

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA  
DEPARTAMENTO DE FÍSICA**

Thiago de Cacio Luchese

**EXCITAÇÕES COLETIVAS EM CONDENSADOS  
BOSÔNICOS POR IMPRESSÃO DE FASE**

Florianópolis

2014



Thiago de Cacio Luchese

**EXCITAÇÕES COLETIVAS EM CONDENSADOS  
BOSÔNICOS POR IMPRESSÃO DE FASE**

Tese submetida ao Programa de Pós-  
Graduação em Física para a obtenção  
do Grau de Doutor em Física.  
Sob a orientação de Prof. Dr. Frederico  
Firmo de Souza Cruz

Florianópolis

2014

Ficha de identificação da obra elaborada pelo autor,  
através do Programa de Geração Automática da Biblioteca Universitária da UFSC.

Luchese, Thiago de Cacio  
EXCITAÇÕES COLETIVAS EM CONDENSADOS BOSÔNICOS POR  
IMPRESSÃO DE FASE / Thiago de Cacio Luchese ; orientador,  
Frederico Firmo de Souza Cruz - Florianópolis, SC, 2014.  
128 p.

Tese (doutorado) - Universidade Federal de Santa  
Catarina, Centro de Ciências Físicas e Matemáticas.  
Programa de Pós-Graduação em Física.

Inclui referências

1. Física. 2. Condensados de Bose-Einstein. 3. Junções  
Bose-Josephson. 4. Equação de Gross-Pitaevskii. 5. Métodos  
Numéricos. I. de Souza Cruz, Frederico Firmo. II.  
Universidade Federal de Santa Catarina. Programa de Pós-  
Graduação em Física. III. Título.

Thiago de Cacio Luchese

**EXCITAÇÕES COLETIVAS EM CONDENSADOS  
BOSÔNICOS POR IMPRESSÃO DE FASE**

Esta Tese foi julgada aprovada para a obtenção do Título de “Doutor em Física”, e aprovada em sua forma final pelo Programa de Pós-Graduação em Física.

Florianópolis, 11 de abril 2014.

---

Prof. Dr. Frederico Firmo de Souza Cruz  
Orientador

**Banca Examinadora:**



Dedicado aos meus pais e à minha irmã.





## AGRADECIMENTOS

Agradeço a Jeová Deus, o Legislador, que fez o universo maravilhosamente belo e nos fez de modo a contemplar tal beleza nas suas várias formas.

Agradeço aos meus pais, Orady Gotardo Luchese e Sandra Regina Fabris Luchese, e à minha irmã, Giorgia Regina Luchese, que com muita luta permitiram e apoiaram a conclusão de minha graduação, com grande custo emocional e financeiro para todos nós. Sempre terei os três como exemplo de dedicação aos compromissos e decisões que tomamos.

Agradeço à minha esposa, Schelka Monalisa Linden Luchese, pelo tempo que me emprestou ao meu trabalho e pela compreensão em momentos de estresse.

Agradeço aos meus amigos de infância e adolescência, da Escola Agrotécnica Municipal Irineu Bornhausen (agora extinta) e do Centro Federal de Educação Tecnológica do Paraná, unidade Pato Branco (atualmente UTFPR) que, sem se aperceberem, fizeram com que eu acreditasse na possibilidade de ser um bom aluno em qualquer lugar que eu fosse. Apesar de toda dificuldade enfrentada para chegar até a conclusão desta tese, nas muitas despedidas que a vida traz consigo, tal auto-estima ainda é uma espécie de combustível que me reanima em situações profissionalmente desafiadoras. Devo grande parte da minha vida a estes amigos.

Agradeço ao meu orientador, Prof. Dr. Frederico Firmo de Souza Cruz (e também à sua família), que foi uma espécie de *pai profissional* para mim. A sua paciência e esforço em explicar assuntos diversos e conversar comigo e me orientar em problemas geralmente simples, porém para mim tempestuosos, serão sempre lembradas com muita apreciação.

Agradeço ao Programa de Pós-Graduação em Física da UFSC, pela paciência ao esperar a conclusão da tese.

Agradeço à Banca Examinadora pelo aceite do convite, pelo tempo e esforço em ler este trabalho, bem como por ajudar a definir locais onde devo melhorar não só nesta tese mas também profissionalmente.

Finalmente, não posso deixar de agradecer o apoio financeiro recebido do CNPq e da CAPES. Minha gratidão a estes órgãos financiadores não é apenas formal, é sincera, uma vez que sem este apoio tudo teria sido muito mais difícil - senão impossível - para mim.

Meu muito obrigado a todos.

*E eu vi todo o trabalho do [verdadeiro] Deus, que a humanidade não é capaz de descobrir o trabalho que se fez debaixo do sol; por mais que a humanidade trabalhe arduamente para procurar, ainda assim não [o] descobre. E mesmo que dissessem que são bastante sábios para saber, não seriam capazes de [o] descobrir.*

*Eclesiastes 8:17, Tradução do Novo Mundo das Escrituras Sagradas*



## RESUMO

Obtivemos o controle sobre as dinâmicas coletivas de um duplo condensado de bósons através do uso de técnicas de impressão de fase sob uma abordagem de campo médio. Um condensado de bósons armadilhado em um potencial de duplo poço (uma junção Bose-Josephson) foi abordada por meio de simulações diretas da Equação de Gross-Pitaevskii. Com conservação de número de partículas e uma definição apropriada de diferença de fase fomos capazes de obter uma representação no espaço de fases das dinâmicas coletivas. O trânsito entre diferentes regimes dinâmicos coletivos foi gerado de forma controlada através do uso de impressões de fase.

Alguns resultados secundários foram a avaliação numérica da validade do modelo de dois modos na descrição da dinâmica de Gross-Pitaevskii e uma aproximação não perturbativa semi-analítica das soluções com contrapartida linear da Equação de Gross-Pitaevskii unidimensional independente do tempo.

**Palavras-chave:** Condensados de Bose-Einstein, Equação de Gross-Pitaevskii, Junções Bose-Josephson



## ABSTRACT

We had obtained the control over the collective dynamics of a double Bose-Einstein condensate by the use of phase imprinting techniques through a mean-field approach. A condensed Bose gas trapped in a double-well potential (a Bose-Josephson junction) is treated by direct simulations of the Gross-Pitaevskii equation. With number conserving and an appropriate definition of phase-difference we had been able to obtain a phase-space representation of the collective dynamics. The transit among the different collective regimes are generated in controlled way by the use of phase imprinting.

Some secondary results were the numerical evaluation of the validity of the two-mode model to describe the Gross-Pitaevskii dynamics and a non-perturbative semi-analytic approximation of the solutions with linear counterpart of the time-independent Gross-Pitaevskii equation in the unidimensional case.

**Keywords:** Bose-Einstein Condensation, Gross-Pitaevskii Equation, Bose-Josephson Junction





## SUMÁRIO

<b>1 INTRODUÇÃO</b> .....	17
<b>2 FENOMENOLOGIA E PROBLEMA ESPECÍFICO</b> ..	23
2.1 GERANDO UM CONDENSADO DE BÓSONS .....	23
2.2 OS TIPOS DE ARMADILHA DISPONÍVEIS .....	24
2.3 O CONTROLE DA INTERAÇÃO .....	25
2.4 A ENGENHARIA DE FASE .....	25
2.5 UMA JUNÇÃO BOSE-JOSEPHSON .....	26
2.6 JBJ E IMPRESSÃO DE FASE .....	28
<b>3 TEORIA DE FUNDO E METODOLOGIA ADOTADA</b>	31
3.1 DESCRIÇÃO DE CAMPO-MÉDIO E REDUÇÃO DE DIMEN- SÕES .....	31
3.2 MODELO DE DOIS MODOS .....	36
3.2.1 Modelando a dinâmica de um condensado duplo - espaço de fases .....	38
3.2.2 O espaço de fases a partir da EGP .....	46
3.3 A INSERÇÃO DE FASE NUMÉRICA .....	51
<b>4 RESULTADOS, DISCUSSÃO E PERSPECTIVAS</b> ...	55
4.1 RESULTADOS E DISCUSSÃO .....	55
4.2 PERSPECTIVAS .....	63
<b>APÊNDICE A – Métodos numéricos</b> .....	69
<b>APÊNDICE B – Solução analítica formal para estados com contrapartida linear da EGP unidimensional</b> .....	85
<b>APÊNDICE C – Modelo de 2 modos aplicado à ENPS</b> ..	95
<b>REFERÊNCIAS</b> .....	121



## 1 INTRODUÇÃO

Ao classificar as partículas da natureza de uma maneira bastante generalizada temos duas grandes classes: os *férmions* e os *bósons*.

Os férmions são partículas cujos estados quânticos não podem ser coincidentes para quaisquer duas delas. Esse impedimento tem origem na chamada *simetria de troca*, existente em sistemas compostos de partículas idênticas e corretamente previsto pela Mecânica Quântica. Como consequência observável deste impedimento podemos citar a estabilidade das anãs brancas e estrelas de nêutrons contra a atração gravitacional e a distribuição eletrônica dos átomos obedecendo o *Princípio de Exclusão de Pauli*.

Já com os bósons a história é diferente. Muitos deles, até mesmo infinitos, podem possuir o mesmo conjunto de números quânticos identificadores de seus estados. Além disso, quando mais que um bóson ocupa um determinado estado microscópico há um aumento de probabilidade de aquele estado ser populado. Caso haja uma ocupação macroscópica diz-se haver uma *condensação de bósons* naquele determinado estado de uma partícula.

Uma maneira prática de distinguir entre um férmion e um bóson é por meio do spin total do objeto considerado: se o spin é inteiro então temos um bóson, caso seja semi-inteiro temos um férmion. Esta relação entre o spin e a estatística bosônica ou fermiônica foi demonstrada em 1940 por W Pauli [1]. Sendo assim, um nêutron, um próton, um elétron, cada um deles isolados são férmions, pois possuem spin semi-inteiro  $S = \frac{1}{2}$ . No entanto, um átomo neutro qualquer possuirá igual número de prótons e de elétrons, de modo que se o número de nêutrons  $N$  for par, tal átomo será um bóson e, se  $N$  for ímpar será um férmion. Note-se que uma dada estrutura obedecerá a estatística fermiônica ou bosônica se a *soma* dos spins das partículas que a constituem for *inteira* ou *semi-inteira*.

A condensação de bósons em um único estado disponível foi prevista em 1925 por Albert Einstein quando ele aplicou à partículas com massa o tratamento que Sathindra Nath Bose deu para fótons em 1924. Por isso o fenômeno é também conhecido como condensação de Bose-Einstein [2]. Durante 70 anos houve pesquisa intensa buscando a observação pura do fenômeno [2, 3]. Embora os comportamentos de supercondutividade em sólidos e superfluidez do Hélio líquido pudessem ser associadas à condensação, a prova concreta de que todo um sistema de partículas idênticas pode estar ocupando um único estado

da matéria foi dada somente nos célebres experimentos realizados em 1995 com gases rarefeitos de Rubídio, Sódio e Lítio [4, 5, 6]. Devido a esta observação indubitável da condensação os autores dos trabalhos [4, 5] foram agraciados com o Prêmio Nobel em 2001.

Embora trabalhos teóricos relacionados à condensação de bósons tenham sido desenvolvidos no decorrer da busca experimental desta, uma grande avalanche de pesquisas sobre este tipo de sistema veio a ocorrer somente depois do registro inequívoco da tal condensação. Experimentos que se seguiram demonstraram a possibilidade de controlar alguns parâmetros de sistemas quânticos não controláveis em outros sistemas senão na presença de condensação de bósons. Por exemplo: a interação entre partículas - nos condensados de bósons, a intensidade dessa interação e até mesmo o seu sinal podem ser controlados por meio de ressonâncias de Feshbach [7, 8, 9]; o tratamento teórico dado a sistemas de partículas em potenciais periódicos pôde ser diretamente testado em potenciais periódicos gerados por feixes de lasers aprisionadores de condensados de bósons [10, 11, 12]; a quebra de simetria na fase de um sistema de muitos corpos idênticos ocupando um único estado, quebra esta que evidencia a relação canônica entre fase global de um sistema e o número de partículas deste [13], pode ser investigada em condensados de bósons - em supercondutores o efeito Josephson tem como base esta canonicidade, e em condensados bosônicos podem ser geradas junções do tipo Josephson, e o chamado efeito Bose-Josephson tem sido explorado teorica e experimentalmente [14, 15, 16, 17]; existe a interferometria com lasers - com condensados existe a possibilidade de interferometria com ondas de matéria [18]; pode-se controlar a temperatura de um gás não condensado e armadilhado juntamente com um condensado, levando-o, sob resfriamento criogênico, a temperaturas ultrabaixas do condensado [19]. Enfim, estas são algumas das inumeráveis possibilidades de controle e pesquisa que se abriram somente após a observação da condensação de bósons em gases de átomos alcalinos rarefeitos e ultrafrios. Não deve ser despercebida a diversidade de enfoques que pode ser dada: tudo isso porque os condensados, no fundo, constituem um excelente laboratório para teste de vários aspectos de sistemas quânticos de muitos corpos. É como se pudéssemos saborear à exaustão as previsões dessa teoria fantástica; com aplicações tecnológicas imprevisíveis em um futuro próximo, é claro.

Dentro desta imensa gama de possibilidades investigativas, o nosso interesse veio a se concentrar na junção Bose-Josephson (JBJ) cuja dinâmica é similar à de um pêndulo de inércia variável [21, 22]. A analogia pêndulo-JBJ aparece quando abordamos a junção na apro-

ximação de dois modos. Surgem então equações semiclássicas para descrever a dinâmica diferença de fase - diferença de população. Esse sistema tem regimes dinâmicos curiosíssimos sob a perspectiva da analogia pêndulo-JBJ. Como um pêndulo de inércia variável, há um regime onde este oscilaria em torno de seu ponto mais alto (pêndulo invertido - modo  $\pi$ ), isto é, no entorno de sua posição invertida, assim como o faz normalmente no entorno de sua posição de equilíbrio; este regime corresponde aos de auto armadilhamento quântico, onde a população média na junção é diferente de zero (auto armadilhamento quântico macroscópico com diferença de fase limitada). Esses regimes são excitados com parâmetros de armadilhamento da junção já acessíveis em experimentos [17, 22].

Por meio de diagramas de Husimi a ponte entre a dinâmica de muitos corpos puramente quântica e as trajetórias semiclássicas do modelo de dois modos já está bem estabelecida [23]. Desse modo o nosso interesse foi outro: como *controlar transições* entre os vários regimes de excitação coletiva?

A analogia do pêndulo vem a calhar para responder a esta pergunta. Se desejamos que um pêndulo simples esteja em regime de oscilação, simplesmente o deslocamos de sua posição de equilíbrio sob um ângulo  $\theta < 180^\circ$  e o soltamos. Por outro lado, se desejamos que este fique girando indefinidamente basta que o soltemos de um dado ângulo e com uma velocidade inicial que permita a ultrapassagem do ponto de equilíbrio instável em  $\theta = 180^\circ$ . Ora, se o ângulo corresponde à diferença de fase entre as componentes da JBJ então entendemos que um controle sobre essa diferença de fase poderia originar o controle sobre as diversas transições entre os regimes dinâmicos distintos acessíveis à junção.

O controle sobre a diferença de fase entre componentes de uma junção pode ser obtido de algumas formas já realizadas experimentalmente [17, 23, 24, 25]. A critério de exemplo citemos a impressão de uma determinada fase em apenas metade de um condensado tipo charuto [24]. No caso de um condensado unidimensional aprisionado em um duplo poço a impressão de uma fase em apenas metade do condensado corresponderia à geração de uma diferença de fase entre as componentes da JBJ - essa seria a maneira mais direta de imprimir diferença de fase entre componentes de uma junção. Outra forma seria gerar dois condensados em apenas um poço em estados hiperfinos diferentes. Caso o sistema seja submetido a um laser não ressonante então uma das componentes do condensado poderia absorver mais energia que outra, o que implicaria na introdução de uma diferença de fase

entre as componentes.

Uma vez que o controle sobre a diferença de fase parece estar experimentalmente acessível, testamos numericamente a ocorrência deste tipo de controle de regimes dinâmicos. Mostraremos que este tipo de controle é viável. No decorrer da busca desta demonstração houveram resultados secundários, entre eles a redefinição da diferença de fase e de diferença de população entre componentes da junção, de uma maneira aparentemente mais precisa que a comumente adotada na literatura porém ainda concordante com aquela. Estas novas definições permitiram uma exploração direta da dinâmica não-linear dada pela Equação de Gross-Pitaevskii (EGP) que rege o fenômeno semiclassicamente. Também possibilitaram explorar os limites da validade da abordagem do modelo de dois modos, sempre presente nas investigações do problema presentes na literatura. Em outras palavras, dentro de uma abordagem de campo médio da JBJ pudemos acessar o grau de proximidade entre uma dinâmica restrita a um modelo de dois modos e uma dinâmica completamente não linear regida pela EGP, sendo estes os resultados que esperamos que sejam mais significativos para a área.

O interesse no controle sobre regimes dinâmicos não é só nosso [26, 27, 28, 29, 30, 31, 32, 33]. Já houveram trabalhos com objetivos semelhantes, porém com sugestões de metodologias de controle completamente distintas das apresentadas aqui. Por exemplo, já houve a sugestão de que a altura da barreira de potencial fosse periodicamente variada de modo a, fazendo uso de estados de Floquet, ligar e desligar estas oscilações gerando transições entre os regimes dinâmicos [30, 31]. Também houve a sugestão de ligar e desligar uma variação periódica na intensidade de interação entre partículas por meio do uso das ressonâncias de Feshbach, de modo a gerar transição de população não em uma JBJ mas em uma rede de condensados periódica [33]. A nossa proposta é inteiramente diferente destas: ao invés de variar a barreira, uma propriedade da armadilha tal que pequenas variações alteram significativamente a dinâmica do sistema, ou a interação, o que sugerimos é variar a diferença de fase entre as componentes da junção, fazendo assim uso da canonicidade natural entre número de partículas e fase global para obter o controle desejado sobre o sistema. Até onde sabemos esta metodologia é original e constitui o resultado principal desta tese.

Os assuntos serão desenvolvidos na seguinte ordem: primeiramente falaremos um pouco mais em detalhes da fenomenologia envolvida no estudo de condensados, como eles são gerados, qual o controle existente sobre os potenciais aprisionadores e sobre a intensidade da

interação. Falaremos também mais especificamente do nosso problema de estudo. Em seguida, descreveremos em detalhes a metodologia de estudo adotada. Por fim mostraremos os nossos resultados, discutindo-os, apontando possíveis dificuldades experimentais a serem superadas e mostraremos as perspectivas de estudos futuros, alguns já em curso.





## 2 FENOMENOLOGIA E PROBLEMA ESPECÍFICO

### 2.1 GERANDO UM CONDENSADO DE BÓSONS

Descreveremos de uma maneira bastante simples o modo como um condensado de bósons é gerado em uma armadilha magneto-óptica seguindo o relato da primeira experiência a observar a ocorrência do fenômeno [4].

Primeiramente uma célula de vidro, digamos um cubo por simplicidade, é totalmente preenchida com um único tipo de átomo à temperatura ambiente. Obtém-se assim um sistema puro com uma densidade de aproximadamente  $10^6$  partículas por centímetro cúbico.

Uma vez puro e rarefeito o gás à temperatura ambiente é resfriado. O resfriamento pode ser conseguido alinhando-se 3 pares de lasers contrapropagantes e ortogonais entre si e que possuem um ponto do espaço, dentro da célula de vidro, onde se encontram. Esses lasers formam ondas estacionárias em cada uma das direções e possuem frequência um pouco abaixo daquela de absorção dos átomos da célula. O efeito Doppler é o responsável pelo resfriamento [34]. Para facilitar a visualização pensemos em apenas uma dimensão: átomos que se movem de encontro a um feixe estarão submetidos a uma frequência levemente acima daquela do laser. Uma vez que o laser tem frequência levemente abaixo da de absorção, o movimento do átomo de encontro ao laser compensa este *levemente abaixo* de tal maneira que ele absorve fótons de uma única direção - aquela do laser - e os reemite em uma direção aleatória quando de sua deexcitação. O efeito líquido fica evidente: o átomo é freado na direção do feixe. Porém o resfriamento Doppler tem limitações e permite que um condensado alcance temperaturas da ordem de centenas de microkelvins. Para alcançar as temperaturas de condensação é necessário recorrer ao resfriamento evaporativo.

Passado tempo suficiente para que a região de encontro dos lasers na célula de gás seja preenchida pelas partículas lentas ligam-se campos magnéticos externos à célula de tal maneira que, exatamente no ponto onde as partículas estavam aprisionadas, exista um mínimo de campo magnético (um máximo de campo magnético não pode existir em região livre de correntes [35]). Deste ponto em diante, pode-se desligar os lasers: o armadilhamento torna-se puramente magnético. Ele ocorre devido à estrutura hiperfina do átomo sendo tratado. Existirão átomos da amostra em níveis hiperfinos cuja energia diminui com o aumento do campo magnético e átomos cuja energia aumenta com o

aumento do campo magnético. Os átomos que tem energia diminuída com o aumento do campo serão repelidos da região de mínimo enquanto que aqueles cuja energia aumenta com o campo serão mantidos neste mínimo. Uma vez que os níveis hiperfinos estão separados por uma quantidade de energia pequena, justifica-se o resfriamento óptico ocorrer antes do armadilhamento magnético - se não fosse assim a energia térmica seria suficiente para retirar os átomos da armadilha magnética.

