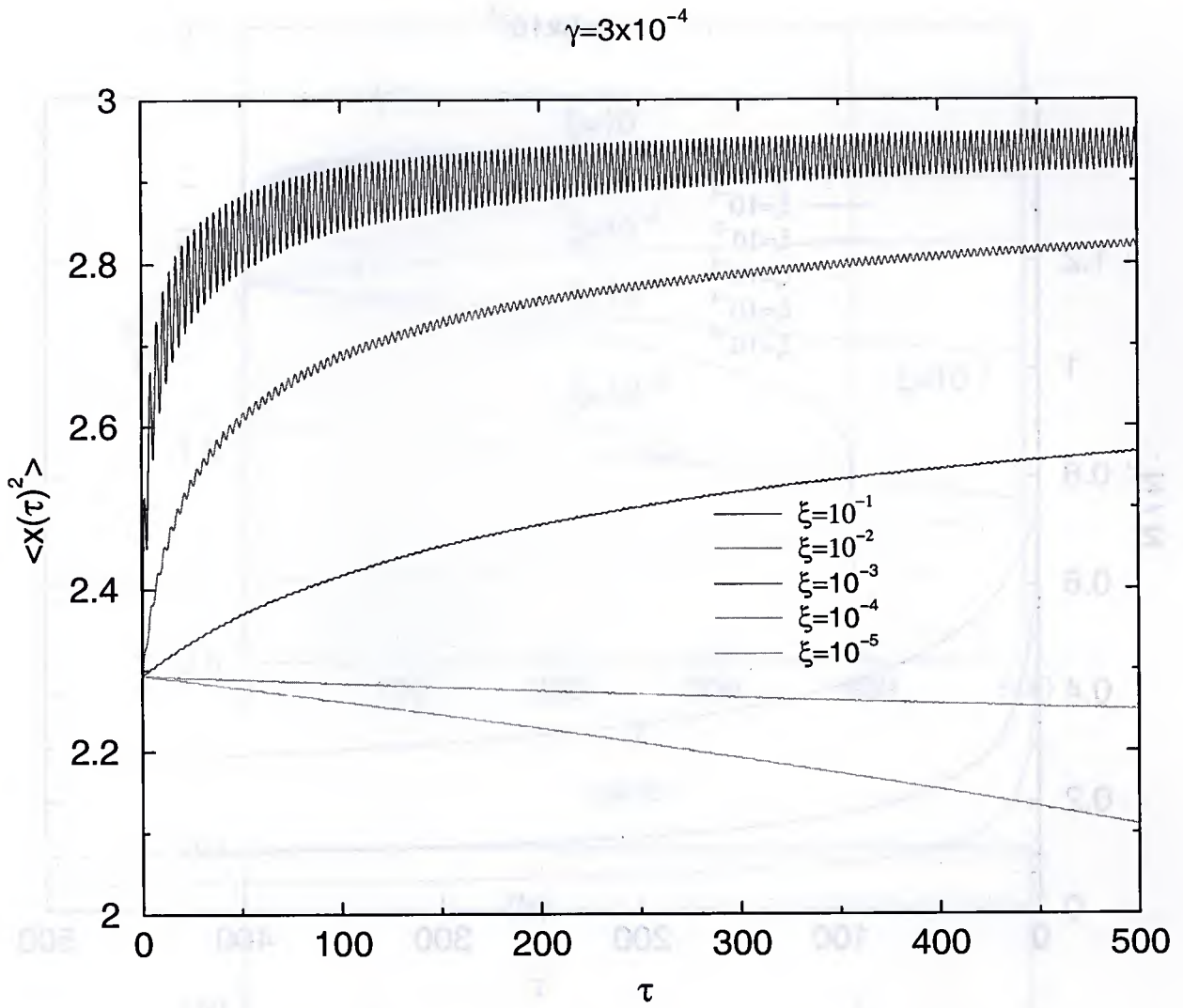


Figura 5.19: Raio quadrático médio  $\langle X(\tau)^2 \rangle$  como função do tempo para  $\tau = \omega t \leq 500$ ,  $\gamma = 3 \times 10^{-4}$  e um conjunto de valores de  $\xi$ .

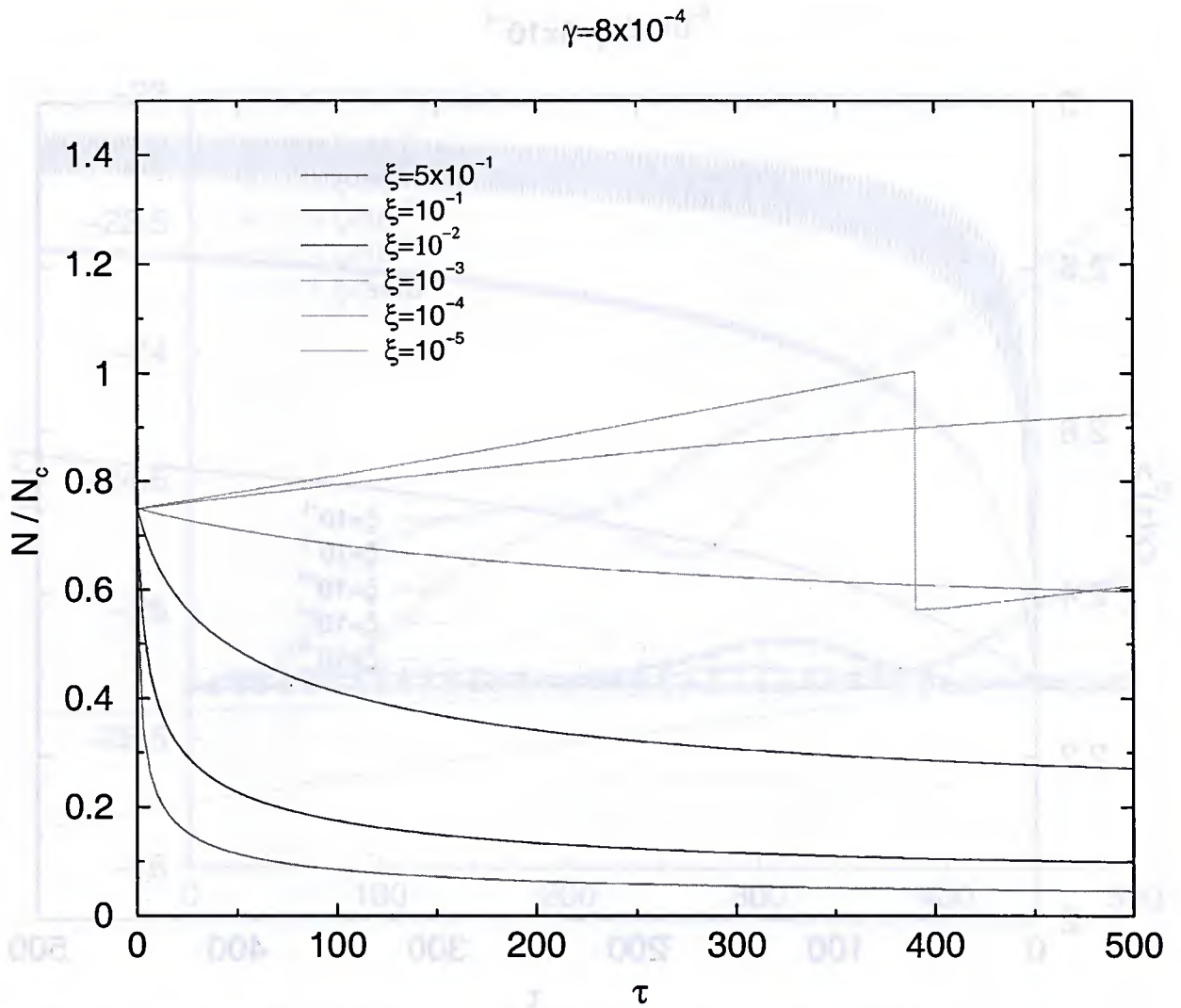


Figura 5.20: Número de átomos como função do tempo para  $\tau = \omega t \leq 500$ ,  $\gamma = 8 \times 10^{-4}$  e um conjunto de valores de  $\xi$ .

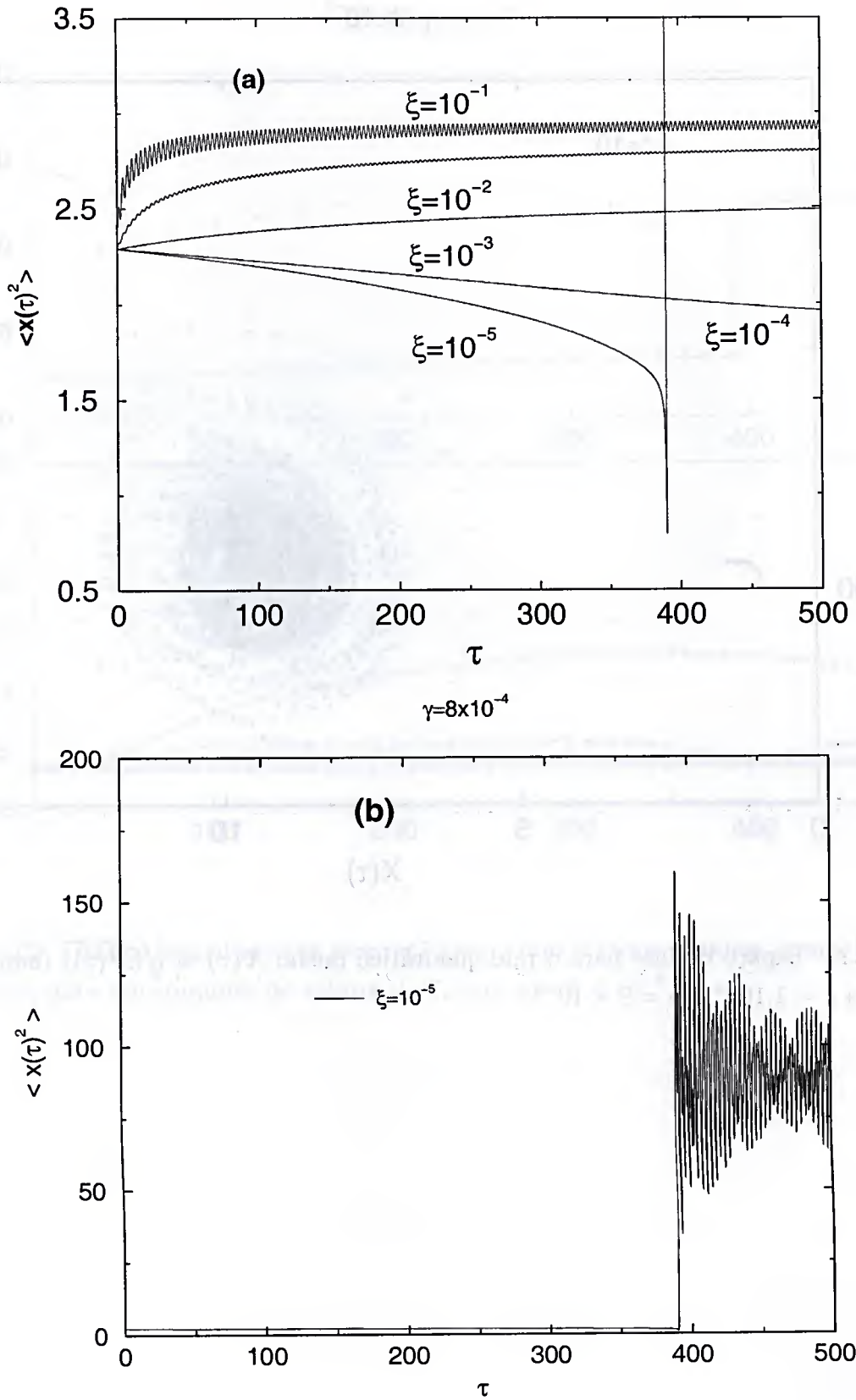


Figura 5.21: Raio quadrático médio  $X(\tau)^2$  como função do tempo para  $\tau = \omega t \leq 500$ ,  $\gamma = 8 \times 10^{-4}$  e  $\xi = 10^{-5}$ .

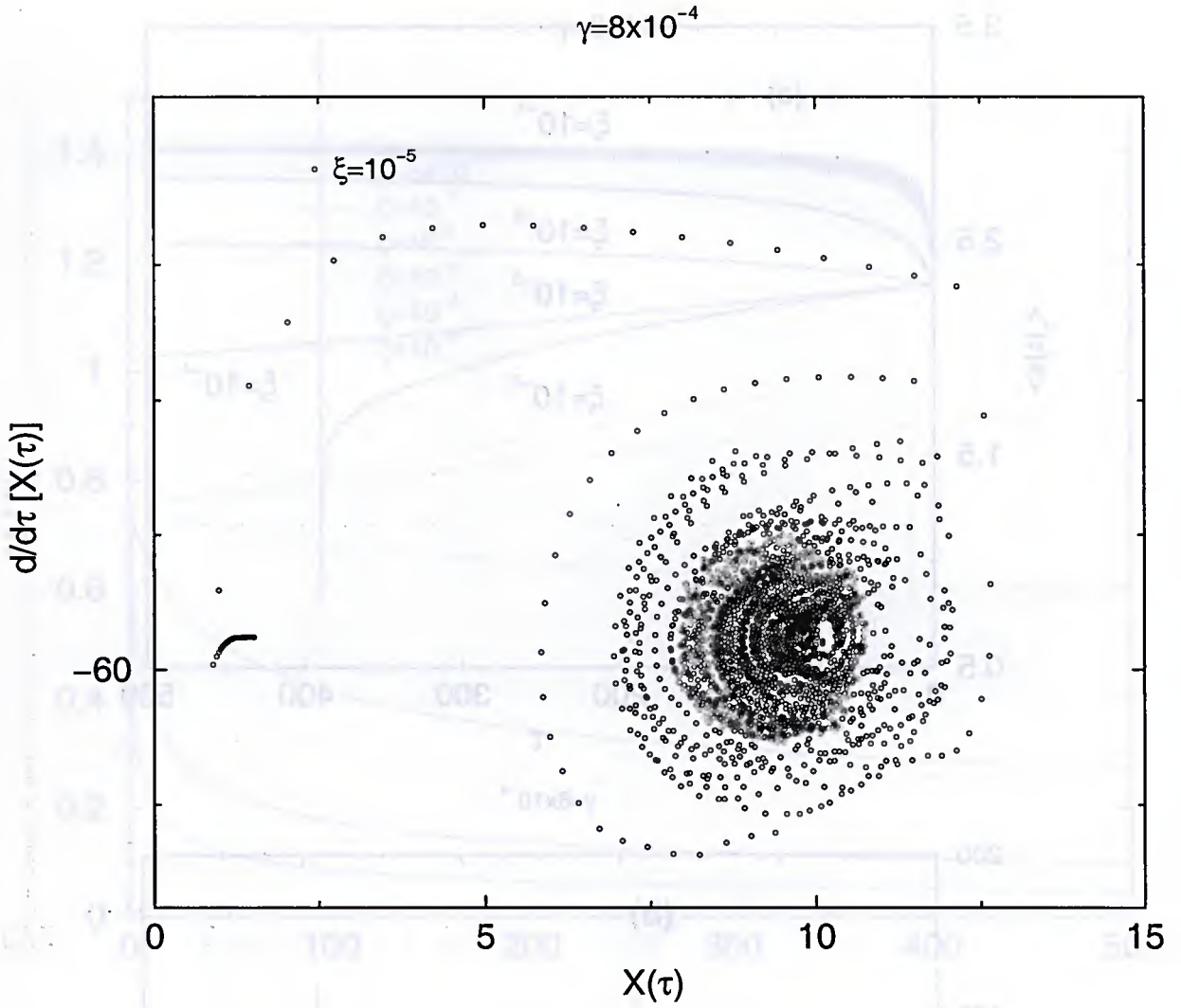


Figura 5.22: Espaço de fase para o raio quadrático médio  $X(\tau) \equiv \sqrt{\langle x^2(\tau) \rangle}$  (adimensional), para  $\xi = 1.10^{-5}$  e  $\gamma = 8 \times 10^{-4}$

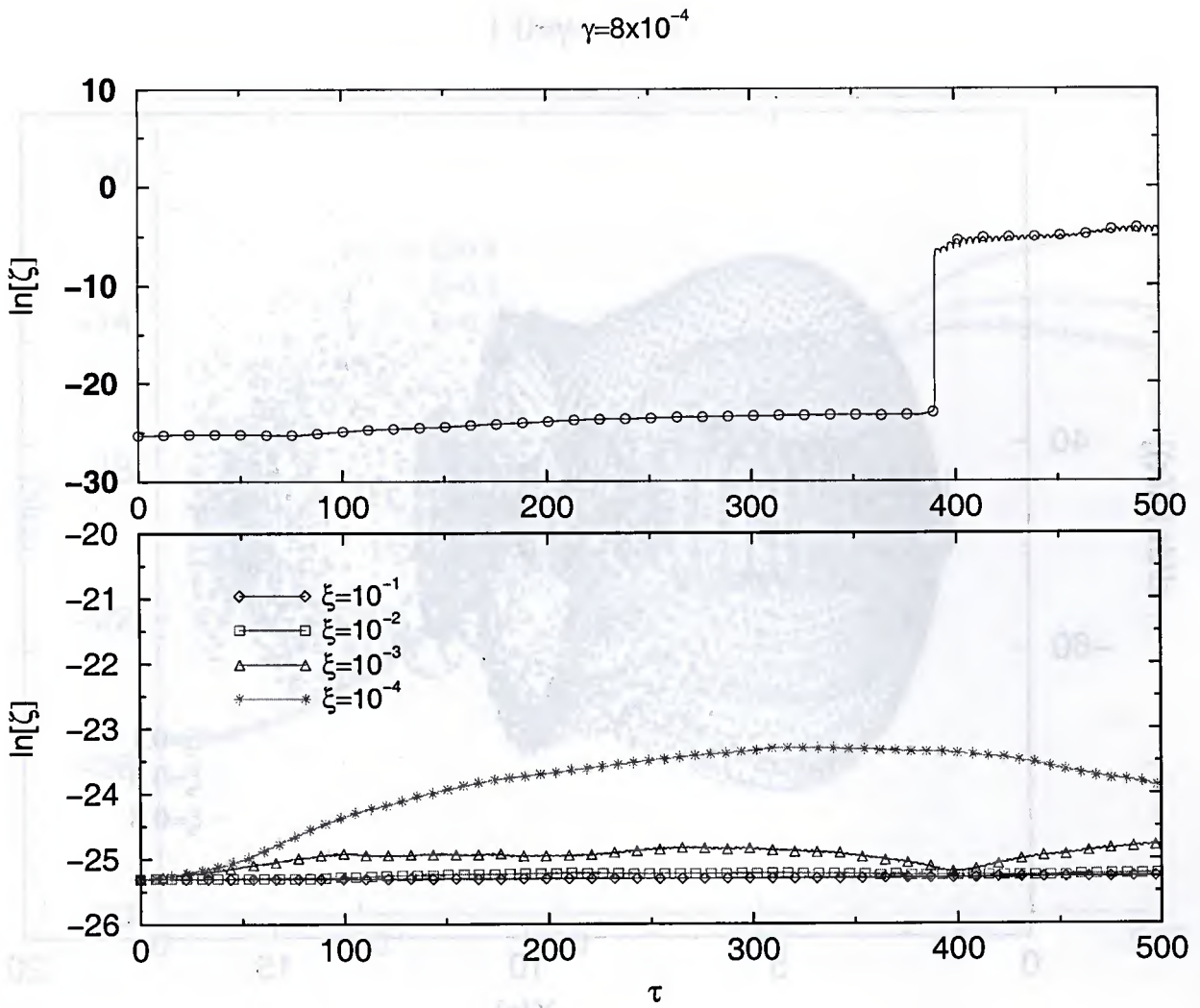


Figura 5.23: Gráfico logarítmico da separação entre dois estados vizinhos, como dado pela Eq. (5.10), para um conjunto de valores de  $\xi$ , com  $\gamma = 8 \times 10^{-4}$ .

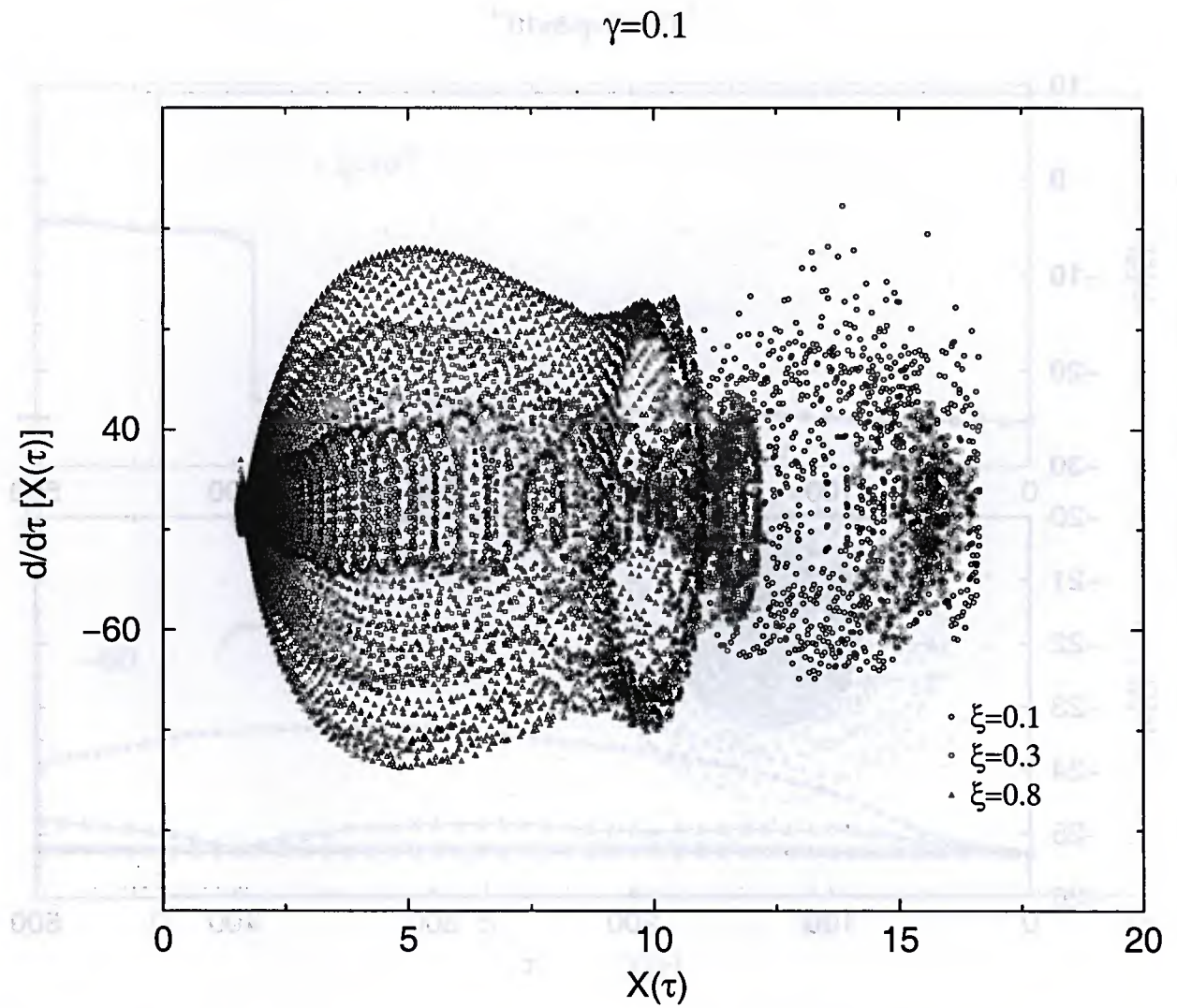


Figura 5.24: Espaço de fase para o raio quadrático médio  $X(\tau) \equiv \sqrt{\langle x^2(\tau) \rangle}$  (adimensional), para um conjunto de valores do parâmetro de dissipação  $\xi$ , fixado  $\gamma = 10^{-1}$ .

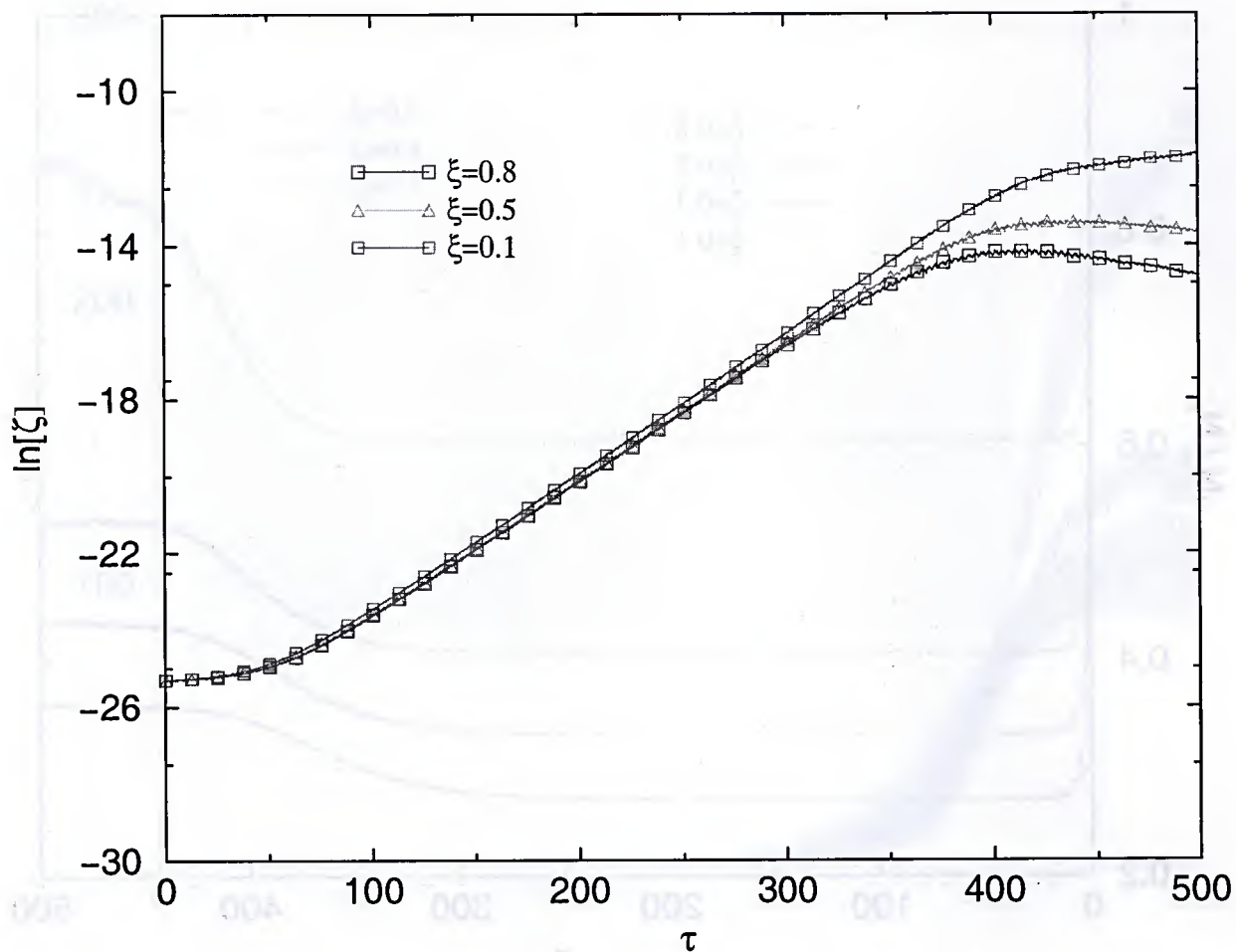
$\gamma=0.1$ 

Figura 5.25: Gráfico logarítmico da separação entre dois estados vizinhos, como dado pela Eq. (5.10), para alguns valores do parâmetro  $\xi$ , com  $\gamma = 10^{-1}$ .

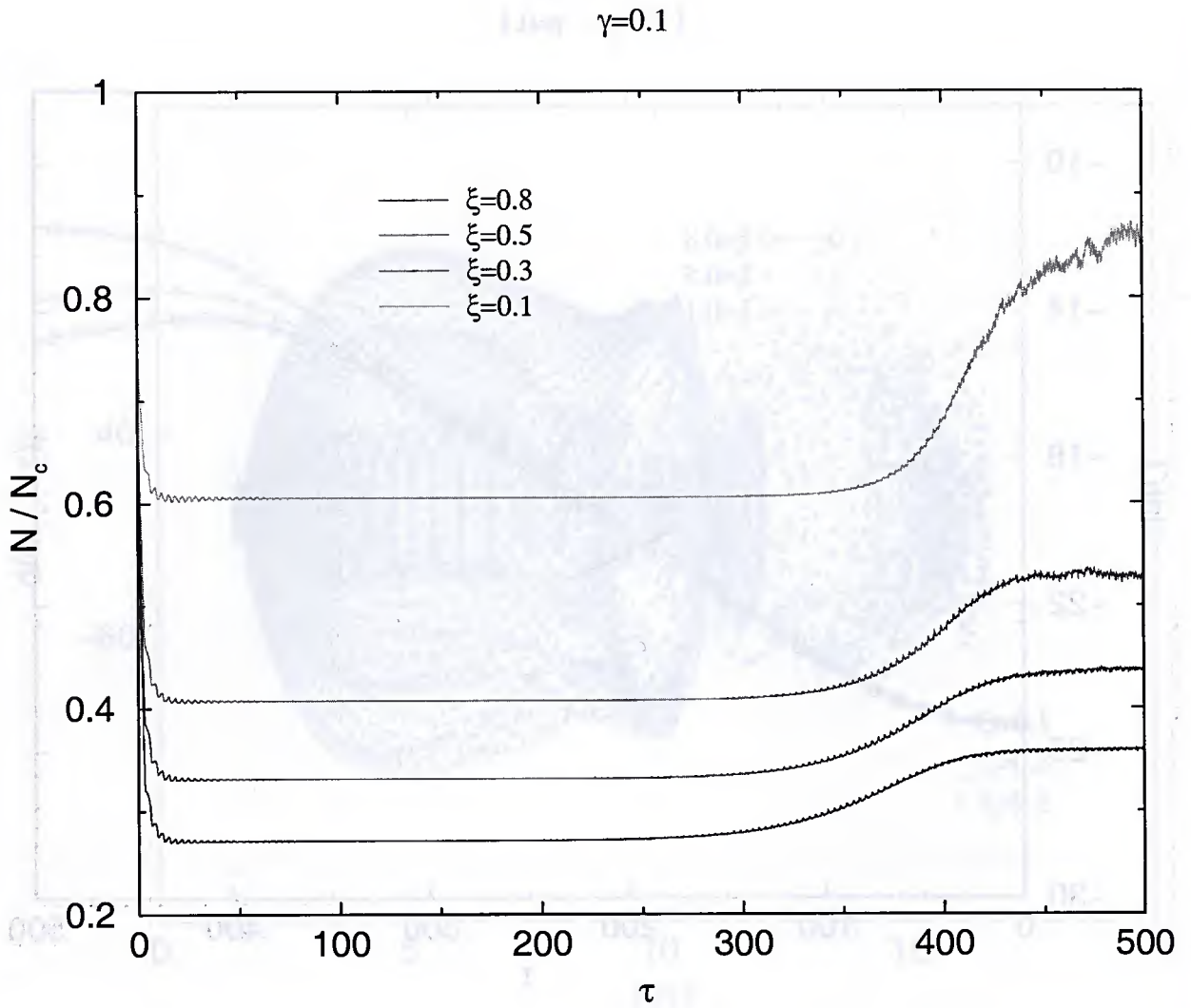


Figura 5.26: Número de átomos como função do tempo para  $\tau = \omega t \leq 500$ ,  $\gamma = 10^{-1}$  e um conjunto de valores de  $\xi$ .

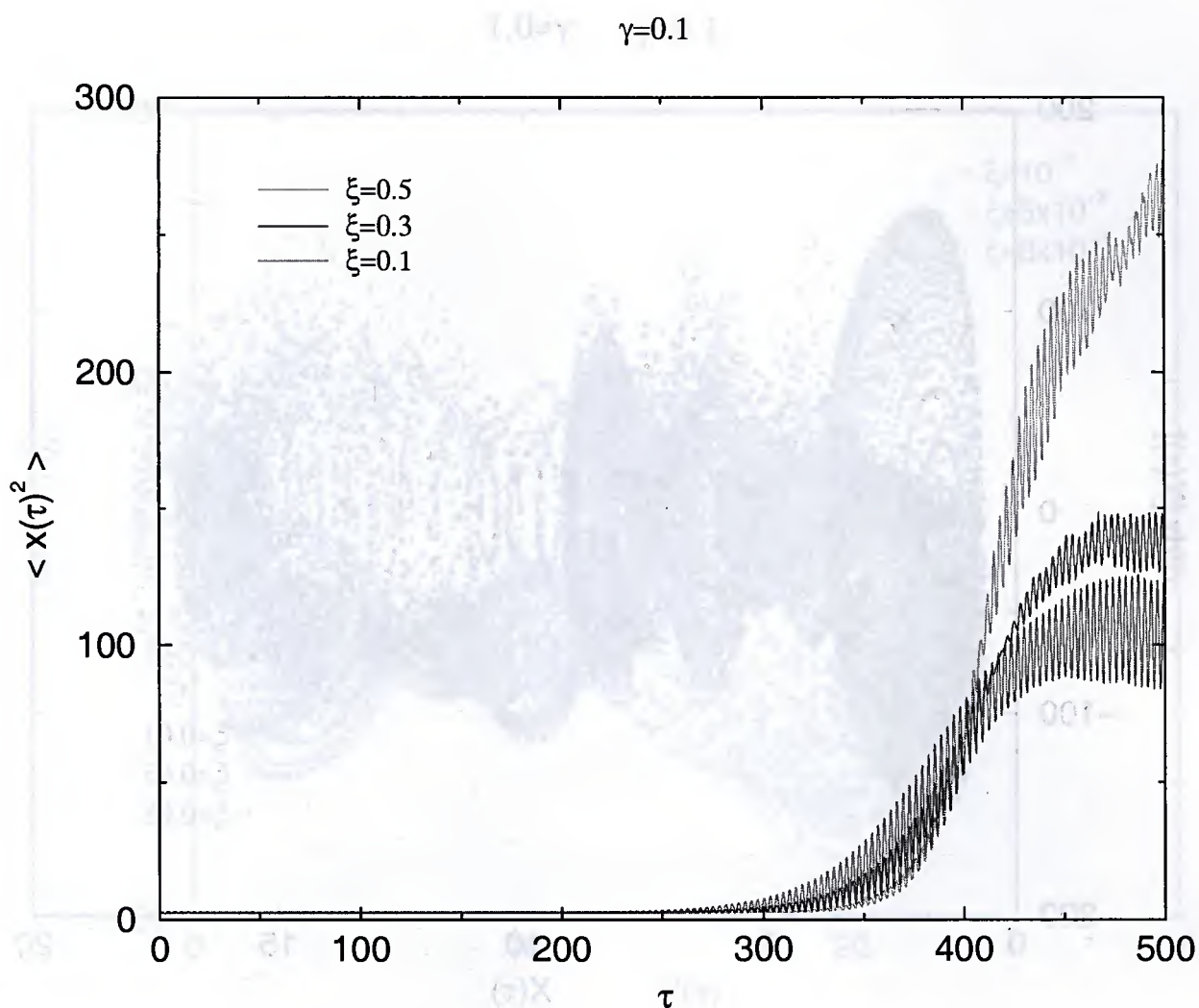


Figura 5.27: Raio quadrático médio  $X(\tau)^2$  como função do tempo para  $\tau = \omega t \leq 500$ ,  $\gamma = 10^{-1}$  e um conjunto de valores de  $\xi$ .

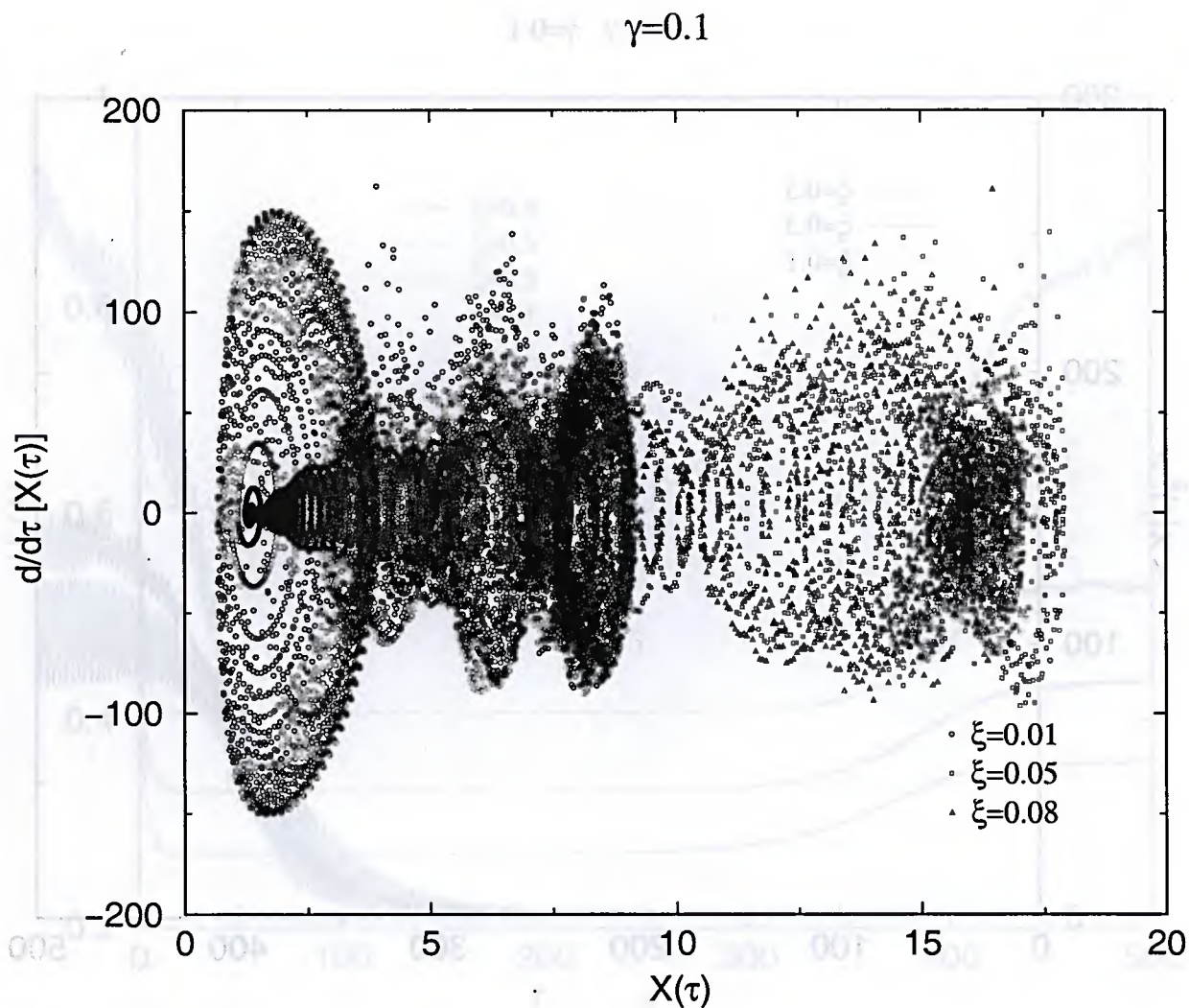


Figura 5.28: Espaço de fase para o raio quadrático médio  $X(\tau) \equiv \sqrt{\langle x^2(\tau) \rangle}$  (adimensional), para um conjunto de valores menores do parâmetro de dissipação  $\xi$ , fixado  $\gamma = 10^{-1}$ .

$$\gamma=0.1$$

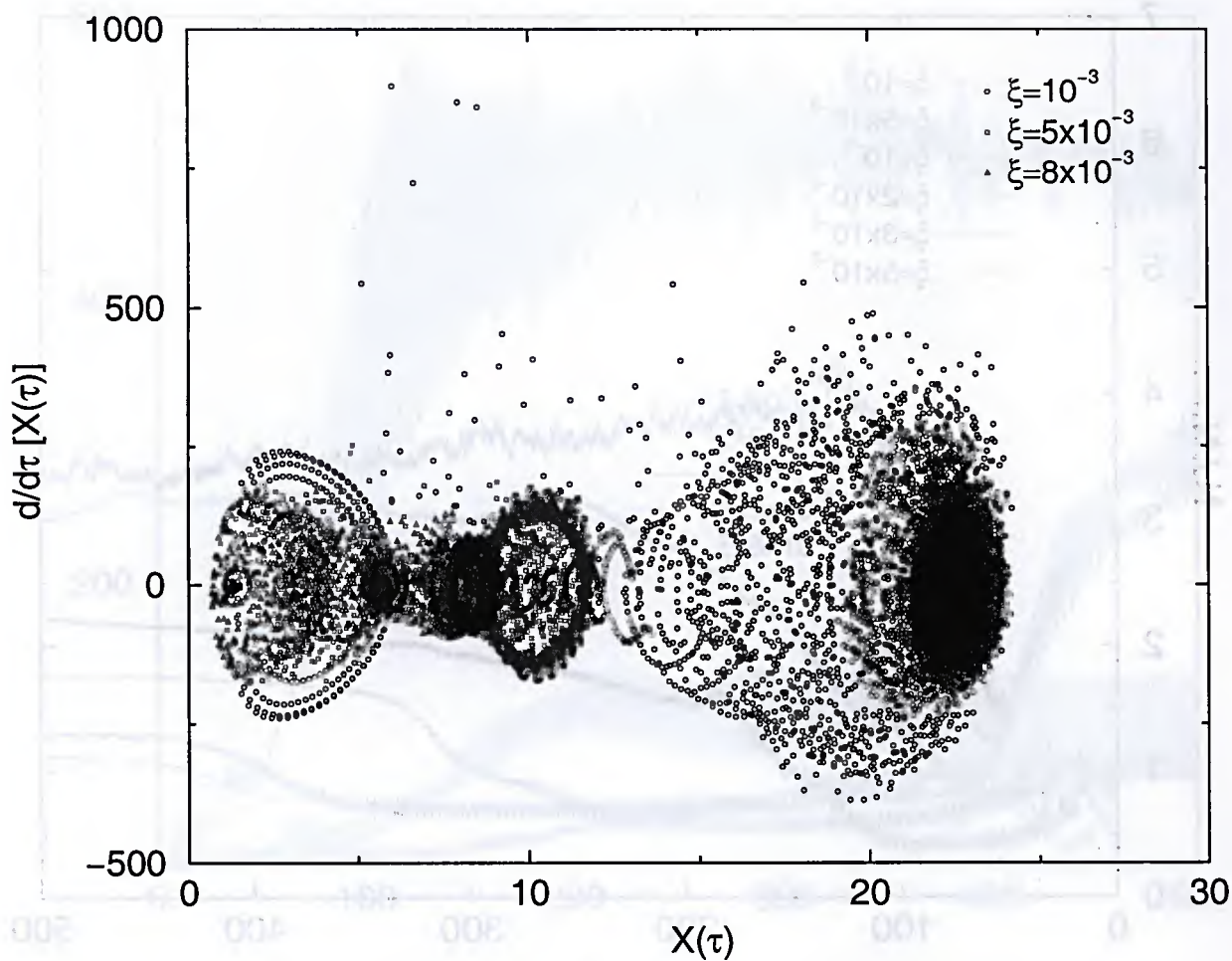


Figura 5.29: Espaço de fase para o raio quadrático médio  $X(\tau) \equiv \sqrt{\langle x^2(\tau) \rangle}$  (adimensional), para um conjunto de valores menores do parâmetro de dissipação  $\xi$ , fixado  $\gamma = 10^{-1}$ .

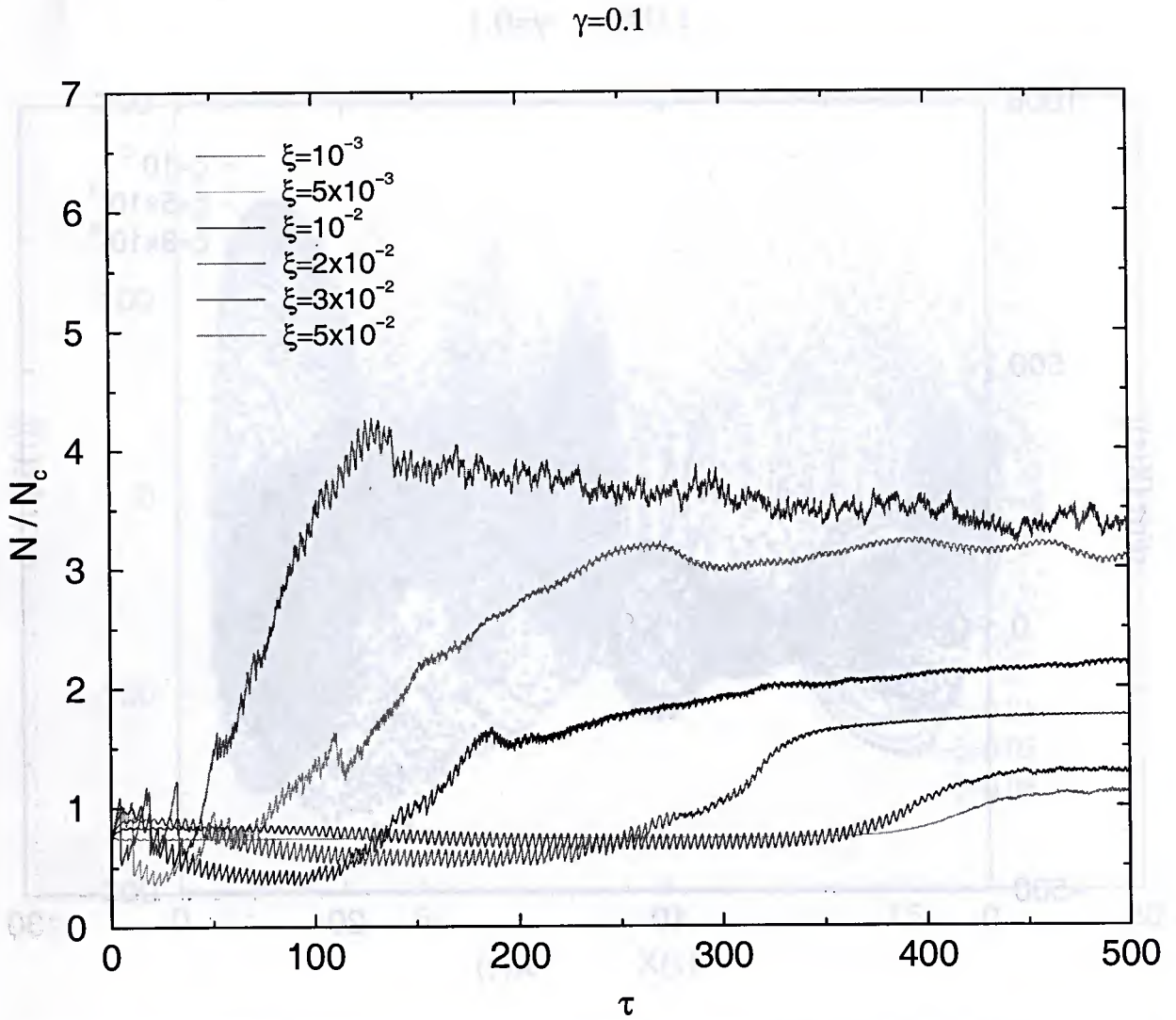


Figura 5.30: Número de átomos como função do tempo para  $\tau = \omega t \leq 500$ ,  $\gamma = 0,1$  e um conjunto de valores menores de  $\xi$ .

$\gamma=0.1$

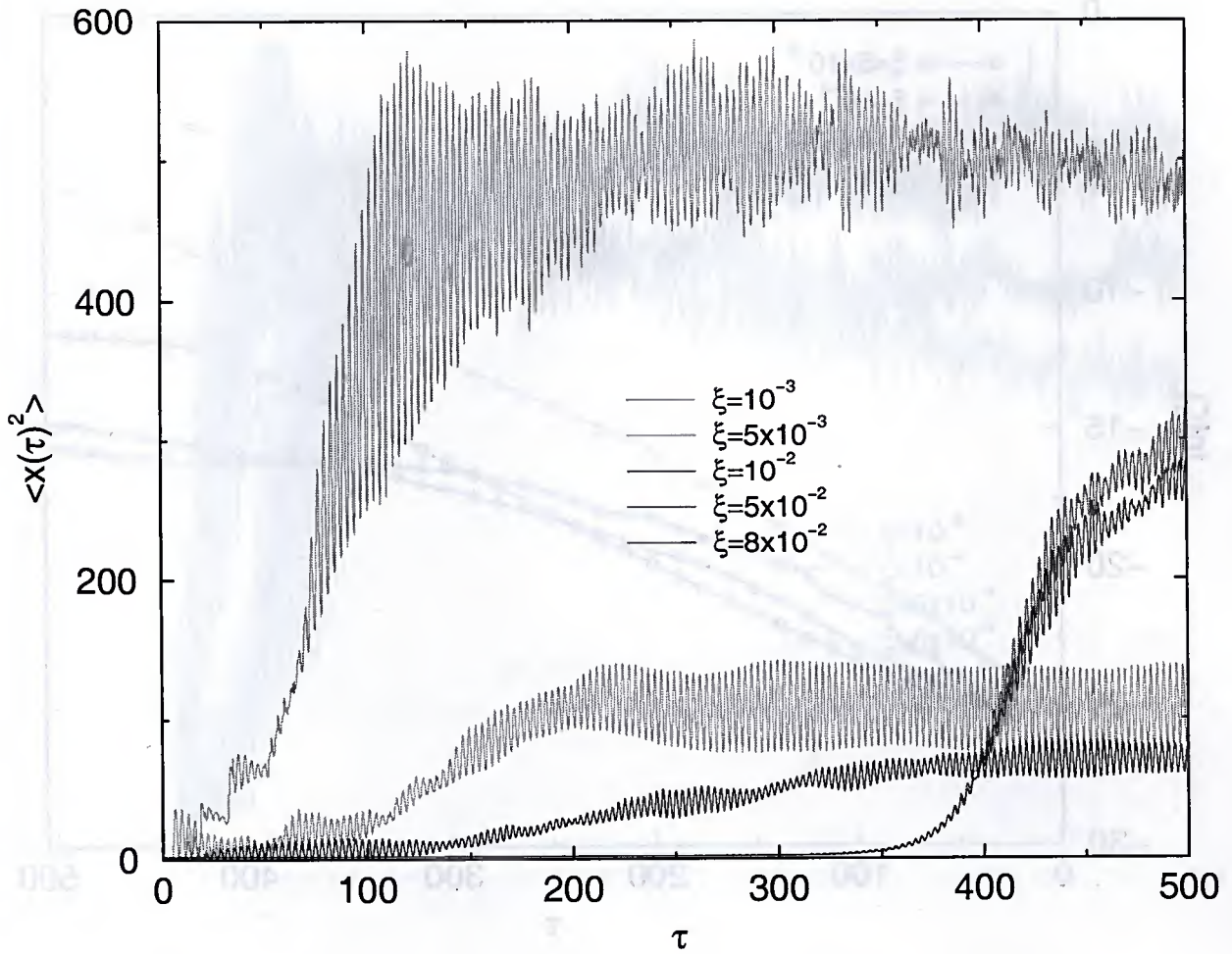


Figura 5.31: Raio quadrático médio  $X(\tau)^2$  como função do tempo para  $\tau = \omega t \leq 500$ ,  $\xi = 10^{-1}$  e um conjunto de valores menores de  $\xi$ .

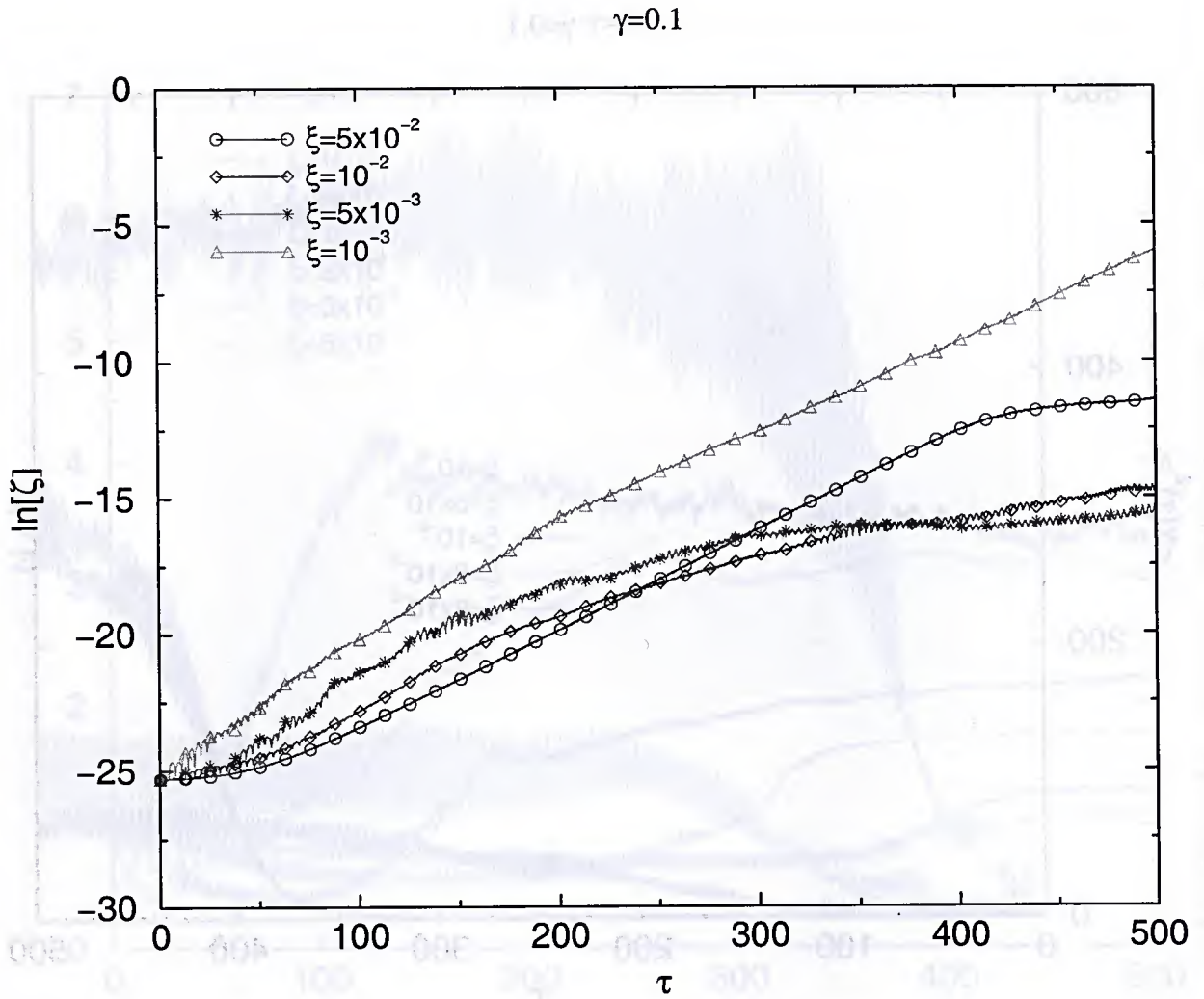


Figura 5.32: Gráfico logarítmico da separação entre dois estados vizinhos, como dado pela Eq. (5.10), para valores menores do parâmetro  $\xi$ , com  $\gamma = 0, 1$ .

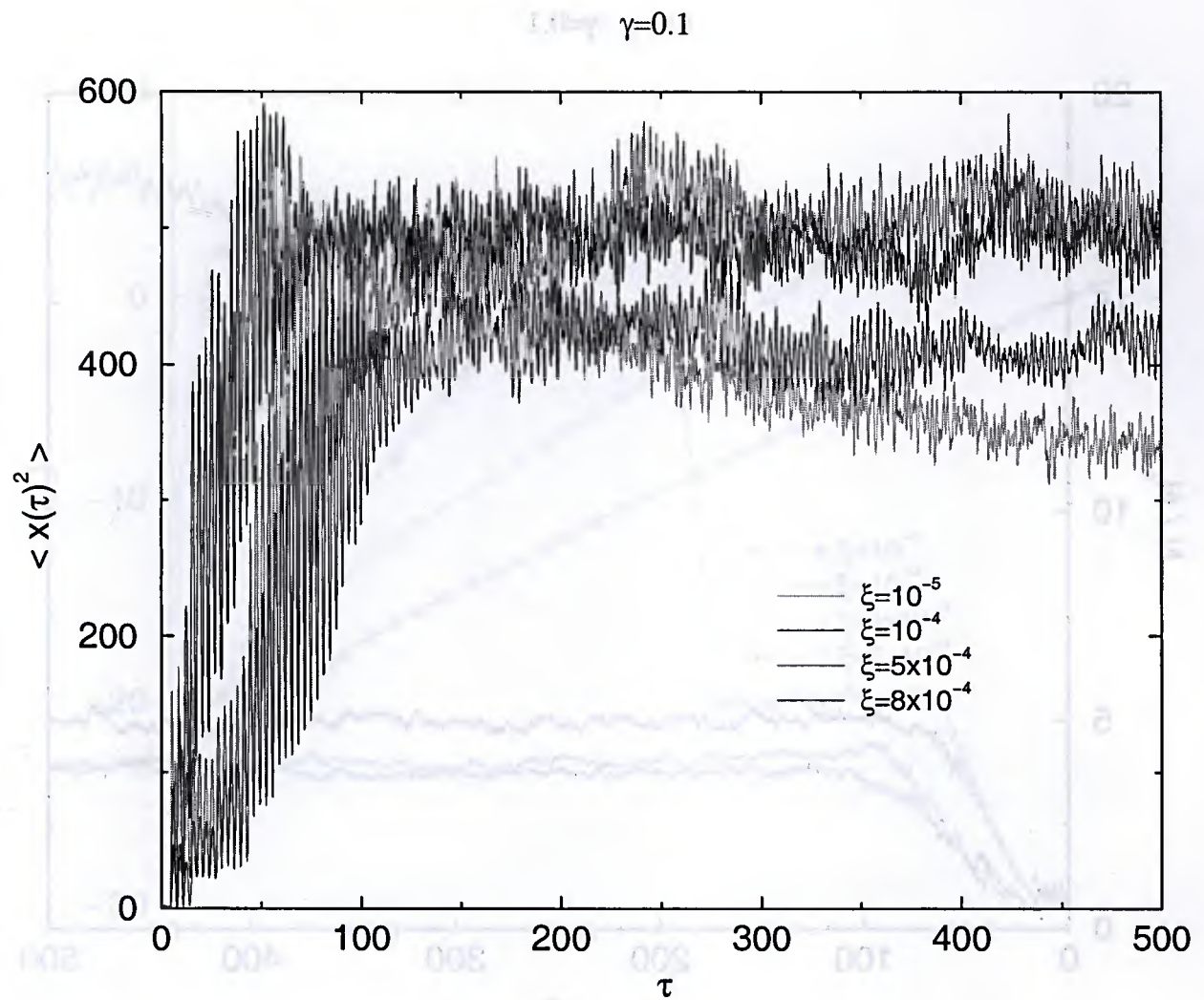


Figura 5.33: Raio quadrático médio  $X(\tau)^2$  como função do tempo para  $\tau = \omega t \leq 500$ ,  $\gamma = 10^{-1}$  e um conjunto de valores muito menores de  $\xi$ .

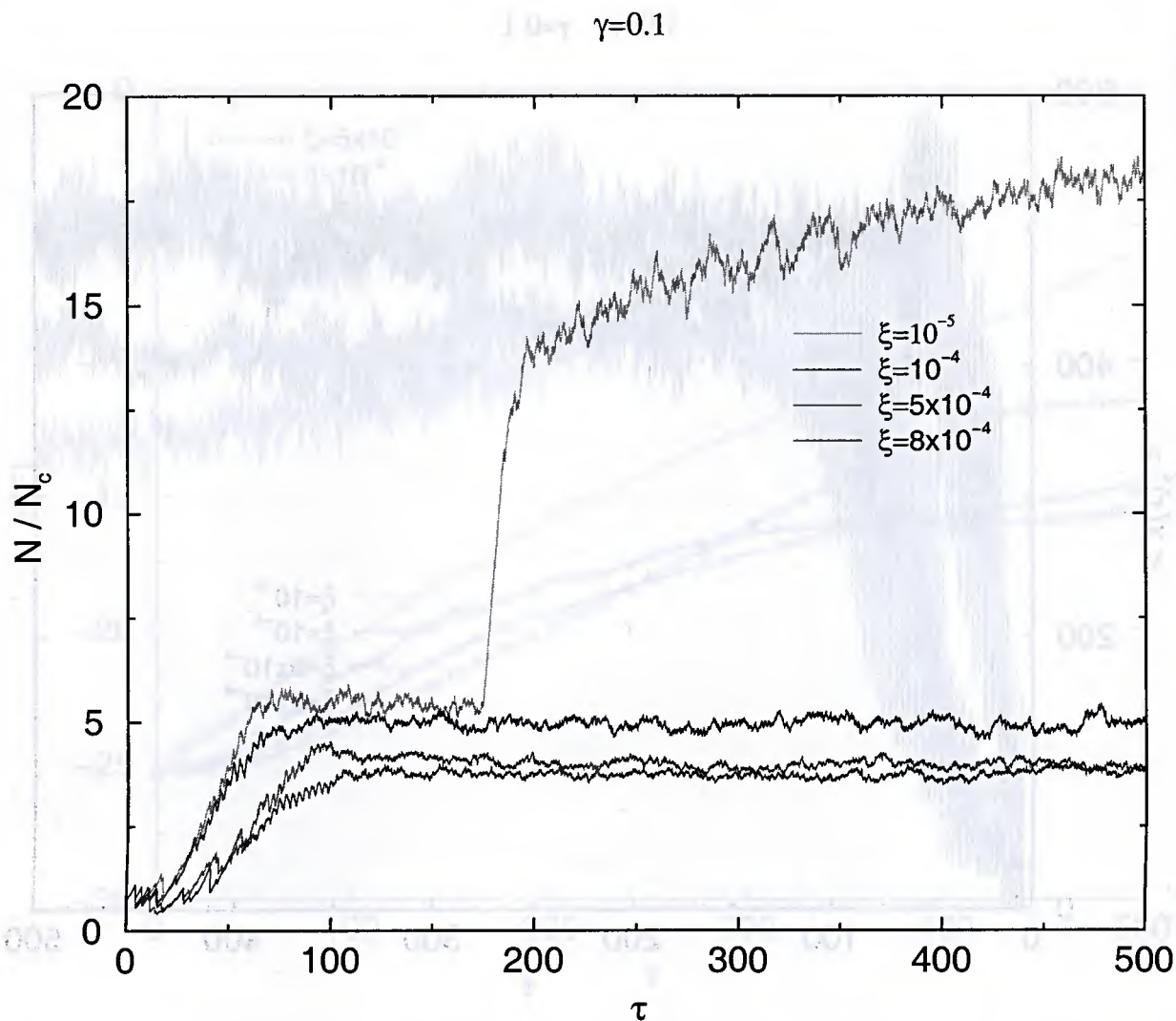


Figura 5.34: Número de átomos como função do tempo para  $\tau = \omega t \leq 500$ ,  $\gamma = 10^{-1}$  e um conjunto de valores muito menores de  $\xi$ .

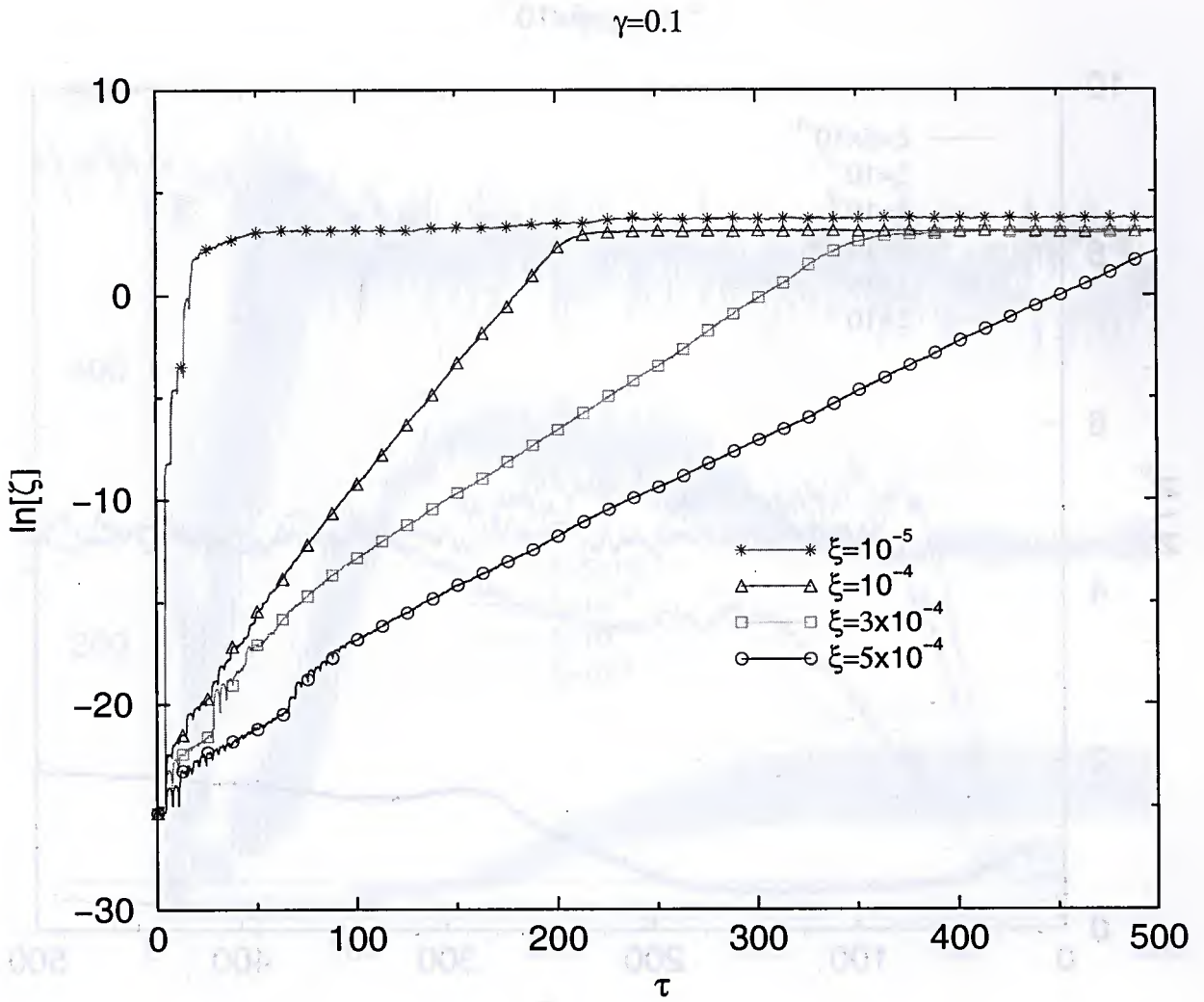


Figura 5.35: Gráfico logarítmico da separação entre dois estados vizinhos, como dado pela Eq. (5.10), para valores muito menores do parâmetro  $\xi$ , com  $\gamma = 10^{-1}$ .

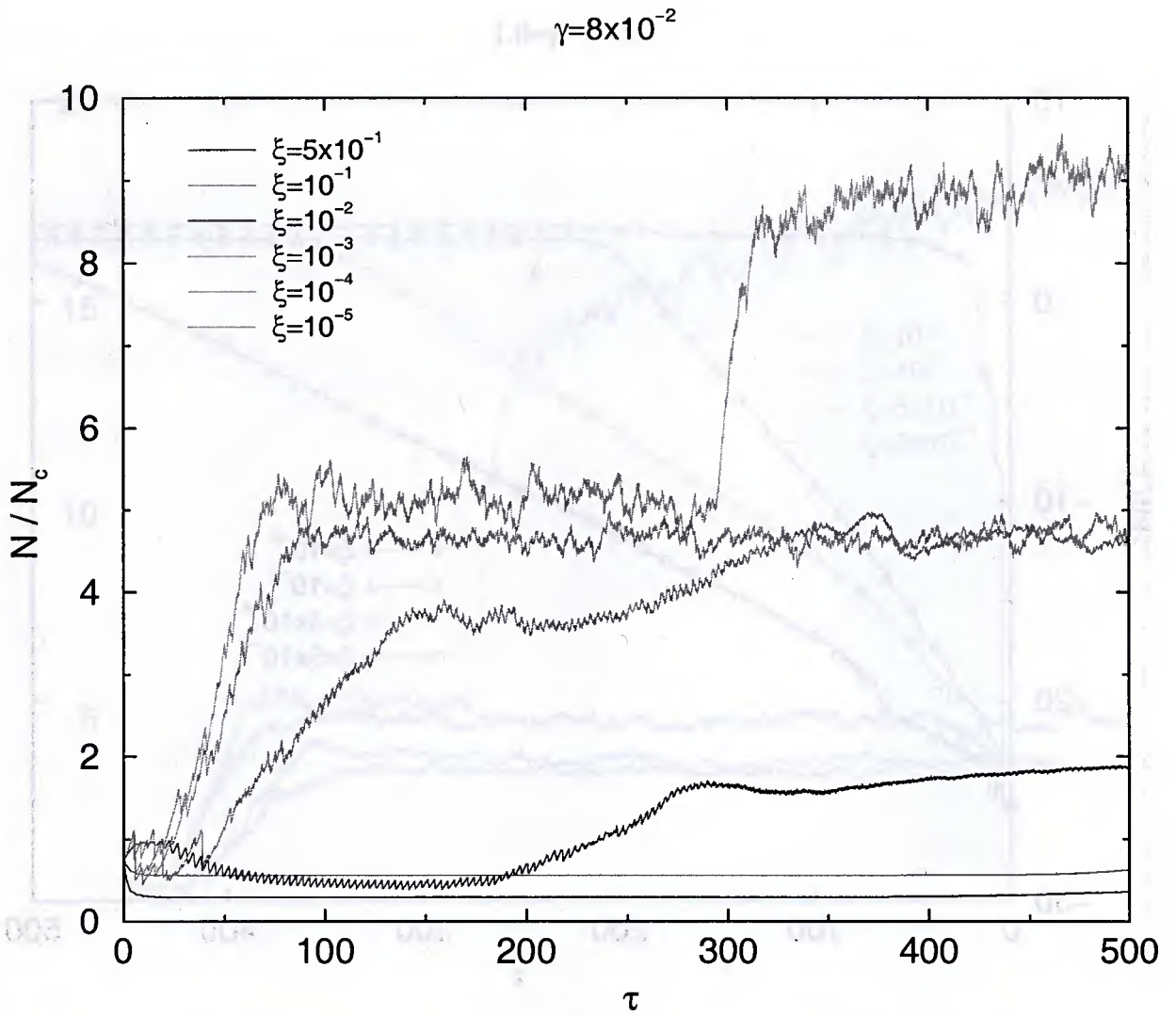


Figura 5.36: Número de átomos como função do tempo para  $\tau = \omega t \leq 500$ ,  $\gamma = 8 \times 10^{-2}$  e um conjunto de valores de  $\xi$ .

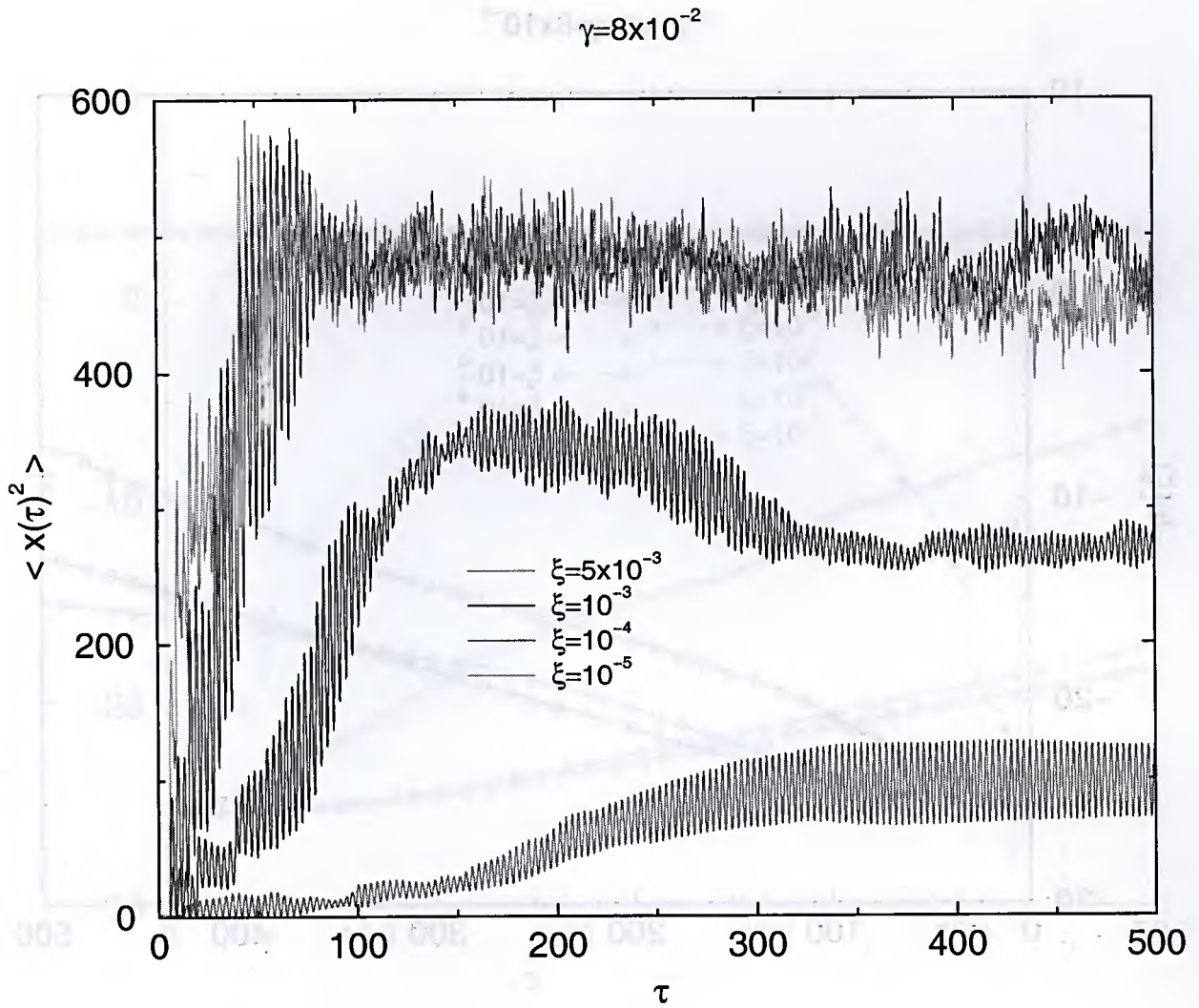


Figura 5.37: Raio quadrático médio  $X(\tau)^2$  como função do tempo para  $\tau = \omega t \leq 500$ ,  $\gamma = 8 \times 10^{-2}$  e um conjunto de valores de  $\xi$ .

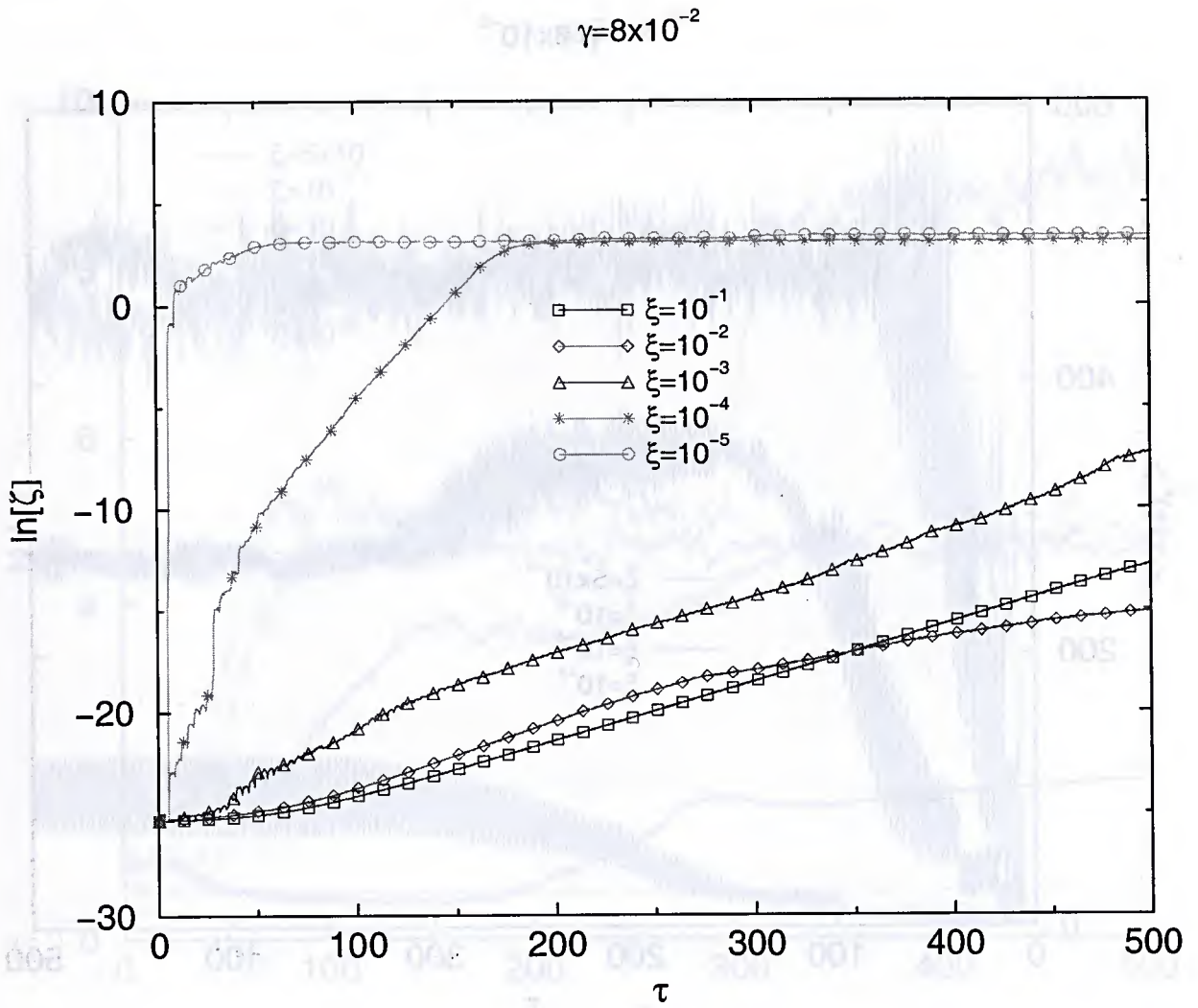


Figura 5.38: Gráfico logarítmico da separação entre dois estados vizinhos, como dado pela Eq. (5.10), para um conjunto de valores de  $\xi$ , com  $\gamma = 8 \times 10^{-2}$ .