Uma vez presos pela armadilha magnética segue-se um ainda maior resfriamento, chamado de evaporativo. Um campo de radio-frequência é aplicado na célula de tal maneira que gere transições hiperfinas apenas nos átomos mais energéticos da amostra resfriada. Estas transições farão com que estes átomos mais energéticos sejam ejetados da armadilha. Ora, se os mais energéticos são ejetados restam os menos energéticos que, por sua vez, retermalizam em uma temperatura inferior. Sendo este processo semelhante àquele da evaporação das partículas mais energéticas de uma xícara de café e cujo efeito líquido é o de resfriar a bebida, então deriva-se o nome do processo para os gases: *resfriamento evaporativo*.

Com os métodos de resfriamento óptico e evaporativo juntos faz-se com que a amostra de gás puro e rarefeito da célula atinja temperaturas ultrabaixas - da ordem de nanokelvins - e esteja restrito a uma pequena região da célula - a armadilha magnética - atingindo densidades da ordem de  $10^{12}$  partículas por centímetro cúbico. Sob estas condições a amostra atinge o novo estado da matéria batizado de *Condensado de Bose-Einstein*.

## 2.2 OS TIPOS DE ARMADILHA DISPONÍVEIS

Os primeiros experimentos foram gerados em armadilhas magnéticas harmônicas [4, 5, 6]. Porém, uma vez estabelecido o caminho para obter a condensação, um número sempre crescente de diferentes armadilhas tem sido relatado: armadilhamento unidimensional e bidimensional [36, 37]; redes uni [10, 38, 39], bi [40] e tridimensionais [41] de poços de aprisionamento de condensados; poço toroidal [42]; apenas um poço duplo [16, 43], entre muitos outros. Essa grande variedade de poços distintos explicita a gama enorme de fenômenos a serem investigados com este tipo de sistema.

Além de existirem estas armadilhas estacionárias é possível que elas sejam alteradas durante o decorrer de um experimento. Por exemplo: uma armadilha magnética unidimensional pode ser, por assim di-

zer, fatiada em duas partes pelo acréscimo de uma barreira de potencial no centro da armadilha [16, 17]. Este tipo de armadilha de duplo poço é o que está mais ligado ao nosso trabalho.

### 2.3 O CONTROLE DA INTERAÇÃO

Não só o potencial aprisionador de condensados pode ser alterado. Uma abordagem de campo-médio à temperatura zero aplicada à descrição do condensado de bósons fornece uma equação efetiva que é não-linear. Toda a interação é levada em consideração neste termo não-linear cuja relevância energética é ditada apenas por um parâmetro: o *comprimento de espalhamento de ondas  $s$* . A estimativa teórica da ordem de grandeza deste parâmetro pode ser feita via Teoria de Espalhamento. Tal equação não-linear efetiva recebeu o nome de *Equação de Gross-Pitaevskii* em homenagem aos dois primeiros autores que a deduziram. Ela têm-se mostrado muito eficiente para descrever sistemas adequados a ela [2, 3, 44].

O fato é que, experimentalmente, até mesmo o parâmetro não-linear da Equação de Gross-Pitaevskii pode ser controlado por meio da aplicação de campos magnéticos apropriados que ativam as ressonâncias de Feshbach em processos de colisão atômica de baixa energia [9, 45, 46, 47] (ver também [8] e referências dentro para maiores explicações do fenômeno). Conforme citado na introdução, propostas teóricas de controle de população em cada poço de uma armadilha múltipla têm sido feitas com base nesta possibilidade de controle de interação (ver [33] como exemplo). Tal controle de população em armadilhas poderá ter importância fundamental no armazenamento e processamento de informações via ondas de matéria, caso esse tipo de tecnologia venha a ser desenvolvido e adotado.

### 2.4 A ENGENHARIA DE FASE

Além do controle da interação e do tipo de armadilha onde um ou muitos condensados podem ser gerados, já em 1999 deu-se início à exploração experimental dos efeitos da canonicidade entre número de partículas e fase global da onda única que as descreve. Estas primeiras propostas de introdução de gradiente de fase no condensado objetivavam gerar estruturas previstas pela teoria não-linear descritiva dos condensados. Estas estruturas são chamadas de sólitons em alguns ca-

tos - onde ondas solitárias de densidade de bósons se propagam através do condensado, e não se tratam de ondas sonoras [24] - e de vórtices em outros - onde singularidades na densidade de condensados bi e tri-dimensionais se movimentam através do condensado, como pequenos buracos ambulantes [48, 49]. Neste último caso a presença da singularidade está associada à presença de momento angular na nuvem de partículas.

De acordo com o relato experimental dado em [24] pode-se entender que o processo de inserção de gradiente de fase é facilmente implementado: parte do condensado é submetida à radiação fora de ressonância com qualquer das transições atômicas da espécie aprisionada e o efeito geral dessa exposição é a mudança da fase global da parte exposta. O condensado exposto a um laser fora de ressonância com um certo padrão de intensidade espacial  $I(x, y)$  expõe os átomos do condensado a um potencial espacialmente variável  $U(x, y)$  proporcional a intensidade do feixe e com isso estes adquirem uma fase correspondente  $\phi(x, y) = -U(x, y)T/\hbar$ , onde  $T$  é a duração do pulso do laser.

As aplicações da engenharia de fase não estão limitadas à geração de vórtices ou sólitons. Há a proposta do uso de inserção de fase em um condensado duplo objetivando gerar um estado emaranhado [50], por exemplo, e neste trabalho também usamos esta engenharia de fase como geradora de controle de excitação coletiva em condensados duplos gerados em junções Bose-Josephson [16].

## 2.5 UMA JUNÇÃO BOSE-JOSEPHSON

Os supercondutores sempre atraíram, e ainda atraem, a atenção dos físicos, teóricos e experimentais, por causa de suas propriedades curiosas. A investigação de uma junção de supercondutores no início da década de 1960 levou D Josephson a desvendar um comportamento completamente contraintuitivo dos portadores de carga da junção: (i) mesmo na ausência de diferença de potencial entre os componentes da junção haveria fluxo contínuo de portadores de carga de um componente para o outro; (ii) caso uma diferença de potencial constante fosse estabelecida entre os elementos então haveria, além da corrente contínua, uma corrente alternada de fundo [14]. Muito intrigados com a previsão teórica, no ano subsequente à previsão, 1963, foi relatada a observação experimental do fenômeno [15] e Josephson veio a ser laureado com Prêmio Nobel pela sua previsão em 1973. Este comportamento estranho dos portadores de carga recebeu o nome de *efeito Josephson*.

Uma vez que o efeito Josephson acontece devido à existência de uma função de onda macroscopicamente ocupada *em superposição* com outra função de onda também macroscopicamente ocupada, cada uma tendo *fase global* bem definida, ainda na década de 1960 seu trabalho foi estendido para tratar de quaisquer dois sistemas que exibam essas propriedades de fase bem definida e duas ondas superpostas que permitam troca de partículas entre si. Uma junção de superfluidos ou de condensados de bósons também exibirão efeito Josephson [51].

O efeito Josephson em superfluidos foi observado com  $^3\text{He}$ , em 1997 [52]. O experimento contava com dois containers deste superfluido separados por uma membrana nanometricamente fina e porosa, de modo a permitir fluxo de partículas através dela.

Já o efeito Josephson com dois condensados de bósons foi observado com um potencial de duplo poço onde a barreira entre os poços permitia tunelamento de partículas através dela [16]. Desse modo as funções de onda macroscópicas se sobrepunham e o efeito ocorria - com uma pequena diferença dos casos anteriores em superfluidos e supercondutores.

Em supercondutores ou superfluidos, um modelo de dois modos é capaz de descrever o comportamento do fluxo de partículas do sistema como sendo exatamente aquele de um pêndulo simples. No entanto, quando o mesmo modelo de dois modos é aplicado para descrever uma junção de condensados de bósons o pêndulo deixa de ser simples para tornar-se um pêndulo físico de inércia variável, particularmente, com a inércia dependente do momento angular do pêndulo. Esse comportamento curioso foi descrito em detalhes em 1997 [20, 21] e pôde-se observar a veracidade da descrição já em 2005 [16].

Existem mais curiosidades em relação a este tipo de junção. Por exemplo: um único poço pode conter uma junção Bose-Josephson se forem armadilhados nele duas espécies de bósons distintas com possibilidade de interconversão entre espécies. Isso é feito com dois níveis hiperfinos distintos em uma mesma armadilha. E mais, todos os regimes dinâmicos habilitados por um modelo de dois modos aplicado à descrição do sistema já foram experimentalmente acessadas neste último caso [25].

Um bom trabalho de tratamento da JBJ sob o modelo de dois modos que explicita os regimes dinâmicos acessíveis de excitação coletiva do sistema, com analogias com o pêndulo físico de inércia variável, é a referência [22].

## 2.6 JBJ E IMPRESSÃO DE FASE

Digamos que uma JBJ seja formada em uma armadilha de duplo poço simétrica, ou seja, temos a mesma espécie de bósons aprisionada em dois poços espacialmente separados, porém com formas idênticas, e onde há possibilidade de tunelamento de partículas através da barreira de potencial que os separa (ver Figura 1). Neste caso, o que ocorre se for gerada uma impressão de fase na núvem condensada de tal maneira que o gradiente de fase ocorra exatamente dentro da barreira de potencial? Esta é a pergunta central deste trabalho.

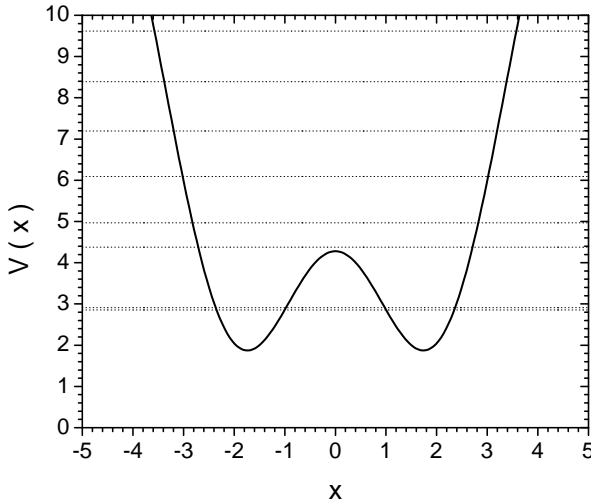


Figura 1: Potencial unidimensional exemplo de nosso trabalho (linha sólida) juntamente com o espectro de uma partícula correspondente (em linhas pontilhadas). Notar a presença de dupletos abaixo da altura da barreira enquanto que acima dela temos aproximadamente um espectro de oscilador. O potencial (adimensional) desta figura é do tipo  $V(x) = \frac{1}{2}x^2 + \frac{1}{2}V_0 \left[1 + \cos\left(\frac{2\pi x}{d}\right)\right]$ , com  $V_0 = 4.28$  e  $d = 4.28$ .

Os regimes dinâmicos de população observados em junções Bose-Josephson podem ser visualizados mais facilmente em um espaço de fases característico, como o da figura 2. Deve-se notar que existem

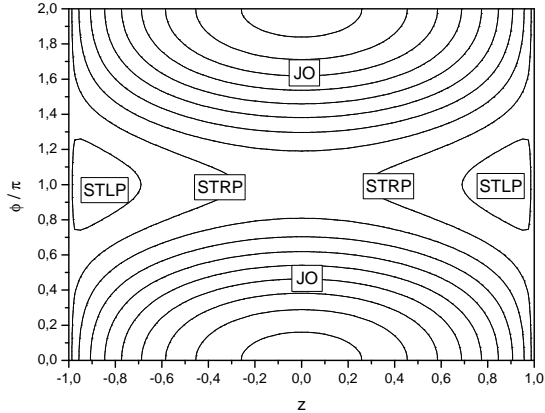


Figura 2: Regimes dinâmicos característicos de uma junção Bose-Josephson. As coordenadas são:  $z$  - diferença de população entre poços, e  $\phi$  - diferença de fase entre funções macroscópicas de cada poço. As trajetórias fechadas no entorno da origem, indicadas por JO (Josephson oscillations), representam os regimes de oscilação simples de população entre um poço e outro. As trajetórias abertas em ambos os lados de  $z = 0$ , indicadas por STRP (self-trapped, running-phase), representam regimes de auto-armadilhamento com fase corrente: a diferença de população média é diferente de zero e a diferença de fase aumenta de modo ilimitado. Por fim, as trajetórias fechadas em ambos os lados de  $z = 0$ , indicadas por STLP (self-trapped, locked phase), correspondem a dinâmicas auto-armadilhadas com diferença de fase limitada.

algumas trajetórias curiosas neste espaço de fases. Por exemplo, nos regimes fechados no entorno da diferença de fase  $\phi = \pi$  (indicados por STLP) as populações oscilam em torno de um valor médio diferente de zero, ou seja, um dos poços (ou lados da junção) tem sempre uma população significativamente maior que o outro. Por esta razão este regime recebe o nome de auto-armadilhamento quântico macroscópico (AAQM). Ainda há o AAQM com diferença de fase ilimitada (indicado por STRP), onde o crescimento ilimitado da diferença de fase faz lembrar, na analogia com o espaço de fases característico de um pêndulo simples, as trajetórias de rotação do pêndulo onde o ângulo cresce indefinidamente e o momento angular oscila no entorno de um valor diferente de zero. Uma comparação completa com o pêndulo está

disponível em [22].

Um dos nossos interesses neste sistema foi estudar os modos de AAQM afim de explorar a evidente quebra de simetria de ocupação para obter o controle de população em armadilhas duplas. A explicação do fenômeno já foi dada: no âmbito da Teoria Quântica de Muitos Corpos, trata-se da ocorrência de um tempo de tunelamento ultralongo entre poços [53]; no âmbito de Teoria de Campo Médio, já foi associado à não-linearidade da equação efetiva que dá a dinâmica do sistema [21].

Já houveram tentativas outras de obter o controle de população em condensados múltiplos. Entre tais tentativas, sejam citadas a variação periódica da barreira de potencial entre os poços permitindo o acesso aos estados de Floquet associados a tal variação, e a variação periódica da intensidade da interação entre partículas.

Nosso trabalho dá um enfoque totalmente distinto ao problema. Nossa proposta é transitar entre os diferentes regimes dinâmicos acessíveis ao sistema usando para isso mecanismos de impressão de diferença de fase entre as componentes da junção.

Voltando à pergunta do final do primeiro parágrafo desta subseção, o que é esperado acontecer quando da inserção da fase apenas em um dos componentes da junção é que o sistema transite entre regimes dinâmicos distintos de uma maneira tão suave quanto pegar um pêndulo com a mão e simplesmente soltá-lo de um dado ângulo. Após algumas oscilações damos um piparote na massa oscilante levando o sistema a oscilar em outro regime a ele disponível.

A canonicidade entre ângulo e momento angular do pêndulo é responsável pelos regimes dinâmicos distintos dele do mesmo modo que a canonicidade entre diferença de população e diferença de fase são responsáveis pelos regimes dinâmicos distintos em uma JBJ. Sendo assim, o controle sobre uma das variáveis ocasiona o controle sobre a outra. Na JBJ já mencionamos o controle experimental sobre a fase na seção 2.4. Sendo assim, mostraremos, através de simulações numéricas confiáveis, que este controle gera o controle não só sobre a população mas sobre todos os regimes dinâmicos de excitação coletiva acessíveis ao sistema.



### 3 TEORIA DE FUNDO E METODOLOGIA ADOTADA

#### 3.1 DESCRIÇÃO DE CAMPO-MÉDIO E REDUÇÃO DE DIMENSÕES

Consideremos a núvem de partículas idênticas constituidora de um condensado de bósons. Esta núvem pode ser considerada à temperatura zero, o que leva todas as partículas a ocuparem o estado fundamental do sistema. Caso não houvesse interação entre as partículas então a função de onda seria apenas o estado fundamental da armadilha que aprisiona os bósons.

A presença da interação altera significativamente o tratamento a ser dado à dinâmica do sistema. Considerando interação do tipo delta entre partículas e minimizando o funcional que fornece a energia do sistema condensado chega-se à seguinte equação não-linear de campo-médio

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\tilde{\Psi}(\bar{\mathbf{r}},\bar{t})+U(\bar{\mathbf{r}})\tilde{\Psi}(\bar{\mathbf{r}},\bar{t})+g(N-1)|\tilde{\Psi}(\bar{\mathbf{r}},\bar{t})|^2\tilde{\Psi}(\bar{\mathbf{r}},\bar{t})=i\hbar\frac{\partial\tilde{\Psi}(\bar{\mathbf{r}},\bar{t})}{\partial\bar{t}} \quad (3.1)$$

que ficou conhecida como Equação de Gross-Pitaevskii (EGP daqui pra frente) [2, 3]. Trata-se da Equação de Schrödinger acrescida de um termo não linear responsável por levar em conta a interação entre as partículas da núvem. Contando-se da esquerda para a direita temos o primeiro termo representando a energia cinética de uma partícula do sistema com massa  $m$ , sendo  $\hbar$  a constante de Planck dividida por  $2\pi$ , o segundo termo a energia do potencial aprisionador  $U(\mathbf{r})$  ao qual o sistema está submetido, o terceiro sendo o termo não linear citado anteriormente e, finalmente, ao lado direito da igualdade, temos a representação da evolução temporal do sistema por meio do operador energia. Resta dizer que a função  $\tilde{\Psi}$  está normalizada à unidade

$$\int|\tilde{\Psi}(\bar{\mathbf{r}},\bar{t})|^2d\bar{\mathbf{r}}=1. \quad (3.2)$$

O termo não linear possui intensidade mensurada em termos de um fator  $g$  que, por sua vez, é dado em termos fundamentais por

$$g=\frac{4\pi\hbar^2a_s}{m} \quad (3.3)$$

e pode ser obtido da teoria de espalhamento de duas partículas idênticas

a velocidades baixíssimas (ver [34], capítulo 5). O fator  $a_s$  é chamado de comprimento de espalhamento de ondas  $s$  e funciona como um parâmetro de impacto efetivo das duas partículas colisoras. O valor de  $a_s$  varia de espécie para espécie, sendo da ordem de nanômetros; pode, porém, ser controlado por meio das ressonâncias de Feshbach [8]. Já o fator  $(N - 1)$  que multiplica o  $g$  tem sua origem no fato de que uma partícula do sistema de muitos corpos interage com as outras  $(N - 1)$  partículas e não consigo mesma<sup>1</sup>. Por fim, resta notar que as dimensões de  $g$  são energia vezes volume, uma vez que o produto  $g|\tilde{\Psi}|^2$  tem dimensão de energia.

Não nos referiremos à Equação de Gross-Pitaevskii como Equação Não-Linear de Schrödinger uma vez que pode-se notar na literatura que a segunda nomenclatura é mais comumente usada para partículas livres [ $U(\mathbf{r}) = 0$ ] interagindo umas com as outras ( $g \neq 0$ ).

A EGP foi deduzida na década de 1960 independentemente por Gross e Pitaevskii, daí resultando seu nome. Sua validade foi largamente testada em experimentos com condensados de bósons e até hoje ela se tem mostrado extremamente robusta para descrever estes sistemas, fornecendo concordância quantitativa estupenda com os dados extraídos dos experimentos (ver a revisão [2]). Por esta razão, a EGP será usada por nós como modelo matemático para simular condensados em armadilhas. Devemos ter em mente, porém, as limitações de nossa equação modelo: trata-se de uma equação de campo-médio descrevendo somente *uma função de onda macroscópica*. Isso quer dizer que partículas presentes em estados excitados não são consideradas por ela e, ainda, que correlações de duas ou mais partículas também são negligenciadas neste tratamento.