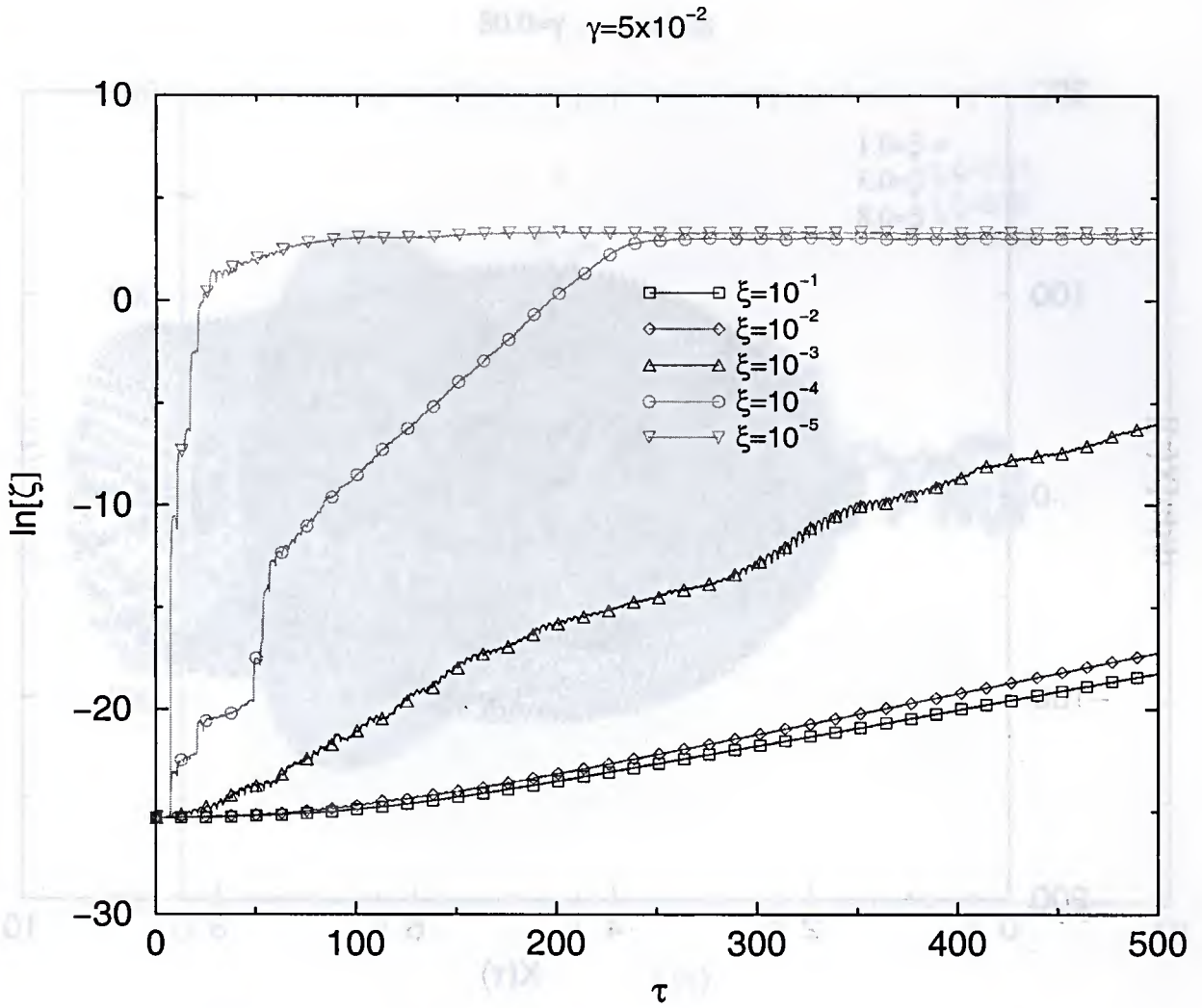


Figura 5.39: Gráfico logarítmico da separação entre dois estados vizinhos, como dado pela Eq. (5.10), para um conjunto de valores de  $\xi$ , com  $\gamma = 5 \times 10^{-2}$ .

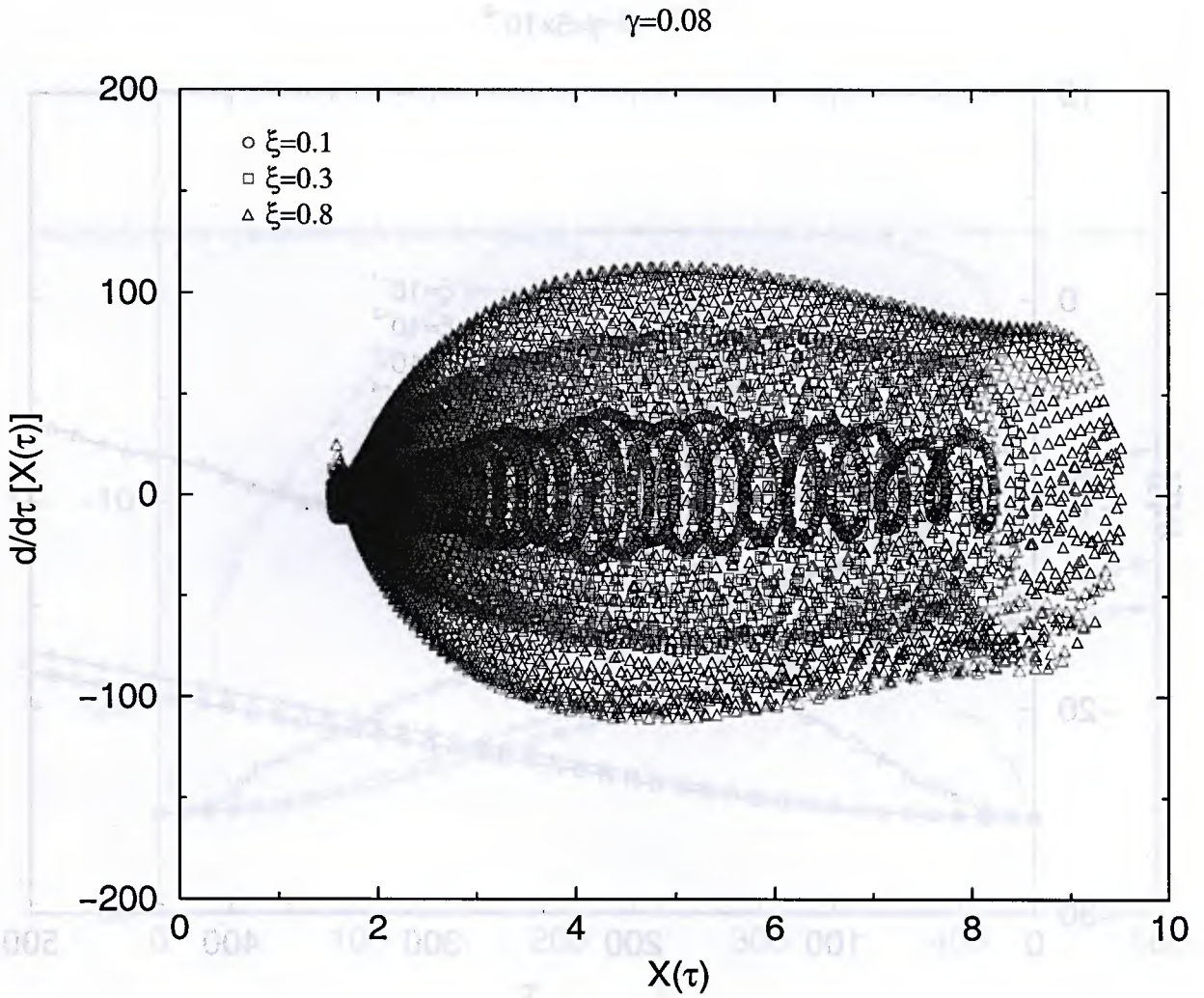


Figura 5.40: Espaço de fase para o raio quadrático médio  $X(\tau) \equiv \sqrt{\langle x^2(\tau) \rangle}$  (adimensional), para alguns valores grandes de  $\xi$  e  $\gamma = 8 \times 10^{-2}$ .

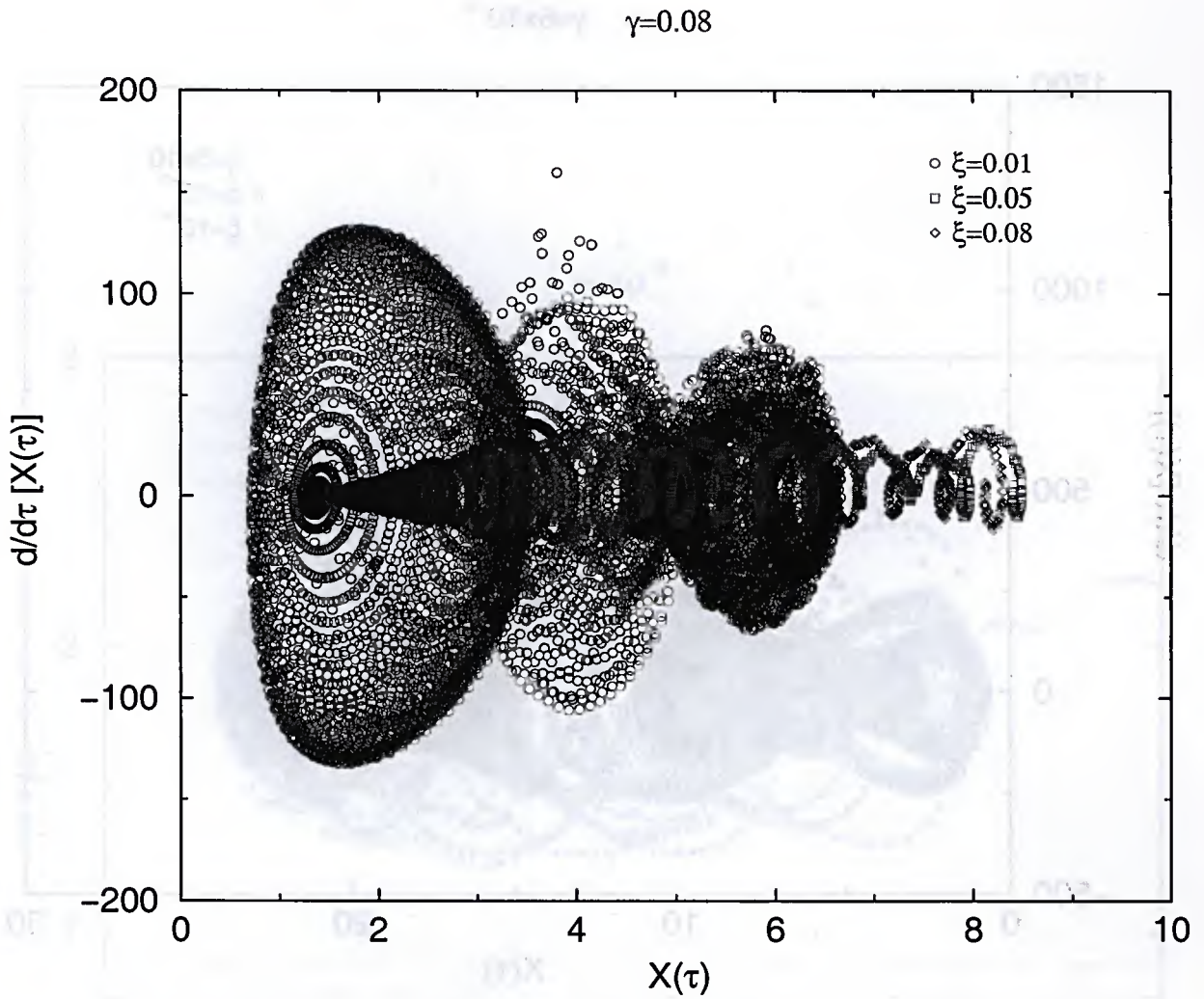


Figura 5.41: Espaço de fase para o raio quadrático médio  $X(\tau) \equiv \sqrt{\langle x^2(\tau) \rangle}$  (adimensional), para alguns valores menores de  $\xi$  e  $\gamma = 8 \times 10^{-2}$ .

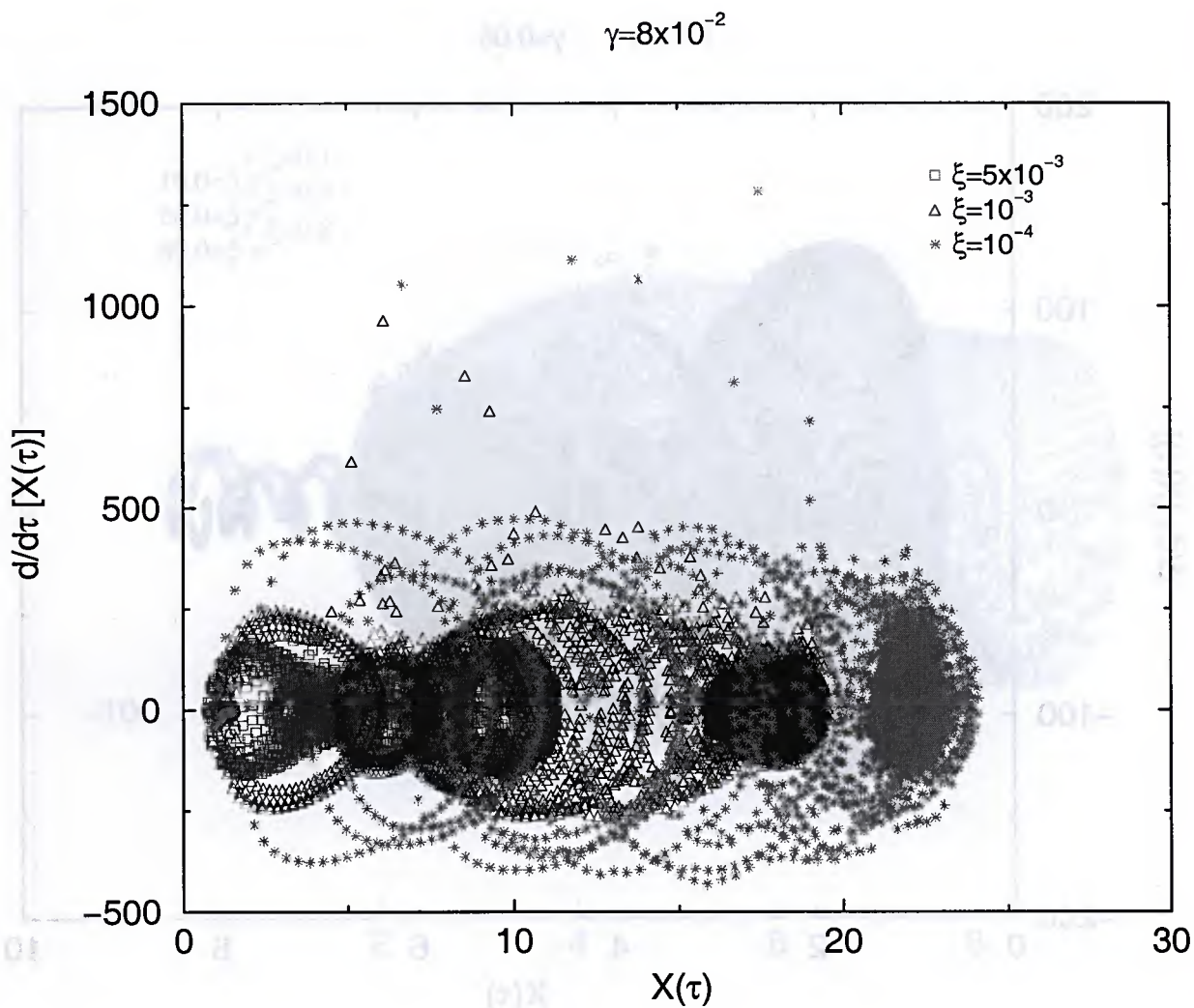


Figura 5.42: Espaço de fase para o raio quadrático médio  $X(\tau) \equiv \sqrt{\langle x^2(\tau) \rangle}$  (adimensional), para alguns valores muito menores de  $\xi$  e  $\gamma = 8 \times 10^{-2}$ .

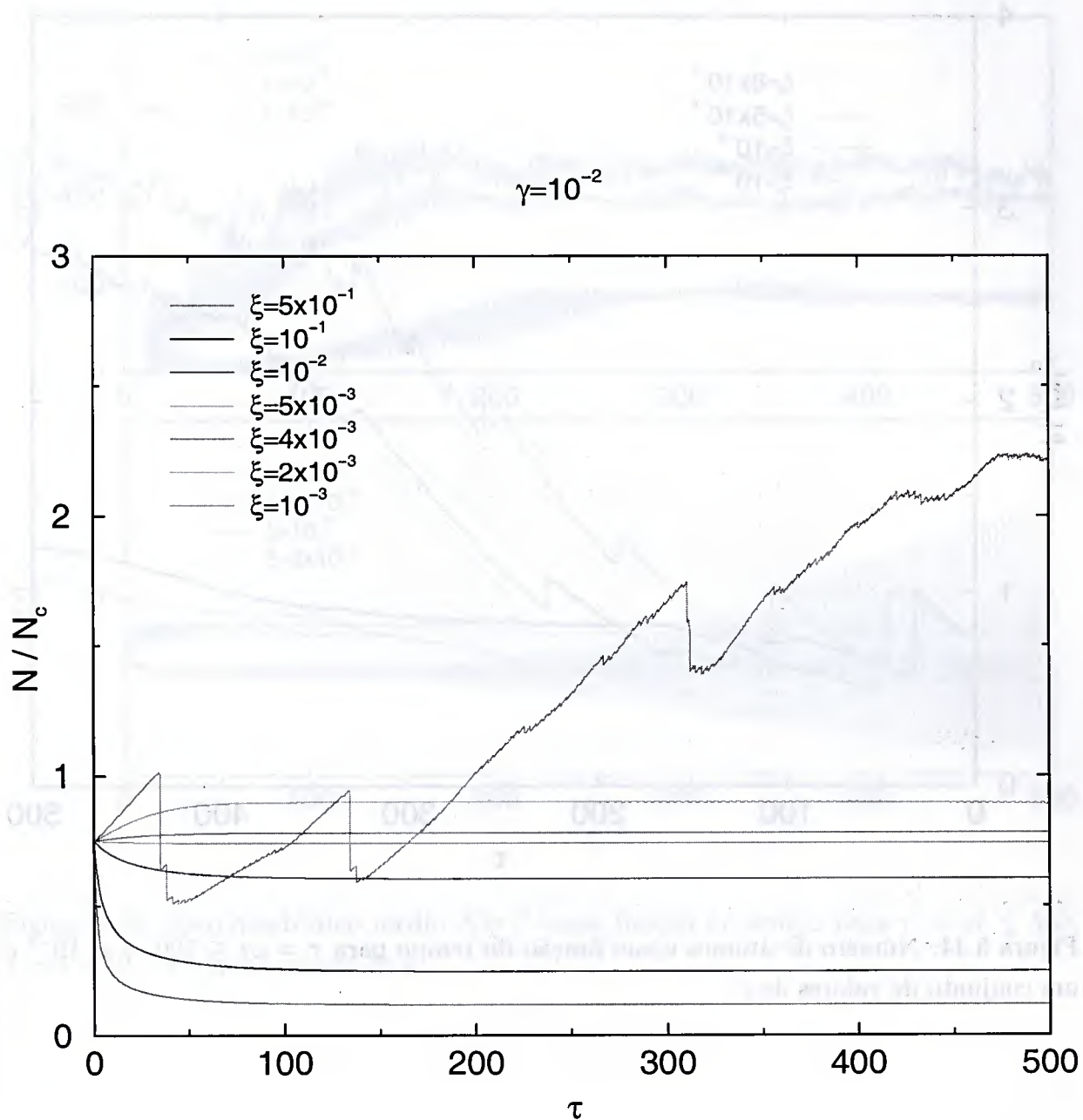


Figura 5.43: Número de átomos como função do tempo para  $\tau = \omega t \leq 500$ ,  $\gamma = 10^{-2}$  e um conjunto de valores de  $\xi$ .

$$\gamma = 10^{-2}$$

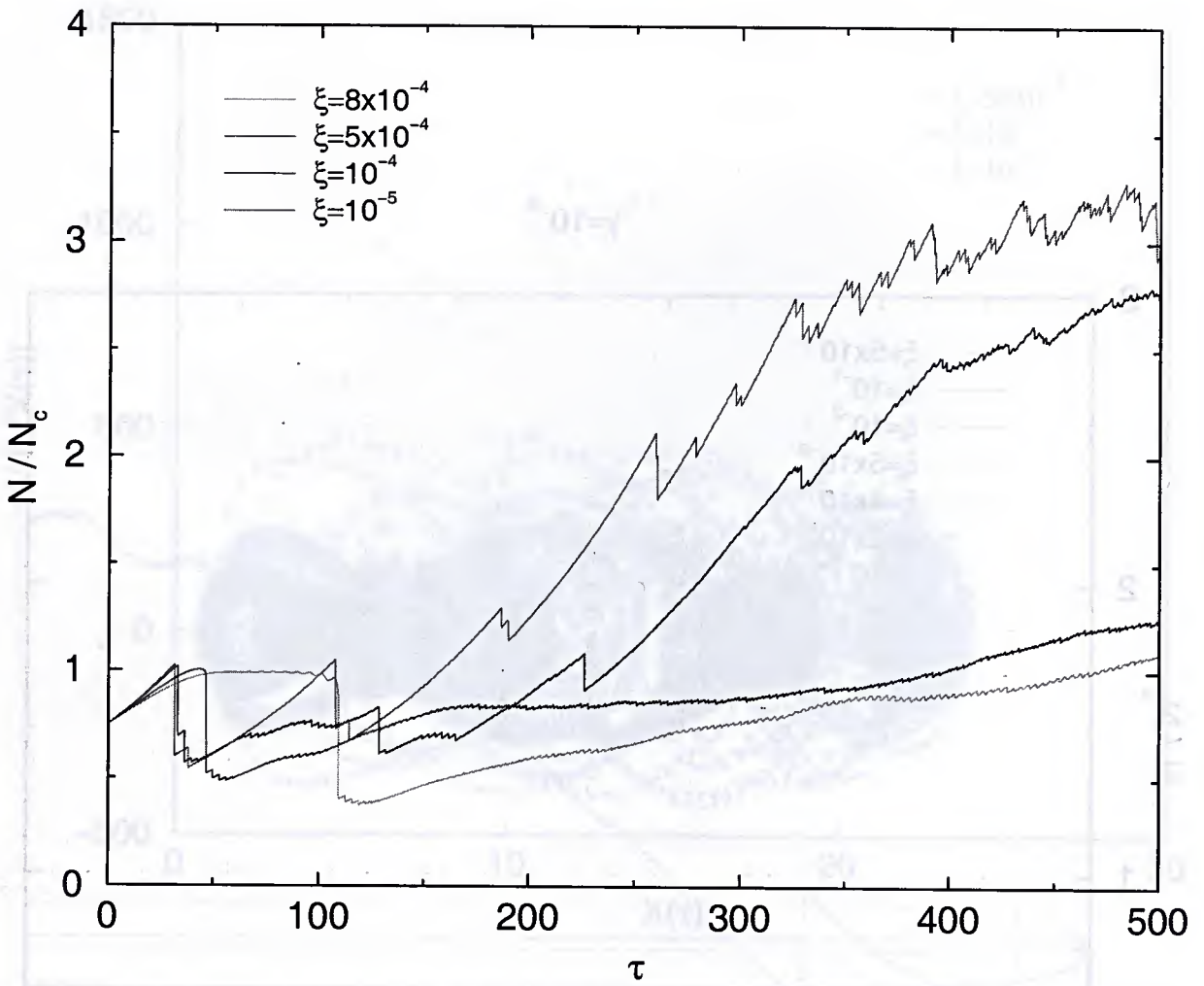


Figura 5.44: Número de átomos como função do tempo para  $\tau = \omega t \leq 500$ ,  $\gamma = 10^{-2}$  e um conjunto de valores de  $\xi$ .

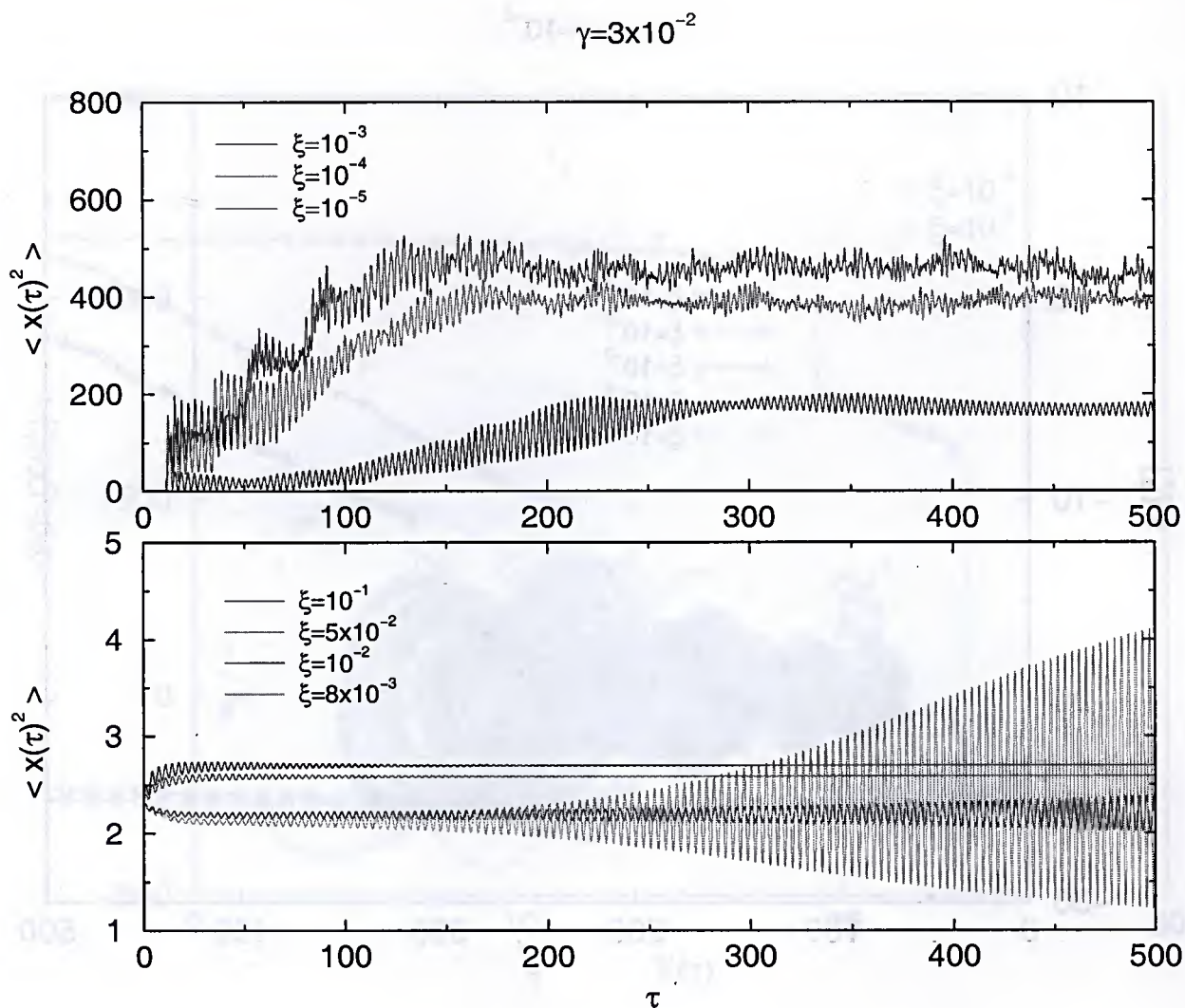


Figura 5.45: Raio quadrático médio  $X(\tau)^2$  como função do tempo para  $\tau = \omega t \leq 500$ ,  $\gamma = 3 \times 10^{-2}$  e alguns valores de  $\xi$ .

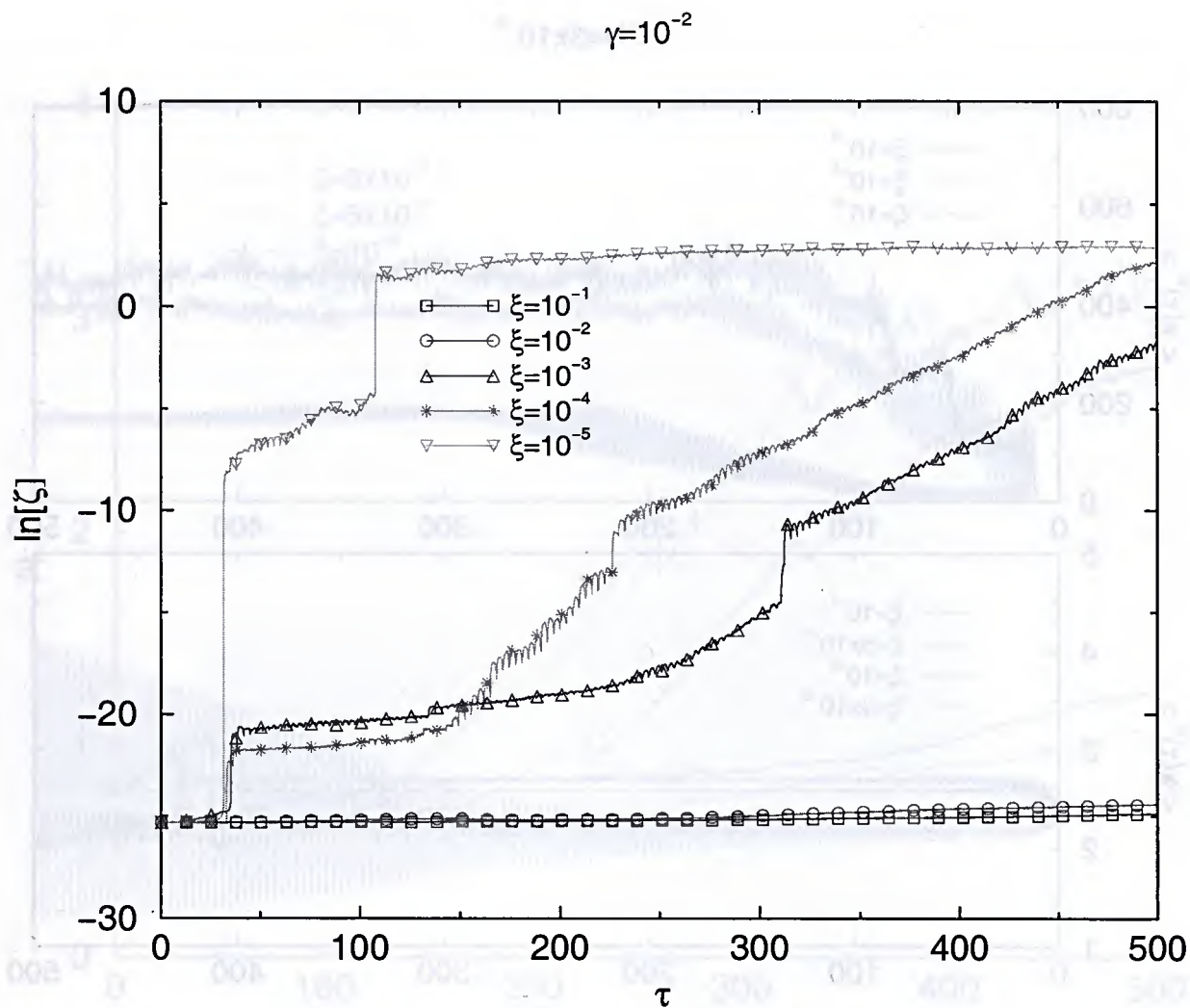


Figura 5.46: Gráfico logarítmico da separação entre dois estados vizinhos, como dado pela Eq. (5.10), para um conjunto de valores de  $\xi$ , com  $\gamma = 10^{-2}$ .

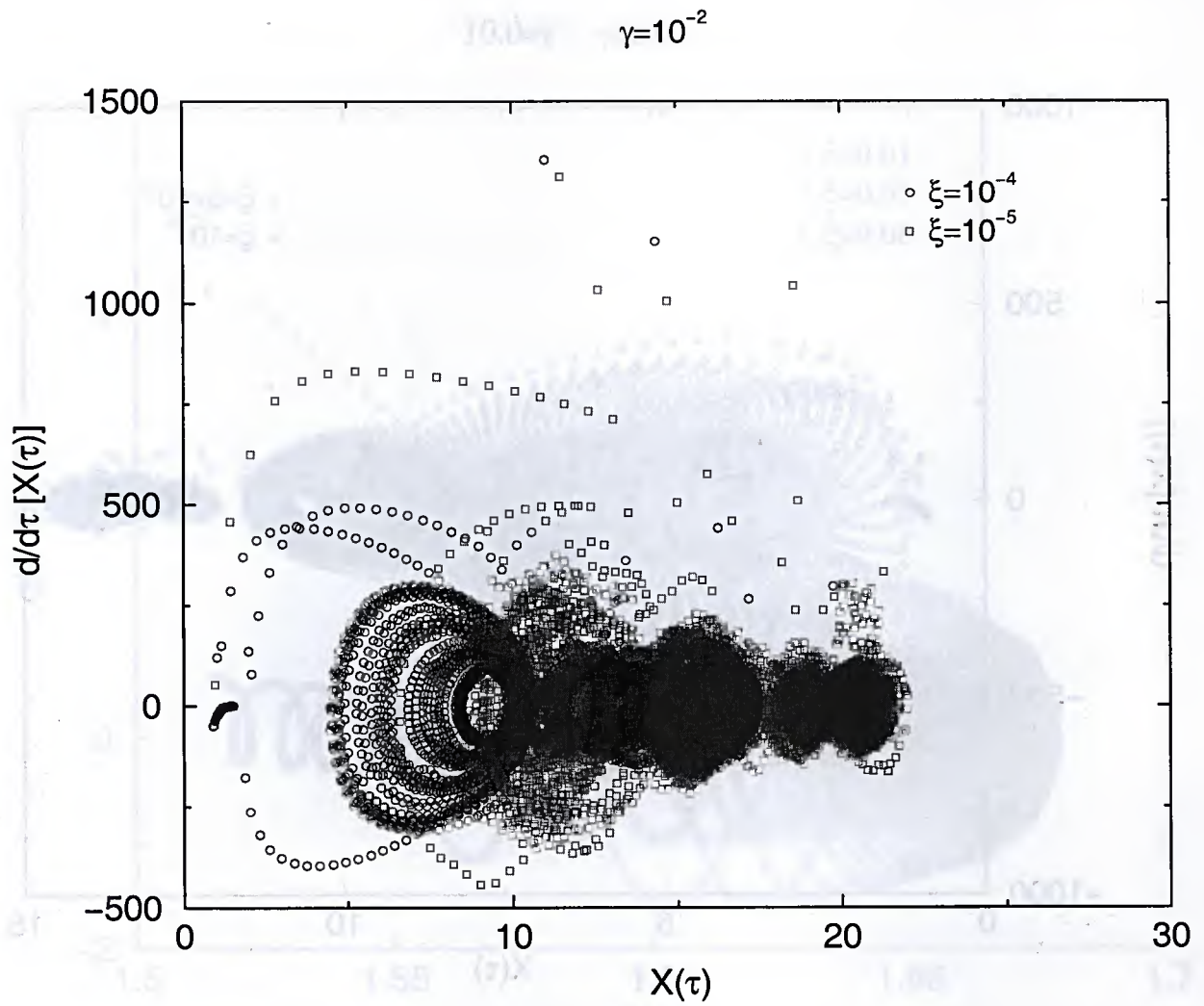


Figura 5.47: Espaço de fase para o raio quadrático médio  $X(\tau) \equiv \sqrt{\langle x^2(\tau) \rangle}$  (adimensional), para valores muito pequenos de  $\xi$  e  $\gamma = 10^{-2}$ .

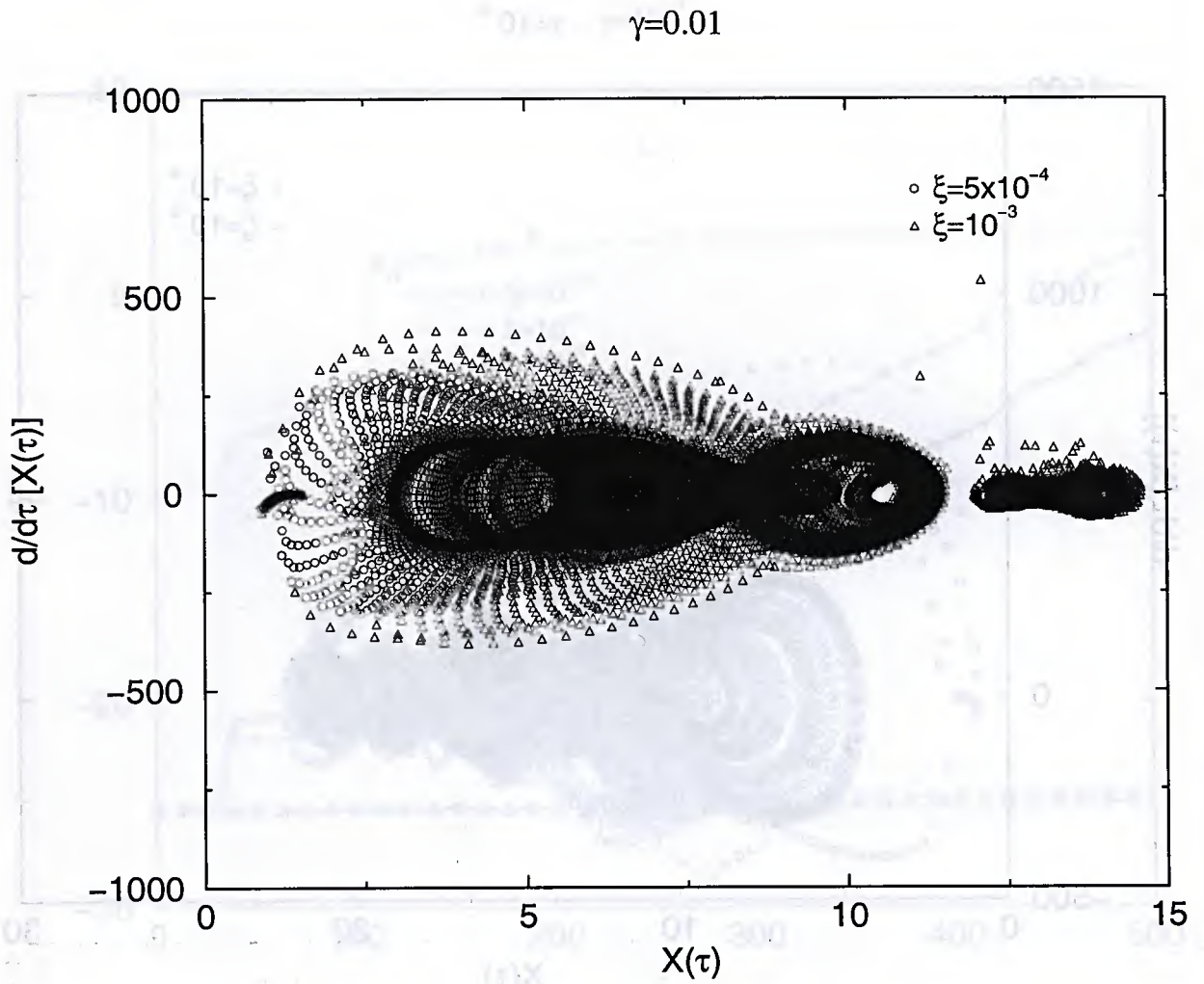


Figura 5.48: Espaço de fase para o raio quadrático médio  $X(\tau) \equiv \sqrt{\langle x^2(\tau) \rangle}$  (adimensional), para valores maiores de  $\xi$  e  $\gamma = 10^{-2}$ .