Como faremos simulações numéricas, é útil adimensionalizar a EGP, equação 3.1. Para isso devemos estabelecer que o potencial armadilhador mais comum a ser trabalhado é o harmônico simples acrescido de alguma outra função  $U'(\bar{\mathbf{r}})$ :

$$U(\bar{\mathbf{r}}) = \frac{1}{2}m\omega_x^2 \left( \bar{x}^2 + \frac{\omega_y^2}{\omega_x^2} \bar{y}^2 + \frac{\omega_z^2}{\omega_x^2} \bar{z}^2 \right) + U'(\bar{\mathbf{r}}). \quad (3.4)$$

Sendo assim, as dimensões de trabalho convenientes são as de oscilador

---

<sup>1</sup>Embora os experimentos atuais não sejam capazes de contabilizar *exatamente* o número  $N$  de partículas, o que invalidaria a subtração de uma unidade neste termo, insistiremos na notação  $(N - 1)$  para evidenciar a necessidade de mais de uma partícula em uma armadilha para que o termo não linear da EGP seja não-nulo.

harmônico dadas por

$$[\text{comprimento}] = a_x \equiv \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_x}} \quad (3.5)$$

$$[\text{tempo}] = \omega_x^{-1} \quad (3.6)$$

$$[\text{energia}] = \hbar\omega_x \quad (3.7)$$

onde estabelecemos, sem perda de generalidade, a direção  $\bar{x}$  como padrão. Chamaremos as razões entre as frequências de armadilhamento nas outras direções,  $\bar{y}$  e  $\bar{z}$ , e na direção padrão,  $\bar{x}$ , quando necessário, de

$$\kappa = \frac{\omega_y}{\omega_x} \quad (3.8)$$

$$\lambda = \frac{\omega_z}{\omega_x}. \quad (3.9)$$

Levando estas dimensões na EGP, equação 3.1, obtemos a seguinte forma adimensional da EGP

$$-\frac{1}{2}\nabla^2\Psi(\mathbf{r}, t) + V(\mathbf{r})\Psi(\mathbf{r}, t) + \beta_{3D} |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 \Psi(\mathbf{r}, t) = i\frac{\partial\Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \quad (3.10)$$

onde as variáveis  $\mathbf{r}$  e  $t$  e a amplitude de probabilidade  $\Psi(\mathbf{r}, t)$  são agora adimensionais, ou seja

$$\mathbf{r} = (x, y, z) \equiv \left(\frac{\bar{x}}{a_x}, \frac{\bar{y}}{a_x}, \frac{\bar{z}}{a_x}\right) = \frac{\bar{\mathbf{r}}}{a_x} \quad (3.11)$$

$$t \equiv \omega_x \bar{t} \quad (3.12)$$

$$\Psi(\mathbf{r}, t) \equiv \sqrt{a_x^3} \tilde{\Psi}(\bar{\mathbf{r}}, \bar{t}) \quad (3.13)$$

O potencial armadilhador foi reescrito como

$$V(\mathbf{r}) \equiv \frac{U(\bar{\mathbf{r}})}{\hbar\omega_x} = \frac{1}{2}(x^2 + \kappa^2 y^2 + \lambda^2 z^2) + v(x), \quad (3.14)$$

com  $v(x) \equiv \frac{U'(\bar{\mathbf{r}})}{\hbar\omega_x}$ , e o parâmetro de interação passou a ser representado por

$$\beta_{3D} \equiv \frac{g(N-1)}{\hbar\omega_x a_x^3} = 4\pi(N-1)\frac{a_s}{a_x}. \quad (3.15)$$

Por fim, a normalização é reescrita como

$$\int |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 d\mathbf{r} = 1 \quad (3.16)$$

Fisicamente, quando as frequências de armadilhamento nas dimensões  $y$  e  $z$  são muito maiores do que na direção padrão  $x$  temos a dinâmica do sistema reduzida somente a uma dimensão. Neste caso formam-se os chamados *condensados tipo charuto*. O *quantum* de energia para excitar uma partícula para o próximo nível harmônico nas dimensões transversais é muito maior do que as energias de excitação coletiva da nuvem condensada e também muito maior que a excitação térmica. Esse fato acaba por restringir a dinâmica do sistema a apenas uma dimensão, validando processos de redução dimensional que objetivam uma diminuição do esforço computacional para obter simulações da EGP.

Utilizamos, ao longo do trabalho, dois processos de unidimensionalização. Os descreveremos a seguir.

O primeiro deles usa o seguinte *ansatz* para a função de onda total

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \sqrt[4]{\frac{\kappa \lambda}{\pi \pi}} e^{-\frac{\kappa y^2}{2}} e^{-\frac{\lambda z^2}{2}} \psi(x, t) \quad (3.17)$$

ou seja, há um congelamento da dinâmica nas direções  $y$  e  $z$ , estando a função de onda no estado fundamental destas direções. Quando levamos a equação 3.17 na EGP adimensional, equação 3.10, com o potencial dado pela expressão 3.14, e multiplicamos o resultado pelos estados fundamentais em  $y$  e  $z$  devidamente normalizados, presentes no *ansatz* 3.17 (a constante multiplicativa e as duas exponenciais), e integramos o resultado em  $y$  e  $z$ , ficamos com a EGP unidimensional (abreviada EGP1D a partir de agora [54])

$$\begin{aligned} -\frac{1}{2} \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} + \left[ \frac{\kappa}{2} + \frac{\lambda}{2} + \frac{1}{2} x^2 + v(x) \right] \psi(x, t) \\ + \beta_{1D} |\psi(x, t)|^2 \psi(x, t) = i \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} \end{aligned} \quad (3.18)$$

onde foi definido o termo de interação unidimensional  $\beta_{1D}$  como

$$\beta_{1D} \equiv \frac{\sqrt{\kappa \lambda}}{2\pi} \beta_{3D} = 2(N-1) \sqrt{\kappa \lambda} \frac{a_s}{a_x}. \quad (3.19)$$

Seja notado que este termo de interação efetiva agora depende da geometria da armadilha, termo  $\sqrt{\kappa \lambda}$  e do termo de interação tridimensi-

onal,  $\beta_{3D}$ , ou então, de modo mais fundamental, do comprimento de espalhamento de ondas  $s$ ,  $a_s$ , e do número de partículas do condensado,  $N$ .

A forma unidimensional dada na equação 3.18 é muito parecida com a equação original que a gerou, havendo apenas uma redefinição na origem da energia (constantes aditivas  $\kappa/2$  e  $\lambda/2$ ) e no termo de interação  $\beta_{1D}$ . Embora esteticamente parecida, resultados de simulações mostraram que este processo deixa a desejar em algumas situações. Por exemplo, a frequência de respiro de um condensado é maior em simulações com a EGP1D do que com a EGP [55]. Desse modo, visando maior concordância entre simulações unidimensionais e tridimensionais, torna-se útil outro processo de unidimensionalização.

O segundo método de unidimensionalização supõe que variações temporais na função de onda transversal de uma armadilha axialmente simétrica do tipo charuto ocorrem muito lentamente em comparação com as variações da direção axial. Através de um *ansatz* gaussiano para a direção transversal, com uma largura descrita por uma função dependente do tempo e da coordenada axial  $z$ , os autores da referência [55] obtiveram uma equação efetiva para o movimento axial e reduziram a EGP à uma equação não polinomial unidimensional.

Embora os resultados quantitativos desta abordagem sejam muito mais satisfatórios que os da EGP1D quando comparados com simulações diretas da EGP, a forma funcional da equação não é nada atraente, conforme pode ser notado

$$\begin{aligned}
 -\frac{1}{2} \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} + \left[ \frac{1}{2} x^2 + v(x) \right] \psi(x, t) + \beta_{1D} \frac{|\psi(x, t)|^2}{\sqrt{1 + \frac{\beta_{1D}}{\lambda} |\psi(x, t)|^2}} \psi(x, t) \\
 + \frac{\lambda}{2} \left( \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{\beta_{1D}}{\lambda} |\psi(x, t)|^2}} + \sqrt{1 + \frac{\beta_{1D}}{\lambda} |\psi(x, t)|^2} \right) \psi(x, t) = \\
 = i \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t}. \quad (3.20)
 \end{aligned}$$

Esta equação recebeu o nome de Equação Não-Polinomial de Schrödinger (abreviada ENPS a partir de agora) [55]. Aparecer somente um fator geométrico na equação, o termo  $\lambda$ , é um reflexo da simetria axial da armadilha ( $\lambda = \kappa$  para comparações com a EGP1D). Já o coeficiente não linear unidimensional possui a mesma definição que no caso da EGP1D, equação 3.19.

Duas características importantes devem ser notadas na ENPS, equação 3.20. A primeira delas é que, caso o termo não linear seja

muito pequeno, podem-se desprezar os termos quadráticos em  $\beta_{1D}$ , que se originariam da expansão em série de Taylor das raízes que tornam a equação não-polinomial, e facilmente se recupera a EGP1D - é uma mostra de consistência. A segunda característica é uma advertência: alguém poderia afirmar, em uma olhada rápida para a ENPS, que no caso de  $\beta_{1D}$  não ser pequeno bastaria aumentar a assimetria da armadilha, tornando o coeficiente  $\lambda \gg \beta_{1D}$ , analiticamente o efeito seria o de desprezar termos quadráticos na razão  $\beta/\lambda$ . No entanto, ao analisar a razão  $\beta_{1D}/\lambda$ , conforme aparece na equação, nota-se que

$$\frac{\beta_{1D}}{\lambda} = 2(N - 1) \frac{a_s}{a_x} \quad (3.21)$$

ou seja, a razão entre a não linearidade unidimensional e a assimetria independe da assimetria. Ela depende apenas do comprimento de espalhamento de ondas  $s$  e do número de partículas. Desse modo, é a interação, de fato, que deve ser pequena para que a ENPS seja transformada na EGP1D.

Embora a EGP1D seja mais parecida com a EGP, sempre realizamos simulações unidimensionais com a ENPS, dada a sua confiabilidade quantitativa quando comparados os seus resultados com os oriundos da EGP [55].

De posse das equações modelo teóricas, equações EGP, EGP1D e ENPS, devidamente justificadas podemos tratar agora do modelo de dois modos que visa simplificar a descrição analítica do sistema. A descrição pormenorizada dos métodos numéricos utilizados para realizar simulações e obter as constantes necessárias à descrição de dois modos foram deixadas para o apêndice A.

### 3.2 MODELO DE DOIS MODOS

Nas seções anteriores mencionamos algumas vezes o fato de a fase de um condensado de bósons ser bem definida. No entanto, o que não mencionamos foi a dificuldade de se construir um operador que extraia essa fase da função de onda quando damos um tratamento de muitos corpos, problema este bem abordado na década de 1960, revisado em [13]. Ainda já notado na mesma década foi o fato de que, embora um operador extrator da fase de *uma* função de onda fosse difícil definir, um operador extrator da *diferença de fase* entre *duas* funções, dois condensados, é bem definido em uma abordagem de muitos corpos. No entanto, em uma abordagem de campo médio retratada

pela EGP, até onde sabemos, não há operação que defina diferença de fase entre componentes de um modelo de dois modos, embora já se tenha tentado definir tal operação por meio das fases dos números complexos que representam cada parte da função numérica [57]. Não há uma forma bem definida de extrair da função que está sendo evoluída pela EGP a diferença de fase entre os dois modos que supostamente a representam bem em uma junção Bose-Josephson. Assim sendo, propomos um método de extrair tal diferença de fase e, a partir desta proposta, fomos capazes de redesenhar o espaço de fases referente ao modelo de dois modos utilizando somente simulações diretas da EGP, conforme mostraremos mais tarde. Com essa definição de diferença de fase entre componentes do modelo de dois modos fomos obrigados a redefinir a diferença de população entre os modos de uma maneira consistente com àquela de diferença de fase. Também mostraremos que, embora analiticamente distinta da definição comumente utilizada na literatura para diferença de população, resultados numéricos dessa grandeza aproximam-se muito daqueles apresentados na literatura para a definição convencional de diferença de população, o que vem a solidificar a robustez das novas definições.

Da mesma forma que a redução de dimensões facilita as simulações, a representação de dois modos facilita abordagens analíticas dadas às junções Bose-Josephson e à investigação sistemática dos regimes dinâmicos de excitações coletivas disponíveis ao sistema. Poder-se-ia questionar a validade de uma abordagem de dois modos a uma equação não-linear, no entanto esta abordagem está fortemente abalada pela estrutura energética característica das junções: as energias de excitações coletivas do sistema, que envolvem tunelamento de partículas, são muito menores que as energias de excitação de uma partícula para um possível próximo nível do espectro. Existem dois níveis energéticos muito próximos um do outro, cuja degenerescência foi quebrada justamente pela possibilidade de tunelamento de partículas, e o próximo nível acessível a qualquer partícula está separado destes dois primeiros níveis por uma lacuna energética muito maior que as de excitação térmica ou de excitações coletivas (ver espectro na figura 1). Sendo assim, a fundamentação para uma abordagem de dois modos dada ao problema é completamente física, não matemática.

Relembremos algumas previsões do modelo de dois modos para a dinâmica da junção Bose-Josephson, em especial as já citadas de 1997 [21], e realizadas em 2005 [16]. Neste processo de revisão ficará clara a canonicidade entre diferença de fase e diferença de população em um duplo condensado.

Deixamos dois resultados semi-analíticos obtidos durante o nosso trabalho e relacionados a esta seção nos apêndices. Um deles (apêndice B) trata semi-analiticamente do ponto de bifurcação entre soluções com contrapartida linear e sem tal contrapartida da EGP1D [57, 58, 59, 60, 61, 62]. A bifurcação apareceu como uma divergência na série não-perturbativa lá abordada. Esse resultado dá certa credibilidade até a modelos multimodos já apresentados para a EGP, desde que a interação não linear não leve as soluções a atingir os valores de potencial químico de bifurcação [57]. O outro (apêndice C) trata do modelo de dois modos aplicado à equação não polinomial de Schrödinger e leva a termos de correção na Hamiltoniana semiclássica que não estão presentes nos tratamentos clássicos de dois modos presentes na literatura. No entanto tais correções mostram-se completamente desprezíveis dentro dos parâmetros de condensação unidimensional dupla e por isso não foram notados até agora; além de serem termos pequenos não podemos esquecer se tratarem de correções a um modelo unidimensional de condensado tipo charuto axialmente simétrico que tenta levar em conta os efeitos da dinâmica de fundo ocorrendo na dimensão transversal ao eixo de simetria.

### 3.2.1 Modelando a dinâmica de um condensado duplo - espaço de fases

Sempre que pudermos reduzir o espaço de possibilidades da dinâmica de um sistema físico a apenas dois estados então um modelo de dois modos para tal problema mostrar-se-á conveniente. O caso de uma JBJ não é diferente.

Em uma JBJ temos um condensado de bósons gerado em uma armadilha do tipo duplo poço. Para simplificar nosso trabalho vamos supor sempre que tal potencial de duplo poço é simétrico. Sendo assim, quando a barreira que separa os dois poços é infinita então os dois primeiros estados do sistema são degenerados. Ao diminuirmos a altura da barreira do infinito, a degenerescência destes dois estados vai sendo quebrada e começa a haver a possibilidade de tunelamento de partículas. Nestas circunstâncias ocorre que os dois primeiros estados possuem energias muito próximas uma da outra enquanto que o terceiro estado possui energia muito acima da energia do segundo estado. Desse modo um modelo de dois modos é válido desde que as energias envolvidas nos processos dinâmicos coletivos que venham a ser gerados não sejam capazes de excitar partículas para este terceiro estado do



sistema.

Vamos reescrever a equação 3.10 aqui

$$-\frac{1}{2}\nabla^2\Psi(\mathbf{r}, t) + V(\mathbf{r})\Psi(\mathbf{r}, t) + \beta_{3D}|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2\Psi(\mathbf{r}, t) = i\frac{\partial\Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t}, \quad (3.22)$$

e, à base da descrição do parágrafo precedente para validade de um modelo de dois modos, vamos aproximar a solução desta equação por

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \bar{\psi}_0(t)\varphi_0(\mathbf{r}) + \bar{\psi}_1(t)\varphi_1(\mathbf{r}) \quad (3.23)$$

onde as funções  $\varphi_i(\mathbf{r})$ ,  $i = 0, 1$ , são funções reais, sem perda de generalidade, e satisfazem a EGP independente do tempo

$$-\frac{1}{2}\nabla^2\varphi_i(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r})\varphi_i(\mathbf{r}) + \beta_{3D}|\varphi_i(\mathbf{r})|^2\varphi_i(\mathbf{r}) = \mu_i\varphi_i(\mathbf{r}) \quad (3.24)$$

onde  $\mu_i$  é o potencial químico da solução  $i$ . A solução  $\Psi(\mathbf{r}, t)$  estará normalizada à unidade

$$\int |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 d\mathbf{r} = 1. \quad (3.25)$$

Uma vez que supomos potencial  $V(\mathbf{r})$  simétrico podemos afirmar que as funções  $\varphi_i(\mathbf{r})$ ,  $i = 0, 1$ , são ortonormais

$$\int \varphi_i(\mathbf{r})\varphi_j(\mathbf{r})d\mathbf{r} = \delta_{ij}. \quad (3.26)$$

Esta afirmação não é óbvia, uma vez que estamos tratando de uma equação não linear. No entanto, no trabalho [56] há a demonstração de que, para interação repulsiva entre átomos, ou seja, para parâmetro  $\beta_{3D} > 0$ , o estado fundamental do potencial é par e o primeiro excitado é ímpar, o que valida a ortogonalidade. Vale lembrar que a normalização no caso de uma solução de equação não linear não é simplesmente multiplicar por uma constante. Uma solução qualquer da EGP multiplicada por uma constante continua sendo solução da EGP só que para um parâmetro de interação não linear modificado pela mesma constante que multiplicou a solução. Então, nem a ortogonalidade nem a normalização expressos na equação 3.26 merecem ser consideradas como simplistas. No caso de interação atrativa os estados fundamental e primeiro excitado do duplo poço vão obedecer à equação 3.26 somente caso a intensidade dessa interação seja pequena. Caso atinja um valor crítico (ver apêndice B) então os dois primeiros

estados são assimétricos, localizados cada um deles em um dos poços. Ainda nesse caso podemos aplicar o tratamento dado aqui por construímos, a partir destes estados assimétricos, combinações simétrica e antissimétrica deles, de tal modo que a equação 3.26 ainda continuará sendo válida. Um exemplo gráfico das funções solução da equação 3.24 para o caso unidimensional é dado na figura 3 - quadrados e círculos abertos.

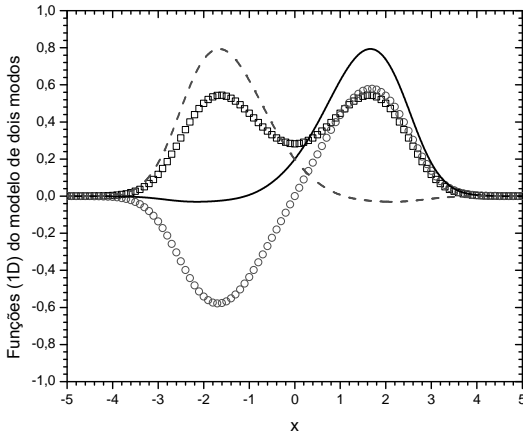


Figura 3: Soluções da EGP1D independente do tempo para o mesmo potencial da Figura 1, aqui com parâmetro de interação  $\beta_{1D} = 5$ . Os símbolos abertos representam as funções simétrica (quadrados) e antissimétrica (círculos)  $\{\varphi_0, \varphi_1\}$ , respectivamente, enquanto que as linhas representam as combinações lineares das primeiras, resultando nas funções localizadas nos poços da direita (sólida) e esquerda (tracejada),  $\{\phi_0, \phi_1\}$ .

Voltando ao modelo de dois modos para a solução da EGP, equação 3.23, as funções  $\bar{\psi}_i(t)$  irão descrever a fração de população que está em cada um dos estados simétrico e antissimétrico, respectivamente  $i = 0$  e  $i = 1$ . Mas mostra-se contra-intuitiva uma interpretação de populações em estados simétrico ou antissimétrico, sendo de mais fácil e rápida visualização uma interpretação de populações em poços físicos distintos, neste caso que estudaremos de JBJ. Sendo assim, propõe-se uma *mudança de base* para descrever a dinâmica do

sistema. A nova base é dada pelas funções localizadas

$$\phi_0(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\varphi_0(\mathbf{r}) + \varphi_1(\mathbf{r})] \quad (3.27)$$

$$\phi_1(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\varphi_0(\mathbf{r}) - \varphi_1(\mathbf{r})] \quad (3.28)$$

novamente com a condição de ortonormalidade

$$\int \phi_i(\mathbf{r})\phi_j(\mathbf{r})d\mathbf{r} = \delta_{ij} \quad (3.29)$$

que é uma consequência natural da ortonormalidade das funções  $\{\varphi_i(\mathbf{r})\}$ . (As linhas sólida e tracejada da figura 3 exemplificam as funções  $\{\phi_0, \phi_1\}$  para o caso unidimensional.) Levando esta nova base no modelo de dois modos, equação 3.23, temos:

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \psi_0(t)\phi_0(\mathbf{r}) + \psi_1(t)\phi_1(\mathbf{r}) \quad (3.30)$$

onde também as funções temporais passaram por uma redefinição, a saber

$$\psi_0(t) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\bar{\psi}_0(t) + \bar{\psi}_1(t)] \quad (3.31)$$

$$\psi_1(t) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\bar{\psi}_0(t) - \bar{\psi}_1(t)] \quad (3.32)$$

e agora cada  $\psi_i(t)$  fornecerá diretamente a fração de população em cada lado do duplo poço.

Prossigamos por incluir o modelo de dois modos dado pela equação 3.30 na equação 3.22. Depois dessa inclusão, que seja tomado o produto, em ambos os lados da equação resultante, por  $\phi_0(\mathbf{r})$  e haja a integração em  $\mathbf{r}$ ; que seja feito o mesmo processo com  $\phi_1(\mathbf{r})$ . O resultado final destes processos corresponde às seguintes equações descritivas das dinâmicas populacionais em cada poço

$$i\frac{d\psi_0}{dt} = [E + A|\psi_0|^2 + D\psi_1^*\psi_0] \psi_0 - \left[ \frac{B}{2} - D|\psi_0|^2 - C\psi_0^*\psi_1 \right] \psi_1 \quad (3.33)$$

$$i\frac{d\psi_1}{dt} = [E + A|\psi_1|^2 + D\psi_0^*\psi_1] \psi_1$$

$$-\left[\frac{B}{2} - D|\psi_1|^2 - C\psi_1^*\psi_0\right]\psi_0 \quad (3.34)$$

onde usamos a equação 3.24 e a condição de normalização

$$|\psi_0|^2 + |\psi_1|^2 = 1. \quad (3.35)$$

Também foram definidas, em analogia com o trabalho [57], as seguintes constantes

$$A \equiv \frac{1}{4}\beta_{3D}(10I_{01} - I_{00} - I_{11}) \quad (3.36)$$

$$B \equiv \mu_1 - \mu_0 + \frac{1}{2}\beta_{3D}(I_{00} - I_{11}) \quad (3.37)$$

$$C \equiv \frac{1}{4}\beta_{3D}(I_{00} + I_{11} - 2I_{01}) \quad (3.38)$$

$$D \equiv \frac{1}{4}\beta_{3D}(I_{00} - I_{11}) \quad (3.39)$$

$$E \equiv \frac{\mu_0 + \mu_1}{2} - \beta_{3D}I_{01} \quad (3.40)$$

com as integrais  $I_{ij}$  dadas por:

$$I_{ij} \equiv \int \varphi_i^2(\mathbf{r})\varphi_j^2(\mathbf{r})d\mathbf{r}. \quad (3.41)$$

Se agora tomarmos o produto de 3.33 (3.34) por  $\psi_0^*(t)$  ( $\psi_1^*(t)$ ) e subtraírmos da equação resultante deste produto o seu próprio complexo conjugado obteremos as duas novas equações

$$\begin{aligned} \frac{d|\psi_0|^2}{dt} &= -B|\psi_0||\psi_1|\sin(\theta_1 - \theta_0) \\ &\quad + 2C|\psi_0|^2|\psi_1|^2\sin 2(\theta_1 - \theta_0) \end{aligned} \quad (3.42)$$

$$\begin{aligned} \frac{d|\psi_1|^2}{dt} &= B|\psi_0||\psi_1|\sin(\theta_1 - \theta_0) \\ &\quad - 2C|\psi_0|^2|\psi_1|^2\sin 2(\theta_1 - \theta_0) \end{aligned} \quad (3.43)$$

onde foi usado o fato de que podemos escrever qualquer número complexo sob a forma polar

$$\psi_i(t) = |\psi_i(t)|e^{i\theta_i(t)} \quad (3.44)$$

com  $\theta_i$  sendo a fase do correspondente número complexo  $\psi_i$ , e fez-se

uso da regra de derivação do produto de funções.

Por outro lado, a adição do produto de 3.33 (3.34) por  $\psi_0^*(t)$  ( $\psi_1^*(t)$ ) com o seu próprio complexo conjugado e o uso da regra de derivada da divisão de funções fornecerá as equações de evolução temporal das fases dos números complexos que estão representando as populações em cada poço

$$\begin{aligned} \frac{d\theta_0}{dt} &= -(E + A|\psi_0|^2) \\ &\quad + \frac{1}{2}(B - 4D|\psi_0|^2) \frac{|\psi_1|}{|\psi_0|} \cos(\theta_1 - \theta_0) \\ &\quad - C|\psi_1|^2 \cos 2(\theta_1 - \theta_0) \end{aligned} \quad (3.45)$$

$$\begin{aligned} \frac{d\theta_1}{dt} &= -(E + A|\psi_1|^2) \\ &\quad + \frac{1}{2}(B - 4D|\psi_1|^2) \frac{|\psi_0|}{|\psi_1|} \cos(\theta_1 - \theta_0) \\ &\quad - C|\psi_0|^2 \cos 2(\theta_1 - \theta_0). \end{aligned} \quad (3.46)$$

Como último passo, se subtrairmos da 3.43 (3.46) a 3.42 (3.45) e definirmos:

$$z(t) \equiv |\psi_1(t)|^2 - |\psi_0(t)|^2 \quad (3.47)$$

$$\phi(t) \equiv \theta_1(t) - \theta_0(t) \quad (3.48)$$

obtemos a forma padrão, encontrada na literatura [22, 57], para a dinâmica diferença de fase ( $\phi$ ) *versus* diferença de população ( $z$ ):

$$\frac{dz}{dt} = B\sqrt{1-z^2} \sin \phi - C(1-z^2) \sin 2\phi \quad (3.49)$$

$$\frac{d\phi}{dt} = -Az - B\frac{z}{\sqrt{1-z^2}} \cos \phi + Cz \cos 2\phi. \quad (3.50)$$

As equações de movimento 3.49 e 3.50 podem ser obtidas a partir da relação canônica:

$$\dot{z} = \frac{\partial H}{\partial \phi} \quad \dot{\phi} = -\frac{\partial H}{\partial z} \quad (3.51)$$

com a Hamiltoniana  $H(z, \phi)$  dada por:

$$H(z, \phi) = \frac{1}{2}Az^2 - B\sqrt{1-z^2} \cos \phi + \frac{1}{2}C(1-z^2) \cos 2\phi. \quad (3.52)$$

e vemos que  $z$  e  $\phi$  são variáveis canonicamente conjugadas<sup>2</sup>.

Sabemos que o sistema é conservativo, de modo que valores constantes de energia corresponderão a curvas de nível da Hamiltoniana obtida. Estas curvas, por sua vez, fornecerão as dinâmicas semiclássicas acessíveis ao sistema e estarão representadas no espaço de fases correspondente ao par de variáveis canônicas  $(z, \phi)$ .

As constantes  $A$ ,  $B$  e  $C$  dependem das integrais de superposição dos dois modos utilizados, da diferença de potenciais químicos, do parâmetro de interação não linear  $\beta_{3D}$  e da altura de barreira (ver definições 3.36-3.38), valendo notar que existe correlação direta entre cada uma destas grandezas que definirão os valores das constantes  $A$ ,  $B$  e  $C$ . Por exemplo, se variamos a altura de barreira mantendo interação entre partículas inalterada, naturalmente os dois modos serão alterados, uma vez que houve modificação do potencial. Também os potenciais químicos serão alterados e as integrais de superposição, pela mesma razão. Ou seja, mudando um parâmetro de potencial todas as constantes se modificam.

Conforme notado por Ananikian - o primeiro a dar um tratamento exato para o modelo de dois modos aplicado à EGP sem recorrer a argumentações físicas para aproximar a validade da ortonormalidade dos dois modos [57] - e por Albiez - que realizou a primeira JBJ experimentalmente [16] - a constante  $C$  é sempre muito menor que as outras duas,  $A$  e  $B$ , de modo que a maioria dos autores que tratam de um modelo de dois modos sob esta abordagem hamiltoniana acabam desprezando-a. Já as constantes  $A$  e  $B$  competem entre si gerando espaços de fase característicos de cada razão  $A/B$  assumida.

No caso de baixos valores de interação entre partículas a constante  $B$  domina sobre  $A$ , implicando em  $A/B < 1$ , e neste caso temos somente regimes dinâmicos de oscilação de partículas entre poços de modo simétrico. Para valores  $1 < A/B < 2$  vemos o surgimento de regimes dinâmicos cuja diferença de população média é diferente de zero, o que equivale a uma quebra de simetria, uma vez que o duplo poço é simétrico e não deveria haver preferência por nenhum dos poços. Notar que estes regimes AAQM possuem diferença de fase limitada. Finalmente, para valores  $A/B > 2$  temos regimes de AAQM com fase ilimitada, que equivaleria a um pêndulo simples cuja energia total supera a energia potencial do ponto de máxima elevação da massa oscilante de modo que ele fica girando indefinidamente.

---

<sup>2</sup>Para esta Hamiltoniana fornecer os mesmos valores de energia que são obtidos por simulações diretas da EGP temos de adicionar a constante  $E$ , dada na equação 3.40, a ela. Como sabemos, esta adição não alterará as equações de movimento.

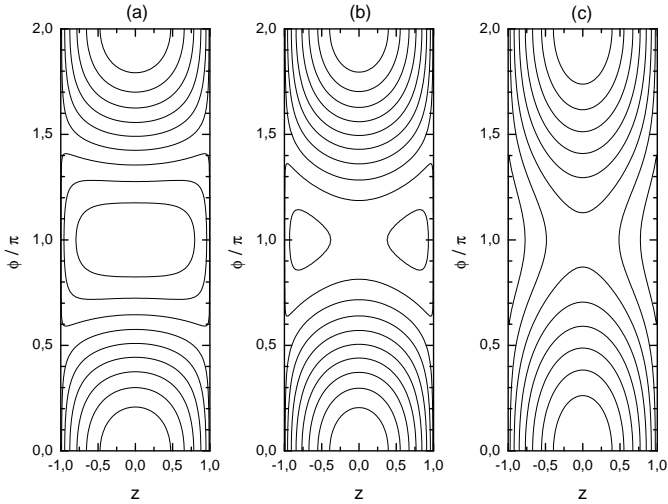


Figura 4: Hamiltonianas possíveis conforme a razão entre os parâmetros  $A$  e  $B$  vai variando. O ajuste das razões  $A/B$  foi obtido por variar o parâmetro  $\beta_{1D}$  de modo a obter em (a)  $A/B = 0.78$ , em (b)  $A/B = 1.55$  e em (c)  $A/B = 3.1$ .

A figura 4 exemplifica as três configurações arbitrárias dos valores das constantes  $A$  e  $B$  (desprezamos  $C$  para desenhar a figura e para a descrição precedente). Utilizamos as razões entre estas constantes conforme elas foram relatadas no experimento que reproduziu completamente o espaço de fases relacionado ao modelo de dois modos descrito aqui objetivando manifestar a proximidade entre simulações numéricas e dados experimentais [25]. O duplo condensado utilizado no caso citado foi de estados hiperfinos distintos em uma mesma armadilha, diferente do nosso, mas onde a abordagem de dois modos também é válida. Utilizando como ferramenta de controle dos coeficientes  $A$  e  $B$  a ressonância de Feshbach, capaz de controlar o comprimento de espalhamento das partículas do condensado, os autores com sucesso obtiveram todos os regimes dinâmicos possíveis disponibilizados por este modelo. Em outras palavras, a própria interação entre partículas foi alterada de modo a escolher entre as hamiltonianas disponibilizadas pelo modelo.

O alcance experimental de hoje não estava disponível em 1997, quando da previsão do AAQM a partir do modelo de dois modos. De

fato, uma única JBJ só foi relatada em 2005, conforme já dissemos [16]. Dada a capacidade deste modelo simples de descrever a dinâmica da JBJ, aprendemos que o condensado de bósons é mais robusto do que parece. Podemos afirmar isso porque, conforme vimos no capítulo anterior, a EGP é uma equação de campo médio à temperatura zero com interação tipo caroço duro entre partículas, um modelo bastante restritivo. Mas o fato de carregar consigo informações qualitativas e quantitativas do problema mostra claramente que o grosso do processo físico em si está descrito nela - e muito bem, diga-se de passagem.

### 3.2.2 O espaço de fases a partir da EGP

Os espaços de fase apresentados, robustos, confiáveis e completos no que diz respeito às dinâmicas acessíveis ao sistema, não provêm diretamente da EGP; eles provêm de uma dinâmica restrita a dois modos. Os trabalhos mais clássicos que aplicam o modelo de dois modos à EGP e que reproduzem o espaço de fases correspondente usualmente seguem duas metodologias: ou usam as equações dinâmicas 3.49 e 3.50 conforme fizemos, ou, em uma abordagem de muitos corpos, usam do formalismo das funções de Husimi para transitar do quântico para o clássico e então reobtem o espaço de fases.

Neste trabalho nós reproduzimos completamente os espaços de fase disponíveis a um duplo condensado espacial (ou, um condensado em duplo poço simétrico), de acordo com os valores acessíveis à razão  $A/B$ , diretamente a partir de simulações da EGP. Estes resultados, por provirem de simulações diretas, naturalmente não estão restritos à aproximação de dois modos. Sendo assim, o fato de representarmos os espaços de fases partindo de simulações diretas prova, numericamente, que a dinâmica ocorre em um espaço de funções restrito a apenas dois estados. Vale destacar a indispensabilidade de uma boa definição de diferença de fase e de população numéricas entre os dois modos do modelo para a reprodutibilidade do espaço de fases semiclássico.

Em um tempo  $t$  qualquer de uma evolução temporal da função de onda  $\Psi(\mathbf{r}, t)$  representativa de uma JBJ sob a EGP, o modelo de dois modos prevê uma função dada pela equação 3.30. O que propomos de diferente dos outros trabalhos é que as constantes  $\psi_i(t)$ ,  $i = 0, 1$ , representativas do percentual da função de onda que está em cada poço, sejam dadas pela integral

$$\psi_i(t) = \int \phi_i(\mathbf{r})\Psi(\mathbf{r}, t)d\mathbf{r} \quad (3.53)$$



que é o produto interno da função  $\Psi(\mathbf{r}, t)$  pelo modo  $i$  que temos interesse, sendo  $i = 0$  ou  $i = 1$ . A soma apresentada na equação 3.30 com as constantes  $\psi_i(t)$  dadas pela integral 3.53 não será capaz de representar completamente a função  $\Psi(\mathbf{r}, t)$ , uma vez que esta não está restrita a ser uma combinação perfeita dos dois modos *durante* a simulação completa da EGP. Desse modo, ganhamos naturalmente uma forma de avaliar o quão boa está a aproximação dos dois modos para a função ao definirmos outra função, que chamaremos de *resto*,  $R(\mathbf{r}, t)$ , como

$$R(\mathbf{r}, t) \equiv \Psi(\mathbf{r}, t) - \psi_0(t)\phi_0(\mathbf{r}) - \psi_1(t)\phi_1(\mathbf{r}). \quad (3.54)$$

Ora, as funções  $\phi_i$  são ortonormais, de modo que podemos afirmar a validade da seguinte equação

$$|\epsilon(t)|^2 \equiv \int |R(\mathbf{r}, t)|^2 d\mathbf{r} = \int |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 d\mathbf{r} - |\psi_0(t)|^2 - |\psi_1(t)|^2 \quad (3.55)$$

onde definimos o número  $\epsilon$  como o representativo do erro cometido ao tomarmos a aproximação de dois modos. Assim, em cada simulação podemos acompanhar a evolução temporal de cada componente  $|\psi_i(t)|^2$  e também do erro  $|\epsilon(t)|^2$ .

Notar que em 3.55 não igualamos a condição de normalização da função  $\Psi$  à unidade porque, eventualmente, devido a flutuações numéricas durante a simulação, a norma deixará de ser 1. A critério de completeza na apresentação de resultados, os gráficos que apresentarem a evolução temporal das componentes e do erro também apresentarão a norma. Será visto que ela se mantém próxima de 1 em todas as simulações feitas, o que fortalecerá a confiança nos métodos numéricos utilizados.

A partir dos números complexos  $\psi_i(t)$  definidos na equação 3.53 podemos, consistentemente, definir a diferença de população,  $z(t)$ , e a diferença de fase,  $\phi(t)$ , entre modos conforme segue

$$z(t) = |\psi_1(t)|^2 - |\psi_0(t)|^2 \quad (3.56)$$

$$\phi(t) = \arg\left(\frac{\psi_1(t)}{\psi_0(t)}\right) = \theta_1 - \theta_0 \quad (3.57)$$

onde  $\theta_i$  corresponde à fase do número complexo  $\psi_i(t)$  em sua representação polar. Estas definições são exatamente as dadas pelas equações 3.47 e 3.48 só que agora, juntamente com a equação 3.53, têm relação direta com a função  $\Psi(\mathbf{r}, t)$  evoluída pela EGP.

A definição de diferença de população dada aqui, equação 3.56,

difere daquela comumente apresentada na literatura para o estudo de poços duplos espaciais. Esta última é frequentemente apresentada como

$$z_s(t) = \int_0^\infty |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 d\mathbf{r} - \int_{-\infty}^0 |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 d\mathbf{r} \quad (3.58)$$

com o índice  $s$  evidenciando ser a definição padrão de diferença de população. Note-se que esta definição, embora seja apropriada para o estudo de condensados duplos espaciais mostra-se deficiente para tratar de condensados sobrepostos em uma mesma armadilha enquanto que aquela dada pela equação 3.56 não apresenta tal limitação.

Analicamente a relação entre  $z_s(t)$  e  $z(t)$ , assumindo o modelo de dois modos como exato, é dada por

$$z_s(t) = 2z(t) \int_0^\infty \varphi_0(\mathbf{r})\varphi_1(\mathbf{r})d\mathbf{r} \quad (3.59)$$

com as duas funções no integrando sendo aquelas que satisfazem a EGP, ou seja, sendo as que possuem simetria definida e não as funções localizadas  $\phi_i(\mathbf{r})$ . Temos notado numericamente que  $z_s$  e  $z$  são próximos indica que a integral relacionando estas definições de diferença de população é próxima de 1/2, o que também foi notado verdadeiro para um intervalo significativo de valores de não linearidade para o caso de armadilha unidimensional semelhante à do trabalho [57].

Com o fim de explicitar a consistência das definições de diferença de fase e de população apresentadas aqui com aquelas dadas pela literatura, reproduziremos os espaços de fases correspondentes à figura 4 só que com parâmetros de armadilhamento equivalentes aos apresentados no experimento [16], que corresponde um potencial armadilhador de duplo poço espacial, ou seja, uma JBJ. Nos restringiremos a simulações unidimensionais para esta apresentação e, para atingirmos os valores requeridos de não linearidade que permitam o acesso aos espaços de fases daquela figura vamos supor que uma das seguintes opções experimentais aconteçam: (1) o comprimento de espalhamento é tornado pequeno ou (2) o número de partículas é tornado pequeno. Tal observação está embasada na equação 3.19, que mostra a dependência do parâmetro efetivo de interação não-linear unidimensional  $\beta_{1D}$  com os parâmetros experimentais. Numericamente o acesso aos valores de não linearidade que reproduzem os espaços de fase daquela figura 4 são obtidos por tentativa e erro: sabemos o valor da razão  $A/B$  que gera as curvas daqueles espaços de fase e sabemos que os valores de  $A$  e de  $B$  provém de integrais de superposição dos dois modos e do valor da não-

linearidade efetiva (ver equações 3.36 e 3.37, notando que  $\beta_{3D}$  deve ser substituído por  $\beta_{1D}$  quando a simulação for unidimensional); os dois modos, por sua vez, dependem da não linearidade efetiva. Sendo assim, testamos valores de não linearidade até que os valores das razões  $A/B$  desejadas fossem obtidas. Os valores de  $\beta_{1D}$  que permitiram o desenho dos espaços de fases equivalentes aos da figura 4 são:  $\beta_{1D} = 0.0326$  para a parte (a) da figura,  $\beta_{1D} = 0.0654$  para a parte (b) e, finalmente  $\beta_{1D} = 0.1338$  para a parte (c). Vale notar que para cada uma das dinâmicas necessárias para a reconstrução de cada um dos espaços de fases da figura 5 a partir da EGP, o erro definido em 3.55 assumiu valores muito menores que quaisquer das componentes  $\psi_0(t)$  ou  $\psi_1(t)$  durante todo o tempo de simulação.

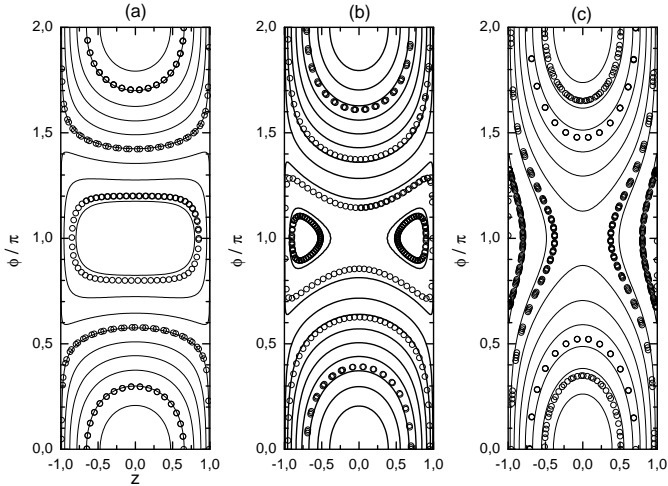


Figura 5: Demonstração da possibilidade de reconstrução do espaço de fases correspondente a um modelo de dois modos diretamente a partir de simulações da EGP. Essa reconstrução acaba por demonstrar não só a validade do modelo de dois modos mas também a consistência das definições de diferença de população e de fase conforme dadas a partir dos números complexos  $\psi_i(t)$  definidos na equação 3.53. As linhas sólidas de fundo em cada parte, (a), (b) ou (c), são curvas de nível da Hamiltoniana semiclássica dada em 3.52. Já os círculos vazios provêm das simulações da EGP unidimensional. Cada trajetória em cada espaço de fases corresponde a uma simulação com uma condição inicial diferente.

Por fim, na figura 6 representamos o espaço de fases da JBJ

apresentada no trabalho [16] segundo o modelo de dois modos para o problema, com parâmetros equivalentes ao relato experimental, e segundo a EGP tridimensional. A concordância entre as descrições é notável. (O traço central mostra a instabilidade do primeiro estado excitado. Antes da instabilidade se manifestar o sistema esteve estacionário por aproximadamente 70 unidades de tempo. Esse tempo de simulação antes da manifestação da instabilidade gera certa confiança no método numérico, porém revela também sua limitação.)

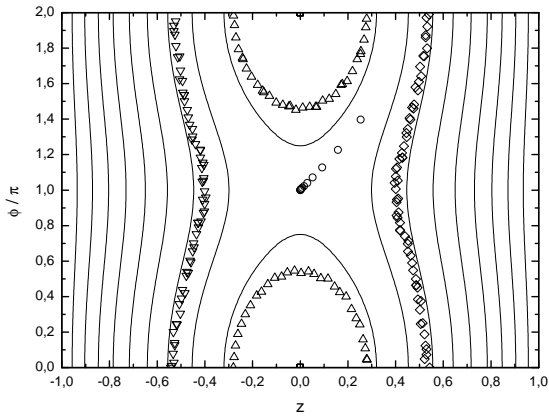


Figura 6: As linhas sólidas ao fundo mostram as curvas de nível da Hamiltoniana semiclassical proveniente de uma abordagem de dois modos dada à JBJ gerada no experimento [16]. Já os símbolos vazios correspondem às simulações diretas da EGP tridimensional. A trajetória de círculos vazios, no centro do gráfico, corresponde ao estado do ponto de sela da superfície hamiltoniana, onde pequenas flutuações numéricas fizeram que o sistema perdesse o equilíbrio após longo tempo de simulação. Notar que o estado fundamental é estável (quadrado vazio na origem do gráfico, quase invisível).