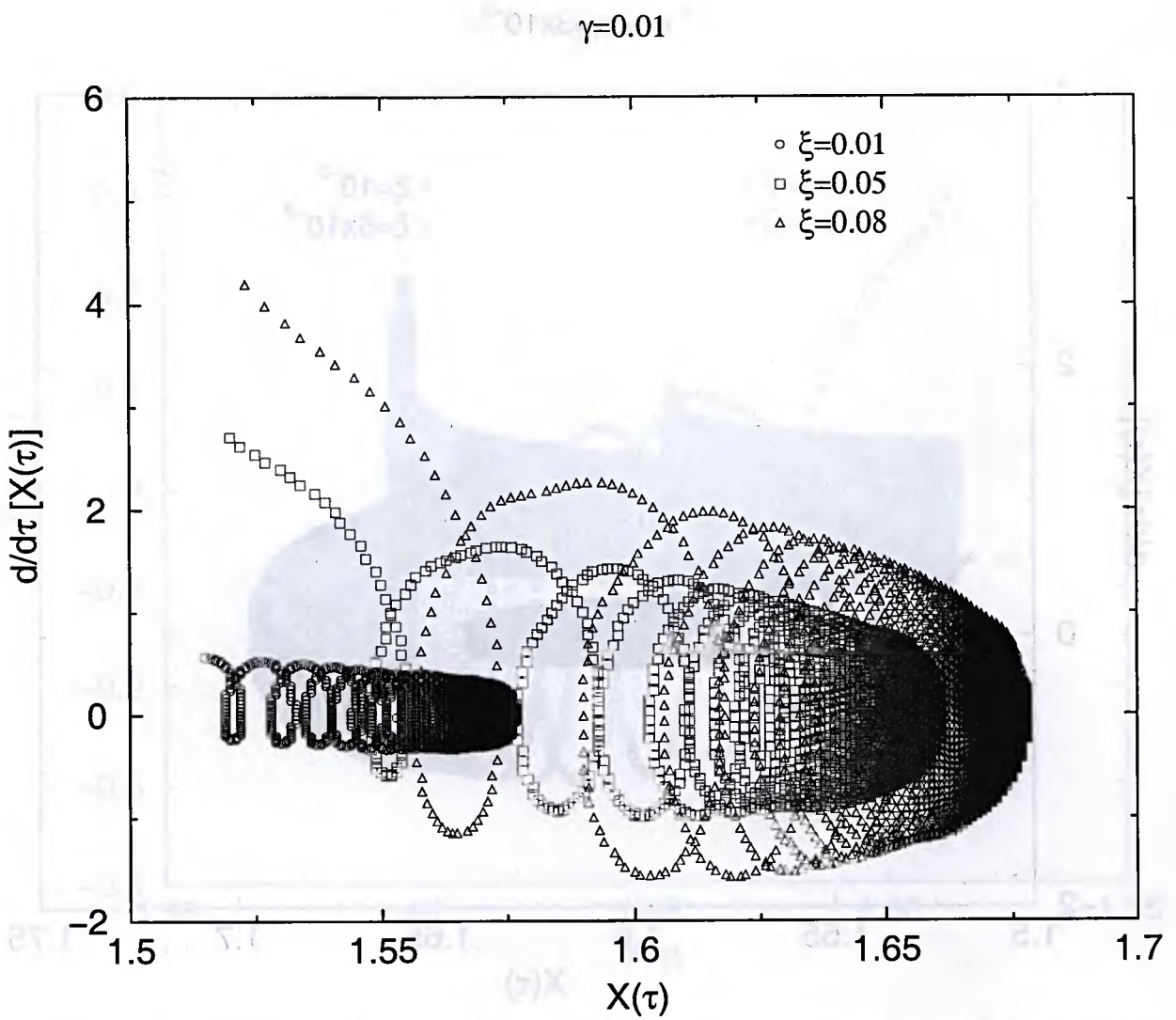


Figura 5.49: Espaço de fase para o raio quadrático médio  $X(\tau) \equiv \sqrt{\langle x^2(\tau) \rangle}$  (adimensional), para alguns valores de  $\xi$  da ordem de  $\gamma = 10^{-2}$ .

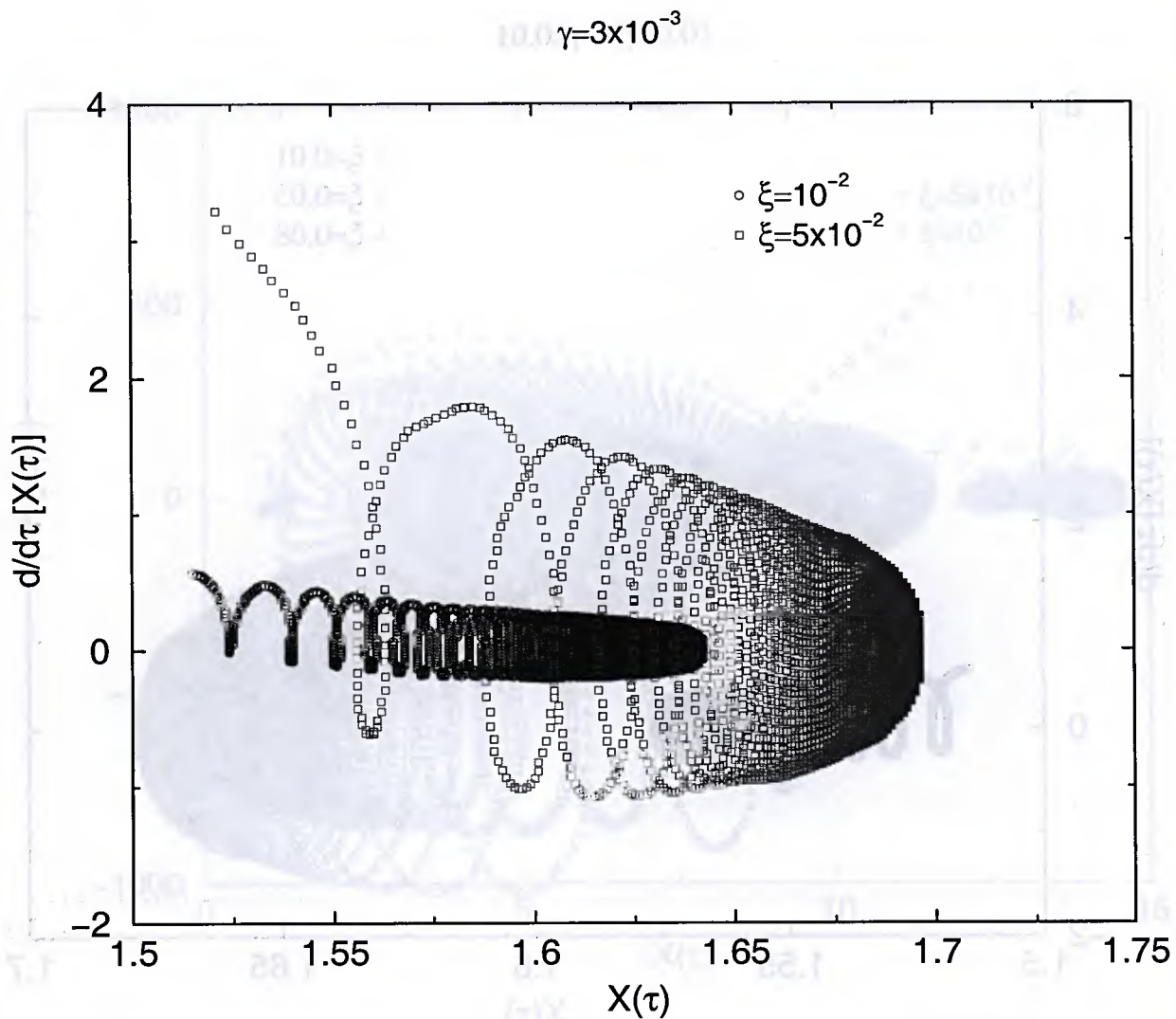


Figura 5.50: Espaço de fase para o raio quadrático médio  $X(\tau) \equiv \sqrt{\langle x^2(\tau) \rangle}$  (adimensional), para alguns valores de  $\xi$  e  $\gamma = 3 \times 10^{-3}$ .

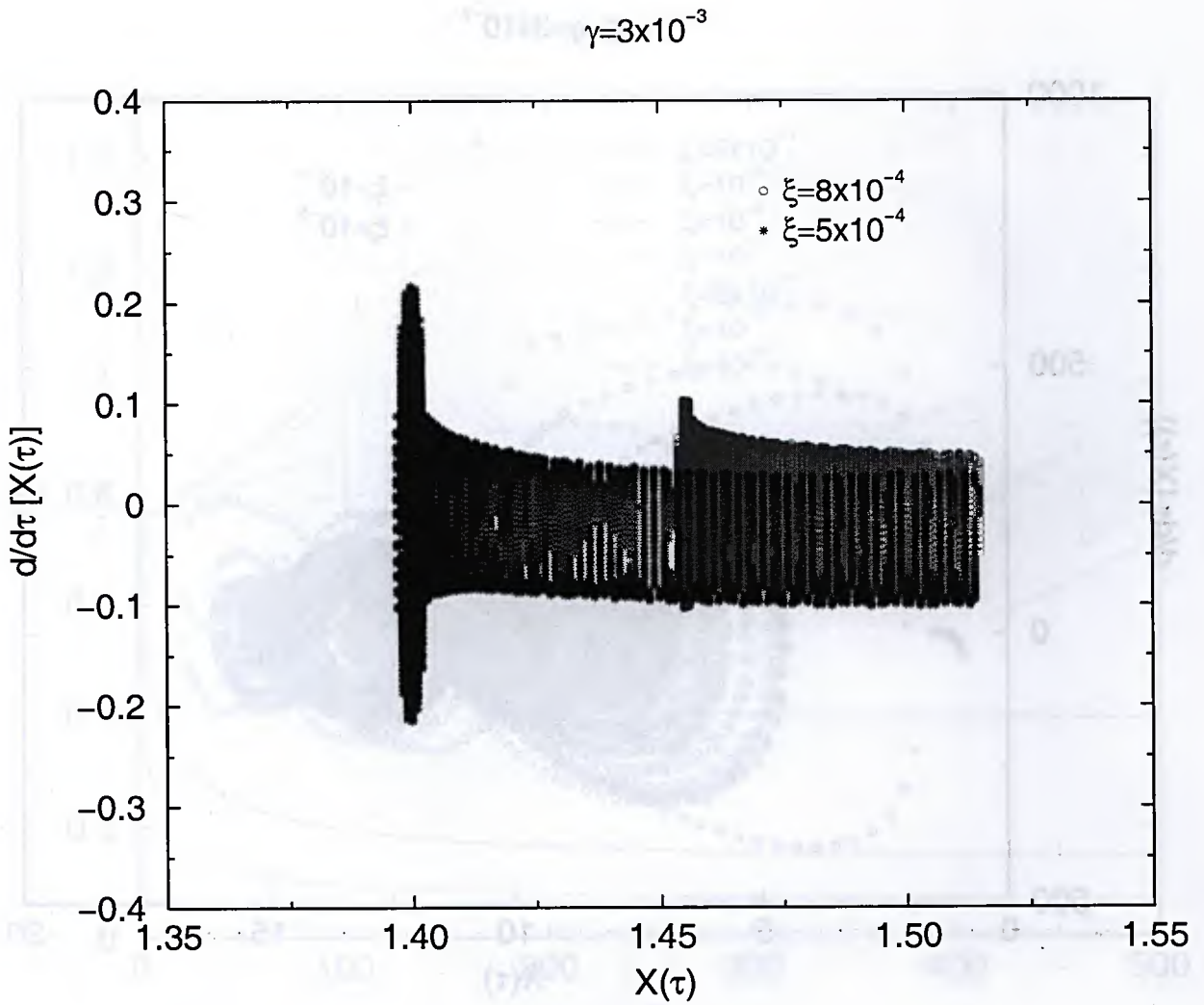


Figura 5.51: Espaço de fase para o raio quadrático médio  $X(\tau) \equiv \sqrt{\langle x^2(\tau) \rangle}$  (adimensional), para valores menores de  $\xi$  e  $\gamma = 3 \times 10^{-3}$ .

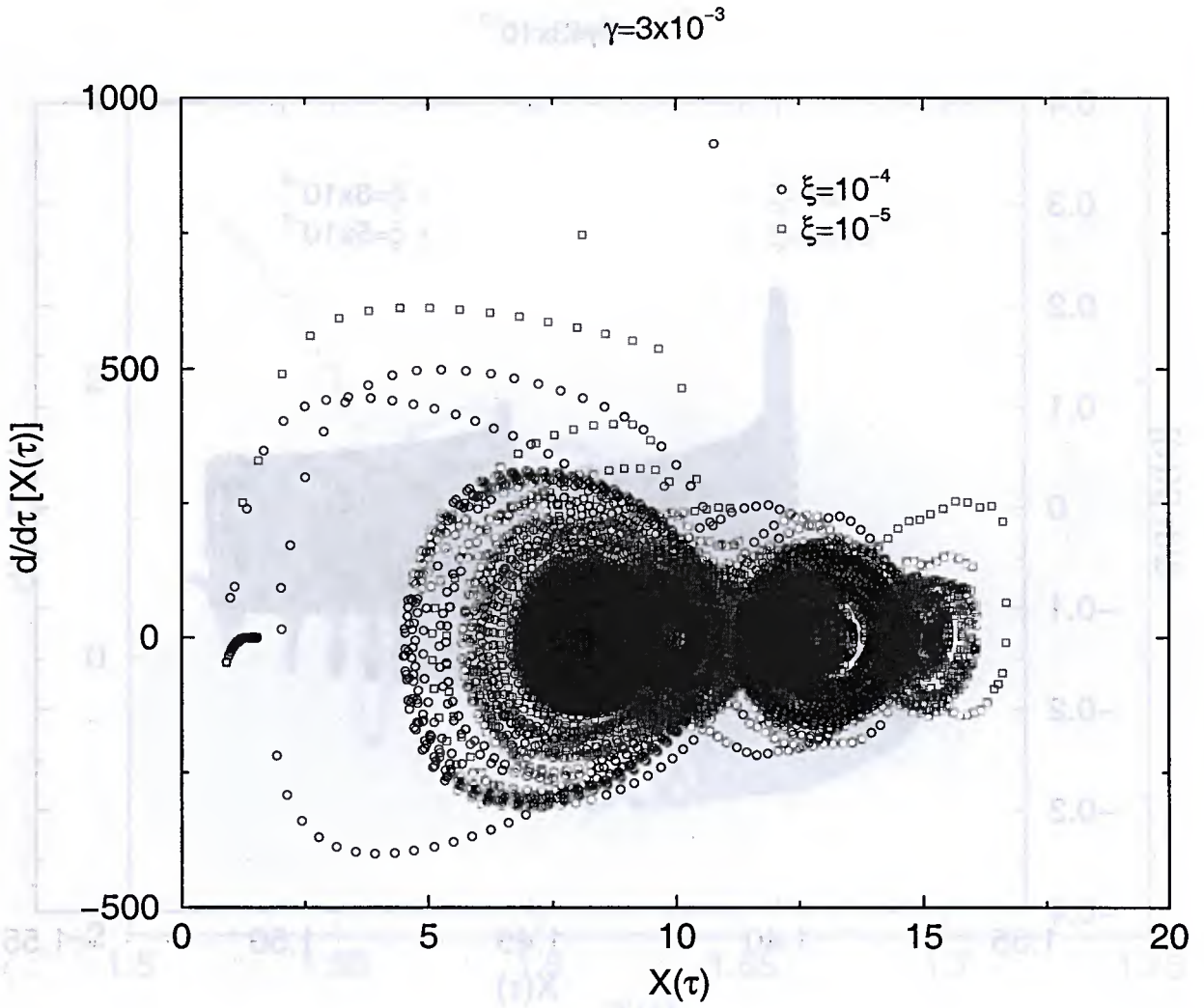


Figura 5.52: Espaço de fase para o raio quadrático médio  $X(\tau) \equiv \sqrt{\langle x^2(\tau) \rangle}$  (adimensional), para valores muito pequenos de  $\xi$  e  $\gamma = 3 \times 10^{-3}$ .

$$\gamma = 3 \times 10^{-3}$$

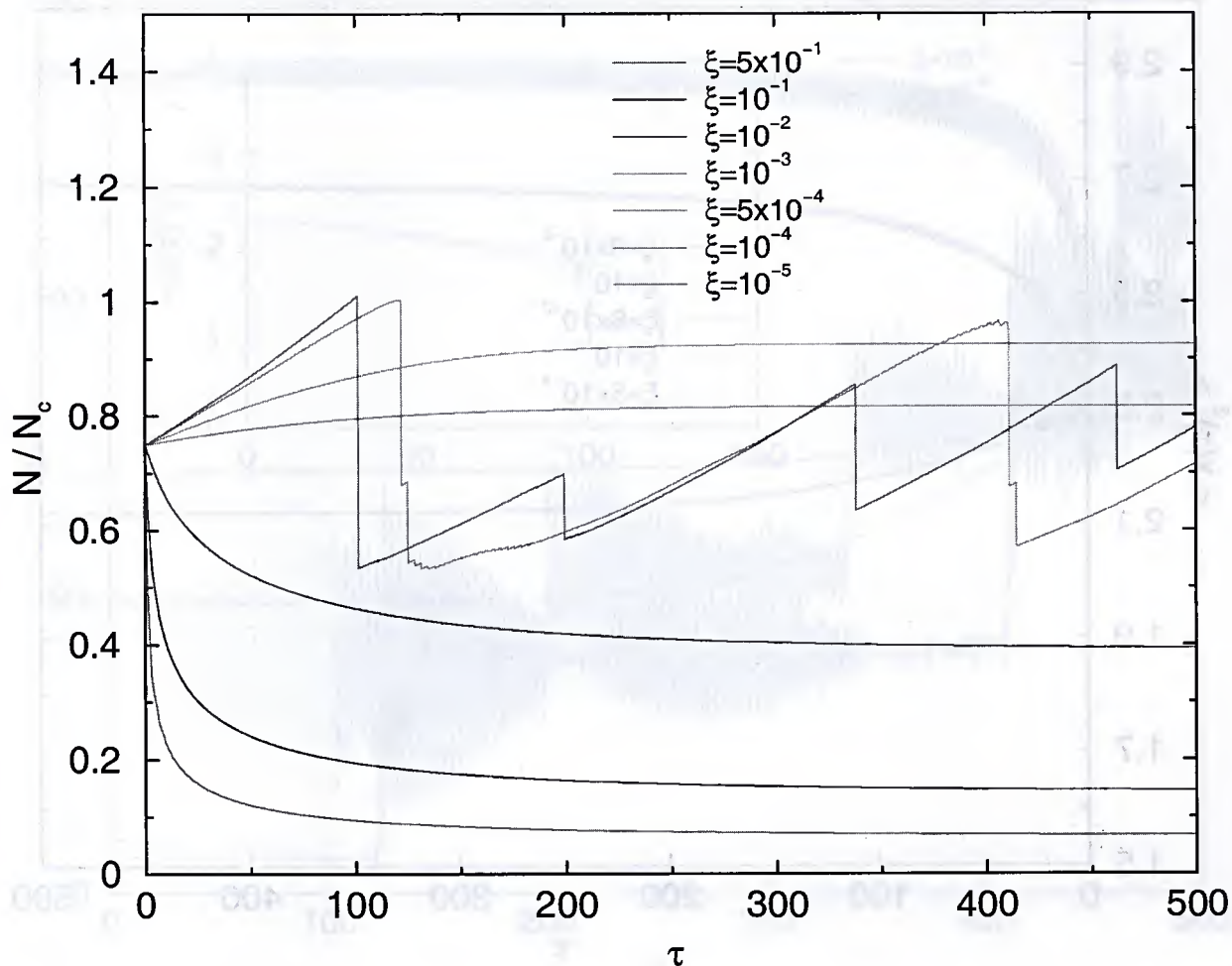


Figura 5.53: Número de átomos como função do tempo para  $\tau = \omega t \leq 500$ ,  $\gamma = 3 \times 10^{-3}$  e um conjunto de valores de  $\xi$ .

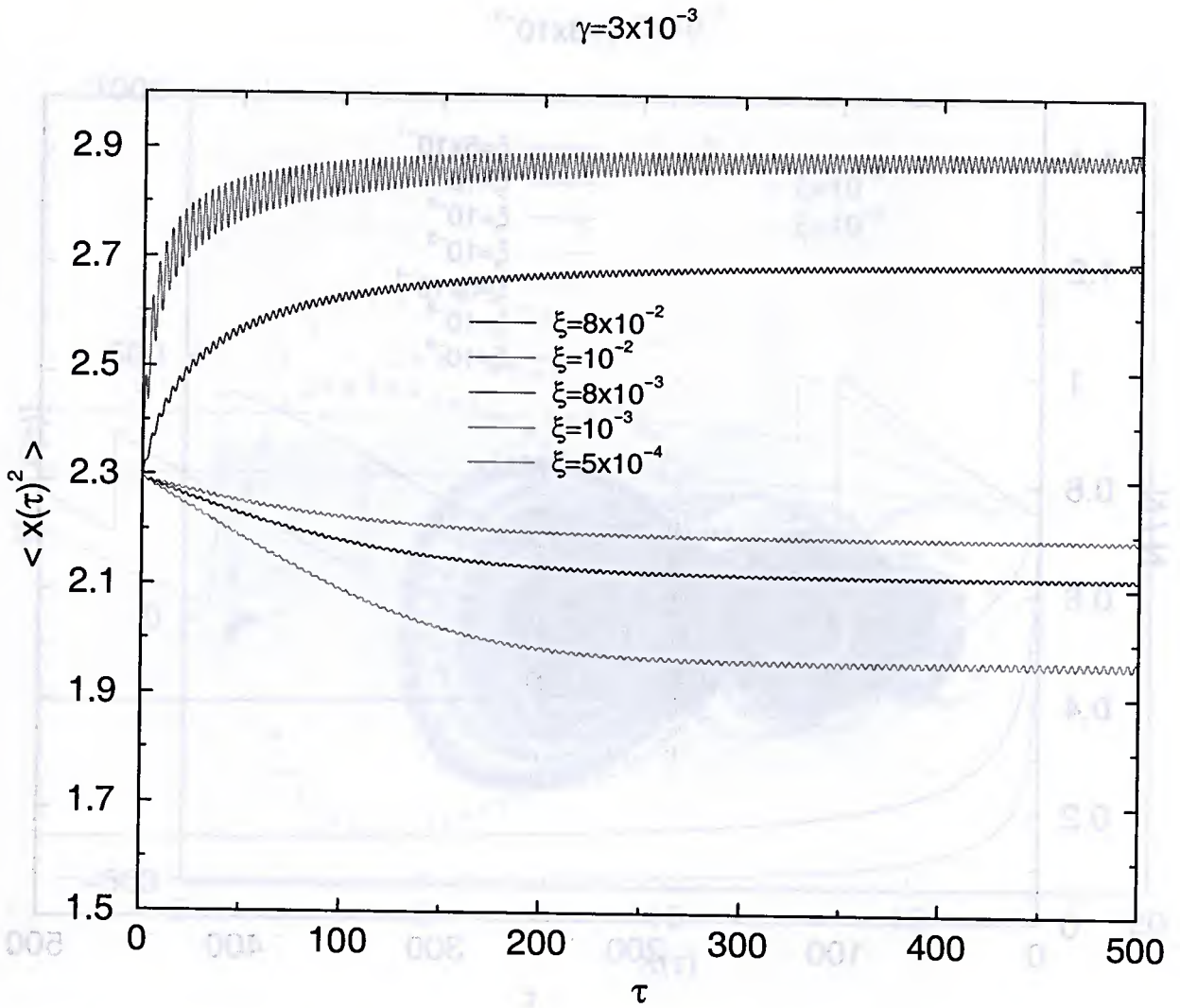


Figura 5.54: Raio quadrático médio  $X(\tau)^2$  como função do tempo para  $\tau = \omega t \leq 500$ ,  $\gamma = 3 \times 10^{-3}$  e um conjunto de valores de  $\xi$ .

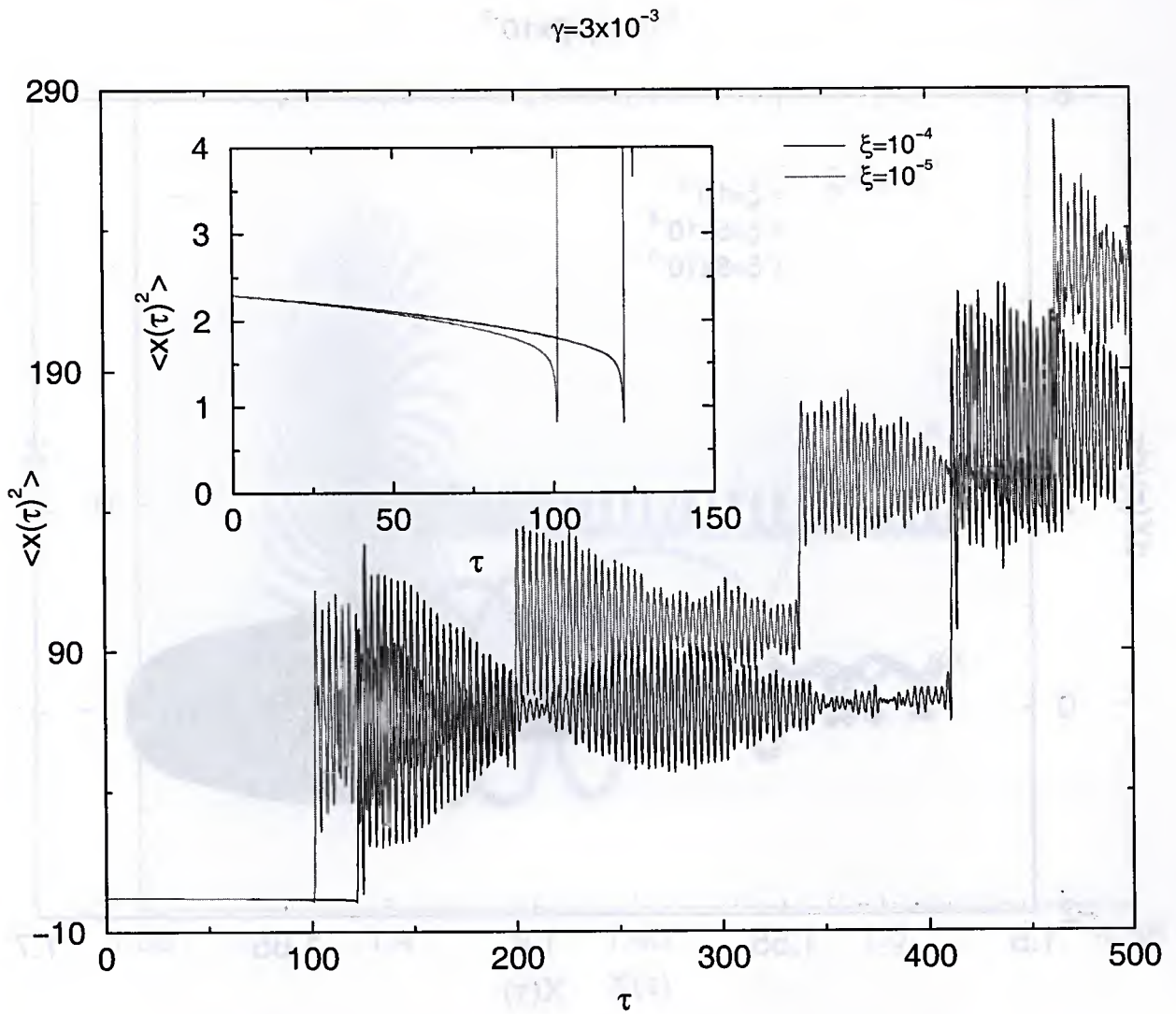


Figura 5.55: Raio quadrático médio  $X(\tau)^2$  como função do tempo para  $\tau = \omega t \leq 500$ ,  $\gamma = 3 \times 10^{-3}$  e pequenos valores de  $\xi$ .

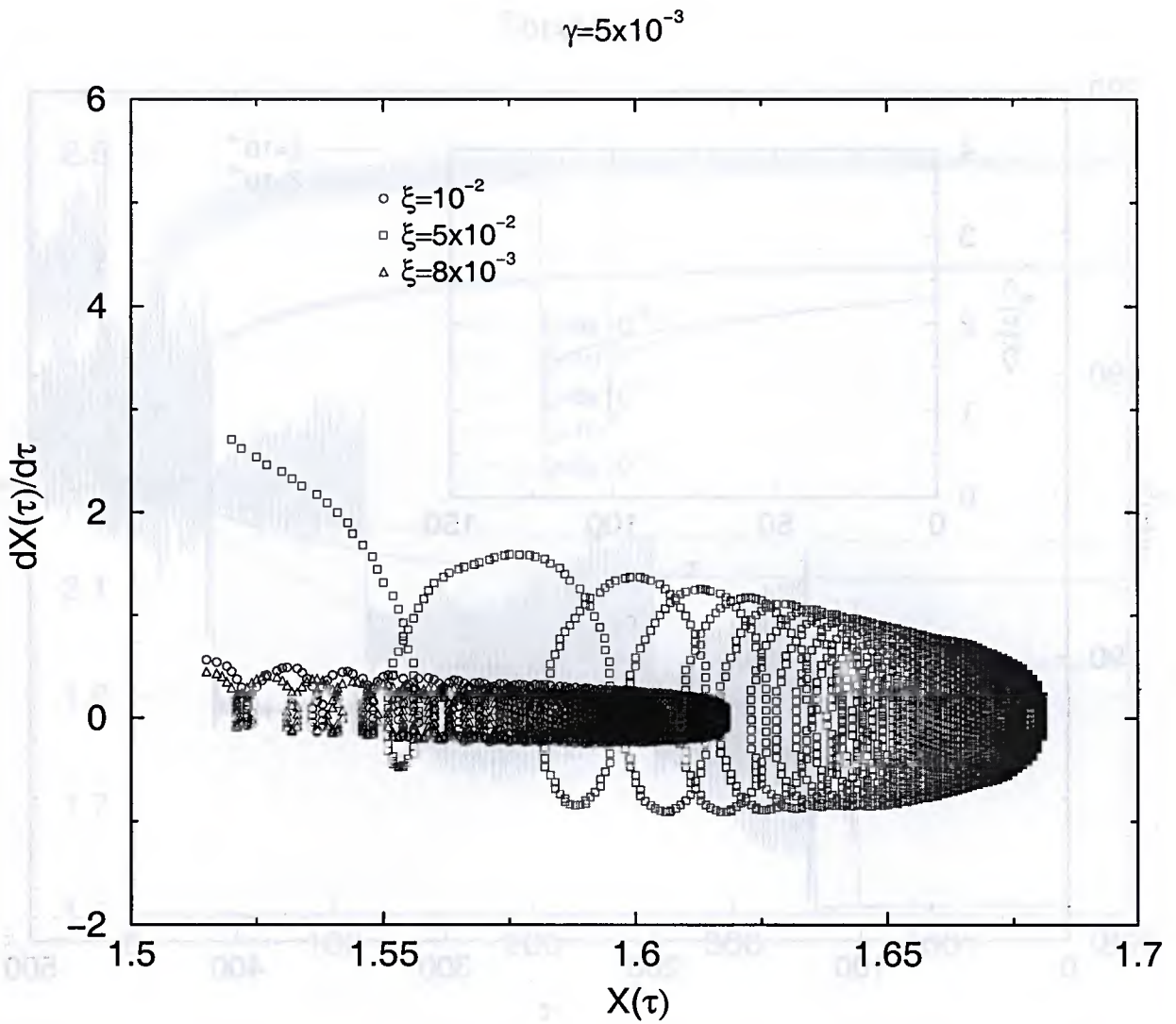


Figura 5.56: Espaço de fase para o raio quadrático médio  $X(\tau) \equiv \sqrt{\langle x^2(\tau) \rangle}$  (adimensional), para alguns valores de  $\xi$  e  $\gamma = 5 \times 10^{-3}$ .

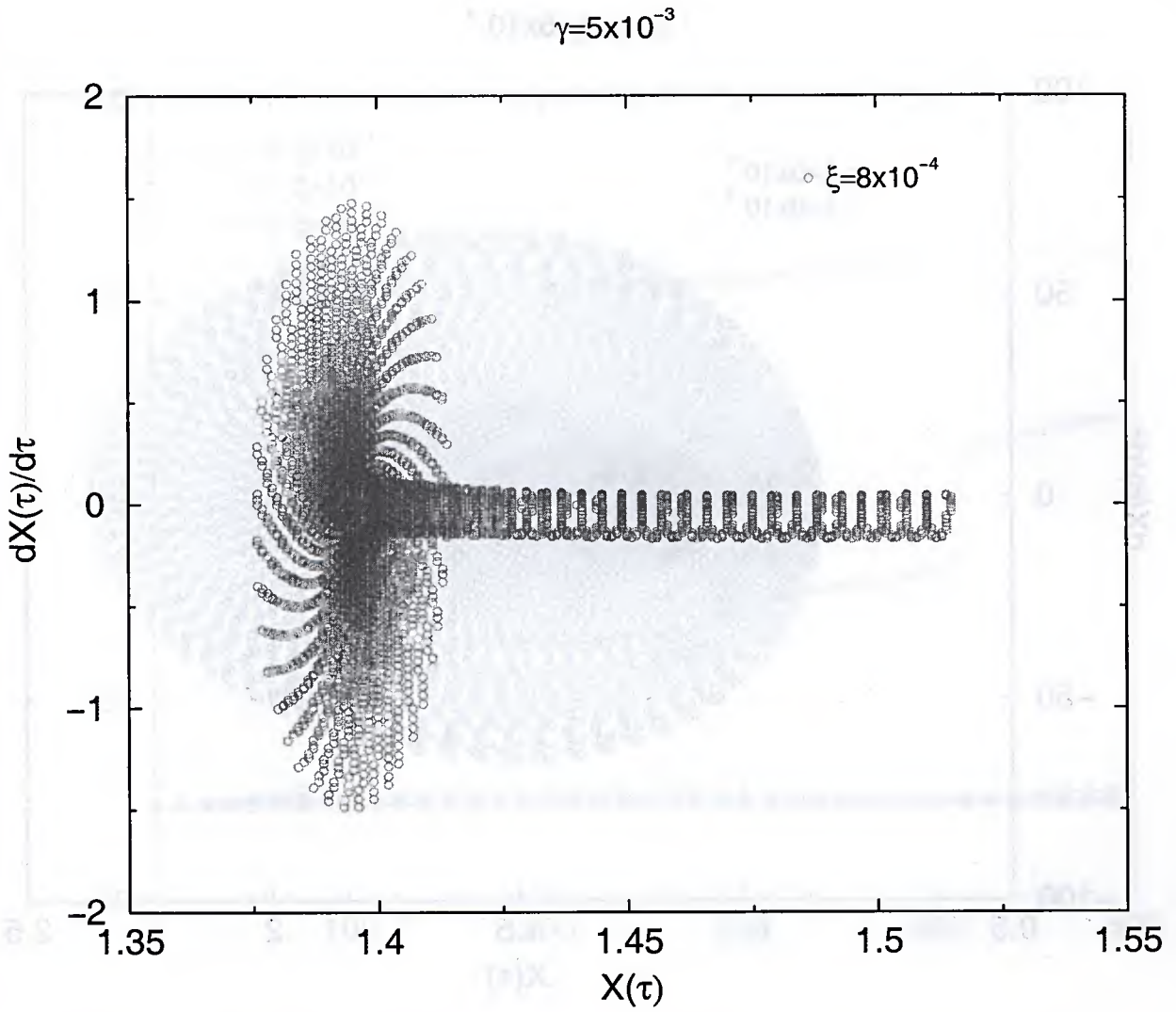


Figura 5.57: Espaço de fase para o raio quadrático médio  $X(\tau) \equiv \sqrt{\langle x^2(\tau) \rangle}$  (adimensional), para  $\xi = 8 \times 10^{-4}$  e  $\gamma = 5 \times 10^{-3}$ .

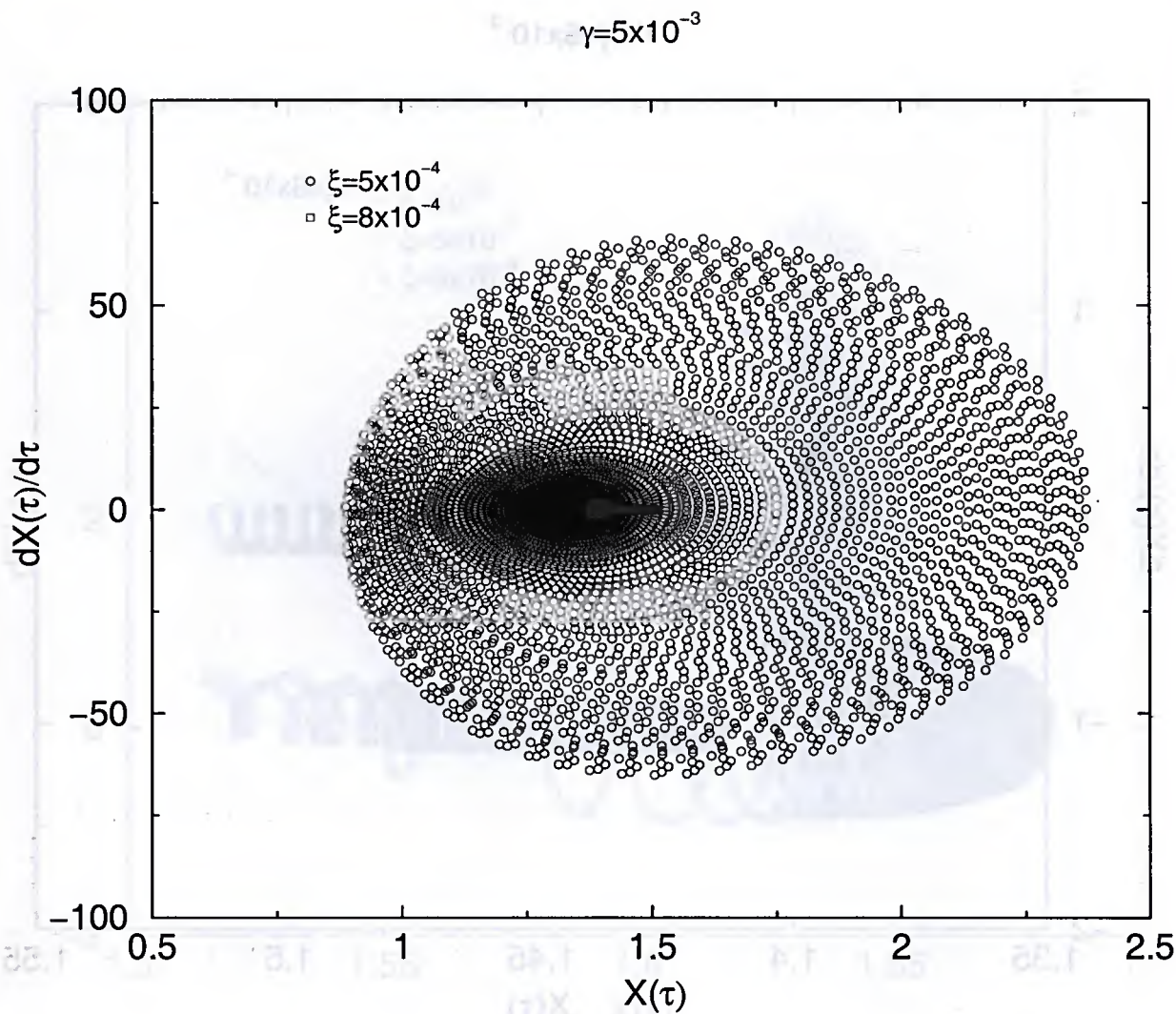


Figura 5.58: Espaço de fase para o raio quadrático médio  $X(\tau) \equiv \sqrt{\langle x^2(\tau) \rangle}$  (adimensional), para dois valores pequenos de  $\xi$  e  $\gamma = 5 \times 10^{-3}$ .

$$\gamma = 3 \times 10^{-3}$$

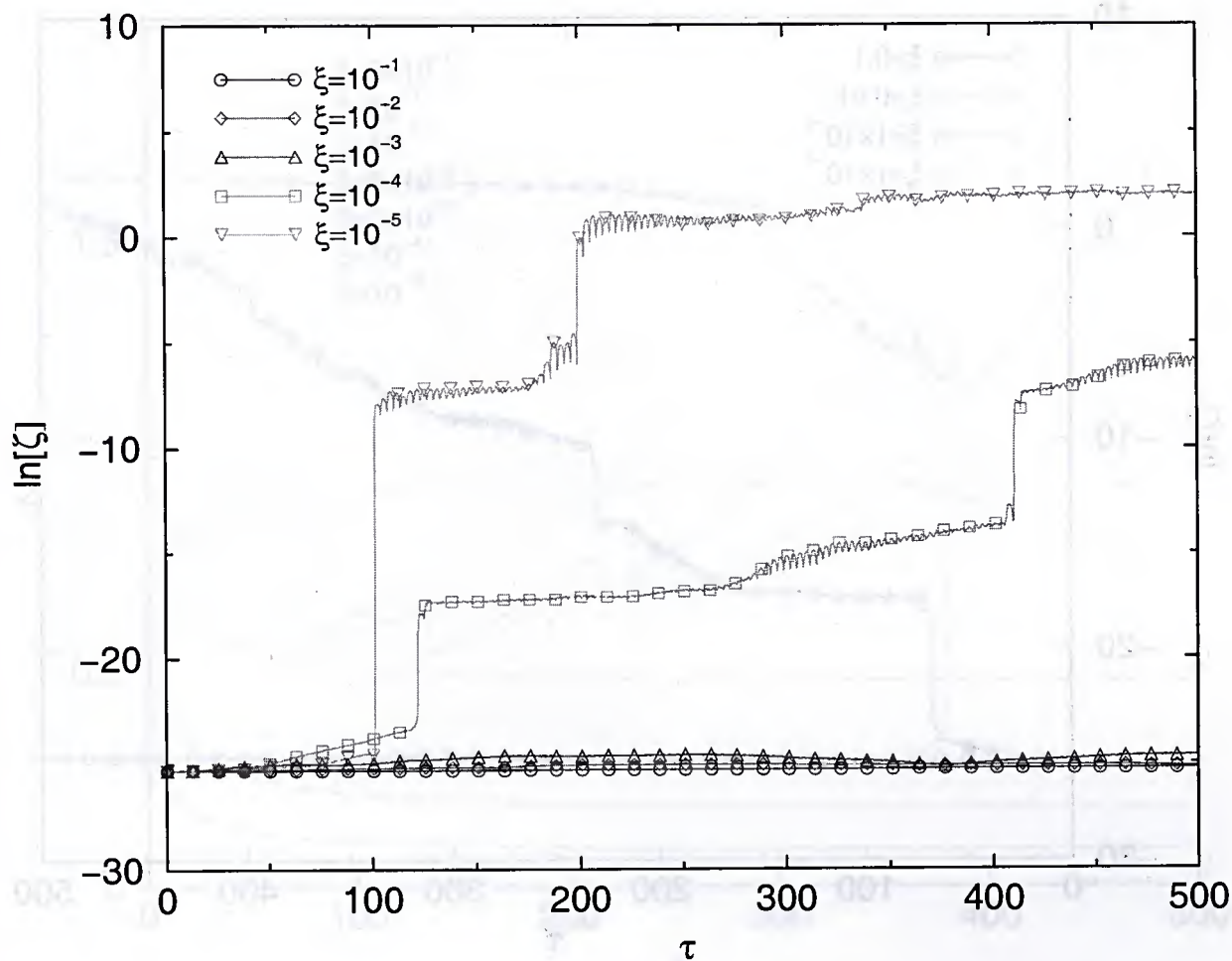


Figura 5.59: Gráfico logarítmico da separação entre dois estados vizinhos, como dado pela Eq. (5.10), para um conjunto de valores de  $\xi$ , com  $\gamma = 3 \times 10^{-3}$ .