Uma vez que temos ferramentas capazes de redesenhar o espaço de fases diretamente a partir de simulações da EGP e, simultaneamente, fornecer informações a respeito do erro cometido na abordagem de dois modos para o problema, então estamos habilitados a explorar o controle de população disponibilizado pela canonicidade entre as variáveis  $(z, \phi)$ , controle este válido enquanto os dois modos forem suficientes para descrever a dinâmica do sistema. Faremos isso no próximo capítulo, sendo

esta exploração o ponto chave de todo o trabalho.

### 3.3 A INSERÇÃO DE FASE NUMÉRICA

Já definimos uma forma consistente de extrair a diferença de fase entre componentes de uma junção. Embora até agora tenhamos-nos prendido a condensados espaciais, ou especificamente à JBJ, o trabalho pode ser naturalmente estendido para quaisquer tipos de condensados duplos que permitam uma impressão de fase entre componentes. A definição coerente de diferença de fase à uma simulação numérica permitiu-nos explorar os efeitos que uma impressão de fase do tipo apresentada nos trabalhos [37, 24] teriam sobre os regimes dinâmicos de uma junção Bose-Josephson e apresentar esses efeitos em um espaço de fases correspondente a um modelo de dois modos do sistema.

A impressão de fase citada anteriormente funciona de maneira bastante simples: um feixe de laser que atravessa um condensado de bósons têm como efeito alterar sua fase. Tal alteração é proporcional à amplitude do feixe e ao tempo de exposição do condensado ao mesmo [24]. Ora, se parte do condensado for privada desta exposição então esta parte não terá fase alterada enquanto que a parte exposta o terá. Desse modo um gradiente de fase pode ser gerado no condensado e o efeito deste gradiente em um condensado tipo charuto foi a geração de um sóliton ou trens de sólitons, a depender dos parâmetros de impressão de fase.

Ora, juntando a informação da possibilidade do controle da fase sobre parte de um condensado duplo com a de que pode-se obter o controle sobre a dinâmica coletiva de um condensado duplo alterando a diferença de fase entre as componentes deste então exploramos numericamente os efeitos da impressão de fase em apenas uma das componentes de um duplo condensado de bósons.

O método de impressão de fase numérica foi o mesmo utilizado no trabalho [24]. Em um dado instante da simulação multiplicamos a função de onda que está sendo evoluída por um gradiente de fase

$$\Psi(\mathbf{r}, t) \rightarrow e^{i\phi(\mathbf{r})}\Psi(\mathbf{r}, t) \quad (3.60)$$

onde a função  $\phi(\mathbf{r})$  é dada por

$$\phi(\mathbf{r}) = \frac{\phi_0}{2} \left( 1 + \tanh \frac{x}{l} \right) \quad (3.61)$$

com  $\phi_0$  sendo a diferença de fase efetivamente impressa entre as componentes do condensado e  $x$  a direção tomada como aquela onde o gradiente de fase irá ocorrer - dentro do intervalo espacial de aproximadamente  $2l$  unidades de comprimento<sup>3</sup>.

Em várias simulações numéricas notamos que esse intervalo espacial onde deve ocorrer o gradiente de fase,  $2l$ , poderá ser uma possível fonte de dificuldades experimentais. Em casos em que este espaço excede a largura da barreira nota-se que a fase impressa tem um valor diferente do previsto  $\phi_0$ , sendo levemente menor que este. É como se uma parcela significativa da função de onda total adquirisse uma fase intermediária entre 0 e  $\phi_0$  e o efeito líquido desse espaço de transição acaba se manifestando como uma diminuição da diferença de fase impressa. Por outro lado, a diminuição do intervalo espacial em que há o gradiente de fase tem o efeito de aumentar a energia inserida no sistema a cada impressão de fase. Desse modo deverá haver um certo valor ótimo do parâmetro  $l$  que identifica o espaço de mudança de fase na função de onda total.

Por fim, ainda com respeito a esse processo de inserção de fase, vale lembrar que o estado fundamental do duplo poço simétrico não tem densidade de probabilidade nula no centro da barreira. Isso significa que a cada inserção de fase haverá a geração de um sóliton escuro no condensado. A ideia é que tal sóliton não seja tão representativo na dinâmica de populações, uma vez que a parcela de partículas perturbadas quando das impressões de fase é esperada ser pequena em relação à população total. Tal afirmação mostrar-se-á verdadeira quando da apresentação dos resultados.

Com o fim de eliminar o sóliton anteriormente citado propomos ainda outro procedimento (não simulado neste trabalho): a impressão de fase poderia ser estudada em um condensado duplo formado em um único poço. Para que isso seja factível é necessário que cada estado hiperfino reaja à presença do feixe de laser não ressonante impressor de fase de forma distinta. Assim, embora seja impressa uma fase simultaneamente em ambos os componentes, dada a reação distinta de cada componente ao feixe impressor de fase haverá, efetivamente, uma impressão de diferença de fase entre as componentes. Por agora nos abstenhamos destes efeitos indesejáveis e idealizemos o sistema para poder continuar o trabalho.

Imprimimos, em um tempo muito curto, uma diferença de fase

---

<sup>3</sup>Notar que a função  $\phi(\mathbf{r})$  e a constante  $\phi_0$  não tem qualquer relação com as funções da base localizada do modelo de dois modos  $\{\phi_j\}$  usadas nas subseções anteriores.

na JBJ. Este *tempo muito curto* será quantificado por algum tempo característico do sistema. Em nosso caso mostra-se apropriado o período de oscilação de população na JBJ dado por

$$\tau_0 = \frac{2\pi}{\omega_{JBJ}} = \frac{2\pi}{\sqrt{(B-2C)(A+B-C)}} \quad (3.62)$$

conforme podemos deduzir das equações 3.49 e 3.50, apresentadas na seção anterior e aplicadas para regimes onde o par  $(z, \phi) \ll 1$  [57]. Desse modo, o tempo de impressão de fase deverá ser muito menor que  $\tau_0$  para caracterizar uma impressão instantânea de fase. Para o caso da barreira de duplo poço apresentada em [16] temos este período da ordem de 34 *ms*, que é mais ou menos o medido por eles em sua figura 1 - aproximados 50 *ms*. No experimento [24] as impressões tiveram duração da ordem de 1  $\mu s$ , justificando assim a ideia de impressão instantânea de diferença de fase, conforme simulamos em alguns casos.

Uma possível forma de relaxar este requisito sobre o tempo de inserção de fase foi testado, também objetivando minimizar a energia inserida no sistema a cada impressão de fase. O que fizemos nestes testes foi multiplicar, a cada passo temporal de simulação, a função que estava sendo evoluída pelo fator insersor de fase

$$\Psi(\mathbf{r}, t) \rightarrow \exp \left\{ \frac{i}{2} \left( 1 + \tanh \frac{x}{l} \right) \frac{\phi_0}{(3\sigma_t/\Delta t)} \exp \left[ - \left( \frac{t-t_p}{\sigma_t} \right)^2 \right] \right\} \Psi(\mathbf{r}, t) \quad (3.63)$$

onde a diferença de fase  $\phi_0$  foi impressa durante um intervalo de tempo aproximado de  $3\sigma_t$  no entorno do tempo do pulso  $t_p$ .  $\Delta t$  representa o passo temporal na simulação numérica, de modo que a razão  $3\sigma_t/\Delta t$  representa o total aproximado de passos necessários para completar a impressão de fase, enquanto que o produto  $\phi_0/(3\sigma_t/\Delta t) \exp[-(t-t_p)^2/\sigma_t^2]$  está representando a diferença de fase impressa em cada passo da simulação. O gradiente de fase continuou ocorrendo em um intervalo aproximado de  $2l$  unidades de comprimento.

Observamos o efeito desejado de diminuição de energia inserida no sistema a cada impressão, neste caso, às custas de um aumento de dificuldade em saber a diferença de fase efetivamente impressa no sistema.

Uma vez que a diferença de fase é adquirida, seja instantaneamente ou não, o sistema simplesmente segue a trajetória que o ponto do espaço de fases seguiria.





## 4 RESULTADOS, DISCUSSÃO E PERSPECTIVAS

### 4.1 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Para apresentação de resultados cabe estabelecer os tipos específicos de potenciais de duplo poço com os quais trabalhamos. Eles foram os seguintes

$$V(x) = \frac{1}{2}x^2 + V_0 e^{-\left(\frac{x}{\sigma}\right)^2} \quad (4.1)$$

$$V(x) = \frac{1}{2}x^2 + \frac{1}{2}V_0 \left[ 1 + \cos\left(2\pi\frac{x}{d}\right) \right] \quad (4.2)$$

ambos unidimensionais e simétricos, uma vez que tratamos sempre com potenciais do tipo charuto e nossos resultados numéricos precisam do primeiro estado excitado do poço, que pode ser obtido via relaxação apenas no caso de poços simétricos e interação repulsiva entre partículas [56].

O primeiro dos potenciais, equação 4.1, foi extraído do trabalho [57] e foi o primeiro dos potenciais trabalhados em nossas investigações por ser de fácil visualização o efeito que as variações de seus parâmetros têm sobre a armadilha:  $V_0$  fornece a altura da barreira de potencial (não a altura efetiva, pois o mínimo de potencial não é zero!) e  $\sigma$  controla a largura da barreira.

O segundo dos potenciais, equação 4.2, foi extraído do trabalho [17] e foi escolhido por ser experimentalmente realizado, o que torna os nossos resultados próximos de algum grupo experimental. Este potencial muda muito de forma de acordo com os parâmetros escolhidos: quando  $V_0$  é pequeno o potencial é quase harmônico puro; quando  $V_0$  é grande, o potencial é quase periódico. Entre estes extremos existe a escolha de  $V_0$  que fornece apenas dois poços no entorno da origem e estes parâmetros foram escolhidos experimentalmente e estes mesmos parâmetros foram os que escolhemos.

Na figura 7 vemos o espaço de fases semiclássico gerado pelo modelo de dois modos aplicado à EGP com linhas sólidas indicando possíveis regimes dinâmicos para um potencial do tipo 4.1 com parâmetros  $V_0 = 3,7$  e  $\sigma = 1,5248$  e interação dada por  $\beta_{1D} = 1$ . Além do espaço de fases semiclássico, colocamos neste gráfico algumas simulações estacionárias da EGP para dar confiabilidade no método numérico. Estas simulações correspondem aos pontos: (i) aquele da

origem do espaço de fases, correspondente ao estado fundamental que possui diferença de população nula e diferença de fase nula; (ii) aquele do centro do espaço de fases, correspondente ao primeiro estado excitado, um estado instável e que durante 100 unidades de tempo de simulação permaneceu fixo no ponto de diferença de população nula e diferença de fase  $\pi$ ; (iii) os dois estados metaestáveis, um à direita e outro à esquerda do ponto central do espaço de fases, com módulos de diferença de população aproximadamente 0.9 e diferenças de fase  $\pi$ , estados estes correspondentes aos máximos da superfície Hamiltoniana semiclássica. Simulações da EGP que explicitam a existência destes modos acabam por conferir ao modelo de dois modos o seu devido respeito para atacar este tipo de problema. Por fim, vemos na figura uma série de círculos abertos, alguns meio desengonçados no entorno das trajetórias semiclássicas. Explicaremos por quê.

Iniciamos uma simulação em tempo real do sistema tendo como função inicial o estado fundamental do duplo poço, estado este obtido por relaxação. Após algumas unidades de tempo de simulação, tempo esperado para confirmar a estabilidade do estado fundamental, inserimos uma diferença de fase  $\phi_0 = \frac{\pi}{2}$  na função que estava sendo evoluída, de acordo com as equações 3.60 e 3.61, com o parâmetro  $l = \frac{\sigma}{10} = 0,15248$ , que corresponde a 10% do valor atribuído à largura de barreira com o fim de garantir que o gradiente de fase ocorresse dentro daquela. O resultado foi que, conforme podemos ver indicado após a seta enumerada (1), o sistema transitou do regime dinâmico estacionário equivalente ao estado fundamental para o regime dinâmico de oscilação Josephson de população entre poços da armadilha, que corresponderia a uma combinação entre os estados fundamental e primeiro excitado. Deixamos então que o sistema evoluísse nesta trajetória até que um ciclo de oscilação fosse concluído.

Então inserimos uma nova diferença de fase, sob a mesma metodologia da primeira inserção, só que agora com  $\phi_0 = \pi$  e exatamente no instante em que o sistema estava passando pelo ponto da trajetória no espaço de fases que corresponde a um máximo de diferença de população. O efeito foi o de levar o sistema para um novo regime dinâmico, um de auto-armadilhamento quântico macroscópico com fase limitada, conforme indicado pela seta com número (2) correspondente.

Mais uma vez permitimos que o ciclo de oscilação fosse concluído, até para termos certeza de que o sistema estava autoarmadilhado, e inserimos mais duas fases: aquela indicada pela seta (3), que levou o sistema novamente a um regime de oscilação Josephson, e aquela indicada pela seta (4), aplicada quando o sistema havia trocado a maioria

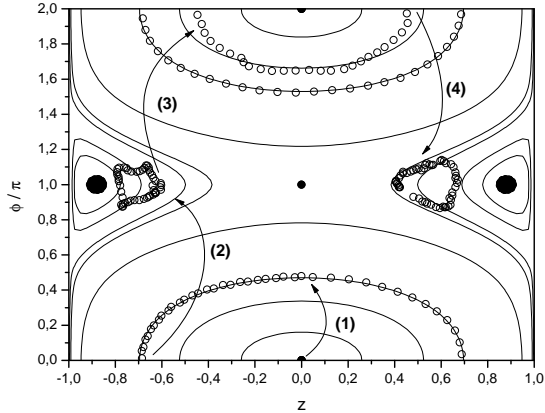


Figura 7: Amostra de confiabilidade de métodos numéricos, dada pela estabilidade das trajetórias correspondentes a estados estacionários, mesmo que instáveis, representados por pontos cheios no gráfico. As curvas sólidas mostram as possíveis trajetórias semiclassicas habilitadas ao sistema. Já os círculos vazios espalhados pelo gráfico representam um resultado de simulação da EGP1D cujo potencial é o dado pela equação 4.1 com parâmetros  $V_0 = 3,7$  e  $\sigma = 1,5248$  e interação  $\beta_{1D} = 1$ . Nesta simulação houve impressão de fase e consequente acréscimo de energia ao sistema. Esse acréscimo é responsável pelo *cambalear* das trajetórias após transição entre regimes dinâmicos indicados pelas setas enumeradas de (1) até (4), correspondentemente à ordem de inserção de fase.

da população entre poços e que acabou levando-o ao regime de auto-armadilhamento no outro lado da barreira.

A figura 8 mostra a evolução temporal da diferença de população enquanto as fases eram impressas. Nela colocamos as duas definições de diferença de população, aquela comumente apresentada na literatura, indicada por  $z_s$  e correspondente à curva tracejada do gráfico, e aquela definida neste trabalho, a partir da parcela da função de onda total em cada um dos modos, indicada por  $z$  e correspondente à curva sólida do gráfico. Notamos que, grosso modo, as duas definições são equivalentes, sendo aquela dada neste trabalho correspondente ao comportamento médio da definição padrão  $z_s$ .

A figura 9, ainda com respeito à mesma simulação, mostra a

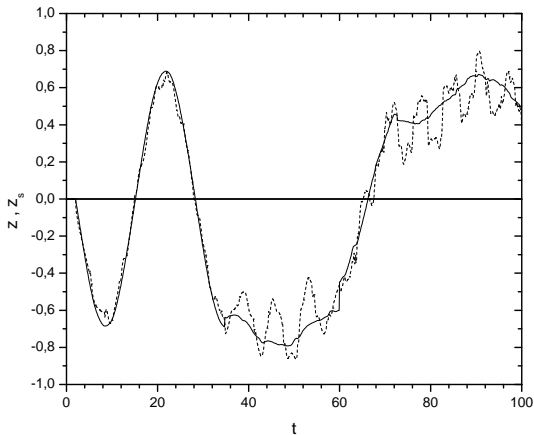


Figura 8: Comparação da evolução temporal da diferença de população segundo a definição dada neste trabalho ( $z$  - linha sólida) e a comumente encontrada na literatura ( $z_s$  - linha tracejada). A linha sólida em  $z = 0$  serve para guiar os olhos quanto a estar o sistema ou não em um regime de auto-armadilhamento. Notar que a definição dada aqui trata-se de uma espécie de comportamento médio da definição padrão encontrada na literatura, ou seja, os resultados são compatíveis.

evolução temporal da densidade de probabilidade em escala de cinza, sendo o escuro correspondente à população nula e o claro à máxima população. Deve-se notar nesta apresentação da simulação o contínuo acréscimo de perturbações na função de onda, à medida que mais pulsos vão se acrescentando à ela, porém que o comportamento geral da população é preservado nos regimes indicados. Estas perturbações provêm da geração de sólitons escuros dentro da barreira a cada impressão de fase. Podemos ver estes sólitons se propagando na figura, em cada um dos poços, por meio de pequenas depressões da densidade de probabilidade dentro dos poços.

Possivelmente este venha a ser um problema experimental a ser enfrentado no caso de controle de população via impressão de fase em um condensado de duplo poço espacial, conforme simulado aqui. Este problema pode ser contornado no caso de impressão de diferença de fase em duas espécies distintas armadilhadas em um mesmo poço, conforme o experimento relatado em [25], uma vez que o sóliton escuro não seria

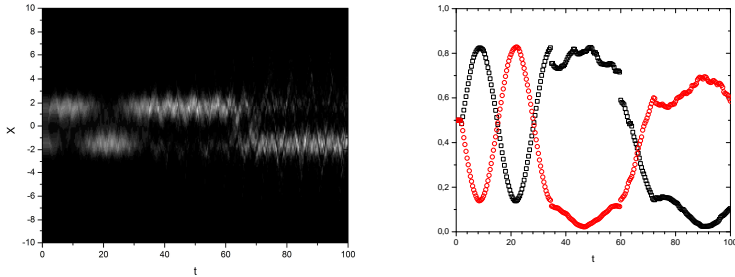


Figura 9: A figura ao lado esquerdo mostra a evolução temporal da densidade de probabilidade. Notar que, embora existam perturbações na densidade de probabilidade o comportamento geral dela segue o que está indicado no espaço de fases da figura 7. Ao lado direito temos a mesma dinâmica representada pelas componentes em cada um dos modos, sendo os quadrados (pretos) representantes da componente  $|\psi_0(t)|^2$  e os círculos (vermelhos) representantes da componente  $|\psi_1(t)|^2$ . Inicialmente, antes de  $t = 2$ , temos o sistema estacionário no estado fundamental. Com a introdução do primeiro pulso, em  $t = 2$ , vemos o estabelecimento do regime de oscilação Josephson. Após o segundo pulso, em  $t = 34, 8$ , o sistema transita para o regime de auto armadilhamento quântico macroscópico. Um terceiro pulso, em  $t = 60$ , leva o sistema ao regime de oscilação Josephson novamente. Permite-se que a maior parte da população transite para o outro poço e então um quarto pulso, em  $t = 72, 7$ , é inserido, deixando o sistema novamente auto-armadilhado, só que desta vez no outro poço.

gerado neste tipo de sistema.

A figura 10 mostra a evolução temporal das amplitudes de probabilidade em cada uma das componentes do modelo de dois modos, bem como o resto definido em 3.55. Os tempos de impressão de pulso ficam muito nítidos nesta figura, bem como as transições entre regimes dinâmicos. Primeiramente temos o estado estacionário com população igualmente distribuída entre os poços; em seguida o regime de oscilação Josephson; então o autoarmadilhamento. Após, vemos o trânsito de população entre poços novamente e, finalmente, o novo autoarmadilhamento. Em acréscimo, fica explícita a quantidade da função evoluída que está efetivamente sendo representada pelos dois modos através da apresentação da evolução temporal do resto juntamente com as componentes do modelo de dois modos. Mesmo com o resto crescente a cada impressão de fase, temos, ao término da simulação, praticamente 70% da função total sendo representada pelos dois modos. Por fim, vemos

a norma sendo conservada no valor 1 durante toda a simulação, o que dá certa confiança no método numérico.

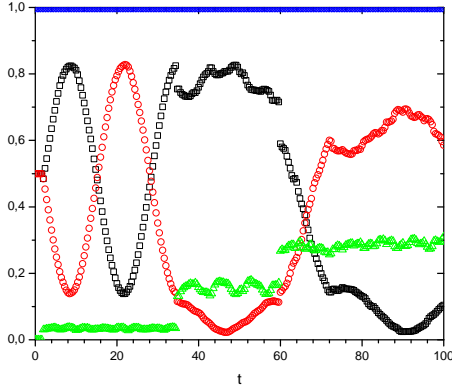


Figura 10: Densidade de probabilidade em cada um dos modos,  $|\psi_j(t)|^2$ , e resto,  $|\epsilon(t)|^2$ , conforme equação 3.55 e parte direita da figura 9. Os símbolos quadrados (pretos) representam a componente  $|\psi_0(t)|^2$ , os círculos (vermelhos) representam a componente  $|\psi_1(t)|^2$  e os triângulos (verdes), o resto  $|\epsilon(t)|^2$  da função. A cada impressão de fase nota-se o aumento do percentual de função que não está sendo descrita pelo modelo de dois modos. Ainda após as 4 impressões de fase vemos cerca de 70% da função sendo representada pelo modelo. Por fim, os triângulos invertidos (azuis), que estão próximos da ordenada 1, representam a norma em função do tempo. Ela foi colocada ali para aumentar confiança no método numérico utilizado.

Como último resultado associado à simulação de 4 pulsos indicada pela figura 7 vemos a figura 11, que contém a evolução temporal da energia e do potencial químico. Vemos que, embora haja conservação de energia entre as inserções sucessivas de pulsos, há um acréscimo desta a cada pulso. Possivelmente essa inserção de energia no sistema venha a ser significativa do ponto de vista experimental, uma vez que podemos associar o acréscimo de energia a um possível aumento de temperatura do condensado.

Como última dificuldade experimental a ser citada para realizar o experimento de transição entre regimes dinâmicos mostrado acima devemos citar que os tempos de inserção das fases devem ser escolhidos precisamente. Por exemplo, para gerar a transição entre o regime de

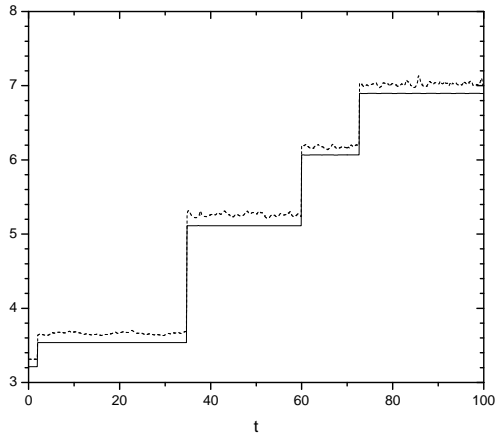


Figura 11: Energia (linha sólida) e potencial químico (linha tracejada) em função do tempo. Notamos que a cada inserção de fase há uma inserção de energia, sendo esta possivelmente responsável por um aquecimento no condensado. A conservação da energia entre inserções de pulsos também é explicitada nesta figura, mais uma vez dando credibilidade ao método numérico utilizado.

oscilação Josephson e o de autoarmadilhamento deve-se inserir o pulso de fase exatamente no instante em que a diferença de população é máxima. Esperamos que essa dificuldade possa ser contornada por meio de métodos não destrutivos de observação da dinâmica do condensado duplo. Essas observações permitiriam uma determinação precisa dos tempos de inserção de fase, conforme requerido pelo método.

Todas as figuras acima referem-se aos resultados de uma simulação unidimensional gerada com potencial armadilhador dado na equação 4.1 e com modelo de unidimensionalização da EGP 1D. Resultados análogos são gerados com o modelo unidimensional da ENPS, com parâmetro de assimetria  $\lambda = 1$ , devendo haver correção de tempos de inserção de fase para produzir as mesmas transições de modos<sup>1</sup>. Não mostramos estes resultados para não sobrecarregar o texto com figuras repetitivas.

<sup>1</sup>Conforme comentado na referência [55], que deduziu o modelo, os tempos das duas equações são realmente distintos - mas a concordância qualitativa é notável, dada a diferença analítica entre as equações de evolução temporal.

Realizamos também uma simulação tridimensional com o potencial não axialmente simétrico descrito no experimento do artigo [16]. As figuras 12-14 mostram os resultados desta simulação, evidenciando que não temos o controle sobre regimes dinâmicos como uma particularidade da abordagem unidimensional mas como um comportamento realmente possível do sistema.

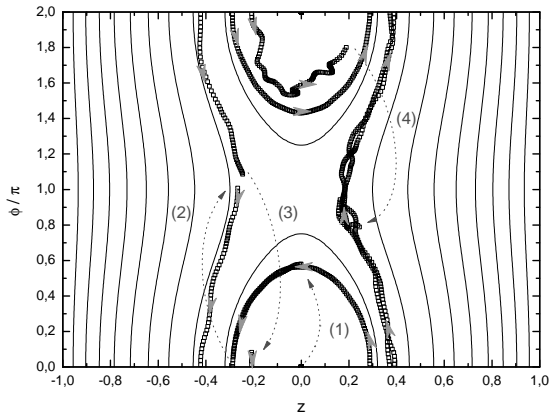


Figura 12: Transição entre regimes dinâmicos gerada por impressão de fase em uma simulação tridimensional com parâmetros de armadilhamento harmônico dados por  $\kappa = 11/13$ ,  $\lambda = 15/13$ . O potencial de duplo poço foi gerado de acordo com 4.2 e com parâmetros  $V_0 = 206/39$  e  $d = 4,276$  e o parâmetro de interação foi tomado  $\beta_{3D} = 56,57$ . A escolha de parâmetros foi aquela que melhor descrevia os parâmetros da armadilha da experiência [16]. A largura do gradiente de fase foi escolhida como  $l = 1,639$  - ver equação 3.61 - que é o valor aproximado da largura de gradiente de fase do experimento [24]. As linhas sólidas de fundo correspondem às curvas de nível da Hamiltoniana semiclássica correspondente a abordagem de dois modos enquanto que os símbolos vazios correspondem aos dados da simulação da EGP 3D. As setas pontilhadas e enumeradas indicam o efeito das inserções de fase sobre o sistema. Por último, as setas cinzas indicam o sentido da trajetória dos pontos no espaço de fases.

Um último resultado a ser apresentado é o da impressão de fase estendida no tempo. Para os mesmos parâmetros apresentados anteriormente, excetuando-se a largura de impressão de fase, agora tida



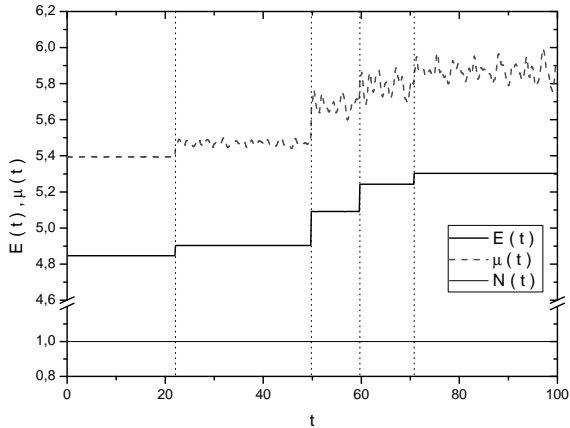


Figura 13: Evolução temporal da norma (linha sólida fina com ordenada constante em 1), da energia (outra linha sólida) e do potencial químico (linha tracejada) - notar a quebra de escala - no caso da simulação tridimensional apresentada na figura 12. A cada impressão de fase há inserção de energia no sistema, porém a energia é conservada entre impressões. A conservação de energia e da norma dão credibilidade ao método numérico utilizado.

como  $l = 0, 5$ , e acrescentando  $\sigma_t = 0, 4$ , ver equação 3.63, obtivemos as figuras 15-16. Na figura 15 vemos que a inserção de fase estendida no tempo torna a transição entre regimes mais suave, até alguns pontos da transição são salvos durante a simulação. Na figura 16 vemos que, embora haja inserção de energia, essa inserção é menor que no caso de pulsos instantâneos durante a simulação (comparar com figura 13 - a escala foi inalterada para facilitar a comparação).

Observamos que a quantidade de energia inserida a cada pulso aumenta quando diminuimos a largura de gradiente de fase e quando aumentamos a fase impressa. Ainda não estabelecemos relação analítica entre estas grandezas mas pretendemos investigar esta dependência.

## 4.2 PERSPECTIVAS

Embora nossa compreensão da dinâmica número-fase tenha avançado significativamente no desenrolar deste trabalho, ainda carecemos

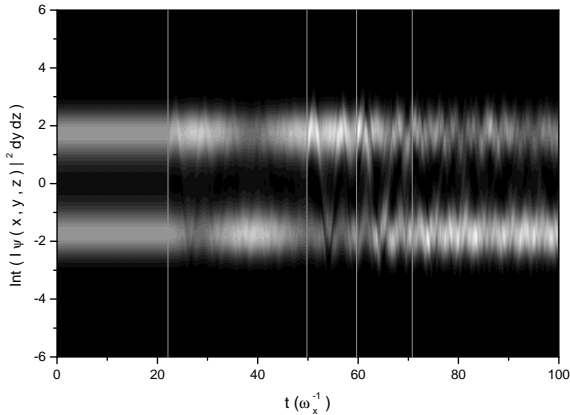


Figura 14: Evolução temporal da densidade de probabilidade integrada em  $y$  e  $z$  correspondente à simulação apresentada na figura 12. Os traços verticais claros representam os tempos de inserção de fases. Do mesmo modo que na simulação unidimensional, vemos a presença de sólitons escuros que se propagam e distorcem a densidade de probabilidade. No entanto, o comportamento geral pode ser visto obedecendo às transições entre regimes dinâmicos indicadas no espaço de fases.

de um modo de imprimir fase que minimize a inserção de energia no sistema. Notamos que alguns casos de fase impressa não instantaneamente retiram energia do sistema ao invés de inserí-la, indicando ser a extensão de tempo de impressão de fase um passo da solução do problema enfrentado. Também notamos que um aumento de largura de gradiente de fase (parâmetro  $l$  na impressão de fase) diminui a energia inserida, sendo este outro passo na minimização da energia inserida. Os contras dos dois passos na direção de resolver nosso problema de inserção de energia se resumem na imprecisão da previsão da diferença de fase impressa e na possível perda de coerência de fase dentro de cada componente. Acreditamos que essa inserção de energia seja a responsável por deformar levemente a superfície hamiltoniana semiclássica, conforme pode ser notado pelo deslocamento dos pontos críticos de auto armadilhamento na figura 7.

Em outra direção, mas ainda complementando o trabalho desenvolvido aqui, pretendemos concluir a análise de efeitos da geometria

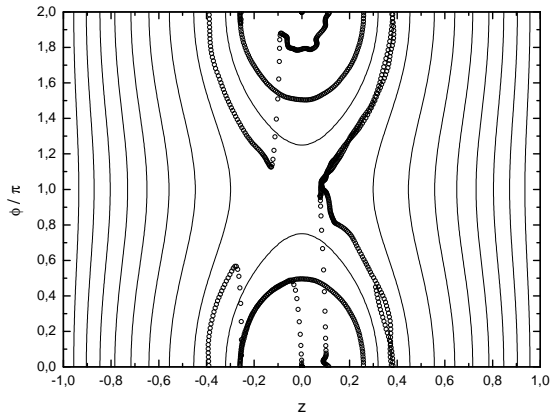


Figura 15: Transição entre regimes dinâmicos gerada por impressão de fase em uma simulação tridimensional com parâmetros idênticos aos da figura 12, exceto a largura de gradiente de fase, que foi tomada aqui como  $l = 0,5$ , e que a impressão de fase ocorre em um tempo estendido (ver equação 3.63 com  $\sigma_t = 0,4$ ).

unidimensional sobre a superfície hamiltoniana semiclássica associada à ENPS (apêndice C). Além de ser um trabalho ainda não realizado, este de aplicação de modelo de dois modos a uma equação não polinomial, uma comparação direta dos espaços de fase gerados pela EGP tridimensional, EGP1D e ENPS, tornará evidente a importância de escolha de modelo unidimensional para simulações prévias da EGP tridimensional.

Como extensão de nosso trabalho, pretendemos aplicar o formalismo aqui desenvolvido para o caso de condensados com três componentes espaciais. Esse estudo viria a contribuir na busca por controle populacional em muitos poços. Além disso, ampliaria a compreensão das dinâmicas coletivas à luz da canonicidade número-fase, uma vez que ainda não sabemos se uma impressão de fase (ou muitas) poderá gerar transição entre os modos coletivos.

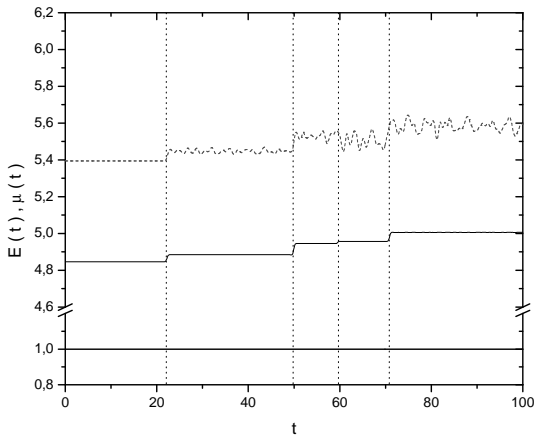


Figura 16: Evolução temporal da norma (linha sólida fina com ordenada constante em 1), da energia (a outra linha sólida) e do potencial químico (linha tracejada) - notar a quebra de escala - no caso da simulação tridimensional apresentada na figura 15 onde a impressão de fase foi estendida no tempo (comparar com a Figura 13, com impressão instantânea de fase).

## APÊNDICE A – Métodos numéricos



Estivemos interessados em resolver a seguinte equação

$$i \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\frac{1}{2} \nabla^2 \Psi(\mathbf{r}, t) + V(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}, t) + \beta_{3D} |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 \Psi(\mathbf{r}, t) \quad (\text{A.1})$$

onde definimos o parâmetro de interação não-linear simplesmente por

$$\beta_{3D} \equiv 4\pi(N-1) \frac{a_s}{a_x}. \quad (\text{A.2})$$

Esta é a EGP em sua forma adimensional e foi a equação central de todo nosso trabalho.

Pela finitude da representação dos números nos computadores sabe-se que não é possível resolver equações diferenciais como a apresentada em A.1 no domínio do contínuo-infinito. Com o fim de resolvê-la numericamente o primeiro passo a ser dado é transformar as variáveis contínuas  $(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}, \mathbf{t})$  em variáveis discretas  $(\mathbf{x}_j, \mathbf{y}_k, \mathbf{z}_l, \mathbf{t}_n)$  e limitar a representação do espaço-tempo infinitos das variáveis contínuas para uma região espacial de interesse em um intervalo de tempo apropriado para que observemos o fenômeno que desejamos. Em outras palavras, o espaço-tempo contínuo infinito deve ser convenientemente reduzido à uma grade finita de pontos capaz de representar completamente o fenômeno físico que estamos interessados. O segundo passo será a transformação de derivadas em diferenças finitas, sempre tendo em mente a ordem do erro cometido nesta transformação para que saibamos o quão bem estamos tratando do sistema. Por fim, escolhe-se um algoritmo apropriado para otimizar o trabalho numérico. Vamos ao primeiro passo.

Estaremos interessados especificamente em simulações de sistemas do tipo apresentado no experimento de Albiez *et al* [16] onde o sistema possui um tamanho máximo da ordem de **20  $\mu\text{m}$**  em uma das direções (a definiremos como a direção  $\mathbf{x}$ , pois é a que possui os dois poços) enquanto que um bom tempo de simulação é da ordem de **50  $\text{ms}$** . Desse modo, apenas para termos uma noção da região espacial a ser representada numericamente, tomemos a massa do  $^{87}\text{Rb}$  dada por  $m \approx 87m_p \approx 1.46 \cdot 10^{-25} \text{ kg}$  onde  $m_p \approx 1.673 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$  é a massa de um próton livre obtida da tabela de constantes universais em [63], com a devida conversão de unidades. Também daquela tabela obtemos o valor de  $\hbar \approx 1.055 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$  e finalmente do próprio experimento [16] extraímos  $\omega_x = 2\pi \cdot 78 \text{ Hz}$ . Com estes valores de  $m$ ,  $\hbar$  e  $\omega_x$  podemos obter  $a_x \approx 1.214 \mu\text{m}$  que implica diretamente em que o espaço máximo necessário para representar a simulação seria aquele de

aproximadas **16** unidades de comprimento ( $a_x$ ). Já os tempos totais de simulação devem superar as **25** unidades de tempo ( $\omega_x^{-1}$ ) apresentadas no experimento. Em resumo, nas simulações teremos espaço e tempo da seguinte ordem para os nossos propósitos:

$$-10 \leq x, y, z \leq 10 \quad (\text{A.3})$$

$$0 \leq t \leq 25. \quad (\text{A.4})$$

Dividiremos todo o espaço em  $(N_x + 1) \times (N_y + 1) \times (N_z + 1)$  pontos e o tempo total de simulação em  $N_t + 1$  pontos, sendo estes dados por:

$$x_j = x_0 + j\Delta x \quad \text{com} \quad \Delta x \equiv \frac{x_{N_x} - x_0}{N_x} \quad e \quad 0 \leq j \leq N_x \quad (\text{A.5})$$

$$y_k = y_0 + k\Delta y \quad \text{com} \quad \Delta y \equiv \frac{y_{N_y} - y_0}{N_y} \quad e \quad 0 \leq k \leq N_y \quad (\text{A.6})$$

$$z_l = z_0 + l\Delta z \quad \text{com} \quad \Delta z \equiv \frac{z_{N_z} - z_0}{N_z} \quad e \quad 0 \leq l \leq N_z \quad (\text{A.7})$$

$$t_n = n\Delta t \quad \text{com} \quad \Delta t \equiv \frac{t_{N_t}}{N_t} \quad e \quad 0 \leq n \leq N_t. \quad (\text{A.8})$$

Deveremos escolher apropriadamente  $(N_x, N_y, N_z, N_t)$  para que o tempo de simulação seja razoável (dentro da finitude do tempo para defesa da tese!).

Agora vamos ao segundo passo em direção a solução numérica do problema: transformar derivadas em diferenças finitas tendo consciência aproximada do erro cometido. Como todas as derivadas presentes na equação A.1 são parciais, ou seja, variam somente uma das variáveis da função  $\Psi(\mathbf{r}, t)$ , podemos desenvolver a discretização das derivadas com uma função exemplo  $f(x)$ , de apenas uma variável, e depois aplicar o resultado a cada derivada de interesse. Sejam então as seguintes expansões em série de Taylor

$$\begin{aligned} f(x+h) &= f(x) + \frac{h}{1!} \left. \frac{df}{dx} \right|_x + \frac{h^2}{2!} \left. \frac{d^2f}{dx^2} \right|_x \\ &\quad + \frac{h^3}{3!} \left. \frac{d^3f}{dx^3} \right|_x + \frac{h^4}{4!} \left. \frac{d^4f}{dx^4} \right|_x + \dots \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

$$\begin{aligned} f(x-h) &= f(x) - \frac{h}{1!} \left. \frac{df}{dx} \right|_x + \frac{h^2}{2!} \left. \frac{d^2f}{dx^2} \right|_x \\ &\quad - \frac{h^3}{3!} \left. \frac{d^3f}{dx^3} \right|_x + \frac{h^4}{4!} \left. \frac{d^4f}{dx^4} \right|_x + \dots \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$



para valores de  $h$  muito pequenos. Somando e subtraindo as equações A.9 e A.10 obtemos

$$f(x-h) - 2f(x) + f(x+h) = 2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{h^{2n}}{(2n)!} \left. \frac{d^{2n} f}{dx^{2n}} \right|_x \quad (\text{A.11})$$

$$f(x+h) - f(x-h) = 2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{h^{2n+1}}{(2n+1)!} \left. \frac{d^{2n+1} f}{dx^{2n+1}} \right|_x. \quad (\text{A.12})$$

Tomando somente o primeiro termo de cada umas das séries acima obtemos as aproximações finitas para as derivadas de primeira e segunda ordem de  $f(x)$  em relação a  $x$  com erro da ordem de  $h^2$  para cada uma delas

$$\frac{d^2 f}{dx^2} \simeq \frac{f(x-h) - 2f(x) + f(x+h)}{h^2} + \mathcal{O}(h^2) \quad (\text{A.13})$$

$$\frac{df}{dx} \simeq \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} + \mathcal{O}(h^2). \quad (\text{A.14})$$

Caso haja a necessidade de reduzir o erro, que não é o nosso caso, então basta combinar linearmente equações do tipo A.9 e A.10 para expansões no entorno de  $(x \pm 2h)$ ,  $(x \pm 3h)$ , etc., até obter a ordem de erro desejada. Notar que, necessariamente, para cada redução de erro existe um aumento de pontos necessários para o cálculo das derivadas neste tipo de abordagem.

Identificaremos os pontos discretos da função  $\Psi(x, y, z, t)$  da seguinte forma:

$$\Psi(x_j, y_k, z_l, t_n) \equiv \Psi_{jkl}^n \quad (\text{A.15})$$

e então, aplicando a ela as derivadas parciais necessárias conforme dadas pelas aproximações A.13 e A.14 obtemos:

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} \simeq \frac{\Psi_{jkl}^{n+1} - \Psi_{jkl}^{n-1}}{2\Delta t} \quad (\text{A.16})$$

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} \simeq \frac{\Psi_{j+1,k,l}^n - 2\Psi_{jkl}^n + \Psi_{j-1,k,l}^n}{\Delta x^2} \quad (\text{A.17})$$

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} \simeq \frac{\Psi_{j,k+1,l}^n - 2\Psi_{jkl}^n + \Psi_{j,k-1,l}^n}{\Delta y^2} \quad (\text{A.18})$$

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} \simeq \frac{\Psi_{j,k,l+1}^n - 2\Psi_{jkl}^n + \Psi_{j,k,l-1}^n}{\Delta z^2}. \quad (\text{A.19})$$

Aqui já começa a surgir um problema de implementação: enquanto

as derivadas espaciais podem ser bem definidas em qualquer tempo, a derivada temporal precisa do valor da função  $\Psi$  nos passos anterior e posterior a  $\mathbf{n}$ , a saber, em  $(\mathbf{n} \pm \mathbf{1})$ . O valor de  $\Psi$  em  $\mathbf{n} + \mathbf{1}$  é o que desejamos saber, no entanto, em  $\mathbf{n} = \mathbf{0}$  não temos passo anterior  $(\mathbf{n} - \mathbf{1})$  e, portanto, não somos capazes de resolver o primeiro dos passos da simulação temporal. A solução deste problema reside no terceiro e último passo a ser dado para implementar um programa: a escolha do algoritmo. Nos deteremos, neste trabalho, em dois algoritmos simples mas muito eficientes para os nossos propósitos. Eles são muito bem descritos nos trabalhos [56] e [54], no entanto, por razões de completeza de apresentação, falaremos um pouco deles aqui.