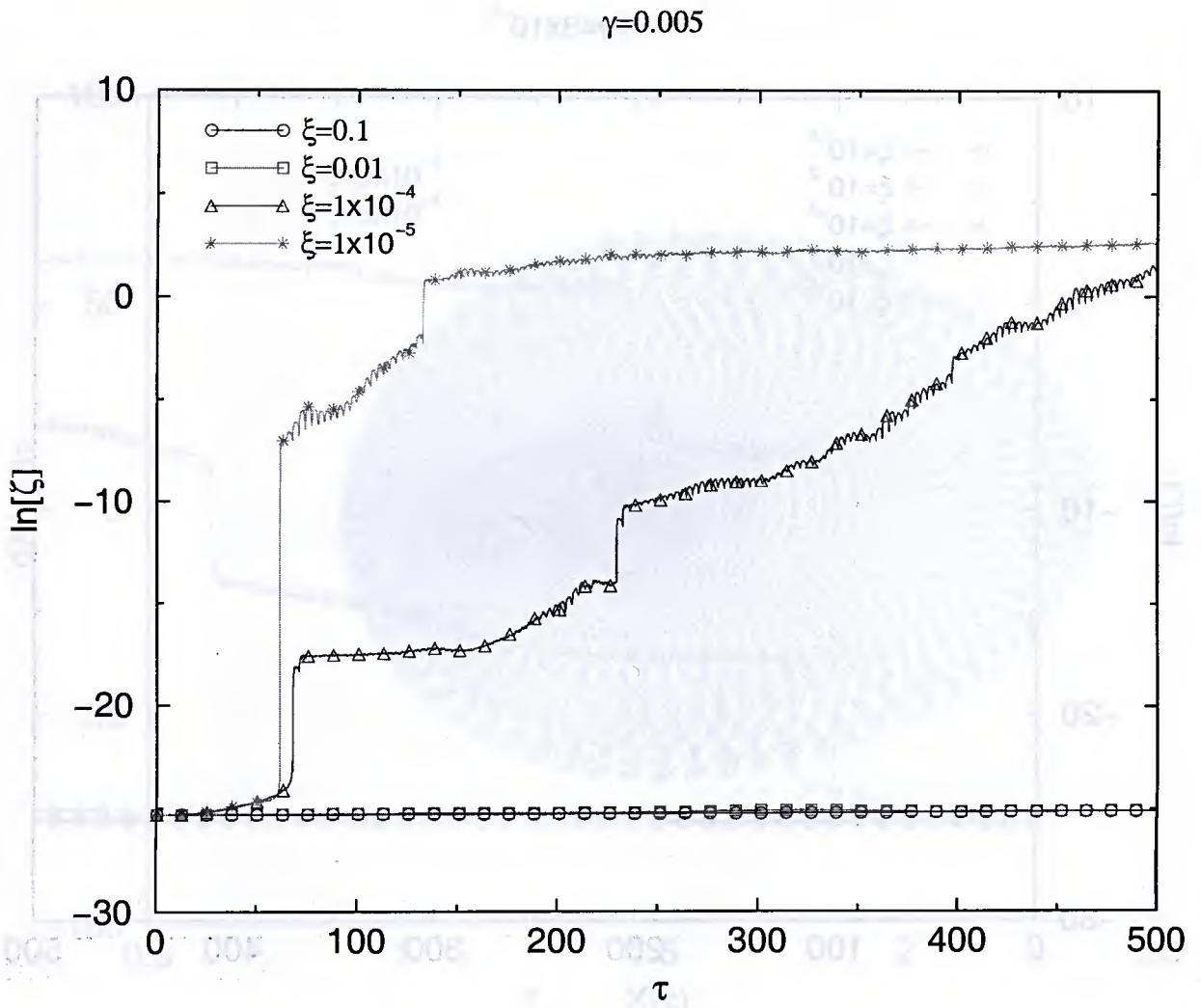


Figura 5.60: Gráfico logarítmico da separação entre dois estados vizinhos, como dado pela Eq. (5.10), para um conjunto de valores de  $\xi$ , com  $\gamma = 5 \times 10^{-3}$ .

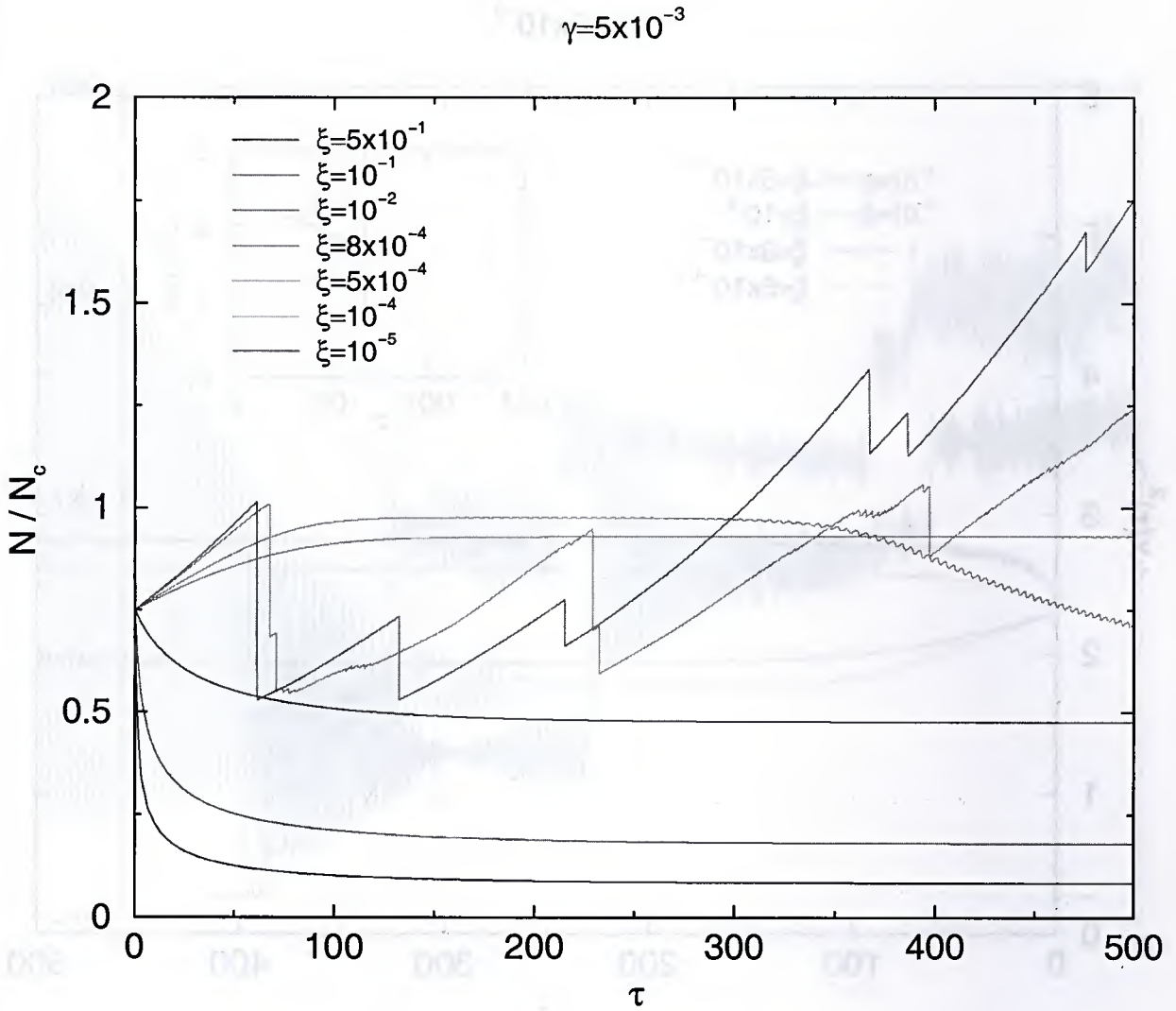


Figura 5.61: Número de átomos como função do tempo para  $\tau = \omega t \leq 500$ ,  $\gamma = 5 \times 10^{-3}$  e um conjunto de valores de  $\xi$ .

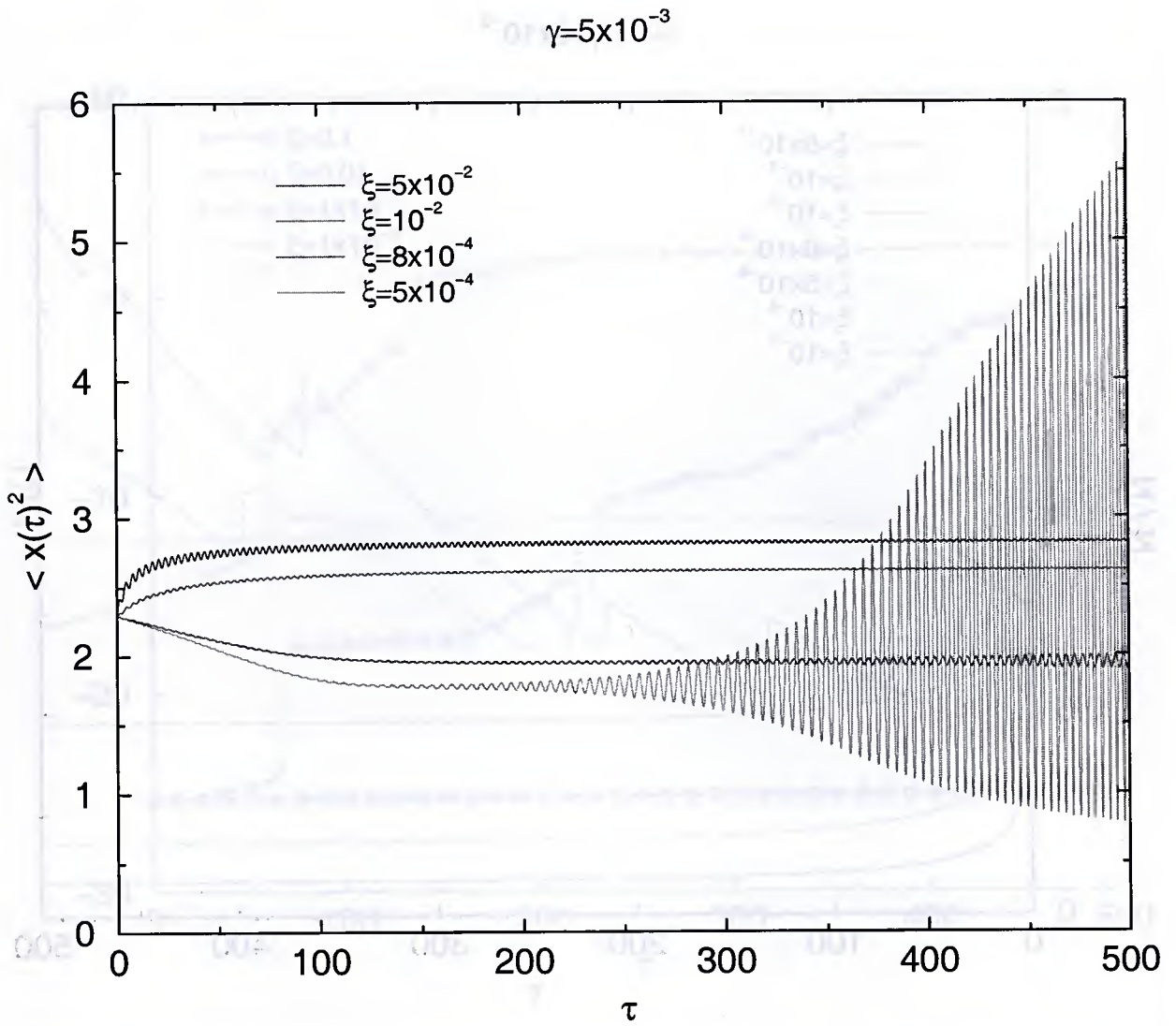


Figura 5.62: Raio quadrático médio  $X(\tau)^2$  como função do tempo para  $\tau = \omega t \leq 500$ ,  $\gamma = 5 \times 10^{-3}$  e um conjunto de valores de  $\xi$ .

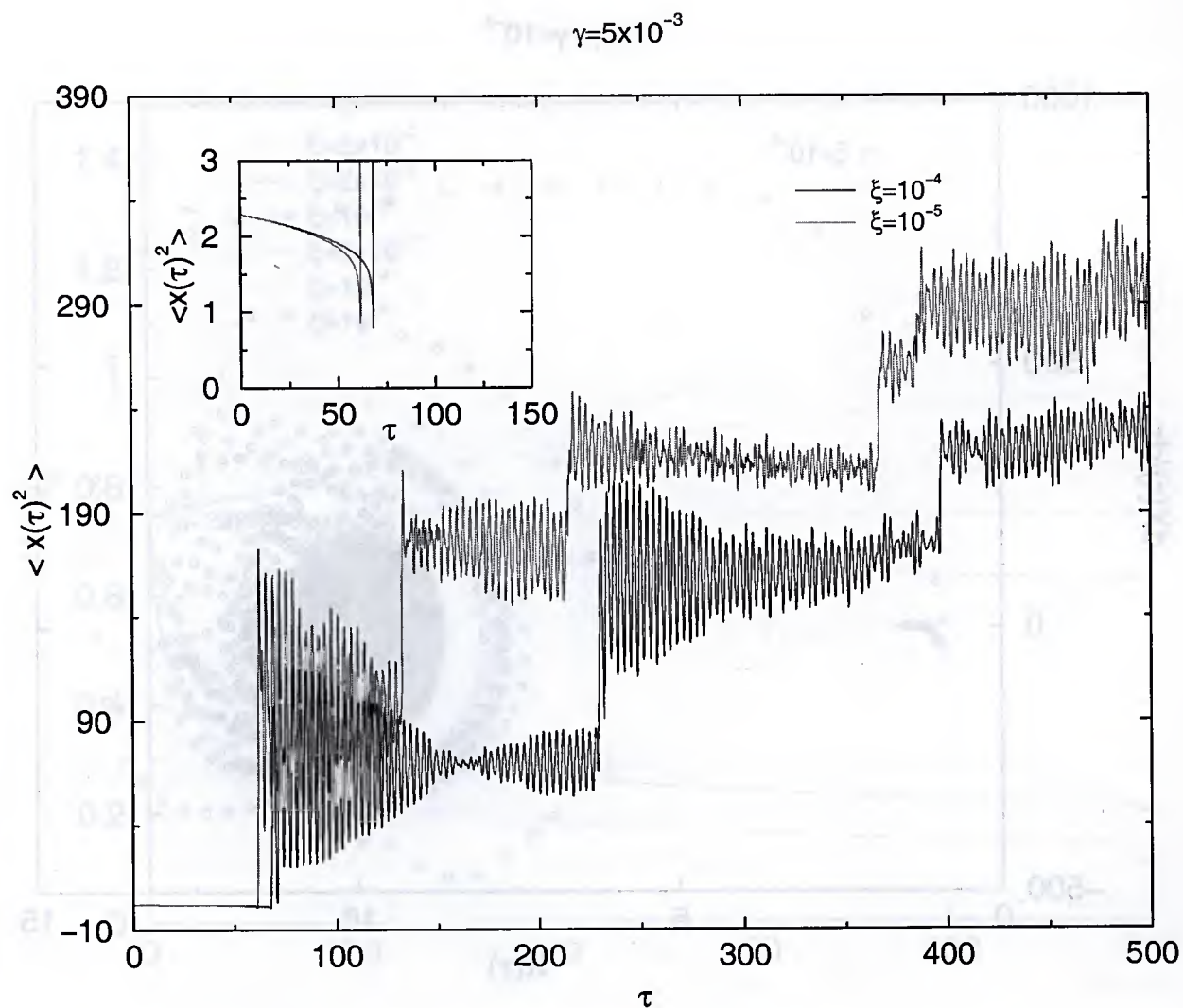


Figura 5.63: Raio quadrático médio  $X(\tau)^2$  como função do tempo para  $\tau = \omega t \leq 500$ ,  $\gamma = 5 \times 10^{-3}$  e valores muito pequenos de  $\xi$ .

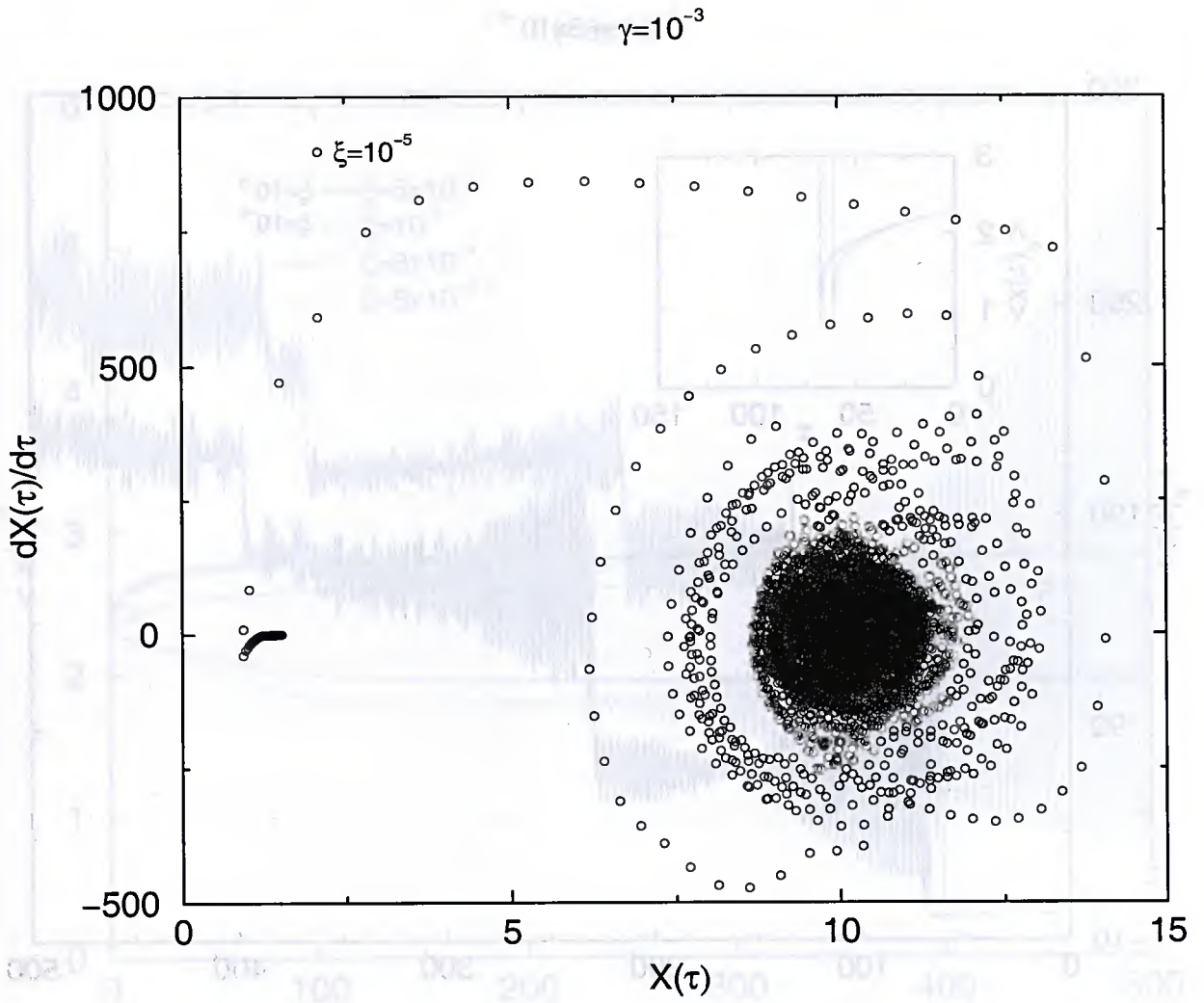


Figura 5.64: Espaço de fase para o raio quadrático médio  $X(\tau) \equiv \sqrt{\langle x^2(\tau) \rangle}$  (adimensional), para  $\xi = 10^{-5}$  e  $\gamma = 10^{-3}$ .

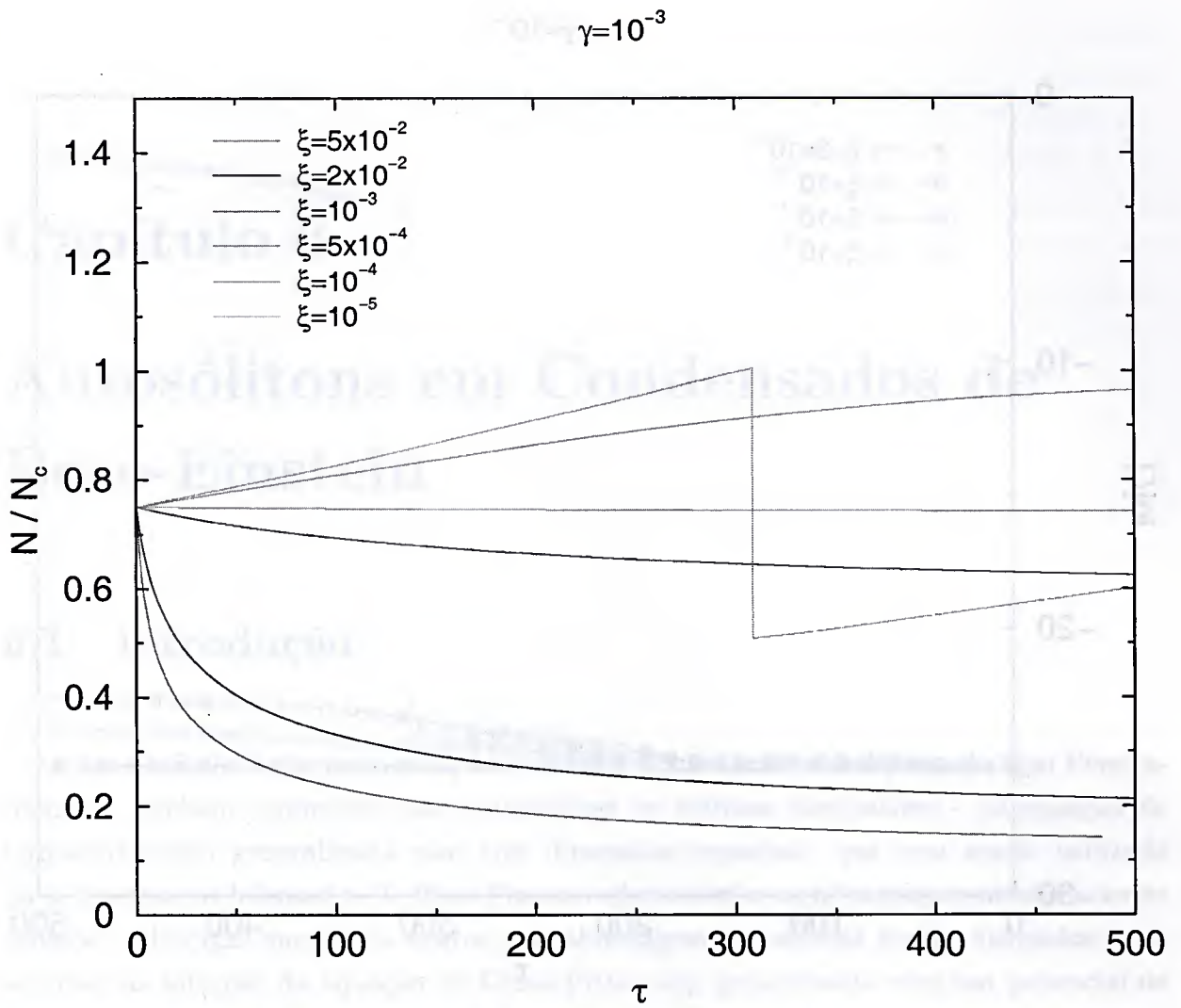


Figura 5.65: Número de átomos como função do tempo para  $\tau = \omega t \leq 500$ ,  $\gamma = 10^{-3}$  e um conjunto de valores de  $\xi$ .

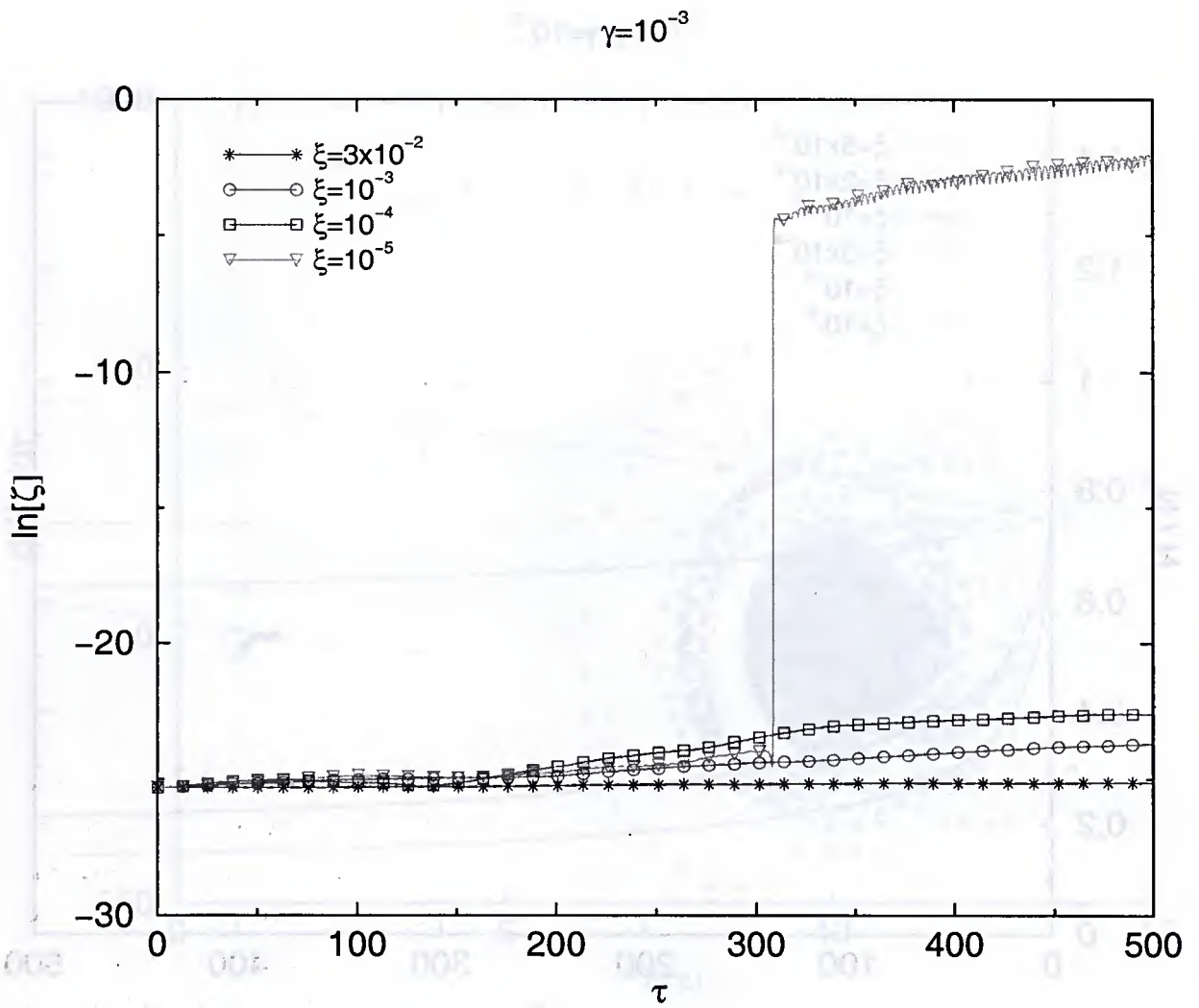


Figura 5.66: Gráfico logarítmico da separação entre dois estados vizinhos, como dado pela Eq. (5.10), para um conjunto de valores de  $\xi$ , com  $\gamma = 10^{-3}$ .

## Capítulo 6

# Autosólitons em Condensados de Bose-Einstein

### 6.1 Introdução

Neste capítulo, examinamos a possibilidade de existência de sólitons do tipo Pereira-Stenflo - também conhecidos por autosólitons ou sólitons dissipativos - na equação de Gross-Pitaevskii generalizada com três dimensões espaciais, que vem sendo utilizada para descrever condensados de Bose-Einstein aprisionados com interações atrativas entre átomos. Métodos numéricos exatos e a abordagem variacional foram utilizados para se obter as soluções da equação de Gross-Pitaevskii, generalizada com um potencial de aprisionamento, alimentação atômica e processos inelásticos de dois e três corpos.

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.) [94]. 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). Matematicamente, tais problemas são descritos pela equação de Schrödinger não-linear com os parâmetros complexos. Um limite interessante é o da equação de Schrödinger não-linear com pequenos coeficientes

complexos.

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 [21]. Eles encontraram a solução exata de autosóliton para intensidades de crescimento e de amortecimento arbitrários. Mais tarde, a existência de autosólitons foi verificada experimentalmente em: (1) óptica de fibras não-lineares [90, 91], 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 [92] (caso com amortecimento não-linear). A existência do análogo bidimensional dos sólitons de Pereira-Stenflo [93] em meios homogêneos 2D com amortecimento não-linear e amplificação foi considerada recentemente através da abordagem variacional. Autosólitons em um meio não-linear fracamente dispersivo descrito pela equação de Korteweg-de Vries modificada com amplificação e dissipação têm sido estudados nas Refs. [94, 95].

A ocorrência do análogo dos autosólitons na equação que descreve o condensado de Bose-Einstein com potencial de aprisionamento externo é possível, conforme mostraremos a seguir. A possível existência de sólitons em condensados de Bose-Einstein foi recentemente descrita nas Refs. [96, 97]. Sólitons já foram observados em experimentos de condensados de Bose-Einstein com interação repulsiva entre átomos [98]. Já foi verificada também a existência de sólitons para o caso atrativo em 1D. Em duas e três dimensões, sabe-se que o condensado com interações atrativas entre átomos, sob um potencial confinante externo, é instável se o número de átomos excede um determinado valor crítico  $N_c$ . Estudos têm sido feitos para estabilizar esses sistemas excitando-se o modo coletivo de quadrupolo do condensado com interações atrativas [72], de modo a conseguir obter um maior número de átomos nesse estado fundamental. Abaixo do número crítico, o estado fundamental estável pode existir, correspondendo a soluções solitárias [73, 99]. Quando o número de átomos excede  $N_c$ , ocorre o colapso. Para grandes densidades, os processos inelásticos envolvendo espalhamento inelástico de dois e três átomos começam a desempenhar um papel importante, levando ao amortecimento não-linear efetivo do condensado. Existe também o processo de alimentação de átomos a partir da nuvem térmica, que pode ser descrito como uma amplificação linear do sistema, como mostrado na Ref. [14], em que é mencionada a importância dos processos inelásticos de três corpos. Experimentos relevantes com  ${}^7\text{Li}$  têm sido executados e os dados estatísticos apoiam o fenômeno de crescimento e colapso da função de onda do condensado [15].

As simulações numéricas da equação de Gross-Pitaevskii generalizada executadas em [14, 16, 17] 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, já analisada no capítulo anterior, no limite de pequenas perturbações. Esta equação é não-integrável, de modo que abordagens aproximadas como métodos numéricos ou o método variacional têm que ser usados [100].

Usaremos a abordagem variacional dependente do tempo para encontrar tais soluções. Como mostrado na Ref. [101], 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. Essas soluções podem ser consideradas como modos não-lineares de tais sistemas como os sólitons para a equação de Schrödinger não-linear integrável [102]. Como uma abordagem alternativa para se obter as soluções dessa equação, utilizamos também o método dos momentos para se obter um sistema de equações envolvendo a variação temporal dos observáveis do condensado, a fim de verificar a consistência das soluções com as obtidas por simulações numéricas ou pela abordagem variacional dependente do tempo.

As previsões analíticas são confirmadas pela solução numérica exata dessa equação de Schrödinger não-linear com amplificação linear e termos dissipativos não-lineares, conforme veremos na seção 6.7. A possibilidade de observação de autosólitons em experimentos de  ${}^7\text{Li}$  é também discutida nessa seção 6.7.

## 6.2 Sólitons de Pereira-Stenflo

Para compreender formalmente o conceito de autosóliton, vamos analisar o artigo original de 1977 de Pereira e Stenflo [21]. Nesse trabalho, Pereira e Stenflo descobriram uma solução de sóliton para uma versão modificada da equação de Schrödinger não-linear

$$i\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} - |\Psi|^2\Psi, \quad (6.1)$$

a qual descreve aproximadamente a evolução não-linear de sistemas fracamente não-lineares e dispersivos de grande amplitude, tais como a turbulência de Langmuir e ondas não-lineares em tokamaks. Nesse caso,  $\Psi$  representa a envoltória complexa do campo elétrico de alta frequência

$$E(x, t) = \text{Re}[\Psi(x, t)]e^{-i\omega t}. \quad (6.2)$$

A energia do campo, que é conservada pela equação (6.1), é dada por

$$W = \int |\Psi(x, t)|^2 dx. \quad (6.3)$$

Pereira e Stenflo analisaram a equação (6.3) modificada, 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  $\Psi$  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. Tendo escolhido as constantes positivas para os coeficientes complexos referentes ao crescimento e amortecimento, a equação (6.1) pode ser escrita na forma

$$i\frac{\partial\Psi}{\partial t} - i\gamma_0\Psi + (1 - i\gamma_2)\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + (1 + i\gamma_n)|\Psi|^2\Psi = 0. \quad (6.4)$$

A energia deixa de ser conservada para a equação (6.4); ao invés disso, vale para a variação da energia a relação

$$\frac{1}{2}\frac{dW}{dt} = \gamma_0 W - \gamma_2 \int \left| \frac{\partial\Psi}{\partial x} \right|^2 dx - \gamma_n \int |\Psi|^4 dx. \quad (6.5)$$

Dois aspectos da equação (6.4) foram analisados por Pereira e Stenflo:

- A aproximação ao equilíbrio da solução assumida;
- Uma solução exata em equilíbrio.

Consideremos inicialmente o problema dependente do tempo. Uma boa aproximação para uma solução particular envolvendo os parâmetros  $\gamma_0$ ,  $\gamma_2$  e  $\gamma_n$  pequenos é a onda estacionária solitária

$$\Psi(x, t) = \sqrt{2}K(t) \exp\left(i \int_0^t K^2(t') dt'\right) \text{sech}[K(t)x], \quad (6.6)$$

onde  $K(t)$  representa tanto a largura quanto a amplitude, e determina o deslocamento de frequência não-linear. A substituição de (6.6) em (6.5) leva a

$$\frac{1}{2}\frac{dK}{dt} = \gamma_0 K - \frac{\gamma_2 + 4\gamma_n}{3} K^3 = \gamma_0 K \left(1 - \frac{\gamma_2 + 4\gamma_n}{3\gamma_0} K^2\right). \quad (6.7)$$

É óbvio que, para haver equilíbrio entre crescimento e amortecimento ( $dK/dt = 0$ ), a solução não-trivial ocorre quando

$$K^2 = K_e^2 \equiv \frac{3\gamma_0}{\gamma_2 + 4\gamma_n}. \quad (6.8)$$

Se  $K \ll K_e$ , para valores pequenos de  $K$ , sua variação no tempo é exponencial, mas se  $K \gg K_e$  então  $K$  varia como  $t^{-1/2}$ . A dependência no tempo completa de  $K$ , obtida a partir da equação (6.7), é dada por

$$K^2(t) = \frac{K^2(0)K_e^2 e^{4\gamma_0 t}}{K_e^2 + K^2(0)[e^{4\gamma_0 t} - 1]} = \frac{3\gamma_0 K^2(0) e^{4\gamma_0 t}}{3\gamma_0 + K^2(0)(\gamma_2 + 4\gamma_n)[e^{4\gamma_0 t} - 1]}. \quad (6.9)$$

Para  $\gamma_2 + 4\gamma_n < 0$  ( $K_e^2 < 0$ ), ou seja, quando ao invés de amortecimento temos um crescimento dispersivo e não-linear, observa-se que  $K(t)$  cresce explosivamente ( $K^2(t) \propto (t - t_0)^{-1}$ ). A divergência (explosão) ocorre quando o denominador da equação (6.9) se anula, em  $t = t_E$ :

$$t_E = \frac{1}{4\gamma_0} \ln \left[ 1 + \frac{|K_e^2|}{K^2(0)} \right]. \quad (6.10)$$

Deve-se observar, nesse caso, que a primeira igualdade da equação (6.8), que corresponde à situação de equilíbrio, não pode ser satisfeita. Por outro lado, observa-se que efeitos de ordem superior, tais como termos  $|\Psi|^4 \Psi$  ou  $\partial^4 \Psi / \partial x^4$  não foram considerados no modelo; e tais termos devem saturar a instabilidade observada acima.

Uma solução exata, em equilíbrio, para a equação (6.4), que pode ser verificada por substituição direta, é dada por

$$\Psi(x, t) = \sqrt{2}A [\operatorname{sech}(Kx)]^{1+i\alpha} \exp(-i\Omega t), \quad (6.11)$$

onde  $A$  é a amplitude e  $\Omega$  é o deslocamento não-linear da frequência. Substituindo (6.11) em (6.4), temos

$$\alpha = -\beta + \sqrt{2 + \beta^2}, \quad (6.12)$$

$$\beta = \frac{3}{2} \left[ (1 - \gamma_2 \gamma_n)(\gamma_2 + \gamma_n)^{-1} \right]. \quad (6.13)$$

Expandindo até primeira ordem nas constantes  $\gamma$  de amortecimento e de crescimento,

$$\alpha \cong \frac{1}{\beta} \cong \frac{2}{3}(\gamma_2 + \gamma_n). \quad (6.14)$$

O inverso da largura ao quadrado é dado por

$$K^2 = \frac{\gamma_0}{2\alpha - \gamma_2 + \alpha^2 \gamma_2} \quad (6.15)$$

ou

$$K^2 = K_e^2 \left( 1 + \frac{\alpha}{3} \frac{2\alpha\gamma_n - \alpha\gamma_2 - 6\gamma_2\gamma_n}{2\alpha - \gamma_2 + \alpha^2\gamma_2} \right), \quad (6.16)$$

onde  $K_e$  é o valor de equilíbrio definido em (6.8).

Nesse caso, a estimativa de  $K^2$  para a condição de equilíbrio, dada pela equação (6.8) 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

$$A^2 = K^2 \left( 1 + \frac{3}{2}\alpha\gamma_2 - \frac{1}{2}\alpha^2 \right), \quad (6.17)$$

enquanto que  $\Omega$  é dado por

$$\Omega = -K^2(1 + 2\alpha\gamma_2 - \alpha^2) . \quad (6.18)$$

É importante observar que as equações (6.11)-(6.16) reduzem-se às bem conhecidas soluções de sóliton da equação (6.1)

$$\Psi_0(x, t) = \sqrt{2}K \operatorname{sech}(Kx) e^{iK^2t} , \quad (6.19)$$

quando anulamos a constante de crescimento  $\gamma_0$  bem como as constantes de amortecimento  $\gamma_2$  e  $\gamma_n$ . O expoente complexo  $\alpha$  aparece em primeira ordem em  $\gamma$ . Assim,  $\Psi_0$  é modificado pelo aparecimento de uma fase  $\phi$  dependente de  $x$ , dada por

$$\phi(x) = \alpha \ln \operatorname{sech}(Kx) . \quad (6.20)$$

O significado físico desta fase segue da equação para a densidade de energia  $|\Psi|^2$ , obtida de (6.4)

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} |\Psi|^2 + \frac{\partial}{\partial x} \left\{ |\Psi|^2 \left[ \frac{\partial}{\partial x} (2\phi - \gamma_2 \ln |\Psi|^2) \right] \right\} \\ = 2\gamma_0 |\Psi|^2 - \gamma_n |\Psi|^4 - \gamma_2 \left| \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right|^2 . \end{aligned} \quad (6.21)$$

O primeiro termo no lado direito da igualdade de (6.21) é positivo e representa a fonte de energia. Os dois últimos termos são negativos e descrevem sumidouros de energia. Em equilíbrio, não há nenhuma produção de energia, isto é

$$\frac{\partial}{\partial t} \int |\Psi|^2 dx = 0 . \quad (6.22)$$

Entretanto, como a intensidade da fonte de energia difere das intensidades dos sumidouros, então a energia deve fluir em direção à região de mais forte absorção de energia. Este fluxo é dado pelo termo entre chaves no lado esquerdo de (6.21). Para pequeno amortecimento, a expressão em colchetes, ou seja, a velocidade do fluxo  $v_g$ , reduz-se a

$$v_g = \frac{2}{3}(\gamma_2 - 2\gamma_n)K \tanh(Kx) . \quad (6.23)$$

Para amortecimento não-linear apenas ( $\gamma_n > 0$  e  $\gamma_2 = 0$ ), o fluxo é dirigido à origem, enquanto que para amortecimento dispersivo ( $\gamma_2 > 0$  e  $\gamma_n = 0$ ) o fluxo é dirigido na direção oposta.

Até a segunda ordem em  $\gamma$ , o crescimento e o amortecimento mudam o deslocamento não-linear de frequência  $\Omega$  e afetam a relação usual entre amplitude  $A$  e a largura  $K^{-1}$ . Sem amortecimento,  $A = K$ , mas até segunda ordem em  $\gamma$  nós temos, de (6.17)

$$A^2 = K^2 \left[ 1 + \frac{(\gamma_2 + \gamma_n)(7\gamma_2 - 2\gamma_n)}{9} \right] . \quad (6.24)$$

Somente com o termo não-linear do amortecimento ( $\gamma_2 = 0$  e  $\gamma_n \neq 0$ ), a amplitude  $A$  é menor que a amplitude do sóliton não-amortecido com a mesma largura. O amortecimento é da ordem de  $|\Psi|^4$ , sendo grande onde  $|\Psi|$  é grande e tende a diminuir a amplitude. Por outro lado, somente com o termo dispersivo ( $\gamma_n = 0$  e  $\gamma_2 \neq 0$ ), o sóliton é mais estreito do que um não-amortecido, porque nesse caso o amortecimento ocorre principalmente nos lados do sóliton.

### 6.3 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 (5.1), onde a parte real da interação efetiva não-linear foi restrita à contribuição de dois corpos. Incorporando um termo não-linear quártico a essa parte real da interação, podemos escrever a equação para a função de onda do condensado  $u(\vec{r}, t)$  na seguinte forma \*

$$i \frac{\partial u}{\partial t} + \nabla^2 u - r^2 u + \lambda_2 |u|^2 u + \lambda_3 |u|^4 u = i\gamma u - i\mu |u|^2 u - i\xi |u|^4 u \equiv R(u, u^*) , \quad (6.25)$$

onde  $r$  é dado em unidades  $\sqrt{\hbar/(m\omega)}$  e o tempo  $t$  em unidades  $2/\omega$ , sendo  $\omega$  a frequência do oscilador. Os coeficientes  $\lambda_2$  e  $\lambda_3$  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, que foram definidos nessa capítulo de forma independente da utilizada no capítulo 5. Note-se que, nas unidades acima, o termo  $r^2$  da equação (6.25) é o potencial de aprisionamento.

Usamos como solução de (6.25) a função tentativa na forma gaussiana [103]

$$u(\vec{r}, t) = A(t) \exp \left[ -\frac{r^2}{2a^2(t)} + i\frac{b(t)r^2}{2} + i\phi(t) \right] , \quad (6.26)$$

onde  $A$ ,  $a$ ,  $b$  e  $\phi$  são parâmetros variacionais dependentes do tempo que correspondem, respectivamente, à amplitude, à largura, à distorção de fase <sup>†</sup> 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.

\*Essa equação difere da equação (5.1) do Capítulo 5 pela inclusão do termo quártico (termo de três corpos), pela escala de tempo que é o dobro da usada no Capítulo 5, e por explicitar a intensidade  $\lambda_2$  da interação de dois corpos.

<sup>†</sup>A distorção de fase, conhecida como “chirp” em inglês, tem sido estudada em óptica não-linear para caracterizar ruídos em ondas; o termo “chirp”, significando chirlo, tem sido usado por corresponder aos sons emitidos por pássaros quando no intervalo audível de frequências.

O método variacional é aplicado à Lagrangiana do sistema conservativo

$$L(t) = \int \mathcal{L}(r, t) d^3r , \quad (6.27)$$

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

$$\mathcal{L} = \frac{i}{2} \left( \frac{\partial u}{\partial t} u^* - \frac{\partial u^*}{\partial t} u \right) - |\nabla u|^2 + \frac{\lambda_2}{2} |u|^4 + \frac{\lambda_3}{3} |u|^6 - r^2 |u|^2 . \quad (6.28)$$

Substituindo a função tentativa (6.26) nas equações (6.28) e (6.27), encontramos a Lagrangiana em termos dos parâmetros da função de onda do condensado

$$\begin{aligned} L(t) = & -\frac{3}{4} \pi^{3/2} A^2 a^5 \frac{db}{dt} - \pi^{3/2} A^2 a^3 \frac{d\phi}{dt} - \frac{3\pi^{3/2}}{2} A^2 a^5 \left( \frac{1}{a^4} + b^2 \right) \\ & + \frac{\pi^{3/2}}{4\sqrt{2}} \lambda_2 A^4 a^3 + \frac{\pi^{3/2}}{3^{5/2}} \lambda_3 A^6 a^3 - \frac{3\pi^{3/2}}{2} A^2 a^5 . \end{aligned} \quad (6.29)$$

Para levar em conta formalmente a parte não-conservativa da equação (6.25), vamos adicionar um termo  $\mathcal{L}_R$  à equação (6.28), onde  $\mathcal{L}_R$  satisfaz a expressão

$$\frac{\delta \mathcal{L}_R}{\delta u^*} = -R(u, u^*) , \quad (6.30)$$

onde  $R$  é dado pelo lado direito de (6.25), ou seja

$$R(u, u^*) = i\gamma u - i\mu |u|^2 u - i\xi |u|^4 u . \quad (6.31)$$

Dessa forma, a densidade Lagrangiana correspondente à equação (6.25) é dada por

$$\mathcal{L}' = \mathcal{L} + \mathcal{L}_R . \quad (6.32)$$

e a Lagrangiana dada por

$$L' = L + L_R . \quad (6.33)$$

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

$$\frac{\partial \mathcal{L}'}{\partial u^*} - \frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}'}{\partial \dot{u}^*} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial u^*} - \frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{u}^*} - R(u, u^*) = 0 , \quad (6.34)$$

que nos leva à equação (6.25) (a equação conjugada é obtida de uma forma similar).

O princípio variacional correspondente é dado por

$$\delta \int_0^t L' dt = 0 , \quad (6.35)$$

onde

$$L_R = \int d^3r \mathcal{L}_R . \quad (6.36)$$

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

$$f(\eta + \delta\eta) = f(\eta) + \delta\eta \frac{\delta f(u, u^*)}{\delta\eta}, \quad (6.37)$$

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  $\eta_i$  [103, 104]

$$\frac{\partial L}{\partial \eta_i} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{\eta}_i} = \int d^3r \left[ R \frac{\partial u^*}{\partial \eta_i} + R^* \frac{\partial u}{\partial \eta_i} \right], \quad (6.38)$$

onde  $\eta_i$  são os parâmetros variacionais presentes na equação (6.26).

Substituindo as equações (6.26) e (6.29) na equação (6.38), obtemos o sistema de equações diferenciais ordinárias para os parâmetros da função de onda do condensado, dado por

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d}{dt}(A^2 a^5) = 4A^2 a^5 b + 2\gamma A^2 a^5 - \frac{\mu}{2\sqrt{2}} A^4 a^5 - \frac{2}{3^{5/2}} \xi A^6 a^5 \\ \frac{d(A^2 a^3)}{dt} = 2\gamma A^2 a^3 - \frac{\mu}{\sqrt{2}} A^4 a^3 - \frac{2}{3^{3/2}} \xi A^6 a^3 \\ \frac{db}{dt} = \frac{2}{a^4} - 2b^2 - 2 - \frac{\lambda_2 A^2}{2\sqrt{2}a^2} - \frac{4\lambda_3 A^4}{3^{5/2}a^2} \\ \frac{d\phi}{dt} = -\frac{3}{a^2} + \frac{7}{2^{7/2}} \lambda_2 A^2 + \frac{2}{3^{3/2}} \lambda_3 A^4 \end{array} \right., \quad (6.39)$$

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

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dx}{dt} = 4xb + \frac{4}{3^{5/2}} \xi y^2 x + \frac{\mu}{2\sqrt{2}} xy \\ \frac{dy}{dt} = -6yb + 2\gamma y - \frac{4}{3^{3/2}} \xi y^3 - \frac{7\mu}{4\sqrt{2}} y^2 \\ \frac{db}{dt} = \frac{2}{x^2} - 2b^2 - 2 - \frac{\lambda_2 y}{2\sqrt{2}x} - \frac{4\lambda_3 y^2}{3^{5/2}x} \end{array} \right. . \quad (6.40)$$

Esse sistema de equações diferenciais ordinárias (EDO) não-lineares é o principal resultado dessa seção. Uma abordagem alternativa para a descrição dinâmica do sistema é através do método dos momentos, que segue abaixo, onde iremos obter equações análogas. A linearização, investigação dos pontos fixo e análise da estabilidade em torno de tais pontos é feita nas seções que seguem ao método dos momentos.

## 6.4 Método dos momentos

O método dos momentos consiste em se avaliar a variação temporal de quantidades físicas do sistema, tais como a energia, o momento e o raio quadrático médio. Por meio desta abordagem, a primeira equação do sistema (6.39) pode ser obtida usando a lei modificada da conservação do número de partículas

$$N = \int d^3r |u|^2, \quad (6.41)$$

obtendo-se a equação [105]

$$\frac{dN}{dt} = 2\gamma N - 2\mu \int |u|^4 d^3r - 2\xi \int |u|^6 d^3r. \quad (6.42)$$

Substituindo nesta equação o ansatz gaussiano (6.26), obtemos a primeira equação do sistema (6.39). As demais equações obtidas pelo método variacional também podem ser obtidas pela abordagem dos momentos como segue.

Basicamente, podemos deduzir as duas últimas equações de (6.39), calculando a variação temporal do raio quadrático médio e do momento quadrático médio. Para se obter a segunda, calculamos

$$\frac{d\langle r^2 \rangle}{dt} = \int \left( \frac{\partial u^*}{\partial t} r^2 u + u^* r^2 \frac{\partial u}{\partial t} \right) d^3r. \quad (6.43)$$

Substituindo  $du/dt$  proveniente da equação (6.25) e aplicando regras de comutação, nós obtemos [106]

$$\frac{d\langle r^2 \rangle}{dt} = 4 \operatorname{Im} \int u^* \vec{r} \cdot \nabla u d^3r + 2\gamma \int |u|^2 r^2 d^3r - 2\mu \int |u|^4 r^2 d^3r - 2\xi \int |u|^6 r^2 d^3r \quad (6.44)$$

Substituindo o ansatz gaussiano (6.26) em ambos os lados desta expressão, obtemos imediatamente a segunda equação de (6.39). A terceira equação pode ser deduzida analogamente, mostrando que

$$\frac{d\langle p^2 \rangle}{dt} = -4 \operatorname{Im} \int u^* \vec{r} \cdot \nabla u d^3r + 2 \operatorname{Im} \int (\nabla u^*) \cdot \nabla (V_1 u) d^3r + 2 \operatorname{Re} \int (\nabla u^*) \cdot \nabla (V_2 u) d^3r \quad (6.45)$$

onde  $V_1 = -\lambda_2 |u|^2 - \lambda_3 |u|^4$  e  $V_2 = \gamma - \mu |u|^2 - \xi |u|^4$ .

Analogamente, através da substituição do ansatz gaussiano (6.26) em (6.45), obtemos a terceira equação de (6.39).

Com esse sistema obtido pelo método variacional e pelo método dos momentos, podemos analisar as possíveis soluções dinâmicas do condensado de Bose-Einstein, incluindo a análise de estabilidade dessas soluções. Como já descrito no capítulo 5, para

a EGPG que descreve sistemas condensados com interação atrativa de dois corpos, temos soluções que colapsam e podem ser caóticas. Por outro lado, temos também soluções em que os observáveis permanecem constantes, indicando equilíbrio entre os parâmetros não-conservativos, bem como casos em que, após o equilíbrio, há grande instabilidade das soluções. Vamos demonstrar agora que esses comportamentos dinâmicos podem ser explicados por meio do método variacional dependente do tempo como sendo soluções solitônicas do condensado de Bose-Einstein 3D no caso de interações atrativas átomo-átomo. Para tal, devemos inicialmente determinar os pontos fixos do sistema (6.39), linearizar o sistema em torno desses pontos fixos e determinar a estabilidade das soluções no espaço de parâmetros, usando os conceitos estudados no capítulo 2 da teoria dinâmica não-linear.

### 6.5 Determinação dos pontos fixos

Autosólitons correspondem aos pontos fixos do sistema. Lembremo-nos das principais propriedades dos sólitons dissipativos. Estas soluções têm forma semelhante à dos sólitons padrões, sendo seus parâmetros definidos pelo balanço entre os termos de dissipação não-linear e de amplificação. A solução, conforme demonstrado no caso unidimensional (o sóliton de Pereira-Stenflo), tem seus parâmetros fixados pelos parâmetros de dissipação e amplificação com a fase modificada pelo parâmetro  $b$ , a distorção de fase. Os parâmetros de tais soluções não dependem das condições iniciais. Nós restringiremos nossa análise tomando  $\lambda_3 = 0$ . A partir do sistema (6.40), estabelecendo primeiramente o caso em que  $\mu = 0$  e  $\xi \neq 0$ , obtemos os pontos fixos, com amplitude

$$y_s = \sqrt{\frac{3^{3/2}\gamma}{\xi}} , \tag{6.46}$$

distorção de fase

$$b_s = -\frac{1}{3}\gamma , \tag{6.47}$$

e largura

$$x_s = -\frac{p}{2} \pm \sqrt{\frac{p^2}{4} + q} , \tag{6.48}$$

onde

$$p = \frac{\lambda_2 y_s}{4\sqrt{2}(1 + b_s^2)} , \tag{6.49}$$

$$q = \frac{1}{1 + b_s^2} . \tag{6.50}$$

Vamos considerar a aproximação  $p \gg q$ . Então, a solução é

$$x_s \approx \frac{q}{p} \approx \frac{4\sqrt{2}}{\lambda_2 y_s}. \quad (6.51)$$

Suponhamos agora o caso  $\xi = 0$  e  $\mu \neq 0$ . Então, os pontos fixos serão aqueles com

$$\begin{cases} y_v = \frac{2\sqrt{2}\gamma}{\mu} \\ b_v = -\frac{\gamma}{4} \\ x_v = -\frac{p_v}{2} + \sqrt{\frac{p_v^2}{2} + q} \end{cases}, \quad (6.52)$$

onde  $p_v = p(y_v)$ .

Se tivermos  $\mu \neq 0$  e  $\xi \neq 0$ , então os pontos fixos serão aqueles com

$$\begin{cases} y_w = -\frac{3^{3/2}\mu}{4\sqrt{2}\xi} + \sqrt{\frac{27\mu^2}{32\xi^2} + \frac{3^{3/2}\gamma}{\xi}} \\ b_w = \frac{\mu}{24\sqrt{2}}y_s - \frac{\gamma}{3} \\ x_w = -\frac{p_w}{2} + \sqrt{\frac{p_w^2}{2} + q} \end{cases}, \quad (6.53)$$

onde  $p_w = p(y_w)$ . Quando  $\mu = 0$ , nós recuperamos as equações (6.46), (6.47) e (6.48). Alternativamente, quando  $\xi \rightarrow 0$  nós recuperamos as equações (6.52).

A seguir, investigaremos a estabilidade dos pontos fixos nos dois primeiros casos acima, em que pelo menos um dos parâmetros dissipativos é nulo.

## 6.6 Análise de estabilidade dos pontos fixos

Para investigar a estabilidade dos pontos fixos, usamos a análise de estabilidade linear descrita no capítulo de teoria dinâmica não-linear. Como calculado na seção anterior, temos que analisar três possíveis casos

1. Caso  $\mu = 0$  e  $\xi \neq 0$ : Vamos considerar as soluções do sistema como

$$\begin{cases} x = x_s + x_1 \\ y = y_s + y_1 \\ z = z_s + z_1 \end{cases}, \quad (6.54)$$

A partir de (6.54), obtemos o sistema linearizado para correções, dado por

$$\begin{cases} \frac{dx_1}{dt} = \frac{8\xi y_s x_s}{3^{5/2}} y_1 + 4x_s b_1 = -c_2 y_1 + c_3 b_1 \\ \frac{dy_1}{dt} = -8\gamma y_1 - 6y_s b_1 = -d_2 y_1 - d_3 b_1 \\ \frac{db_1}{dt} = \frac{4}{x_s^2} \left( \frac{\lambda_2 y_s}{8\sqrt{2}} - \frac{1}{x_s} \right) x_1 - \frac{\lambda_2}{2\sqrt{2}x_s} y_1 - 4b_s b_1 = a_1 x_1 - a_2 y_1 - a_3 b_1 \end{cases} \quad (6.55)$$

A equação característica associada a esse sistema é dada por

$$q^3 + (d_2 + a_3)q^2 - (-d_2 a_3 + a_1 c_3 + a_2 d_3)q - a_1(d_3 c_2 + d_2 c_3) = 0. \quad (6.56)$$

Podemos reescrever a equação (6.56) na forma

$$q^3 + \alpha_1 q^2 - \alpha_2 q - \alpha_3 = 0, \quad (6.57)$$

onde

$$\begin{cases} \alpha_1 = \frac{20}{3}\gamma \\ \alpha_2 = \frac{32}{3}\gamma^2 + \frac{16}{x_s^2} \left( \frac{\lambda_2 y_s x_s}{8\sqrt{2}} - 1 \right) + \frac{3\lambda_2 y_s}{\sqrt{2}x_s} \\ \alpha_3 = \frac{64\gamma}{x_s^2} \left( \frac{\lambda_2 y_s x_s}{8\sqrt{2}} - 1 \right) \end{cases} \quad (6.58)$$

As raízes com  $\text{Re}(q) > 0$  correspondem à região de soluções instáveis.

Sem perda de generalidade, assumimos  $\lambda_2 = 1$ . De acordo com as soluções de (6.57), construímos o diagrama de estabilidade mostrado na figura 6.1. O diagrama mostra claramente que, quando  $\gamma > 1.84\xi$ , o sistema fica instável. Se  $\gamma \gg \xi$ , o sistema entra em processo de colapso, que tem sido mostrado como sendo caótico no capítulo anterior [16]. Se  $\gamma$  é diminuído (ou  $\xi$  aumentado), o sistema finalmente encontrará uma região de estabilidade onde a formação de autosólitons é possível.

2. Caso  $\xi = 0$  e  $\mu \neq 0$ : Para correções, nós temos o sistema

$$\begin{cases} \frac{dx_1}{dt} = \frac{\mu x_v}{2\sqrt{2}} y_1 + 4x_v b_1 \\ \frac{dy_1}{dt} = -\frac{7}{2}\gamma y_1 - \frac{12\sqrt{2}\gamma}{\mu} b_1 \\ \frac{db_1}{dt} = \frac{4}{x_v^3} \left( \frac{\lambda_2 \gamma}{4\mu} x_v - 1 \right) x_1 - \frac{\lambda_2}{2\sqrt{2}x_v} y_1 - 4b_v b_1 \end{cases} \quad (6.59)$$

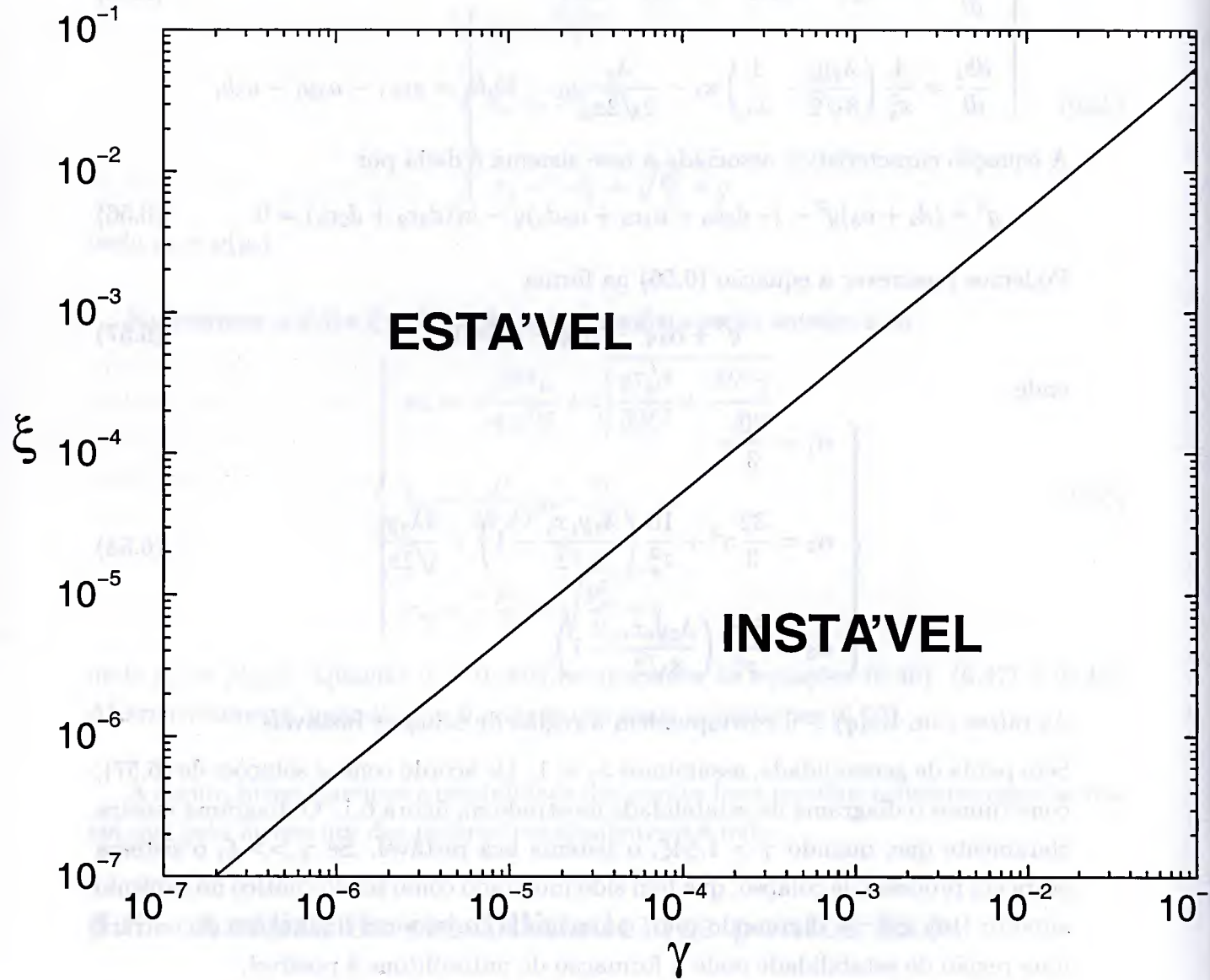


Figura 6.1: Análise de estabilidade dos pontos fixos para a equação de Gross-Pitaevskii incluindo alimentação ( $\gamma$ ) e perdas por três corpos ( $\xi$ ), no método variacional gaussiano.

O sistema (6.59) tem a mesma forma que o anterior (6.55), de modo que a equação característica tem a mesma forma que a equação (6.56); então, temos a equação característica

$$q^3 + \beta_1 q^2 - \beta_2 q - \beta_3 = 0, \quad (6.60)$$

onde

$$\begin{cases} \beta_1 = \frac{5}{2}\gamma \\ \beta_2 = \frac{7}{2}\gamma^2 + \frac{16}{x_v^2} \left( \frac{\lambda_2 \gamma x_v}{4\mu} - 1 \right) + \frac{6\lambda_2 \gamma}{x_v \mu} \\ \beta_3 = \frac{32\gamma}{x_v^2} \left( \frac{\lambda_2 \gamma x_v}{4\mu} - 1 \right) \end{cases} \quad (6.61)$$

Da mesma forma, assumindo  $\lambda_2 = 1$  e considerando as soluções da equação (6.60), construímos o diagrama de estabilidade da figura 6.2. Esse diagrama mostra claramente que, quando  $\gamma > 0.53\mu$ , o sistema é instável. Analogamente ao caso anterior, se  $\gamma$  é diminuído (ou  $\mu$  aumentado) o sistema por fim encontrará uma região estável em que a formação de autosólitons torna-se possível.

## 6.7 Simulações numéricas e discussões

Fizemos uma série de simulações numéricas da dinâmica do condensado empregando o método de diferenças finitas de Crank-Nicolson à equação (6.25) e os comparamos ao método variacional gaussiano. As funções de onda iniciais foram calculadas como na Ref. [77]. A seguir, apresentamos simulações com alguns dos conjuntos de parâmetros que conduzem aos autosólitons estáveis na escala de tempos suficientemente grandes (da ordem de  $\tau = 10^3$ ). Cálculos envolvendo parâmetros próximos aos realísticos foram realizados para que se possa comparar com os resultados experimentais envolvendo condensados de  ${}^7\text{Li}$ . As simulações incluindo os casos da região instável foram analisados no capítulo 5.

Na figura 6.3, mostramos a evolução temporal do número de átomos para  $\gamma = 10^{-3}$  e  $\xi = 10^{-3}$ . A formação dos autosólitons é demonstrada tanto na abordagem variacional gaussiana quanto por cálculos numéricos exatos. Há uma concordância notável entre ambas as abordagens. Note-se que o número de átomos não depende das condições iniciais. A abordagem variacional nos dá um número de átomos um pouco maior que os cálculos exatos. A figura 6.4 nos mostra o raio quadrático médio com os mesmos parâmetros. A abordagem variacional nos fornece um valor um pouco menor que o dos cálculos numéricos. Nas figuras 6.5 e 6.6, mostramos a evolução temporal do número de

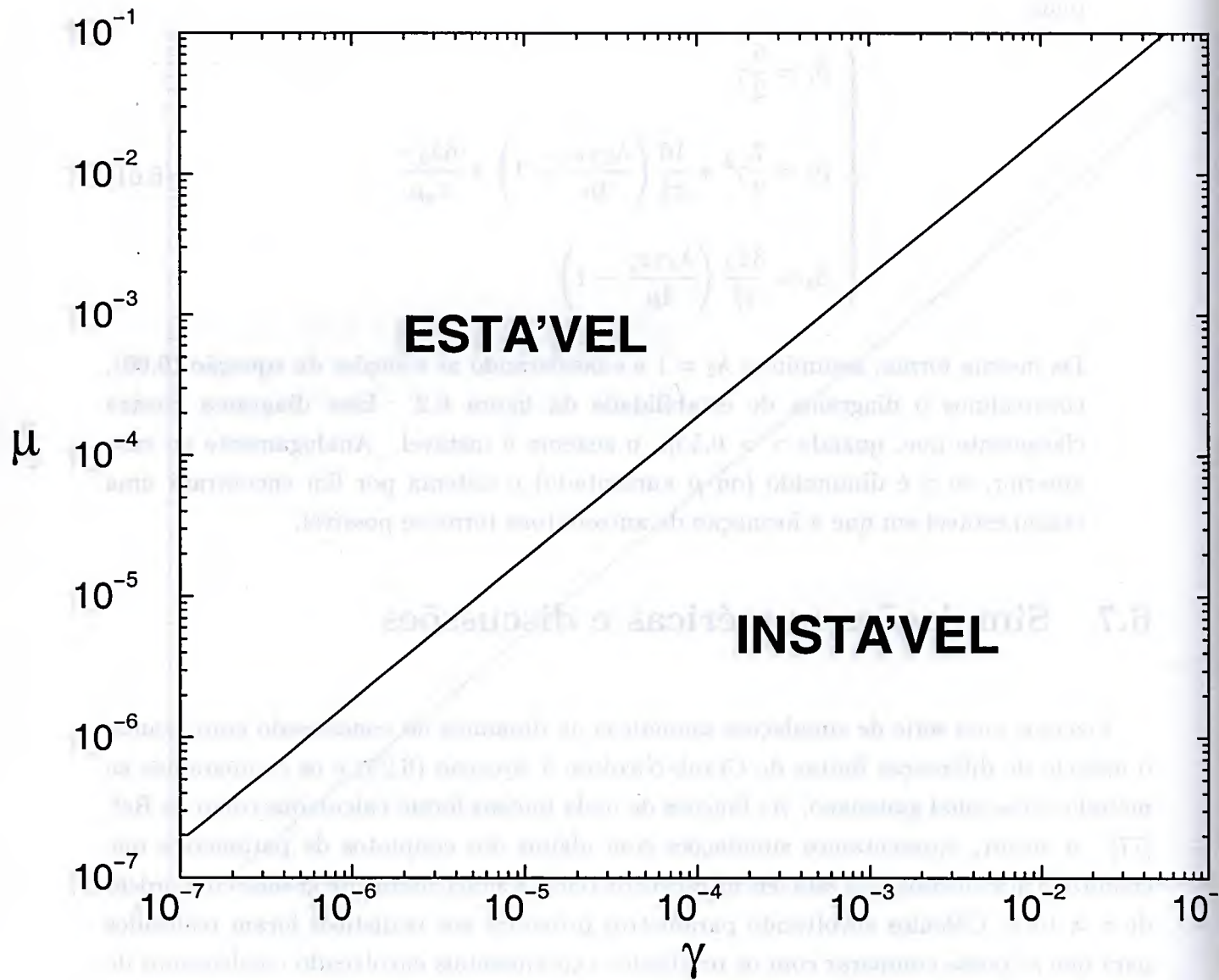


Figura 6.2: Análise de estabilidade dos pontos fixos para a equação de Gross-Pitaevskii incluindo alimentação ( $\gamma$ ) e perdas por dois corpos ( $\mu$ ), no método variacional gaussiano.

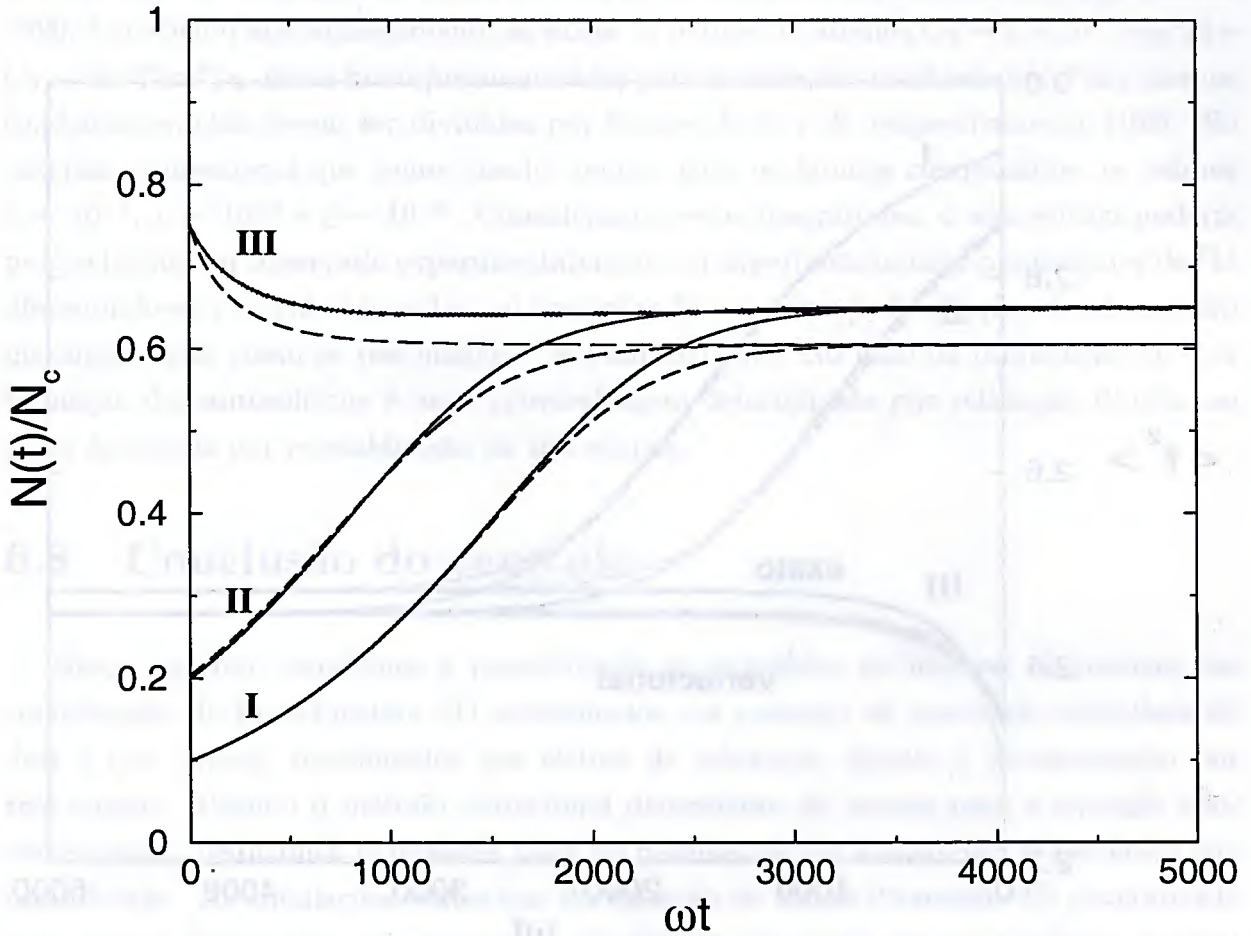


Figura 6.3: Evolução do número de átomos na equação de Gross-Pitaevskii com alimentação  $\gamma = 10^{-3}$  e dissipação por três corpos  $\xi = 10^{-3}$  ( $\mu = 0$ );  $N = \int |u|^2 d^3r$ . Os casos I, II e III correspondem às condições iniciais  $N(t = 0)/N_c = 0, 1; 0, 2; 0, 75$ ; respectivamente. As linhas sólidas referem-se à abordagem variacional gaussiana e linhas tracejadas aos cálculos numéricos.

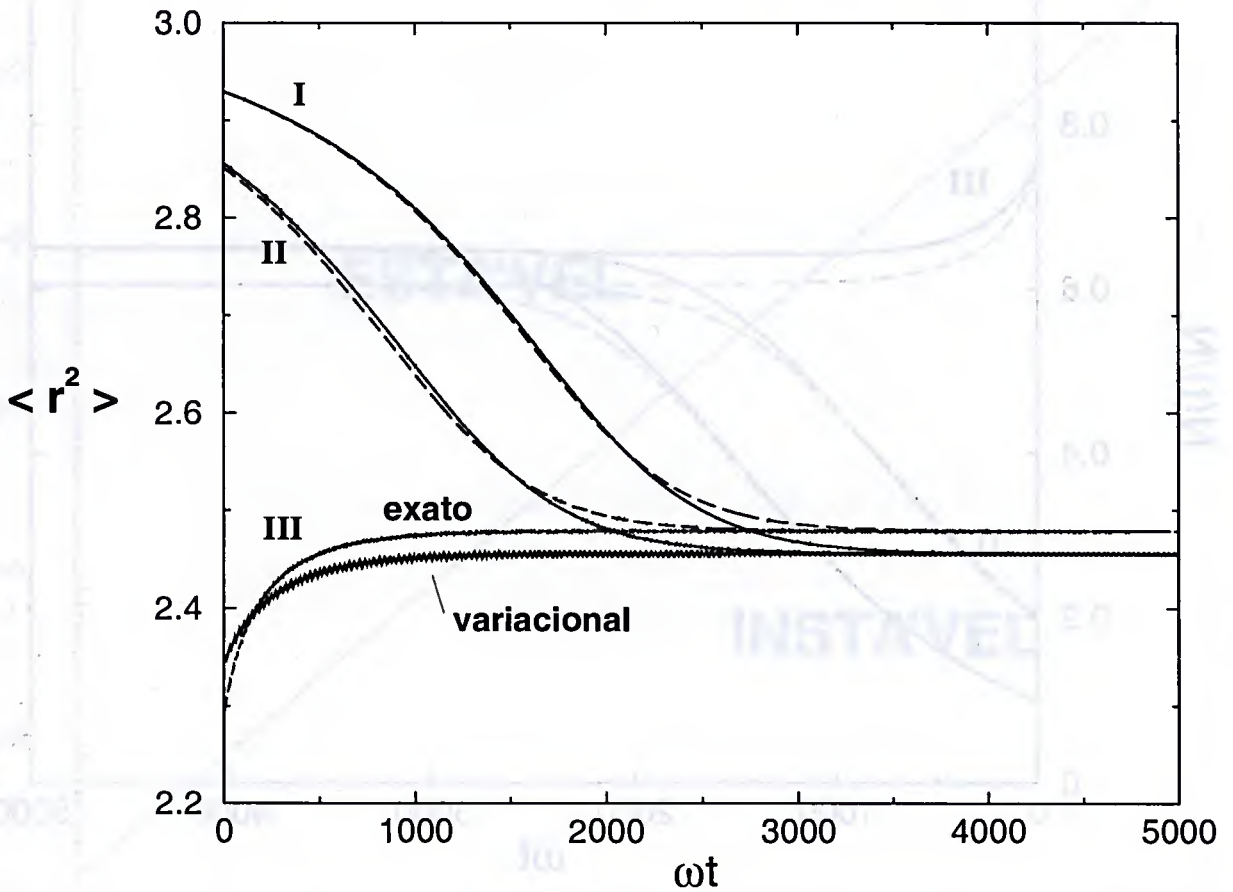


Figura 6.4: Evolução do raio quadrático médio na equação de Gross-Pitaevskii. Os mesmos parâmetros e convenções da figura 6.3. O raio quadrático médio é dado por  $\langle r^2 \rangle = \int r^2 |u|^2 d^3r$ .