### A.1 MÉTODO BACKWARD EULER

O primeiro dos algoritmos é um método implícito, pois toma as derivadas em tempos distintos em cada lado da igualdade da EGP, e será aplicado somente em problemas que possam ser tratados unidimensionalmente, ou seja, problemas cuja dinâmica permite a redução da EGP tridimensional para uma unidimensional. Abordamos os processos mais difundidos de unidimensionalização na subseção 3.1. Tal algoritmo recebeu o nome de *Backward Euler* [56] e será abreviado por BE daqui pra frente. Na prática o BE ocorre do seguinte modo: ao invés de subtrairmos as equações A.9 e A.10 para discretizar a derivada temporal, objetivando diminuir a ordem do erro, simplesmente truncamos a equação A.9 logo no termo de derivada primeira, ficando com

$$\frac{df}{dx} \simeq \frac{f(x+h) - f(x)}{h} + \mathcal{O}(h) \quad (\text{A.20})$$

que, quando na linguagem dos pontos finitos da representação da nossa função de interesse  $\Psi$  fica

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} \simeq \frac{\Psi_{jkl}^{n+1} - \Psi_{jkl}^n}{\Delta t}. \quad (\text{A.21})$$

Então, ao substituir na EGP esta discretização de derivada temporal, toma-se todo o lado direito da EGP, equação A.1, no tempo  $(\mathbf{n} + \mathbf{1})$  e não no tempo  $\mathbf{n}$ , mantendo somente a intensidade da interação não linear no tempo  $\mathbf{n}$ . Vamos admitir aqui que o processo de unidimensio-

nalização a EGP tridimensional, equação A.1, gera a seguinte equação

$$i \frac{\partial \psi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2 \psi(\mathbf{x}, t)}{\partial \mathbf{x}^2} + V(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x}, t) + \mathcal{G}(|\psi(\mathbf{x}, t)|^2)\psi(\mathbf{x}, t) \quad (\text{A.22})$$

com  $V(\mathbf{x})$  sendo a parte do potencial dependente de  $\mathbf{x}$  que não foi integrada no processo de unidimensionalização e a função  $\mathcal{G}(|\psi(\mathbf{x}, t)|^2)$  sendo resultado do processo de unidimensionalização e contendo dependência nos parâmetros de interação  $\beta_{3D}$  e de armadilhamento  $\kappa$  e  $\lambda$ .

Levando então a discretização da derivada temporal dada em A.21 e a discretização espacial dada em A.17 na A.22, lembrando de tomar o lado direito em um tempo posterior, obtemos o método de BE:

$$i \frac{\psi_j^{n+1} - \psi_j^n}{\Delta t} = -\frac{1}{2} \frac{\psi_{j+1}^{n+1} - 2\psi_j^{n+1} + \psi_{j-1}^{n+1}}{\Delta x^2} + V_j \psi_j^{n+1} + \mathcal{G}_j^n \psi_j^{n+1} \quad (\text{A.23})$$

onde tomamos  $V_j \equiv V(x_j)$  e  $\mathcal{G}_j^n \equiv \mathcal{G}(|\psi_j^n|^2)$ . Deve-se notar que o termo de interação é tomado fixo durante o passo de integração. (Uma maneira de testar o método é gerar simulações com passos temporais e espaciais distintos e ver se os resultados são os mesmos. Dentro do possível isso sempre foi feito para os resultados apresentados.)

Após um simples rearranjo podemos reescrever a equação A.23 sob a seguinte forma

$$-\frac{i\Delta t}{2\Delta x^2} \psi_{j+1}^{n+1} + \left[1 + \frac{i\Delta t}{\Delta x^2} + i\Delta t (V_j + \mathcal{G}_j^n)\right] \psi_j^{n+1} - \frac{i\Delta t}{2\Delta x^2} \psi_{j-1}^{n+1} = \psi_j^n \quad (\text{A.24})$$

que é um sistema tridiagonal de  $N_x - 1$  equações, pois  $1 \leq j \leq N_x - 1$ , a  $N_x - 1$  incógnitas, uma vez que as condições de contorno fornecem os valores de  $\psi_0^{n+1}$  e de  $\psi_{N_x}^{n+1}$ , a saber

$$\psi_0^{n+1} = 0 = \psi_{N_x}^{n+1}. \quad (\text{A.25})$$

No trabalho do Adhikari [54] encontramos uma receita muito inteligente para resolver sistemas deste tipo. A receita consiste em forçar a validade da seguinte relação de recorrência entre os valores de  $\psi$  em tempos futuros

$$\psi_{j+1}^{n+1} = A_j \psi_j^{n+1} + B_j \quad (\text{A.26})$$

com  $0 \leq j \leq N_x - 1$ . A igualdade é forçada pela escolha apropriada dos coeficientes  $A_j$ 's e  $B_j$ 's. Mas como determiná-los em associação

com o sistema tridiagonal apresentado em A.24? Basta notar que podemos reescrever A.26 para  $j - 1$  ficando com

$$\psi_j^{n+1} = \mathbf{A}_{j-1} \psi_{j-1}^{n+1} + \mathbf{B}_{j-1} \quad (\text{A.27})$$

e que, ao levarmos A.26 em A.24, reescrevendo o resultado para assemelhá-lo a A.27 obtemos

$$\begin{aligned} \psi_j^{n+1} &= \frac{i\Delta t}{2\Delta x^2} \left[ 1 + \frac{i\Delta t}{2\Delta x^2} (2 - A_j) + i\Delta t (V_j + \mathfrak{g}_j^n) \right]^{-1} \psi_{j-1}^{n+1} \\ &+ \left( \psi_j^n + \frac{i\Delta t}{2\Delta x^2} B_j \right) \left[ 1 + \frac{i\Delta t}{2\Delta x^2} (2 - A_j) + i\Delta t (V_j + \mathfrak{g}_j^n) \right]^{-1} \end{aligned} \quad (\text{A.28})$$

e imediatamente identificamos as recorrências que fornecerão  $\mathbf{A}_j$ 's e  $\mathbf{B}_j$ 's

$$\mathbf{A}_{j-1} = \frac{i\Delta t}{2\Delta x^2} \left[ 1 + \frac{i\Delta t}{2\Delta x^2} (2 - A_j) + i\Delta t (V_j + \mathfrak{g}_j^n) \right]^{-1} \quad (\text{A.29})$$

$$\mathbf{B}_{j-1} = \left( \psi_j^n + \frac{i\Delta t}{2\Delta x^2} B_j \right) \left[ 1 + \frac{i\Delta t}{2\Delta x^2} (2 - A_j) + i\Delta t (V_j + \mathfrak{g}_j^n) \right]^{-1}. \quad (\text{A.30})$$

Ora, notando que as condições de contorno A.25 devem ser satisfeitas durante todo o tempo de simulação, então temos de forçar que

$$\mathbf{A}_{N_x-1} = \mathbf{0} = \mathbf{B}_{N_x-1} \quad (\text{A.31})$$

que fornecerá sempre  $\psi_{N_x}^{n+1} = \mathbf{0}$  em virtude da equação A.26. Estes valores fixos de  $\mathbf{A}_{N_x-1}$  e  $\mathbf{B}_{N_x-1}$  permitem usar as equações A.29 e A.30 em retrocesso desde  $j = N_x - 1$  até  $j = 1$  e determinar os valores de  $\mathbf{A}_j$ 's e  $\mathbf{B}_j$ 's para todo  $j$  no intervalo  $[0, N_x - 2]$ . Levando estes valores na recorrência A.26, utilizando a condição de contorno  $\psi_0^{n+1} = \mathbf{0}$  e variando  $j$  de modo crescente no intervalo  $[0, N_x - 1]$  obtemos todos os valores de  $\psi_j^{n+1}$ , o que conclui o passo temporal.

## A.2 MÉTODO DE CRANK-NICOLSON COM PASSO TEMPORAL FRACIONADO

Um segundo algoritmo a ser apresentado é o denominado Crank-Nicolson (CN) [56, 54]. Trata-se de um método semi-implícito, por tomar as derivadas dos dois lados da igualdade da EGP, equação A.1, em um tempo intermediário,  $(n + \frac{1}{2})$ , resultando em um erro temporal de ordem  $\mathcal{O}(\Delta t^2, \Delta x^2)$  provindo somente do processo de discretização, conforme passaremos a demonstrar. Além do erro cometido no processo

de discretização, mostra-se prático também a quebra do passo temporal em partes distintas. Tal quebra consiste em notar que a evolução temporal da função  $\Psi(\mathbf{r}, t)$  ocorre com uma operação unitária do tipo

$$\Psi(\mathbf{r}, t + \Delta t) = e^{-i\Delta t[-\frac{1}{2}\nabla^2 + V(\mathbf{r}) + \beta_{3D}|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2]} \Psi(\mathbf{r}, t) \quad (\text{A.32})$$

com  $\Delta t$  muito pequeno. Ora, se  $\Delta t$  é pequeno podemos separar o expoente em várias partes e evoluir cada parte individualmente em cada passo temporal  $\Delta t$ . O erro que se comete na quebra de passo temporal que implementamos é da ordem  $\mathcal{O}(\Delta t)$ , pois a quebra que fizemos foi a seguinte:

$$\Psi^*(\mathbf{r}, t + \Delta t) = e^{-i\Delta t[-\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2}]} \Psi(\mathbf{r}, t) \quad (\text{A.33})$$

$$\Psi^{**}(\mathbf{r}, t + \Delta t) = e^{-i\Delta t[-\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial y^2}]} \Psi^*(\mathbf{r}, t + \Delta t) \quad (\text{A.34})$$

$$\Psi^{***}(\mathbf{r}, t + \Delta t) = e^{-i\Delta t[-\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial z^2}]} \Psi^{**}(\mathbf{r}, t + \Delta t) \quad (\text{A.35})$$

$$\Psi(\mathbf{r}, t + \Delta t) = e^{-i\Delta t[V(\mathbf{r}) + \beta_{3D}|\Psi^{***}(\mathbf{r}, t + \Delta t)|^2]} \Psi^{***}(\mathbf{r}, t + \Delta t). \quad (\text{A.36})$$

Novamente, uma forma de testar o método é comparar resultados de simulações com passos temporais distintos e grades distintas e ver se são iguais. Podemos também comparar resultados deste método com os métodos em [56, 54].

Mostraremos somente a implementação do programa tridimensional, uma vez que a implementação do programa unidimensional é o caso particular do caso tridimensional onde há apenas uma quebra de passo, ao invés das três mostradas acima. Na prática, temos de resolver em cada passo temporal as seguintes equações

$$i\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{1}{2}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} \quad (\text{A.37})$$

$$i\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{1}{2}\frac{\partial^2\Psi}{\partial y^2} \quad (\text{A.38})$$

$$i\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{1}{2}\frac{\partial^2\Psi}{\partial z^2} \quad (\text{A.39})$$

$$i\frac{\partial\Psi}{\partial t} = V(\mathbf{r})\Psi + \beta_{3D}|\Psi|^2\Psi. \quad (\text{A.40})$$

Seja a equação A.37: o CN exige que apliquemos as derivadas em ambos os lados da igualdade no tempo intermediário  $(n + \frac{1}{2})$ , ou

seja, devemos obter a discretização da seguinte equação:

$$i \frac{\partial \Psi}{\partial t} \Big|_{(x, y, z, t + \frac{\Delta t}{2})} = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} \Big|_{(x, y, z, t + \frac{\Delta t}{2})}. \quad (\text{A.41})$$

A forma mais simples de fazer com que essas derivadas apareçam é expandir a função  $\Psi(\mathbf{r}, t)$  em série de Taylor. Como o tempo é intermediário entre  $t$  e  $(t + \Delta t)$  e não desejamos mostrar parcialidade no tratamento de cada uma das variáveis da função  $\Psi(\mathbf{r}, t)$ , faremos seis expansões, duas para cada valor de  $\mathbf{x}$  que fornecerá a segunda derivada espacial da função  $\Psi(\mathbf{r}, t)$ , todas elas no entorno do ponto  $(x, y, z, t + \frac{\Delta t}{2})$ . Primeiro, sejam as aproximações para  $\Psi(x, y, z, t)$  e  $\Psi(x, y, z, t + \Delta t)$

$$\begin{aligned} \Psi(x, y, z, t) &\simeq \Psi\left(x, y, z, t + \frac{\Delta t}{2}\right) - \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial \Psi}{\partial t} \Big|_{(x, y, z, t + \frac{\Delta t}{2})} \\ &\quad + \frac{\Delta t^2}{4 \cdot 2!} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} \Big|_{(x, y, z, t + \frac{\Delta t}{2})} - \frac{\Delta t^3}{8 \cdot 3!} \frac{\partial^3 \Psi}{\partial t^3} \Big|_{(x, y, z, t + \frac{\Delta t}{2})} \\ &\quad + \mathcal{O}(\Delta t^4) \end{aligned} \quad (\text{A.42})$$

$$\begin{aligned} \Psi(x, y, z, t + \Delta t) &\simeq \Psi\left(x, y, z, t + \frac{\Delta t}{2}\right) + \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial \Psi}{\partial t} \Big|_{(x, y, z, t + \frac{\Delta t}{2})} \\ &\quad + \frac{\Delta t^2}{4 \cdot 2!} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} \Big|_{(x, y, z, t + \frac{\Delta t}{2})} + \frac{\Delta t^3}{8 \cdot 3!} \frac{\partial^3 \Psi}{\partial t^3} \Big|_{(x, y, z, t + \frac{\Delta t}{2})} \\ &\quad + \mathcal{O}(\Delta t^4). \end{aligned} \quad (\text{A.43})$$

Agora, as aproximações para  $\Psi(x + \Delta x, y, z, t)$  e  $\Psi(x + \Delta x, y, z, t + \Delta t)$

$$\begin{aligned} \Psi(x + \Delta x, y, z, t) &\simeq \Psi\left(x, y, z, t + \frac{\Delta t}{2}\right) + \Delta x \frac{\partial \Psi}{\partial x} \Big|_{(x, y, z, t + \frac{\Delta t}{2})} \\ &\quad - \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial \Psi}{\partial t} \Big|_{(x, y, z, t + \frac{\Delta t}{2})} + \frac{\Delta x^2}{2!} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} \Big|_{(x, y, z, t + \frac{\Delta t}{2})} \\ &\quad - \frac{\Delta x \Delta t}{2!} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x \partial t} \Big|_{(x, y, z, t + \frac{\Delta t}{2})} + \frac{\Delta t^2}{4 \cdot 2!} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} \Big|_{(x, y, z, t + \frac{\Delta t}{2})} \\ &\quad + \frac{\Delta x^3}{3!} \frac{\partial^3 \Psi}{\partial x^3} \Big|_{(x, y, z, t + \frac{\Delta t}{2})} - \frac{3}{3!} \frac{\Delta x^2 \Delta t}{2} \frac{\partial^3 \Psi}{\partial x^2 \partial t} \Big|_{(x, y, z, t + \frac{\Delta t}{2})} \\ &\quad + \frac{3}{3!} \frac{\Delta x \Delta t^2}{4} \frac{\partial^3 \Psi}{\partial x \partial t^2} \Big|_{(x, y, z, t + \frac{\Delta t}{2})} - \frac{\Delta t^3}{3! \cdot 8} \frac{\partial^3 \Psi}{\partial t^3} \Big|_{(x, y, z, t + \frac{\Delta t}{2})} \\ &\quad + \mathcal{O}(\Delta x^4 - \Delta x^3 \Delta t + \Delta x^2 \Delta t^2 - \Delta x \Delta t^3 + \Delta t^4) \end{aligned} \quad (\text{A.44})$$

$$\Psi(x + \Delta x, y, z, t + \Delta t) \simeq \Psi\left(x, y, z, t + \frac{\Delta t}{2}\right) + \Delta x \frac{\partial \Psi}{\partial x} \Big|_{(x, y, z, t + \frac{\Delta t}{2})}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial \Psi}{\partial t} \Big|_{(x,y,z,t+\frac{\Delta t}{2})} + \frac{\Delta x^2}{2!} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} \Big|_{(x,y,z,t+\frac{\Delta t}{2})} \\
& + \frac{\Delta x \Delta t}{2!} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x \partial t} \Big|_{(x,y,z,t+\frac{\Delta t}{2})} + \frac{\Delta t^2}{4 \cdot 2!} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} \Big|_{(x,y,z,t+\frac{\Delta t}{2})} \\
& + \frac{\Delta x^3}{3!} \frac{\partial^3 \Psi}{\partial x^3} \Big|_{(x,y,z,t+\frac{\Delta t}{2})} + \frac{3 \Delta x^2 \Delta t}{3! \cdot 2} \frac{\partial^3 \Psi}{\partial x^2 \partial t} \Big|_{(x,y,z,t+\frac{\Delta t}{2})} \\
& + \frac{3 \Delta x \Delta t^2}{3! \cdot 4} \frac{\partial^3 \Psi}{\partial x \partial t^2} \Big|_{(x,y,z,t+\frac{\Delta t}{2})} + \frac{\Delta t^3}{3! \cdot 8} \frac{\partial^3 \Psi}{\partial t^3} \Big|_{(x,y,z,t+\frac{\Delta t}{2})} \\
& + \mathcal{O}(\Delta x^4 + \Delta x^3 \Delta t + \Delta x^2 \Delta t^2 + \Delta x \Delta t^3 + \Delta t^4). \tag{A.45}
\end{aligned}$$

Finalmente, para  $\Psi(x - \Delta x, y, z, t)$  e  $\Psi(x - \Delta x, y, z, t + \Delta t)$  obtemos

$$\begin{aligned}
\Psi(x - \Delta x, y, z, t) & \simeq \Psi\left(x, y, z, t + \frac{\Delta t}{2}\right) - \Delta x \frac{\partial \Psi}{\partial x} \Big|_{(x,y,z,t+\frac{\Delta t}{2})} \\
& - \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial \Psi}{\partial t} \Big|_{(x,y,z,t+\frac{\Delta t}{2})} + \frac{\Delta x^2}{2!} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} \Big|_{(x,y,z,t+\frac{\Delta t}{2})} \\
& + \frac{\Delta x \Delta t}{2!} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x \partial t} \Big|_{(x,y,z,t+\frac{\Delta t}{2})} + \frac{\Delta t^2}{4 \cdot 2!} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} \Big|_{(x,y,z,t+\frac{\Delta t}{2})} \\
& - \frac{\Delta x^3}{3!} \frac{\partial^3 \Psi}{\partial x^3} \Big|_{(x,y,z,t+\frac{\Delta t}{2})} - \frac{3 \Delta x^2 \Delta t}{3! \cdot 2} \frac{\partial^3 \Psi}{\partial x^2 \partial t} \Big|_{(x,y,z,t+\frac{\Delta t}{2})} \\
& - \frac{3 \Delta x \Delta t^2}{3! \cdot 4} \frac{\partial^3 \Psi}{\partial x \partial t^2} \Big|_{(x,y,z,t+\frac{\Delta t}{2})} - \frac{\Delta t^3}{3! \cdot 8} \frac{\partial^3 \Psi}{\partial t^3} \Big|_{(x,y,z,t+\frac{\Delta t}{2})} \\
& + \mathcal{O}(\Delta x^4 + \Delta x^3 \Delta t + \Delta x^2 \Delta t^2 + \Delta x \Delta t^3 + \Delta t^4) \tag{A.46}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\Psi(x - \Delta x, y, z, t + \Delta t) & \simeq \Psi\left(x, y, z, t + \frac{\Delta t}{2}\right) - \Delta x \frac{\partial \Psi}{\partial x} \Big|_{(x,y,z,t+\frac{\Delta t}{2})} \\
& + \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial \Psi}{\partial t} \Big|_{(x,y,z,t+\frac{\Delta t}{2})} + \frac{\Delta x^2}{2!} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} \Big|_{(x,y,z,t+\frac{\Delta t}{2})} \\
& - \frac{\Delta x \Delta t}{2!} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x \partial t} \Big|_{(x,y,z,t+\frac{\Delta t}{2})} + \frac{\Delta t^2}{4 \cdot 2!} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} \Big|_{(x,y,z,t+\frac{\Delta t}{2})} \\
& - \frac{\Delta x^3}{3!} \frac{\partial^3 \Psi}{\partial x^3} \Big|_{(x,y,z,t+\frac{\Delta t}{2})} + \frac{3 \Delta x^2 \Delta t}{3! \cdot 2} \frac{\partial^3 \Psi}{\partial x^2 \partial t} \Big|_{(x,y,z,t+\frac{\Delta t}{2})} \\
& - \frac{3 \Delta x \Delta t^2}{3! \cdot 4} \frac{\partial^3 \Psi}{\partial x \partial t^2} \Big|_{(x,y,z,t+\frac{\Delta t}{2})} + \frac{\Delta t^3}{3! \cdot 8} \frac{\partial^3 \Psi}{\partial t^3} \Big|_{(x,y,z,t+\frac{\Delta t}{2})} \\
& + \mathcal{O}(\Delta x^4 - \Delta x^3 \Delta t + \Delta x^2 \Delta t^2 - \Delta x \Delta t^3 + \Delta t^4). \tag{A.47}
\end{aligned}$$

Agora, se somarmos as expansões A.44-A.47 obtemos uma avaliação da derivada segunda de  $\Psi$  na direção  $x$  aplicada no tempo