átomos para  $\gamma = 5 \times 10^{-5}$  e  $\mu = 10^{-4}$ . A formação dos autosólitons é também demonstrada ou por abordagem variacional ou por cálculos numéricos exatos. Observações similares às das figuras 6.3 e 6.4 também se aplicam nesse caso. Nos experimentos com  ${}^7\text{Li}$ , a alimentação pode ser indiretamente inferida a partir das medidas realizadas pelo grupo da Universidade de Rice [15] e correspondem a uma taxa média de aproximadamente 600 átomos/s [107]. As perdas de dois e três corpos foram também medidas [83] e estimadas [108], fornecendo aproximadamente as taxas de perdas de átomos  $G_2 \sim 2 \times 10^{-14} \text{cm}^3/\text{s}$  e  $G_3 \sim 10^{-28} \text{cm}^6/\text{s}$ . Essas taxas foram medidas para átomos não condensados. Para átomos condensados, elas devem ser divididas por fatores de  $2!$  e  $3!$ , respectivamente [109]. No sistema adimensional que temos usado, temos, para os átomos condensados, os valores  $\gamma \sim 10^{-3}$ ,  $\mu \sim 10^{-4}$  e  $\xi \sim 10^{-6}$ . Considerando estas magnitudes, o autosóliton poderia possivelmente ser observado experimentalmente em experimentos com condensados de  ${}^7\text{Li}$  diminuindo-se  $\gamma$ , devido às perdas, ou aumentando-se a taxa de dissipação, devido a outro mecanismo tais como as ressonâncias de Feshbach [47]. No caso da diminuição de  $\gamma$ , a formação dos autosólitons é mais provavelmente determinada por relaxação dipolar ao invés de perdas por recombinação de três corpos.

## 6.8 Conclusão do capítulo

Neste capítulo, 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. Usando o método variacional dependente do tempo para a equação não-conservativa, deduzimos expressões para os parâmetros do autosóliton e checamos sua estabilidade. As simulações numéricas da equação de Gross-Pitaevskii 3D generalizada com termos dissipativos não-lineares e de alimentação estão em concordância notável com as previsões da aproximação variacional dependente do tempo, quando os valores dos parâmetros são tais que a estabilização é atingida. É interessante notar que a estabilização pode também ser observada numericamente no modelo dado na Ref. [14], quando  $\gamma$  é diminuído no tempo, mas os parâmetros utilizados estão muito acima dos realísticos e a relaxação dipolar é negligenciada. Essa estabilização verificada na Ref. [14] não foi reconhecida como uma manifestação do autosóliton, uma característica física que estamos indicando neste trabalho de tese. Concluindo, mostramos neste capítulo 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  ${}^7\text{Li}$  ultrafrios. No caso em que se diminui  $\gamma$  devido a colapsos e perdas, é mais provável que o autosóliton

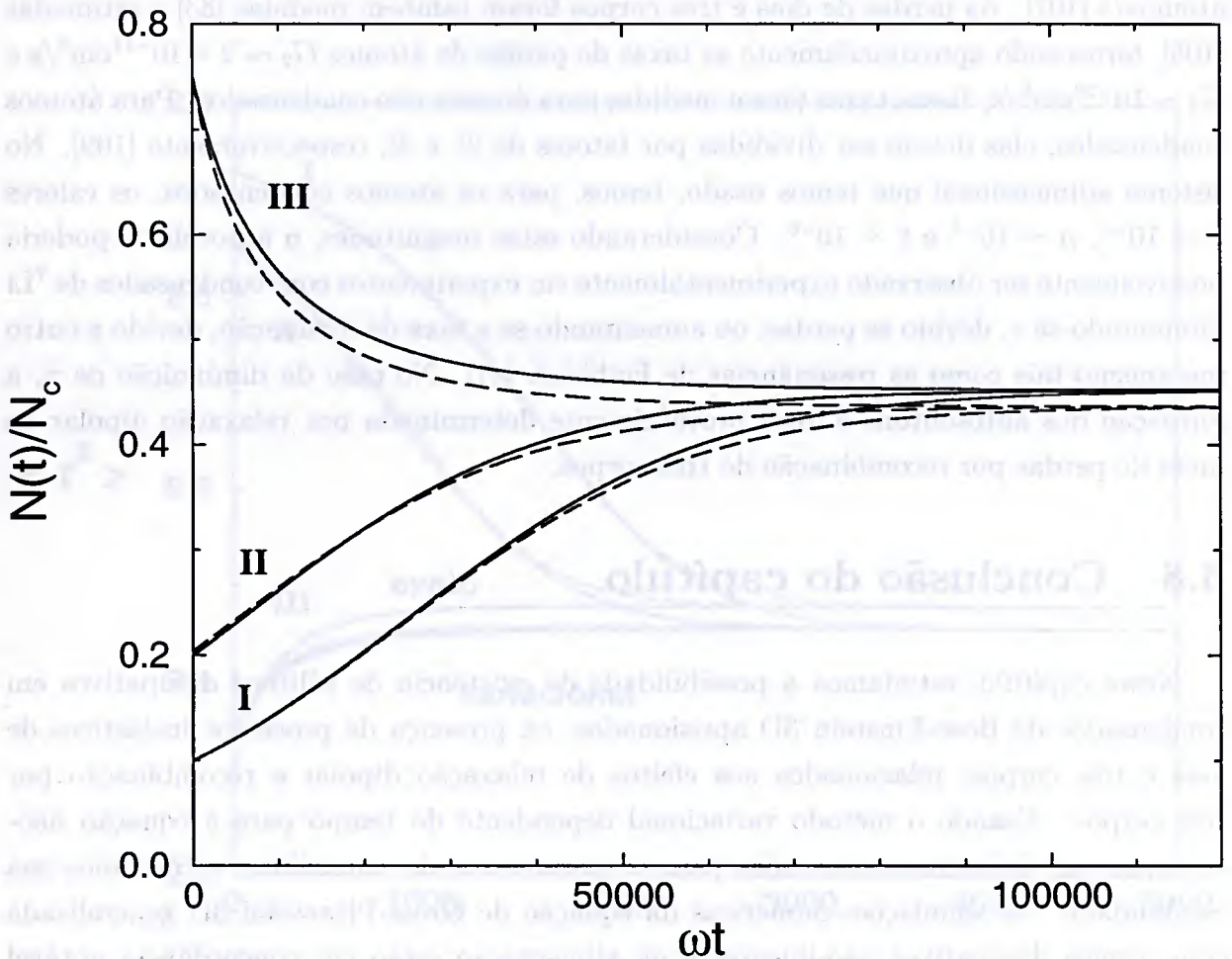


Figura 6.5: Evolução do número de átomos na equação de Gross-Pitaevskii com alimentação  $\gamma = 5 \times 10^{-5}$  e dissipação por dois corpos  $\mu = 10^{-4}$  ( $\xi = 0$ );  $N = \int |u|^2 d^3r$ . Os casos I, II e III correspondem às condições iniciais  $N(t = 0)/N_c = 0, 1; 0, 2; 0, 75$ ; respectivamente. As linhas sólidas referem-se à abordagem variacional gaussiana e linhas tracejadas aos cálculos numéricos.

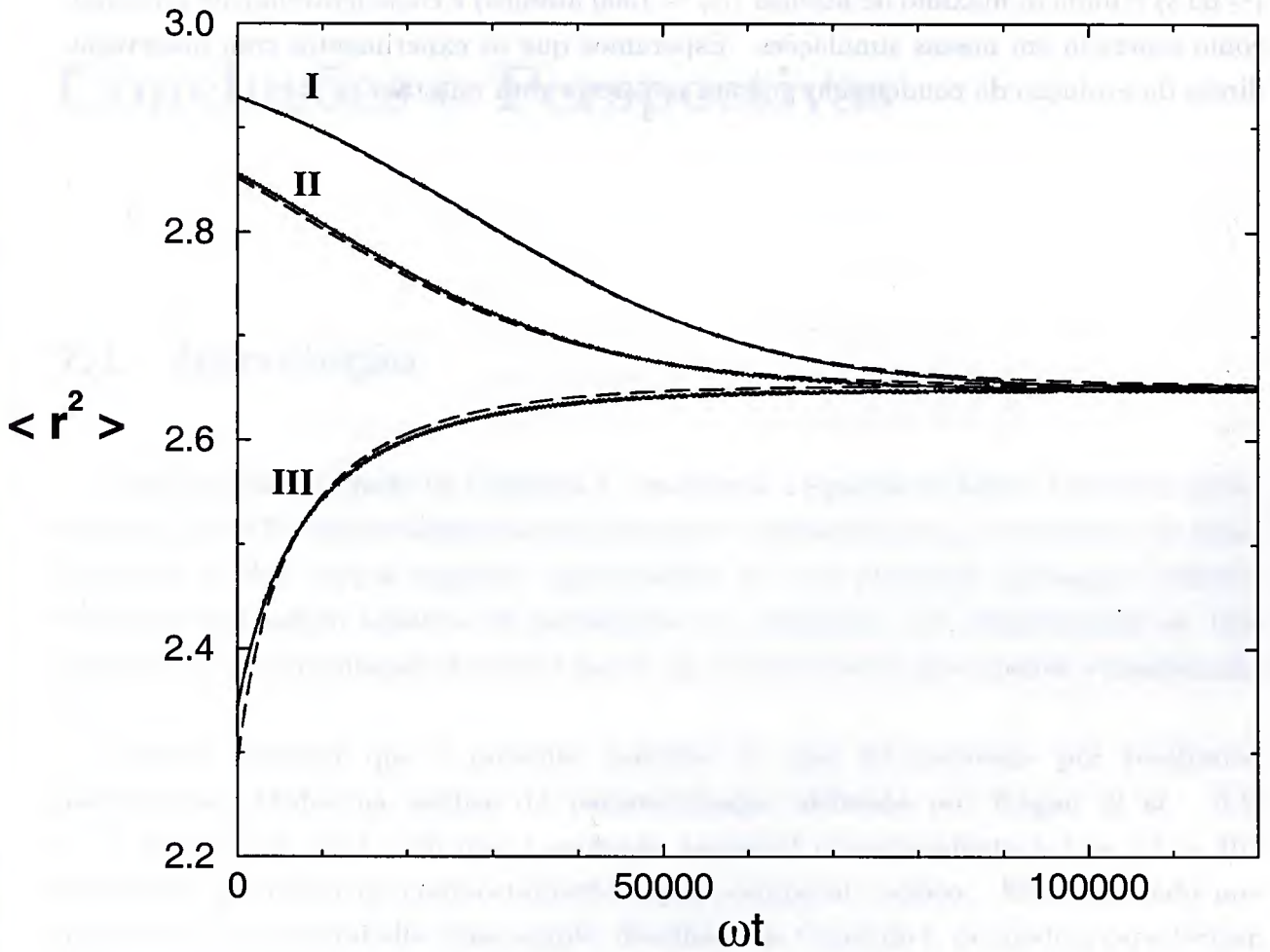


Figura 6.6: Evolução do raio quadrático médio na equação de Gross-Pitaevskii. Os mesmos parâmetros e convenções da figura 6.5. O raio quadrático médio é dado por  $\langle r^2 \rangle = \int r^2 |u|^2 d^3r$ .

possa ser formado devido à relaxação dipolar ao invés de processos de recombinação. Esses resultados podem ser relevantes nos experimentos atuais com comprimento de espalhamento negativo e mostram provavelmente um novo fenômeno de formação de sólitons tipo Pereira-Stenflo em condensados de Bose-Einstein com interações atrativas. Acreditamos que esse fenômeno já está ocorrendo no comportamento de longo tempo nos experimentos atuais com  $^7\text{Li}$  [83] ( $\omega \sim 2\pi \times 140\text{Hz}$ ), uma vez que para tempos mais longos ( $\sim 60\text{ s}$ ) o número máximo de átomos ( $N_c \sim 1300$  átomos) é consideravelmente reduzido, como esperado em nossas simulações. Esperamos que os experimentos com observação direta da evolução do condensado possam esclarecer esta questão.

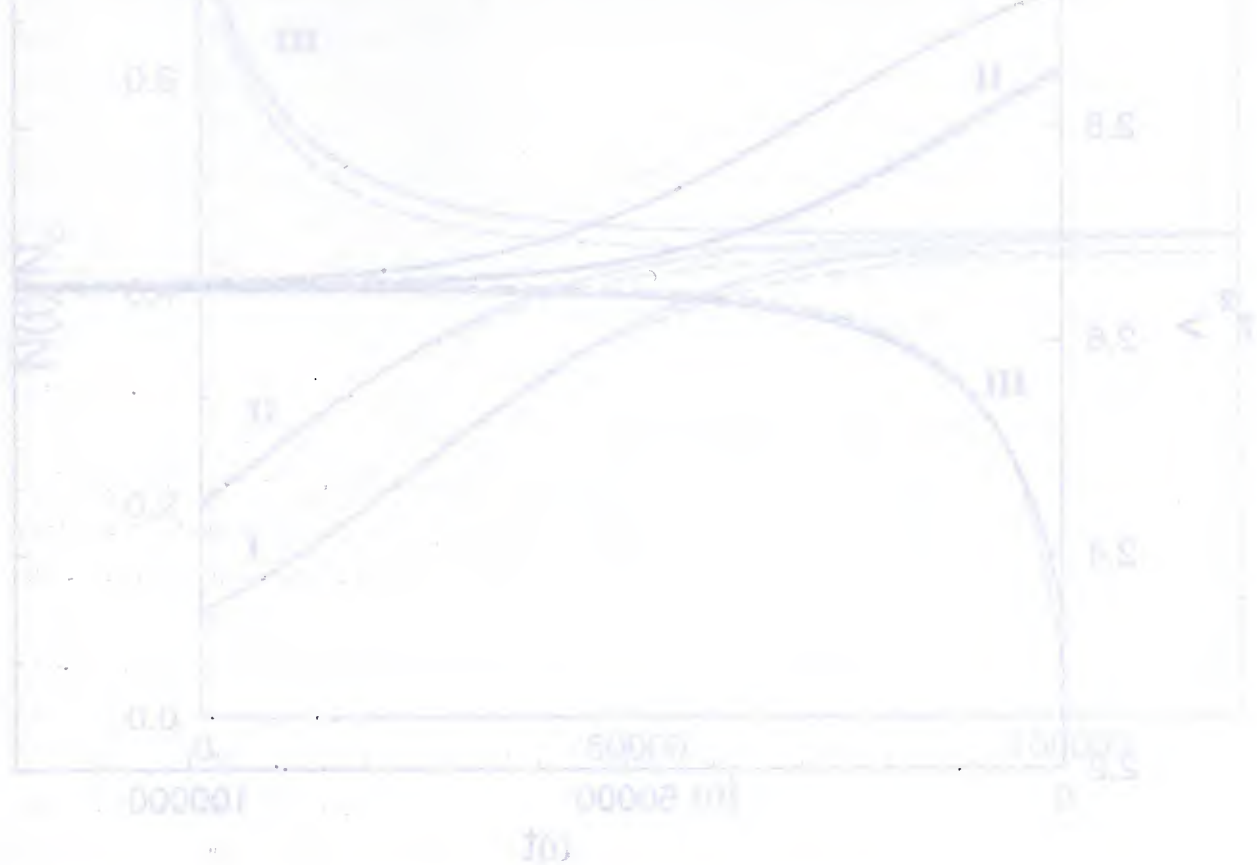


Figura 6.1: Evolução do número de átomos em função do tempo para diferentes condições iniciais. As curvas I, II e III correspondem a diferentes valores iniciais de  $N(0)$ . O eixo horizontal representa o tempo  $t$  em unidades de  $10^4$  segundos, e o eixo vertical representa o número de átomos  $N(t)$ .

# Capítulo 7

## Conclusões e Perspectivas

### 7.1 Introdução

Conforme foi detalhado no Capítulo 5, resolvemos a equação de Gross-Pitaevskii generalizada (EGPG) considerando sistemas atômicos condensados com comprimento de espalhamento de dois corpos negativo, aprisionados por um potencial harmônico esférico, utilizando um amplo espectro de parâmetros de dissipação por recombinação de três corpos ( $\xi$ ) e de alimentação atômica a partir da nuvem externa que envolve o condensado ( $\gamma$ ).

Convém ressaltar que o presente trabalho de tese foi motivado por resultados preliminares obtidos na análise da parametrização utilizada por Kagan *et al.* [14] ( $\gamma = 10^{-1}$  e  $\xi = 10^{-3}$ ), em que a evolução temporal correspondente a  $\tau = \omega t = 10^3$  apresentou indicação de comportamento espaço-temporal caótico. Esse resultado nos motivou a fazer um trabalho mais amplo, detalhado no Capítulo 5, de modo a caracterizar o comportamento dinâmico da equação para um espectro abrangente de valores dos parâmetros não-conservativos, onde consideramos as variações de ambos,  $\gamma$  e  $\xi$ , entre  $10^{-5}$  e  $10^{-1}$ , incluindo o caso em que  $\gamma = 0$ . Essa abrangência está dentro da perspectiva futura de análise de novos dados experimentais.

Com o objetivo de caracterizar os possíveis comportamentos dinâmicos dos sistemas descritos pela EGPG, em particular no que se refere à estabilidade, foram analisadas evoluções suficientemente grandes para a variável adimensional de tempo, ou seja, com  $\tau$  no mínimo igual a 500 ou superior.

Em síntese, foram encontrados os seguintes comportamentos dinâmicos, de acordo com as intensidades dos parâmetros não-conservativos  $\xi$  e  $\gamma$ :

- Variação inicial da magnitude da função de onda do condensado com posterior estabilidade das soluções para longos intervalos de tempo, caracterizadas 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.

Através dos cálculos que realizamos, foi possível comprovar a sugestão na Ref. [16] da possibilidade de existência de um crescimento exponencial do número de átomos gerando-se caos espaço-temporal. Esse comportamento foi confirmado analisando-se os gráficos do espaço de fase envolvendo o raio quadrático médio, bem como a evolução temporal dos observáveis número de átomos, raio quadrático médio, densidade e energia. Para mostrar a existência de caos, utilizamos o critério de Deissler-Kaneko, descrito no Capítulo 5, onde foi calculado o equivalente ao expoente de Lyapunov de equações diferenciais ordinárias. Esse **expoente de Lyapunov estendido** é associado a sistemas regidos por equações diferenciais parciais. Para tais sistemas, um valor positivo do expoente de Lyapunov estendido fornece o sinal característico do comportamento caótico. Foi verificado que, em geral, o comportamento caótico espaço-temporal deve ocorrer principalmente para  $\gamma > \xi$  e razão  $\gamma/\xi$  grande na escala considerada.

Nosso objetivo, que seguiu o de caracterizar a região do espaço de parâmetros  $(\gamma, \xi)$  em que ocorria caos, foi o de explicar fisicamente o que ocorria nesses sistemas nos casos em que se obtinha um valor constante dos observáveis (equilíbrio) durante a evolução do sistema. Com base na abordagem variacional, pôde-se verificar porque tais casos aconteciam e porque havia casos em que o sistema ficava instável.

No Capítulo 6, 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: os efeitos de relaxação dipolar e de recombinação por três corpos. Usando o método variacional dependente do tempo para a equação não-conservativa, deduzimos expressões para os parâmetros do autosóliton e checamos sua estabilidade. Foram determinadas as regiões dos espaços de parâmetros  $(\gamma, \xi)$  e  $(\gamma, \mu)$ , onde  $\mu$  corresponde às dissipações por colisões inelásticas de dois corpos, que apresentam instabilidade das soluções e aquelas que apresentam estabilidade das soluções. Estas últimas, associadas

aos pontos fixos dos sistemas da abordagem variacional, foram demonstradas como sendo soluções do tipo sóliton de Pereira-Stenflo.

As simulações numéricas da equação de Gross-Pitaevskii 3D generalizada com termos dissipativos não-lineares e de alimentação confirmam as previsões da teoria variacional de existência de autosólitons, correspondentes às regiões de estabilidade, e de regiões de instabilidade, como descobrimos no Capítulo 5 e confirmamos no Capítulo 6.

## 7.2 Relevância dos resultados obtidos

Podemos basicamente destacar dois resultados obtidos como aspectos relevantes neste trabalho de tese: a descoberta de caos espaço-temporal e de autosólitons na evolução temporal da função de onda obtida a partir da equação não-conservativa de Gross-Pitaevskii.

A verificação de caos espaço-temporal é relevante para demonstrar um limite de validade no uso do formalismo generalizado de Gross-Pitaevskii para descrever condensados. A função de onda obtida a partir da EGPG para tempos suficientemente grandes e considerando-se as intensidades dos parâmetros podem não representar somente o estado fundamental do gás diluído, mas também estados excitados. Esse resultado pode nos levar a duas possíveis hipóteses. A mais provável é que, tendo em vista que tal comportamento caótico não está sendo observado experimentalmente, a região de grande intensidade dos parâmetros não-conservativos deve ser descartada. Nessa hipótese, a parametrização de Kagan *et al.* para descrever condensados é inadequada. A segunda hipótese é que existe a possibilidade experimental de ocorrência de fortes instabilidades no sistema que poderiam ser caracterizadas como caóticas.

Dos nossos cálculos, podemos inferir o possível limite superior para a intensidade dos parâmetros não-conservativos como sendo  $\gamma \cong 8 \times 10^{-4}$  e  $\xi \sim 10^{-5}$ . Com essa intensidade dos parâmetros  $\gamma$  e  $\xi$ , concluímos que o formalismo estendido de Gross-Pitaevskii para descrever condensados de átomos de Lítio torna-se adequado, pois a EGPG pode descrever corretamente a dinâmica do condensado de Bose-Einstein para sistemas com interação atrativa de dois corpos, inclusive reproduzindo fenômenos complexos como o colapso. Além disso, tendo em vista a possibilidade de modificação da intensidade das interações entre os átomos por meio de ressonâncias Feshbach nos leva a acreditar na possibilidade de verificação de muitos dos comportamentos dinâmicos descritos para intensos valores dos parâmetros.

A descoberta teórica dos autosólitons nesses sistemas condensados com interação

atrativa de dois corpos e presença de colisões inelásticas é muito importante porque ela pode ser realisticamente constatada em laboratório, uma vez que o regime de soluções em equilíbrio dos observáveis foi obtido em uma ampla região do espaço de parâmetros  $(\gamma, \xi)$  e  $(\gamma, \mu)$ , inclusive na região realística de baixa intensidade. A possível descoberta experimental de autosólitons em condensados bosônicos indicaria a correção na utilização desse formalismo para descrever condensados de Bose-Einstein com interações atrativas de dois corpos.

### 7.3 Perspectivas

Dado o grande interesse atual (teórico e experimental) no estudo de sistemas condensados e de fenômenos óticos não-lineares, somados ao número ainda grande de questões em aberto em sistemas não-lineares, pode-se dar continuidade a esse trabalho em uma série de linhas de pesquisa, muitas das quais estão em pleno desenvolvimento.

Entre as perspectivas que merecem destaque, podemos citar as seguintes:

- O estudo de condensados considerando o caso de temperatura finita ( $T \neq 0$ ), em especial a extensão da equação de Gross-Pitaevskii para o caso com temperatura, seja no caso conservativo ou não, tomando como base trabalhos já desenvolvidos na literatura (ver, por exemplo, as referências [52, 112, 8]);
- O estudo do comportamento do sistema condensado com a variação do comprimento de espalhamento dos átomos, conforme trabalhos iniciados em [47];
- O estudo de interação e acoplamento de condensados de duas componentes, mistas ou não [114, 115, 116, 117, 118], de tunelamento em condensados acoplados [119] e de efeitos de entrelaçamento em condensados, seguindo estudo feito em [36];
- O estudo de propriedades de condensados com espécies atômico-moleculares diferentes, assunto que vem sendo intensamente pesquisado por vários autores, entre os quais [120, 121, 122, 123];
- O estudo de condensados em estados excitados [124];
- A descrição teórica de condensação de sistemas fermiônicos;
- A aplicação das técnicas de cálculo aqui desenvolvidas a inúmeros sistemas físicos que podem ser descritos por diferentes formas de equações não-lineares.

# Apêndice A

## Equações de Schrödinger não-lineares

As equações não-lineares do tipo Schrödinger são muito importantes, pois elas descrevem um grande número de fenômenos de grande em Física, tendo extensões relevantes em outros domínios científicos como, por exemplo, em Engenharia 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**:

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = a\psi - v \frac{\partial \psi}{\partial x} + b \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} - c |\psi|^2 \psi, \quad (\text{A.1})$$

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.

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

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

desde que se satisfaça  $\text{Re}(a) < 0$ ,  $\text{Re}(c) < 0$  e  $\text{Re}(d) > 0$ .

A equação de Schrödinger não-linear, apropriada à descrição de condensados de Bose-Einstein, é conhecida como equação de Gross-Pitaevskii 3D (EGP) [70]

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\vec{r}, t) + NU |\Psi|^2 \Psi(\vec{r}, t), \quad (\text{A.3})$$

onde  $U$  é a interação átomo-átomo, dada por

$$U = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m} \quad (\text{A.4})$$

e  $m$  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.

Outras generalizações são possíveis, tais como a introdução de um potencial externo ou de termos não-conservativos nessa equação. No primeiro caso, temos a equação de Gross-Pitaevskii com potencial, a qual apresenta a seguinte forma tridimensional

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\vec{r}, t) + V_{ext}(\vec{r}) \Psi(\vec{r}, t) + NU |\Psi|^2 \Psi(\vec{r}, t) \quad (\text{A.5})$$

A outra possibilidade citada refere-se a termos dissipativos e de alimentação para descrever sistemas em que há perdas e ganhos de átomos na região onde o potencial externo os confina. Neste caso, 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

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + V_{ext}(\vec{r}) \Psi - NU |\Psi|^2 \Psi + iG_\gamma \Psi - i(G_\mu |\Psi|^2 + G_\xi |\Psi|^4) \Psi \quad (\text{A.6})$$

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

# Apêndice B

## Condensação de Gás Ideal Homogêneo de Bósons

### B.1 Sistemas de Bose

Um sistema de Bose\* é aquele em que todas as suas partículas apresentam momento angular intrínseco com número quântico inteiro. A característica predominante de um sistema de bósons é a atração estatística entre as partículas. Ao contrário do que ocorre com os férmions, as partículas tendem a ter os mesmos números quânticos.

O formalismo para um sistema de Bose ideal é muito similar ao de um sistema de Fermi ideal, diferindo apenas pela variação de sinais presentes em várias expressões. As conseqüências dessas variações de sinais são dramaticamente diferentes. Enquanto os férmions em baixa temperatura tendem a saturar os orbitais até uma energia específica conhecida como energia de Fermi, os bósons tendem a se atrair e se condensar no estado fundamental. Quando o número de partículas é conservado, esta atração leva ao fenômeno de **condensação de Bose-Einstein**, que é também a base do fenômeno de superfluidez. Esta condensação ocorre abruptamente e abaixo de uma temperatura de transição. A transição de fase resultante conduz à superfluidez no  $^4\text{He}$  e conduz à supercondutividade no nióbio e em vários outros metais e ligas metálicas. Como se pode constatar na literatura, a condensação de Bose-Einstein é um fenômeno comum, que ocorre em todas as escalas, da matéria condensada à matéria nuclear, das partículas elementares à astrofísica, com idéias que envolvem conceitos físicos de vários campos da Física.

A condensação de Bose-Einstein, um fenômeno que pode ocorrer em um sistema bosônico real, é convenientemente estudada através de um gás ideal de bósons, conforme segue.

---

\*O conteúdo deste Apêndice está baseado nas Refs. [5].

## B.2 Gases de Bose ideais

A função de partição para os gases ideais de Bose em uma isocoleção gran-canônica, para um volume  $V$  e uma temperatura  $T$ , é dada por

$$Q_N(V, T) = \sum_{\{n_p\}} e^{-\beta E\{n_p\}} \quad , \quad (\text{B.1})$$

onde

$$\beta = \frac{1}{kT} \quad , \quad (\text{B.2})$$

$$E\{n_p\} = \sum_p \epsilon_p n_p \quad , \quad (\text{B.3})$$

e os números de ocupação são restritos à condição

$$\sum_p n_p = N \quad , \quad (\text{B.4})$$

sendo seus possíveis valores dados por:  $n_p = 0, 1, 2, 3, \dots$  .

Para um gás de Bose ideal, a função-partição não pode ser avaliada facilmente devido à restrição (B.4). Então, ao invés da função-partição, nós consideramos a granfunção-partição

$$\mathcal{D}(z, V, T) = \sum_{N=0}^{\infty} z^N Q_N(V, T) = \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{\substack{\{n_p\} \\ \sum n_p = N}} z^N e^{-\beta \sum \epsilon_p n_p} \quad (\text{B.5})$$

$$\Rightarrow \mathcal{D}(z, V, T) = \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{\substack{\{n_p\} \\ \sum n_p = N}} \sum_p (z e^{-\beta \epsilon_p})^{n_p} \quad . \quad (\text{B.6})$$

onde  $z$  corresponde à fugacidade, definida por

$$z = e^{\beta \mu} \quad , \quad (\text{B.7})$$

com  $\mu$  correspondendo ao potencial químico.

Agora, devemos perceber que o duplo somatório dado acima é equivalente a somar sobre cada  $n_p$  independentemente. Assim, temos que

$$\mathcal{D}(z, V, T) = \sum_{n_0} \sum_{n_1} \dots [(z e^{-\beta \epsilon_0 n_0})(z e^{-\beta \epsilon_1 n_1}) \dots] \quad (\text{B.8})$$

$$\Rightarrow \mathcal{D}(z, V, T) = \prod_p \left[ \sum_n (z e^{-\beta \epsilon_p n_p}) \right] \quad , \quad (\text{B.9})$$

onde a soma em  $n$  se estende por todos os valores  $n = 0, 1, 2, \dots$  para um gás de Bose. O resultado final é, então

$$\mathcal{D}(z, V, T) = \prod_p \frac{1}{1 - ze^{-\beta\epsilon_p}} . \quad (\text{B.10})$$

A equação de estado é dada por

$$\frac{PV}{kT} = \log \mathcal{D}(z, V, T) = \sum_p \log(1 - ze^{-\beta\epsilon_p}) \quad (\text{B.11})$$

e os números de ocupação médios são dados, então, por

$$\langle n_p \rangle = \frac{1}{\mathcal{D}} \sum_{N=0}^{\infty} z^N \sum_{\substack{\{n_p\} \\ \sum n_p = N}} n_p e^{-\beta \sum \epsilon_p n_p} \quad (\text{B.12})$$

$$\Rightarrow \langle n_p \rangle = \frac{ze^{-\beta\epsilon_p}}{1 - ze^{-\beta\epsilon_p}} = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_p - \mu)} - 1} , \quad (\text{B.13})$$

que é também freqüentemente chamada de probabilidade de ocupação.

O número de partículas é dado por

$$N = \sum_p \frac{ze^{-\beta\epsilon_p}}{1 - ze^{-\beta\epsilon_p}} . \quad (\text{B.14})$$

Da equação (B.14) conclui-se que

$$N = \sum_p \langle n_p \rangle . \quad (\text{B.15})$$

Agora, façamos  $V \rightarrow \infty$  e transformemos as somas sobre  $p$  em integrais em  $p$ , o que é claramente possível se a expressão dada é finita para todo  $p$ .

Para o gás de Bose ideal, o somatório existente em (B.11) e (B.13) divergem quando  $z \rightarrow 1$ , porque o termo correspondendo a  $p = 0$  diverge. Assim, o termo com  $p = 0$  deve ser retirado da soma e o somatório restante pode ser transformado em uma integral.

As equações de estado obtidas para um gás de Bose ideal são, então, dadas por

$$\begin{cases} \frac{P}{kT} = -\frac{4\pi}{h^3} \int_0^{\infty} dp \, p^2 \log(1 - ze^{-\beta p^2/2m}) - \frac{1}{V} \log(1 - z) \\ \frac{1}{v} = \frac{4\pi}{h^3} \int_0^{\infty} dp \, p^2 \frac{1}{z^{-1}e^{-\beta p^2/2m} - 1} - \frac{1}{V} \frac{z}{1 - z} \end{cases} , \quad (\text{B.16})$$

onde  $v = V/N$ .

Da expressão (B.13), concluímos que o número de ocupação médio para o nível de partícula única com  $\vec{p} = \vec{0}$  é dado por

$$\langle n_0 \rangle = \frac{z}{1 - z} . \quad (\text{B.17})$$

Assim, pode ser verificado de modo direto que (B.16) pode também ser escrito na forma

$$\begin{cases} \frac{P}{kT} = -\frac{1}{\lambda^3} g_{5/2}(z) - \frac{1}{V} \log(1-z) \\ \frac{1}{v} = \frac{1}{\lambda^3} g_{3/2}(z) - \frac{1}{V} \langle n_0 \rangle \end{cases}, \quad (\text{B.18})$$

onde o comprimento de onda térmico  $\lambda$  é dado por

$$\lambda = \sqrt{\frac{2\pi\hbar^2}{mkT}}. \quad (\text{B.19})$$

Além disso, temos

$$g_{5/2}(z) = -\frac{4}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty dx \, x^2 \log(1 - ze^{-x^2}) = \sum_{i=1}^{\infty} \frac{z^i}{i^{5/2}} e \quad (\text{B.20})$$

$$g_{3/2}(z) = z \frac{\partial}{\partial z} g_{5/2}(z) = \sum_{i=1}^{\infty} \frac{z^i}{i^{3/2}} \quad (\text{B.21})$$

As principais propriedades destas funções são dadas no Apêndice C.

O termo correspondente ao mais baixo nível contribui significativamente para (B.18) se  $\langle n_0 \rangle/V$  é um número finito, isto é, se uma fração finita de todas as partículas no sistema ocupa o nível com  $\vec{p} = \vec{0}$ . Como descreveremos, esse comportamento dá origem ao fenômeno de condensação de Bose-Einstein.

Analisando a forma de  $\langle n_p \rangle$ , concluímos que para um gás bosônico a função molar de Gibbs ou potencial químico tem que ser negativo, pois se  $\mu$  fosse positivo o estado com  $\epsilon_p = \mu$  teria um número de ocupação infinito. Assim, para um gás bosônico com um número de partículas limitado e uma escala de energia em que o mais baixo nível orbital tenha energia zero, o potencial molar de Gibbs é sempre negativo. Na figura B.1, vemos a forma de  $\langle n_p \rangle$  como função de  $\beta(\epsilon_p - \mu)$ , como dado em (B.13). O número de ocupação cai de um valor infinito em  $\epsilon_p = \mu$  até zero no infinito.

O número de partículas em tal sistema aumenta com a temperatura. O potencial químico  $\mu$  deve diminuir com o aumento da temperatura. No caso em que  $\mu$  seja mantido constante por um reservatório de partículas, pode-se obter de forma direta a termodinâmica do sistema. Mas, no caso em que  $N$  seja mantido constante, como em um fluido de átomos de  $^4\text{He}$ , o formalismo de sistemas de Bose leva a conseqüências sem qualquer análogo em sistemas de Fermi e sistemas clássicos.

Há casos em que as partículas bosônicas não são conservadas, como em um “gás de fótons”. Nesses sistemas, existem processos em que, por exemplo, dois fótons

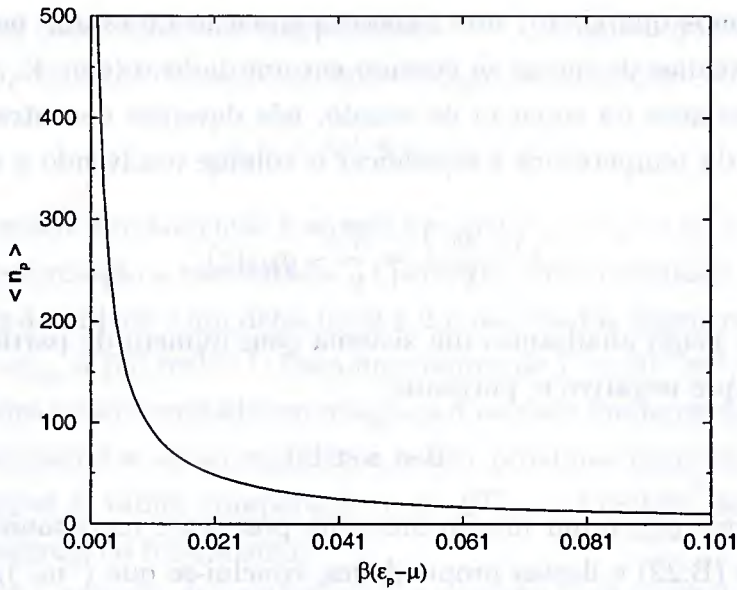


Figura B.1: Comportamento do número médio de partículas versus  $\beta(\epsilon_p - \mu)$ .

interagem através de um acoplamento não-linear para produzir três fótons. Para adaptar o formalismo do gás de Bose ideal a fim de levar em conta a possibilidade de não-conservação, basta que se omitam os vínculos sobre o número de partículas. Assim, o tratamento de partículas não-conservadas equivale a tomar  $\mu = 0$ , ou seja, o potencial químico em um gás de Bose não-conservado deve ser nulo.

Já no caso anterior, o vínculo sobre  $N$  implicará no aparecimento da condensação de Bose-Einstein.

### B.3 Condensação de Bose-Einstein

A condensação de Bose-Einstein (condensação de Bose-Einstein) é uma transição de fase em que um número macroscópico de partículas bosônicas tendem a ocupar simultaneamente o mais baixo estado quântico em um sistema físico.

Tendo em mente a discussão anterior sobre a conservação de partículas, consideremos agora um gás de Bose ideal obedecendo à restrição (B.15), ou seja, um sistema ideal de bósons cujo número é conservado (mantido em um recipiente de paredes impermeáveis, por exemplo). Então, o potencial químico deve aumentar quando a temperatura diminui, exatamente como no caso fermiônico.

Vamos assumir que os bósons sejam partículas materiais com energia cinética  $\epsilon =$

$p^2/2m$ . Então, temos que (B.16) nos fornece a equação de estado para esse gás ideal de Bose de  $N$  partículas de massa  $m$  contido em um dado volume  $V$ . Para estudar em detalhes as propriedades da equação de estado, nós devemos encontrar a fugacidade  $z$  como uma função da temperatura e especificar o volume resolvendo a segunda equação, isto é

$$\lambda^3 \frac{\langle n_0 \rangle}{V} = \frac{\lambda^3}{v} - g_{3/2}(z) \quad (\text{B.22})$$

Nessa equação, como analisamos um sistema com número de partículas conservado, temos que  $\mu$  é sempre negativo e, portanto,

$$0 < z < 1 \quad (\text{B.23})$$

Assim, temos que  $g_{3/2}$  é um função limitada, positiva e monotonicamente crescente em  $z$ . A partir de (B.22) e destas propriedades, conclui-se que  $\langle n_0 \rangle/V > 0$  quando o volume específico e a temperatura são tais que

$$\frac{\lambda^3}{V} > g_{3/2}(1) \quad (\text{B.24})$$

Isto significa que uma fração finita das partículas ocupa o mais baixo nível de energia. Este é o fenômeno conhecido como **condensação de Bose-Einstein**. A condição (B.24) define um subespaço do espaço termodinâmico  $P - v - T$  que corresponde à região de transição da condensação de Bose-Einstein; nesta região, o sistema pode ser considerado como uma mistura de duas fases, uma composta de partículas com  $p = 0$  e a outra com  $p \neq 0$ .

Para um dado volume  $v$ , a superfície que separa a região de condensação do restante do espaço  $P - v - T$  nos permite determinar a temperatura de transição para estado condensado, denominada temperatura crítica, dada por

$$T_c = \frac{2\pi\hbar^2}{mk[v g_{3/2}(1)]} \quad (\text{B.25})$$

A temperatura crítica  $T_c$  é atingida quando o comprimento de onda térmico é da mesma ordem de magnitude que a separação média entre partículas.

Assim, para  $T < T_c$ , temos uma transição para o estado condensado, o que ocorre, associada com uma população anômala do estado fundamental.

Para explorar a população do estado fundamental e dos mais baixos estados excitados, analisamos o número de partículas e os valores permitidos de  $\epsilon_p$

$$\epsilon_{n_x, n_y, n_z} = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{1}{\lambda_x^2} + \frac{1}{\lambda_y^2} + \frac{1}{\lambda_z^2} \right) \quad (\text{B.26})$$

Assumindo uma caixa cúbica de comprimento  $V^{1/3}$  e exigindo que um número inteiro de metade de comprimentos de onda caibam ao longo de cada eixo, ou seja

$$\frac{1}{2}n_i\lambda_i = V^{1/3} \quad i = x, y, z \quad (\text{B.27})$$

A energia do estado fundamental é aquela em que  $n_x = n_y = n_z$  e nós escolhemos a escala de energia em relação a esse estado. O primeiro estado excitado tem dois números quânticos  $n_i$  iguais à unidade e um deles igual a 2 (três estados degenerados). A diferença em energia é  $\epsilon_{211} - \epsilon_{111} = 6h^2/mV^{2/3}$ . Para um volume de  $V = 10^{-3}m^3$ ,  $m \cong 6,6 \cdot 10^{-27}kg$ , a energia do primeiro estado excitado em relação à do estado fundamental é de  $2,5 \cdot 10^{-37}J$ . Assim, os estados discretos estão realmente muito próximos entre si, e para qualquer temperatura razoável é válida comparação com  $kT$  e a hipótese de substituição dos somatórios por integrais no formalismo.

Considere agora o número de partículas  $n_0$  no estado fundamental. Se  $n_0 \gg 1$ , segue que  $\beta(\epsilon_{111} - \mu) \ll 1$  e nós podemos expandir a exponencial até a primeira ordem, de modo que se obtém

$$n_0 \cong \frac{kT}{\epsilon_{111} - \mu} \quad (\text{B.28})$$

Assim, a população do estado fundamental torna-se comparável ao número inteiro de partículas no sistema (por exemplo,  $n_0 \cong 10^{22}$  se  $\beta(\epsilon_{111} - \mu) \sim 10^{-22}$ ).

Quanto à população do primeiro estado excitado, tomando  $T \cong 10$ , temos que  $(\epsilon_{111} - \mu)/k \cong 10^{-21}$  enquanto que  $(\epsilon_{211} - \epsilon_{111})/k \cong 10^{-14}$ , de modo que  $n_{211}/n_0 \cong 10^{-7}$ . A população de estados excitados superiores continua a cair extremamente rápido.

Assim, concluímos que quando a temperatura diminui em um gás de Bose ideal, o potencial químico aumenta e se aproxima da energia do estado fundamental. A população do estado fundamental aumenta significativamente quando se atinge a temperatura crítica  $T_c$ . O número de ocupação de qualquer outro estado individual é relativamente negligenciável.

Para encontrar  $z$  como uma função de  $T$  e  $v$  nós devemos resolver grafica ou numericamente (B.22). Podemos analisar a curva da fugacidade  $z$  na figura ?? para um grande e finito valor do volume total  $V$ . No limite  $V \rightarrow \infty$ , nós obtemos

$$z = \begin{cases} 1 & \text{se } \frac{\lambda^3}{v} \geq g_{3/2}(1) \\ z' / g_{3/2}(z') = \frac{\lambda^3}{v} & \text{se } \frac{\lambda^3}{v} \leq g_{3/2}(1) \end{cases} \quad (\text{B.29})$$

Para o segundo caso em (B.29), o valor de  $z$  deve ser encontrado por métodos numéricos.

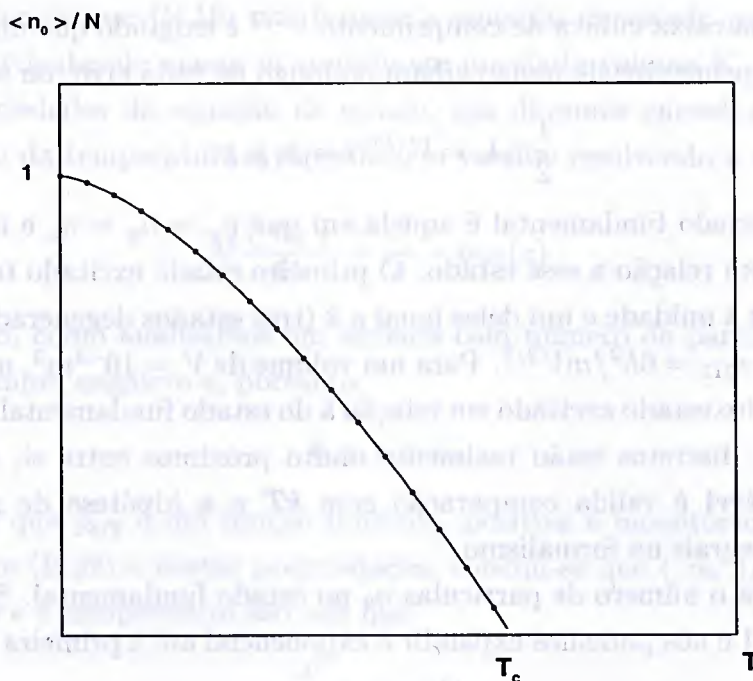


Figura B.2: Número de ocupação médio do estado fundamental

A partir de de (B.17) e (B.22), podemos escrever

$$\frac{\langle n_0 \rangle}{N} = \begin{cases} 0 & \text{se } \frac{\lambda^3}{v} \geq g_{3/2}(1) \\ 1 - \left(\frac{T}{T_c}\right)^{3/2} & \text{se } \frac{\lambda^3}{v} \leq g_{3/2}(1) \end{cases} \quad (\text{B.30})$$

Um gráfico da fração de condensado  $\langle n_0 \rangle / N$  é dado na figura B.2. Pode-se notar que quando  $T < T_c$ , uma fração finita das partículas no sistema ocupa o estado fundamental. Por outro lado,  $\langle n_p \rangle / N$  tende a zero para  $p \neq 0$ , sendo nula para  $T = 0$ . Portanto, para  $T > T_c$ , as partículas distribuem-se igualmente por todos os níveis, mas, para  $T < T_c$ , uma fração finita dada pela expressão em (B.30) ocupa o nível com  $p = 0$ , enquanto que o pouco restante espalha-se pelos níveis excitados.

A condensação de Bose-Einstein é, às vezes, descrita como uma condensação no espaço de momento. Suas manifestações termodinâmicas são as de uma transição de fase de primeira ordem. Se examinarmos somente a equação de estado, não encontraremos nenhuma distinção entre esta e uma condensação gás-líquido. De fato, se as partículas de um gás de Bose são colocadas em um campo gravitacional, então na região de condensação haverá uma separação espacial das duas fases, exatamente como na condensação gás-líquido. O termo condensação no espaço de momento apenas serve para enfatizar que a causa da condensação de Bose-Einstein encontra-se na simetria da função de onda e não em qualquer interação interpartículas.

Note que para  $v < v_c$ , a pressão é igual à pressão de vapor, dada por

$$P = P_0 = \frac{kT g_{5/2}(1)}{\lambda^3}, \quad (\text{B.31})$$

e, para  $v > v_c$ , temos

$$P = \frac{kT g_{5/2}(z)}{\lambda^3}. \quad (\text{B.32})$$

Assim, no diagrama  $P \times v$ , para valores inferiores ao crítico, temos isotermas com  $P$  constante (horizontal), o que pode ser interpretado, tal como no caso da condensação ordinária, como uma mistura de duas fases, que correspondem aos pontos em que  $v = 0$  e  $v = v_c$ , chamadas respectivamente de fase condensada e fase gasosa. A porção horizontal das isotermas entre as fases corresponde à região da transição de fase. A diferenciação da equação (B.31) leva a

$$\frac{dP_0}{dT} = \frac{5k g_{5/2}(1)}{2\lambda^3} = \frac{5kT}{2Tv_c} \frac{g_{5/2}(1)}{g_{3/2}(1)}. \quad (\text{B.33})$$

ou seja, à equação de Clapeyron, onde o calor latente de transição por partícula é

$$L = \frac{g_{5/2}(1)}{g_{3/2}(1)} \frac{5}{2} kT. \quad (\text{B.34})$$

Logo, a condensação de Bose-Einstein de um gás uniforme é uma transição de fase de 1ª ordem [5].

A condensação de bósons, como em gases de metais alcalinos, ou de pares de férmions, como no caso de supercondutores metálicos, é um efeito frágil que pode ser facilmente superado por outros efeitos e instabilidades [31]. Podemos citar como principais competidores da condensação de Bose-Einstein a Desordem e Localização, a Dissociação de Bósons Compostos e a Cristalização.

O interessante caso da cristalização merece alguns comentários para se entender quando a condensação de Bose-Einstein prevalece sobre a fase mais favorável (a sólida). A energia por partícula de uma fase líquida é grosseiramente uma interação média  $V_m$  sobre uma célula unitária (a distância entre átomos é livre para variar, exceto por algumas correlações de curto alcance). Isto pode ser comparado com fase sólida em que as partículas estão localizadas em sítios da rede cristalina. A energia deste último sistema contém uma parte cinética, devido à localização das partículas, e uma energia potencial  $V_a$  correspondendo a um espaçamento de rede  $a$

$$\frac{E_0}{N} \cong \frac{\hbar^2}{ma^2} + V_a. \quad (\text{B.35})$$

Como o potencial repulsivo  $V(r)$  diminui com  $r$ , nós temos que  $V_a < V_m$ . Segue que o estado cristalino será favorecido por acoplamento forte (ele otimiza a energia potencial), enquanto que o condensado de Bose prevalecerá em acoplamento fraco (ele minimiza a energia potencial). Um exemplo óbvio é  $^4\text{He}$ , que é um superfluido em baixa pressão e congela em densidades maiores.

(11.11)

$$\frac{1}{V} \ln Z = \frac{1}{V} \ln \left( \frac{1}{\lambda^3} \right)^N = \frac{N}{V} \ln \left( \frac{1}{\lambda^3} \right)$$

(11.12)

$$P = -k_B T \left( \frac{\partial \ln Z}{\partial V} \right)_T = -k_B T \left( \frac{\partial}{\partial V} \left( \frac{N}{V} \ln \left( \frac{1}{\lambda^3} \right) \right) \right)_T$$

(11.13)

$$\frac{1}{V} \ln Z = \frac{1}{V} \ln \left( \frac{1}{\lambda^3} \right)^N = \frac{N}{V} \ln \left( \frac{1}{\lambda^3} \right)$$

(11.14)

$$P = -k_B T \left( \frac{\partial \ln Z}{\partial V} \right)_T = -k_B T \left( \frac{\partial}{\partial V} \left( \frac{N}{V} \ln \left( \frac{1}{\lambda^3} \right) \right) \right)_T$$

(11.15)

$$\frac{1}{V} \ln Z = \frac{1}{V} \ln \left( \frac{1}{\lambda^3} \right)^N = \frac{N}{V} \ln \left( \frac{1}{\lambda^3} \right)$$

# Apêndice C

## Funções Especiais Utilizadas

As funções  $g_{3/2}$  e  $g_{5/2}$  representam um caso especial da classe mais geral de funções

$$g_n(z) = \frac{1}{\Gamma(n)} \int_0^\infty \frac{\beta^n e^{\beta z} d\beta}{z^{-1} e^{\beta z} - 1} \quad 0 < z < 1, \quad (\text{C.1})$$

onde  $\Gamma(n)$  é a função Gama.

Expandindo o integrando, pode-se mostrar que essas funções têm a forma

$$g_n(z) = \sum_{i=1}^{\infty} \frac{z^i}{i^n} \quad (\text{C.2})$$

A equação (C.2) nos fornece uma interessante relação para a função Zeta de Riemann  $\zeta(n)$ . Para  $z = 1$ , temos

$$\zeta(n) = g_n(1) = \sum_{i=1}^{\infty} \frac{1}{i^n} \quad (\text{C.3})$$

Analisando a figura C.1, notamos que todas começam na origem com inclinação 1 e divergem para  $z \rightarrow 1$  quando  $n \leq 1$ . Para  $n > 1$ , elas têm um valor finito em  $z = 1$  que diminui à medida em que se aumenta  $n$ . Para  $n \rightarrow \infty$ , temos  $g_n \rightarrow z$ . Esta série converge somente para  $n > 1$ , o que, entretanto, não significa que as funções  $g_n(z)$  são definidas somente para  $n > 1$ , mas que  $g_n \rightarrow \infty$  para  $n \leq 1$  e  $z \rightarrow 1$ ; por outro lado,  $g_n(z)$  é finita para  $n > 1$  para todo  $z$  tal que  $0 < z < 1$ .

No caso de bósons conservados,  $\mu$  é sempre negativo e, portanto,  $z$  assume valores reais entre 0 e 1, o que nos leva à conclusão de que  $g_{3/2}$  é uma função limitada, positiva, monotonicamente crescente em  $z$ , assim como  $g_{5/2}$ .

Para pequenos valores de  $z$ , a série (C.2) nos fornece um modo prático de calcular  $g_{3/2}$ :

$$g_{3/2}(z) = z + \frac{z^2}{2^{3/2}} + \frac{z^3}{3^{3/2}} + \dots \quad (\text{C.4})$$

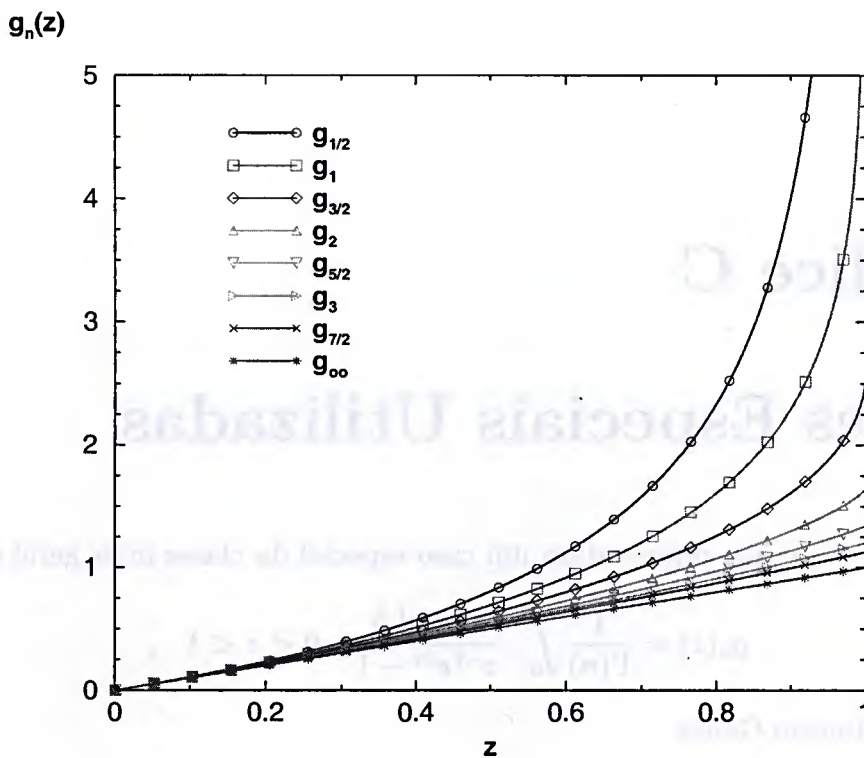


Figura C.1: Gráficos das funções  $g_n(z)$

Em  $z = 1$ , sua derivada diverge, mas seu valor é finito, dado por

$$\zeta(3/2) = g_{3/2}(1) = \sum_{i=1}^{\infty} \frac{1}{i^{3/2}} = 2,612\dots \quad (C.5)$$

onde  $\zeta(n)$  é a função Zeta de Riemann em  $n$ . Assim, para todo  $z$  entre 0 e 1, temos que

$$g_{3/2} \leq 2,612\dots \quad (C.6)$$

Na figura C.1, podemos constatar as propriedades dessas funções. Pode-se notar que essas funções têm uma inclinação unitária em  $z = 0$ , são monotonicamente crescentes, positivas, e em  $z = 1$ ,  $g_{3/2}$  tem o valor 2,612... e  $g_{5/2}$  o valor 1,34... .

Essas duas funções satisfazem a relação

$$\frac{d}{dz} g_{5/2} = \frac{1}{z} g_{3/2} \quad (C.7)$$

a partir da qual segue que a inclinação de  $g_{5/2}$  em  $z = 1$  é igual a  $g_{3/2}$ , ou 2,612... .

# Apêndice D

## Métodos numéricos

### D.1 Método de Runge-Kutta

Para resolver equações diferenciais ordinárias do tipo

$$\frac{du}{dt} = F(t, u) \quad (\text{D.1})$$

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

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

de modo que o valor da função  $u$  da equação (D.1) é dado por

$$u_{n+1} = u_n + \frac{1}{6}[k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4] \quad (\text{D.3})$$

No caso em que se deseja resolver um sistema de três equações diferenciais ordinárias da forma

$$\begin{cases} \frac{dx}{dt} = f(t, x, y, z) \\ \frac{dy}{dt} = g(t, x, y, z) \\ \frac{dz}{dt} = h(t, x, y, z) \end{cases} \quad (\text{D.4})$$

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

$$\left\{ \begin{array}{l} k_1 = \Delta t f(t_n, x_n, y_n, z_n) \\ l_1 = \Delta t g(t_n, x_n, y_n, z_n) \\ m_1 = \Delta t h(t_n, x_n, y_n, z_n) \\ k_2 = \Delta t f\left(t_n + \frac{\Delta t}{2}, x_n + \frac{k_1}{2}, y_n + \frac{l_1}{2}, z_n + \frac{m_1}{2}\right) \\ l_2 = \Delta t g\left(t_n + \frac{\Delta t}{2}, x_n + \frac{k_1}{2}, y_n + \frac{l_1}{2}, z_n + \frac{m_1}{2}\right) \\ m_2 = \Delta t h\left(t_n + \frac{\Delta t}{2}, x_n + \frac{k_1}{2}, y_n + \frac{l_1}{2}, z_n + \frac{m_1}{2}\right) \\ k_3 = \Delta t f\left(t_n + \frac{\Delta t}{2}, x_n + \frac{k_2}{2}, y_n + \frac{l_2}{2}, z_n + \frac{m_2}{2}\right) \\ l_3 = \Delta t g\left(t_n + \frac{\Delta t}{2}, x_n + \frac{k_2}{2}, y_n + \frac{l_2}{2}, z_n + \frac{m_2}{2}\right) \\ m_3 = \Delta t h\left(t_n + \frac{\Delta t}{2}, x_n + \frac{k_2}{2}, y_n + \frac{l_2}{2}, z_n + \frac{m_2}{2}\right) \\ k_4 = \Delta t f(t_n + \Delta t, x_n + k_3, y_n + l_3, z_n + m_3) \\ l_4 = \Delta t g(t_n + \Delta t, x_n + k_3, y_n + l_3, z_n + m_3) \\ m_4 = \Delta t h(t_n + \Delta t, x_n + k_3, y_n + l_3, z_n + m_3) \end{array} \right. , \quad (D.5)$$

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

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

## D.2 Método de Crank-Nicolson

Equações diferenciais parciais parabólicas da forma

$$u_{rr} = \Psi(r, t, u, u_r, u_t) \quad (D.7)$$

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

$$u_{rr} + f(r, t, u)u_r + g(r, t, u) = p(r, t, u)u_t \quad (D.8)$$

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 (D.7) nos leva a

$$\frac{1}{2h^2} \delta_r^2 (U_{i,j+1} + U_{i,j}) = \quad (D.9)$$

$$= \Psi \left[ ih, \left( j + \frac{1}{2} \right) k, \frac{1}{2} (U_{i,j+1} + U_{i,j}), \frac{1}{4h} \mu \delta_r (U_{i,j+1} + U_{i,j}), \frac{1}{k} (U_{i,j+1} - U_{i,j}) \right] ,$$

onde usamos a notação de operadores de discretização

$$\delta_r^2 U_{i,j+1} = U_{i+1,j+1} - 2U_{i,j+1} + U_{i-1,j+1} , \quad (D.10)$$

$$\delta_r U_{i,j+1} = U_{i+\frac{1}{2},j+1} - U_{i-\frac{1}{2},j+1} \text{ e} \quad (D.11)$$

$$\mu U_{i,j+1} = \frac{1}{2} (U_{i+\frac{1}{2},j+1} + U_{i-\frac{1}{2},j+1}) . \quad (D.12)$$

Lees [110, 111] demonstrou que a solução da equação de diferenças (D.9) converge para a solução de (D.7) sem nenhuma restrição sobre a razão de estabilidade

$$R_{est} = \frac{k}{h^2} , \quad (D.13)$$

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 [86].

D.3. Método de Euler-Nielsen

<p>(D.7)</p>	<p>Equações diferenciais com condições de fronteira</p> $y' = f(x, y), \quad y(a) = \alpha, \quad y(b) = \beta$
<p>(D.8)</p>	<p>Equações diferenciais com condições de fronteira</p> $y' = f(x, y), \quad y(a) = \alpha, \quad y(b) = \beta$
<p>(D.9)</p>	<p>Equações diferenciais com condições de fronteira</p> $y' = f(x, y), \quad y(a) = \alpha, \quad y(b) = \beta$
<p>(D.10)</p>	<p>Equações diferenciais com condições de fronteira</p> $y' = f(x, y), \quad y(a) = \alpha, \quad y(b) = \beta$
<p>(D.11)</p>	<p>Equações diferenciais com condições de fronteira</p> $y' = f(x, y), \quad y(a) = \alpha, \quad y(b) = \beta$
<p>(D.12)</p>	<p>Equações diferenciais com condições de fronteira</p> $y' = f(x, y), \quad y(a) = \alpha, \quad y(b) = \beta$
<p>(D.13)</p>	<p>Equações diferenciais com condições de fronteira</p> $y' = f(x, y), \quad y(a) = \alpha, \quad y(b) = \beta$
<p>(D.14)</p>	<p>Equações diferenciais com condições de fronteira</p> $y' = f(x, y), \quad y(a) = \alpha, \quad y(b) = \beta$
<p>(D.15)</p>	<p>Equações diferenciais com condições de fronteira</p> $y' = f(x, y), \quad y(a) = \alpha, \quad y(b) = \beta$
<p>(D.16)</p>	<p>Equações diferenciais com condições de fronteira</p> $y' = f(x, y), \quad y(a) = \alpha, \quad y(b) = \beta$
<p>(D.17)</p>	<p>Equações diferenciais com condições de fronteira</p> $y' = f(x, y), \quad y(a) = \alpha, \quad y(b) = \beta$
<p>(D.18)</p>	<p>Equações diferenciais com condições de fronteira</p> $y' = f(x, y), \quad y(a) = \alpha, \quad y(b) = \beta$

## Referências Bibliográficas

- [1] M.R. Andrews, M.-O. Mewes, N.J. van Druten, D.S. Durfee, D.M. Kurn, W.Ketterle, *Science* **273**, 84 (1996); M.H. Anderson, J.R. Ensher, M.R. Matthews, C.E. Wieman, E.A. Cornell, *Science* **269**, 198 (1995).
- [2] 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).
- [3] C.C. Bradley, C.A. Sackett, J.J. Tollet e R.G. Hulet, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 1687 (1995); <http://atomcool.rice.edu>
- [4] 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).
- [5] 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).
- [6] 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).
- [7] I. F. Silvera e J. T. M. Walraven, *Phys. Rev. Lett.* **44**, 164 (1980).
- [8] F. Dalfovo, S. Giorgini, L. P. Pitaevskii e S. Stringari, *Rev. Mod. Phys.* **71**, 463 (1999).
- [9] 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).
- [10] J. Weiner, V. S. Bagnato, S. Zilio e P. S. Julienne, *Rev. Mod. Phys.* **71**, 1 (1999).
- [11] V. E. Zakharov, *Sov. Phys.-JETP*, **35**, 908 (1972); V. E. Zakharov e V. S. Synakh, *Sov. Phys.-JETP* **41**, 465 (1976)
- [12] J. A. Freire e D. P. Arovas, *Phys. Rev. A* **59**, 1461 (2000).

- [13] C. A. Sackett, H. T. C. Stoof e R. G. Hulet, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 2031 (1998).
- [14] Y. Kagan, A.E. Muryshev e G.V. Shlyapnikov, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 933 (1998).
- [15] C.A. Sackett, J.M. Gerton, M. Welling e R.G. Hulet, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 876 (1999).
- [16] 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).
- [17] V. S. Filho, A. Gammal, L. Tomio e T. Frederico, *Dynamics of Bose-Einstein condensation for negative scattering length*, Proceedings on *Quantum Optics I*, 22-26 de Agosto, Santiago, Chile (2000), a sair em volume especial da Springer Lecture Notes Series, em 2001.  
A. Gammal, V. S. Filho, L. Tomio e T. Frederico, *Spatio-temporal chaos in time evolution of Bose-Einstein condensate with attractive two body interactions*, Proceedings on "Nonlinearity and Disorder: Theory and Applications" NATO Advanced Research, 2-6 de Outubro, Tashkent, Uzbekistan (2000), a ser publicado no livro de contribuições que será editado pela Kluwer em 2001.
- [18] Victo S. Filho, F. Kh. Abdullaev, A. Gammal e L. Tomio, *Phys. Rev. A* , (2001), cond-mat/0010152.
- [19] A. Gammal, T. Frederico, L. Tomio e Ph. Chomaz, *Phys. Rev. A* **61**, 051602(R) (2000).
- [20] R.J. Deissler e K. Kaneko, *Phys. Lett. A* **119**, 397 (1987); R.J. Deissler, *J. Stat. Phys.* **54**, 1459 (1989); H.R. Brand e R.J. Deissler, *Phys. Rev. E* **58**, R4064 (1998).
- [21] N.R. Pereira e L. Stenflo, *Phys. Fluids* **20**, 1733 (1977).
- [22] F. C. Moon, *Chaotic and fractal dynamics*, (A Wiley - Interscience Publication, John Wiley & Sons, 1992).
- [23] S. H. Strogatz, *Nonlinear Dynamics and Chaos*, (Addison-Wesley Publishing Company, 1994).
- [24] A. Wolf, J. B. Swift, H. L. Swinney e J. A. Vastano, *Physica D* **16**, 285 (1985).
- [25] K. Kaneko, *Phys. Lett. A* **147**, 105 (1990).
- [26] P. G. Drazin & R. S. Johnson, *Solitons: an introduction* (Cambridge University Press, Cambridge, 1989).

- [27] G. C. Marques, *Int. J. Mod. Phys. B* **8**, 1577 (1994).
- [28] A. Griffin, *A Brief History of Our Understanding of BEC: From Bose to Beliaev*, (Lecture in Varenna Summer School, 1998), cond-mat/9901123.
- [29] W. Ketterle, D. S. Durfee e D. M. Stamper-Kurn, cond-mat/9904034 (1999).
- [30] R. Fitzgerald, *Phys. Today*, Agosto, 19 (2000).
- [31] A. Griffin, D. W. Snoke e S. Stringari *Bose-Einstein Condensation*, (Cambridge University Press, Great Britain, 1995).
- [32] S. N. Bose, *Z. Phys. B* **26**, 178 (1924).
- [33] A. Einstein, *Berl. Ber.* **22**, 261 (1924); A. Einstein, *Berl. Ber.* **23**, 3, 18 (1925).
- [34] P. Kaptiza, *Nature* **141**, 913 (1938).
- [35] J. F. Allen e A. D. Misener, *Nature* **141**, 75 (1938).
- [36] V. S. Filho, *Paradoxo EPR e Desigualdades de Bell* (Monografia de Qualificação - Instituto de Física Teórica (IFT), São Paulo, 2000).
- [37] O. Penrose, *Phil. Mag.* **42**, 1373 (1951).
- [38] N. N. Bogoliubov, *J. Phys. U.S.S.R.*, **11**, 23 (1947).
- [39] J. Bardeen, L. N. Cooper e J. R. Schriffer, *Phys. Rev.* **108**, 1175 (1957).
- [40] L. D. Landau, *J. Phys. U.S.S.R.* **5**, 71 (1941); L.D. Landau, *J. Phys. U.S.S.R.*, **11**, 91 (1947).
- [41] L. D. Landau, *Phys. Rev.* **75**, 884 (1949).
- [42] S. T. Beliaev, *Sov. Phys. - JETP* **7**, 299 (1958).
- [43] G. C. Marques e V. S. Bagnato, *Phys. Rev. A* **61**, 053607 (2000).
- [44] S.K. Adhikari, M. Casas, A. Puente, A. Rigo, M. Fortes, M. A. Solís, M. de Llano, A. A. Valladares e O. Rojo, *Phys. C* **341**, 233 (2000).
- [45] P. E. Sokol, *Bose-Einstein Condensation*, editado por A. Griffin, D. W. Snoke e S. Stringari, (Cambridge University Press, Cambridge, 1995), p. 51.
- [46] J. P. Wolfe, J. L. Lin e D. W. Snoke, *Bose-Einstein Condensation*, editado por A. Griffin, D. W. Snoke e S. Stringari, (Cambridge University Press, Cambridge, 1995), p. 281.

- [47] 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. A. Cornell e C. E. Wieman, *cond-mat/0102116*; B. G. Levi, *Phys. Today*, Agosto, 17 (2000).
- [48] L. V. Hau, B. D. Busch, C. Liu, Z. Dutton, M. M. Burns e J. A. Golovchenko, *Phys. Rev. A* **58** R54 (1998).
- [49] S. R. de Groot, G. J. Hooman e C. A. Ten Seldam, *Proc. R. Soc. London, Ser. A* **203**, 266 (1950).
- [50] J. R. Ensher, D. S. Jin, M. R. Matthews, C. E. Wieman e E. A. Cornell, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 4984 (1996).
- [51] S. Giorgini, L. P. Pitaevskii e S. Stringari, *Phys. Rev. A* **54**, R4633 (1996).
- [52] S. K. Adhikari e A. Gammal, *Phys. A* **286**, 299 (2000).
- [53] K. Huang, *Phys. Rev. Lett.* **83**, 3770 (1999).
- [54] J. D. Reppy, B. C. Crooker, B. Hebral, A. D. Corwin, J. He e G. M. Zassenhaus, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 2060 (2000).
- [55] R. Napolitano, J. DeLuca, V. S. Bagnato e G. C. Marques, *Phys. Rev. A* **55**, 3954 (1997).
- [56] W. Ketterle e N. J. van Druten, *Phys. Rev. A* **54**, 656 (1996).
- [57] M. Gajda e K. Rzazewski, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 2686 (1997).
- [58] P. Navez, D. Bitouk, M. Gajda, Z. Idziaszek and K. Rzazewski, *Phys. Rev. Lett.* **79**, 1789 (1997).
- [59] S. Giorgini, L. P. Pitaevskii e S. Stringari, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 5040 (1998).
- [60] D. M. Ceperley, *Rev. Mod. Phys.* **71**, S438 (1999).
- [61] W. Krauth, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 3695 (1996).
- [62] G. C. Marques, *Phys. Rev. B* **44**, 12485 (1991).
- [63] E. H. Lieb e J. Yngvason, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 2504 (1998).
- [64] 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).

- [65] H. M. J. M. Boesten, C. C. Tsai, J. R. Gardner, D. J. Heinzen e B. J. Verhaar, *Phys. Rev. A* **55**, 636 (1997).
- [66] E. R. I. Abraham, W. I. McAlexander, C. A. Sackett e R. G. Hulet, *Phys. Rev. Lett.* **74**, 1315 (1995).
- [67] M. Houbiers e H.T.C. Stoof, *Phys. Rev. A* **54**, 5055 (1996).
- [68] G. Baym e C.J. Pethick, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 6 (1996).
- [69] A.L. Fetter e J.D. Walecka, *Quantum Theory of Many - Particle Systems* (McGraw-Hill, New York, 1971).
- [70] 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).
- [71] C.A. Sackett, C.C. Bradley, M. Welling, e R.G. Hulet, *Appl. Phys. B* **65** 433 (1997).
- [72] A. K. Pattanayak, A. Gammal, C. A. Sackett e R. G. Hulet, *Phys. Rev. A* **63**, 033604 (2000).
- [73] A. Gammal, T. Frederico, L. Tomio e F. Kh. Abdullaev, *Phys. Lett. A* **267**, 305 (2000).
- [74] S.K. Adhikari, *Phys. Rev. E* **62**, 2937 (2000).
- [75] F. Kh. Abdullaev, A. Gammal, L. Tomio e T. Frederico, *Phys. Rev. A* **63**, 0336xx-1 (2001). cond-mat/0102018.
- [76] A. Gammal, T. Frederico, L. Tomio e P. Chomaz, *J. Phys. B* **33**, 4053 (2000); A. Gammal, T. Frederico e L. Tomio, "Collective Excitations in Fermi and Bose Systems", p. 159-168, ed. by C. Bertulani, L.F. Canto e M. Hussein (World Scientific, Singapore, 1999).
- [77] A. Gammal, T. Frederico e L. Tomio, *Phys. Rev. E* **60**, 2421 (1999).
- [78] P.A. Ruprecht, M. Edwards, K. Burnett e C.W.Clark, *Phys. Rev. A* **54**, 4178 (1996).
- [79] N. Akhmediev, M.P. Das e A.V. Vagov, "Condensed Matter Theories", vol. 12, p. 17-25. Edited by J.W. Clark e P.V. Panat (Nova Science Publ., New York, 1997); N. Akhmediev, M.P. Das e A.V. Vagov, *Int. J. Mod. Phys. B* **13**, 625 (1999).
- [80] K.G. Singh e D.S. Rokhsar, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 1667 (1996).
- [81] J. M. Gerton, D. Strekalov, I. Prodan e R. G. Hulet, *Nature* **408**, 692 (2000).

- [82] C.A. Sackett, J.M. Gerton, M. Welling e R.G. Hulet, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 876 (1999).
- [83] J.M. Gerton, C.A. Sackett, B.J. Frew and R.G. Hulet, *Phys. Rev. A* **59**, 1514 (1999).
- [84] 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).
- [85] 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).
- [86] W.F. Ames, *Numerical Methods for Partial Differential Equations*, (Academic Press, 3rd. ed., New York, 1992).
- [87] J.M. Gerton, C.A. Sackett, B. J. Frew e R.G. Hulet, *Phys. Rev. A* **59**, 1514 (1999).
- [88] Y. Castin e R. Dum, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 5315 (1996).
- [89] M. Fliesser e R. Graham, *Physica D* **131**, 141 (1999).
- [90] G. Agrawal, *Nonlinear Fiber Optics*, (Academic Press, New York, 1994).
- [91] F.Kh. Abdullaev, S.A. Darmanyan e P.K. Khabibullaev, *Optical Solitons*, (Springer-Verlag, Heidelberg, 1993).
- [92] M.V. Fabrikant, *Wave Motion* **2**, 355 (1980).
- [93] D. Anderson, F. Cattani e M. Lisak, *Phys. Scripta* **T82**, 32 (1999).
- [94] F.Kh. Abdullaev, *Theory of Solitons in Inhomogeneous Media*, (Wiley, Chichester, 1994).
- [95] F.Kh. Abdullaev, S.A. Darmanyan e M.R. Djumaev, *Izv.AN UzSSR* **6**, 34 (1986); *Phys. Lett. A* **141**, 423 (1989).
- [96] R. Dum, J.I. Cirac, M. Lewenstein e P. Zoller, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 2972 (1998).
- [97] H. Michinel, V.M. Perez-Garcia e R. de la Fuente, *Phys. Rev. A* **60**, 1513 (1999).
- [98] J. Denschlag *et al.*, *Science* **287**, 97 (2000).
- [99] L. Bergé, T.J. Alexander e Y. Kivshar, *Phys. Rev. A* **62**, 023607 (2000).
- [100] D.J. Kaup e B.A. Malomed, *Physica D* **87**, 155 (1995).
- [101] J.J.G. Ripoll e V.M. Perez-Garcia, *Phys. Rev. A* **59**, 2220 (1999).

- [102] N. Akhmediev e A. Ankiewicz, *Spatial Solitons 1*, (Springer, Berlin, 2000).
- [103] A. Bondeson, M. Lisak e D. Anderson, *Phys. Scripta* **20**, 479 (1979).
- [104] A.I. Maïmistov, *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **104**, 3620 (1993) [*JETP* **77**, 727 (1993)].
- [105] A. S. Parkins e D. S. Walls, *Phys. Rep.* **303**, 1 (1998).
- [106] T. Tsurumi e M. Wadati, *J. Phys. Soc. Japan* **68**, 1531 (1999).
- [107] R.G. Hulet *informação pessoal, restrita*.
- [108] A.J. Moerdijk, H.M.J.M. Boesten e B.J. Verhaar, *Phys. Rev. A* **53**, 916 (1996); A.J. Moerdijk e B. Verhaar, *Phys. Rev. A* **53**, R19 (1996).
- [109] Yu. Kagan, B.V. Svistunov e G.V. Shlyapnikov, *Pis'ma Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **42**, 169 (1985) [*JETP Lett.* **42**, 209 (1985)]; E.A. Burt *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **79**, 337 (1997).
- [110] M. Lees, *SIAM J.* **7**, 167, 1959.
- [111] M. Lees, *Duke Math. J.*, **27**, 297, 1960.
- [112] S. K. Adhikari, *Physica A* **284**, 97 (2000).
- [113] S. K. Adhikari, cond-mat/0011526.
- [114] J. Williams, R. Walser, J. Cooper, E. A. Cornell e M. Holland, *Phys. Rev. A* **61**, 033612 (2000).
- [115] B. Tan e J. P. Boyd, *Chaos, Solitons and Fractals* **12**, 721 (2001).
- [116] H. Pu e N. P. Bigelow, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 1130 (1998).
- [117] C. K. Law, H. Pu, N. P. Bigelow e J. H. Eberly, *Phys. Rev. Lett.* **79**, 3105 (1997).
- [118] M. R. Andrews, C. G. Townsend, H. J. Miesner, D. S. Durfee, D. M. Kurn e W. Ketterle, *Science* **275**, 637 (1997).
- [119] R. A. Kraenkel e F. Kh. Abdullaev, *Phys. Rev. A* **62**, 023613 (2000).
- [120] L. G. Marcassa, G. D. Telles, S. R. Muniz e V. S. Bagnato, *Phys. Rev. A* **63**, 013413 (2001).
- [121] E. Timmermans, P. Tommasini, R. Cote, M. Hussein e A. Kerman, *Phys. Rev. Lett.* **83**, 2691 (1999).

- [122] G. D. Telles, L. G. Marcassa, S. R. Muniz, S. G. Miranda, A. Antunes, C. Westbrook e V. S. Bagnato, *Phys. Rev. A* **59**, R23 (1999).
- [123] M. S. Santos, P. Nussenzeig e A. Antunes, *Phys. Rev. A* **60**, 3892 (1999).
- [124] V. I. Yukalov, E. P. Yukalova e V. S. Bagnato, *Phys. Rev. A* **56**, 4845 (1997).