$(t + \frac{\Delta t}{2})$ , conforme segue

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} \Big|_{(x,y,z,t+\frac{\Delta t}{2})} &\simeq \frac{\Psi(x + \Delta x, y, z, t) + \Psi(x + \Delta x, y, z, t + \Delta t)}{2\Delta x^2} \\ &+ \frac{\Psi(x - \Delta x, y, z, t) + \Psi(x - \Delta x, y, z, t + \Delta t)}{2\Delta x^2} \\ &- \frac{4\Psi\left(x, y, z, t + \frac{\Delta t}{2}\right)}{2\Delta x^2} - \frac{\Delta t^2}{4\Delta x^2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} \Big|_{(x,y,z,t+\frac{\Delta t}{2})} \\ &+ \mathcal{O}\left(\Delta x^2 + \Delta t^2 + \frac{\Delta t^4}{\Delta x^2}\right). \end{aligned} \quad (\text{A.48})$$

Precisamos de uma avaliação do valor de  $\Psi$  no tempo intermediário  $(t + \frac{\Delta t}{2})$ . Tal avaliação pode ser obtida ao somarmos as duas expansões A.42 e A.43 chegando em

$$\begin{aligned} \Psi\left(x, y, z, t + \frac{\Delta t}{2}\right) &\simeq \frac{\Psi(x, y, z, t) + \Psi(x, y, z, t + \Delta t)}{2} \\ &- \frac{\Delta t^2}{8} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} \Big|_{(x,y,z,t+\frac{\Delta t}{2})} + \mathcal{O}(\Delta t^4) \end{aligned} \quad (\text{A.49})$$

que tem erro de ordem  $\mathcal{O}(\Delta t^2)$ , conferindo consistência à aproximação do valor da derivada segunda. Levando este resultado em A.48 obtemos

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} \Big|_{(x,y,z,t+\frac{\Delta t}{2})} &\simeq \frac{\Psi(x + \Delta x, y, z, t) + \Psi(x + \Delta x, y, z, t + \Delta t)}{2\Delta x^2} \\ &+ \frac{\Psi(x - \Delta x, y, z, t) + \Psi(x - \Delta x, y, z, t + \Delta t)}{2\Delta x^2} \\ &- \frac{2\Psi(x, y, z, t) + 2\Psi(x, y, z, t + \Delta t)}{2\Delta x^2} \\ &+ \mathcal{O}\left(\Delta x^2 + \Delta t^2\right). \end{aligned} \quad (\text{A.50})$$

Levando esta discretização na linguagem  $(j, k, l, n)$  da rede espaço-temporal numérica obtemos:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} \Big|_{(x,y,z,t+\frac{\Delta t}{2})} &\simeq \frac{\Psi_{j+1,k,l}^n - 2\Psi_{jkl}^n + \Psi_{j-1,k,l}^n}{2\Delta x^2} \\ &+ \frac{\Psi_{j+1,k,l}^{n+1} - 2\Psi_{jkl}^{n+1} + \Psi_{j-1,k,l}^{n+1}}{2\Delta x^2} \\ &+ \mathcal{O}\left(\Delta x^2 + \Delta t^2\right). \end{aligned} \quad (\text{A.51})$$

De modo curioso, a avaliação da derivada segunda em um tempo inter-



mediário entre  $\mathbf{n}$  e  $\mathbf{n} + \mathbf{1}$  trata-se da média entre as avaliações das derivadas em cada um dos tempos, fornecendo um erro de ordem  $\mathcal{O}(\Delta t^2)$ .

Para podermos implementar a evolução temporal desta nossa primeira parte do passo temporal, ainda resta obter uma avaliação da derivada temporal de  $\Psi$  no tempo intermediário. Essa é facilmente obtida ao subtrairmos as expansões A.42 e A.43 chegando no resultado

$$\left. \frac{\partial \Psi}{\partial t} \right|_{(x,y,z,t+\frac{\Delta t}{2})} \simeq \frac{\Psi(x,y,z,t+\Delta t) - \Psi(x,y,z,t)}{\Delta t} + \mathcal{O}(\Delta t^2) \quad (\text{A.52})$$

que reescrita nos índices  $(j, k, l, n)$  fica

$$\left. \frac{\partial \Psi}{\partial t} \right|_{(x,y,z,t+\frac{\Delta t}{2})} \simeq \frac{\Psi_{jkl}^{n+1} - \Psi_{jkl}^n}{\Delta t} + \mathcal{O}(\Delta t^2) \quad (\text{A.53})$$

Levando agora as equações A.51 e A.53 na equação A.41 obtemos

$$\begin{aligned} & -\frac{i\Delta t}{4\Delta x^2} \Psi_{j+1,k,l}^{n+1} + \left(1 + 2\frac{i\Delta t}{4\Delta x^2}\right) \Psi_{jkl}^{n+1} - \frac{i\Delta t}{4\Delta x^2} \Psi_{j-1,k,l}^{n+1} = \\ & = \frac{i\Delta t}{4\Delta x^2} \Psi_{j+1,k,l}^n + \left(1 - 2\frac{i\Delta t}{4\Delta x^2}\right) \Psi_{jkl}^n + \frac{i\Delta t}{4\Delta x^2} \Psi_{j-1,k,l}^n \end{aligned} \quad (\text{A.54})$$

que é uma equação do mesmo tipo que aquela resolvida para o método BE, equação A.24, e, portanto, podemos usar o mesmo método para resolvê-la. Supomos a recorrência entre valores futuros da função procurada, equação A.26 e, utilizando as mesmas condições de contorno daquele caso, a saber:

$$\Psi_{0kl}^{n+1} = 0 = \Psi_{N_x,kl}^{n+1} \quad (\text{A.55})$$

encontramos apropriadamente os valores de  $A_j$ 's e  $B_j$ 's que validarão a relação de recorrência entre  $\Psi$ 's, equação A.26.

As mesmas discretizações se aplicam nos dois próximos passos, equações A.38 e A.39, trocando-se apropriadamente as variações espaciais  $\Delta x$  por  $\Delta y$  ou  $\Delta z$  e lendo-se  $N_y$  e  $N_z$  onde escrevemos  $N_x$  na dedução apresentada para evoluir a equação A.37.

O último passo consiste em tomar a evolução unitária dada na equação A.36, após o passo com derivadas em  $z$  ser dado. Assim se completa o passo temporal do método de CN com passo quebrado.

### A.3 MÉTODOS DE RELAXAÇÃO

São chamados de métodos de relaxação aqueles propostos com o fim de obter o estado fundamental de um dado problema por fazer a seguinte transformação na variável temporal

$$t = -i\tau \quad (\text{A.56})$$

ou seja: o tempo é simplesmente tornado complexo. Esta transformação simples do ponto de vista analítico tem consequências Físicas chocantes. Quando a fazemos na EGP3D, equação A.1, aquela equação deixa de ser uma descritiva de onda propagante para tornar-se em uma de difusão. Para explicar qualitativamente porque isso ocorre vamos abusar temporariamente da linguagem, esquecendo por um tempo que estamos tratando de uma equação não-linear. Se lermos a EGP 3D da seguinte forma mais simples

$$i \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \mathcal{H} \Psi \quad (\text{A.57})$$

e transformarmos o tempo conforme equação A.56, obtemos

$$\frac{\partial \Psi}{\partial \tau} = -\mathcal{H} \Psi \quad (\text{A.58})$$

cuja dinâmica é do tipo

$$\Psi = e^{-\mathcal{H}\tau} \Psi_0 \quad (\text{A.59})$$

com  $\Psi_0$  sendo a função inicial. Sabemos que toda função pode ser decomposta em série em termos de funções que formem uma base do espaço que a contenha, então decompos  $\Psi_0$  da seguinte forma

$$\Psi_0(\mathbf{r}) = \sum_n a_n \phi_n(\mathbf{r}) \quad (\text{A.60})$$

onde as funções  $\{\phi_n(\mathbf{r})\}$  formariam uma base de  $\mathcal{H}$  (note que é um absurdo falar de *base* de um problema não linear; encaremos como descrição qualitativa, que é o que de fato estamos fazendo). Ora, se levarmos a série A.60 na equação A.59 obteremos

$$\Psi = e^{-\mathcal{H}\tau} \sum_n a_n \phi_n(\mathbf{r})$$

$$\Psi = \sum_n a_n e^{-\epsilon_n \tau} \phi_n(\mathbf{r})$$

onde  $\epsilon_n$  seriam os autovalores de cada uma das funções de base. Aqui vemos claramente que quanto maior o autovalor mais rapidamente a função associada a ele é amortecida pelo decaimento exponencial no tempo, de modo que, em uma simulação com tempo suficientemente grande, restaria apenas a função de menor autovalor, ou seja, o estado fundamental.

Todo o afirmado acima tem validade para problemas lineares, sem sombra de dúvida. Já para problemas não lineares a demonstração de que a evolução temporal acima descrita leva ao estado fundamental do problema correspondente já é mais complicada, mas foi realizada no belo trabalho [56]. Lá há a demonstração de que, além de obter o estado fundamental, se o potencial for simétrico, pode-se obter o primeiro estado excitado do problema, bastando para isso iniciar a evolução temporal com uma função ímpar.

Um detalhe que não deve passar despercebido é que a cada passo temporal de uma simulação de relaxação a função deve ser renormalizada, isso para que os valores da função evoluída não se tornem muito pequenos e seja perdida precisão no cálculo. No trabalho supracitado do Bao [56], ele mostra que o próprio passo de renormalização da função é importante para o funcionamento dos métodos de relaxação, tanto que ele denomina a evolução sob relaxação de *fluxo de norma*.

Os métodos de Backward Euler e Crank-Nicolson desenvolvidos anteriormente, nas subseções A.1 e A.2, respectivamente, podem ser facilmente implementados para evolução complexa lendo-se  $-i\Delta\tau$  onde antes lia-se  $\Delta t$ . Utilizamos largamente estes métodos em nosso trabalho para obter os estados fundamental e primeiro excitado de poços duplos contenedores de condensados de bósons. Resta dizer que são métodos eficientes e rápidos.



**APÊNDICE B – Solução analítica formal para estados com  
contrapartida linear da EGP unidimensional**



Seja a equação de Gross-Pitaevskii unidimensional e adimensionalizada com unidades de oscilador harmônico, com poço  $V(\mathbf{x})$  arbitrário:

$$-\frac{1}{2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \mathbf{x}^2} + V(\mathbf{x})\psi + \beta |\psi|^2 \psi = i \frac{\partial \psi}{\partial t}. \quad (\text{B.1})$$

Seja o *ansatz* separador de variáveis temporal e espacial:

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \varphi(\mathbf{x}) e^{-i\mu t} \quad (\text{B.2})$$

que, substituído em B.1, leva à Equação de Gross-Pitaevskii independente do tempo:

$$-\frac{1}{2} \frac{d^2 \varphi}{d \mathbf{x}^2} + V(\mathbf{x})\varphi + \beta |\varphi|^2 \varphi = \mu \varphi. \quad (\text{B.3})$$

Seja agora um conjunto ortonormal completo de funções  $\{\varphi_n(\mathbf{x})\}$  que satisfaz a equação B.3 para  $\beta = \mathbf{0}$ , ou seja, para o caso linear:

$$-\frac{1}{2} \frac{d^2 \varphi_n}{d \mathbf{x}^2} + V(\mathbf{x})\varphi_n = \epsilon_n \varphi_n. \quad (\text{B.4})$$

Propomos que todas as *soluções* da equação não-linear B.3 *que possuem contrapartida linear* sejam do tipo:

$$\tilde{\varphi}_n(\beta, \mathbf{x}) = \sum_{m=0}^{\infty} \eta_m^n(\mathbf{x}) \beta^m \quad (\text{B.5})$$

e que seus respectivos potenciais químicos sejam dados por:

$$\mu_n(\beta) = \sum_{m=0}^{\infty} \alpha_m^n \beta^m \quad (\text{B.6})$$

pelo menos para algum intervalo de valores do parâmetro não linear  $\beta$ .

Definimos em B.5 e B.6, implicitamente, o seguinte:

$$\eta_0^n(\mathbf{x}) \equiv \varphi_n(\mathbf{x}) \quad (\text{B.7})$$

$$\alpha_0^n \equiv \epsilon_n \quad (\text{B.8})$$

com o objetivo de que, quando  $\beta \rightarrow \mathbf{0}$ , as soluções conhecidas do problema linear sejam reobtidas. Este é, intrinsecamente, o significado da expressão *solução com contrapartida linear*.

Levando as propostas B.5 e B.6 na equação B.3 e reagrupando

potências de mesma ordem em  $\beta$ , obtemos:

$$\begin{aligned} & \beta^0 \left( \frac{d^2 \eta_0^n}{dx^2} - 2V \eta_0^n + 2\alpha_0^n \eta_0^n \right) \\ & + \sum_{m=1}^{\infty} \beta^m \left[ \frac{d^2 \eta_m^n}{dx^2} - 2V \eta_m^n + 2 \sum_{l=0}^m \alpha_l^n \eta_{m-l}^n \right. \\ & \quad \left. - 2 \sum_{l=0}^{m-1} \sum_{j=0}^{m-l-1} \eta_l^n \eta_j^n \eta_{m-l-j-1}^n \right] = 0 \quad (\text{B.9}) \end{aligned}$$

Dada a arbitrariedade de  $\beta$  devemos exigir que cada termo da soma infinita de potências em  $\beta$  seja nulo, ou seja:

$$\frac{d^2 \eta_0^n}{dx^2} - 2V \eta_0^n + 2\alpha_0^n \eta_0^n = 0 \quad (\text{B.10})$$

$$\begin{aligned} & \frac{d^2 \eta_m^n}{dx^2} - 2V \eta_m^n + 2 \sum_{l=0}^m \alpha_l^n \eta_{m-l}^n \\ & - 2 \sum_{l=0}^{m-1} \sum_{j=0}^{m-l-1} \eta_l^n \eta_j^n \eta_{m-l-j-1}^n = 0 \quad (\text{B.11}) \end{aligned}$$

onde a segunda das equações é válida para todo  $m \geq 1$ .

Ora, a primeira das equações só faz identificar as funções  $\eta_0^n(x)$  com as funções conhecidas do problema linear  $\varphi_n(x)$  e os coeficientes  $\alpha_0^n$  com as autoenergias conhecidas também do problema linear  $\epsilon_n$ , mostrando consistência com as equações B.7 e B.8, conforme era de se esperar. Resta-nos, na equação B.11, um sistema recorrente de equações a ser resolvido ordem a ordem, equações estas agora lineares nas funções  $\eta_m^n(x)$ , sendo  $m$  o indicativo da ordem considerada. Para perceber que se trata de um sistema recorrente basta notar que a soma dupla contém termos até a ordem  $m - 1$  e a soma que vai até a ordem  $m$  possui a função  $\eta_m^n$  multiplicada pelo coeficiente  $\alpha_0^n$ , um termo sempre conhecido, de modo que a equação é linear em  $\eta_m^n$  e possui uma espécie de termo de forçamento que depende de todas as outras ordens.

Sem perder generalidade, uma vez que o conjunto  $\{\varphi_n(x)\}$  é completo, vamos supor que as funções  $\eta_m^n(x)$  pertencem ao mesmo espaço de funções representado pela base  $\{\varphi_n(x)\}$  e, portanto, possam



ser expandidas por este conjunto. Assim escrevemos:

$$\eta_m^n(\mathbf{x}) = \sum_{l=0}^{\infty} \lambda_l^{(m,n)} \varphi_l(\mathbf{x}) \quad (\text{B.12})$$

com os coeficientes  $\lambda_l^{(m,n)}$  ainda a serem determinados.

Levando B.12 em B.11, pois B.10 já está resolvida, usamos o fato de que  $\varphi_l(\mathbf{x})$  satisfaz B.4 e que  $\alpha_0^n = \epsilon_n$ , equação B.8, para obter:

$$\sum_{l=0}^{\infty} \lambda_l^{(m,n)} (\epsilon_n - \epsilon_l) \varphi_l = \sum_{l=0}^{m-1} \sum_{j=0}^{m-l-1} \eta_l^n \eta_j^n \eta_{m-l-j-1}^n - \sum_{l=0}^{m-1} \alpha_{m-l}^n \eta_l^n \quad (\text{B.13})$$

Usamos agora a ortonormalidade das funções  $\{\varphi_l(\mathbf{x})\}$  para obter os  $\lambda$ 's. Vamos tomar o produto interno dos dois lados da igualdade por  $\varphi_k$  e integrar em  $\mathbf{x}$  para obter:

$$\lambda_k^{(m,n)} (\epsilon_n - \epsilon_k) = \sum_{l=0}^{m-1} \sum_{j=0}^{m-l-1} \int \eta_l^n \eta_j^n \eta_{m-l-j-1}^n \varphi_k d\mathbf{x} - \sum_{l=0}^{m-1} \alpha_{m-l}^n \lambda_k^{(l,n)} \quad (\text{B.14})$$

Supondo que estamos tratando somente dos estados ligados de  $V(\mathbf{x})$ , então não existem estados  $\{\varphi_n\}$  que sejam degenerados no caso unidimensional<sup>1</sup>. Sendo assim, temos, para  $k \neq n$ :

$$\lambda_k^{(m,n)} = \frac{1}{\epsilon_n - \epsilon_k} \sum_{l=0}^{m-1} \left[ \sum_{j=0}^{m-l-1} \int \eta_l^n \eta_j^n \eta_{m-l-j-1}^n \varphi_k d\mathbf{x} - \alpha_{m-l}^n \lambda_k^{(l,n)} \right]. \quad (\text{B.15})$$

Caso  $k = n$ , ou seja,  $\epsilon_k = \epsilon_n$ , então obtemos o coeficiente  $\alpha_m^n$ :

$$\sum_{l=0}^{m-1} \alpha_{m-l}^n \lambda_n^{(l,n)} = \sum_{l=0}^{m-1} \sum_{j=0}^{m-l-1} \int \eta_l^n \eta_j^n \eta_{m-l-j-1}^n \varphi_n d\mathbf{x} \quad (\text{B.16})$$

<sup>1</sup>A demonstração de não existência de estados ligados degenerados no caso unidimensional é simples (Problema 2.45 do livro [64]): (1) suponha a existência de dois estados degenerados,  $\varphi_{d1}(\mathbf{x})$  e  $\varphi_{d2}(\mathbf{x})$ ; (2) multiplique a equação de Schrödinger - linear e independente do tempo - de  $\varphi_{d1}$  ( $\varphi_{d2}$ ) por  $\varphi_{d2}$  ( $\varphi_{d1}$ ); (3) subtraia as duas equações resultantes; (4) integre uma vez e use que  $\varphi_i(|\mathbf{x}| \rightarrow \infty) \rightarrow 0$  para dizer que a constante de integração é nula; (5) integre uma segunda vez para provar que  $\varphi_{d2}$  é igual a uma constante multiplicada por  $\varphi_{d1}$ , ou seja, para concluir que a densidade de probabilidade dos dois estados supostos distintos é idêntica, o que iguala os dois estados, concluindo a demonstração.

(se chegamos na ordem  $m$  todas as funções  $\eta_l^n(x)$  e coeficientes  $\alpha_l^n$  com  $l \leq m - 1$  são conhecidas, de modo que esta equação determina univocamente  $\alpha_m^n$  para todo  $m \geq 1$ ).

Ainda falta determinar  $\lambda_n^{(m,n)}$ . Como fazer? Exigindo a normalização da função  $\tilde{\varphi}_n(x)$ :

$$\begin{aligned} \int \tilde{\varphi}_n^2 dx &= 1 \\ \int \sum_{m,l=0}^{\infty} \eta_l^n \eta_m^n \beta^{l+m} dx &= 1 \\ \sum_{m=0}^{\infty} \beta^m \left( \sum_{l=0}^m \int \eta_l^n \eta_{m-l}^n dx \right) &= 1 \\ \sum_{m=1}^{\infty} \beta^m \left( \sum_{l=0}^m \int \eta_l^n \eta_{m-l}^n dx \right) &= 0 \end{aligned}$$

onde usamos, no último passo, a normalização das funções de decomposição do espaço funcional que estamos considerando. Novamente a arbitrariedade em  $\beta$  exige que:

$$\sum_{l=0}^m \int \eta_l^n \eta_{m-l}^n dx = 0 \quad (\text{B.17})$$

para todo  $m \geq 1$ . Inserindo nesta exigência a expansão das funções  $\eta_m^n(x)$  em termos do conjunto  $\{\varphi_l(x)\}$ , equação B.12, e utilizando a ortonormalidade deste conjunto, obtemos:

$$\sum_{l=0}^m \sum_{j=0}^{\infty} \lambda_j^{(l,n)} \lambda_j^{(m-l,n)} = 0 \quad (\text{B.18})$$

para todo  $m \geq 1$ . Devemos lembrar que a igualdade  $\eta_0^n(x) = \varphi_n(x)$  implica em

$$\lambda_l^{(0,n)} = \delta_{ln} \quad (\text{B.19})$$

onde  $\delta_{ln}$  é o delta de Kroneker usual.

Com isso a parte formal está concluída.

Nas figuras 17 e 18 mostramos alguns resultados procedentes desta abordagem.

A figura 17 apresenta uma comparação do raio de convergência dos potenciais químicos dos primeiros três estados de um potencial de

duplo poço quadrado infinito do tipo:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & b < |x| < a \\ V_0 & |x| \leq b \\ \infty & |x| \geq a \end{cases} \quad (\text{B.20})$$

com o ponto de bifurcação dos potenciais químicos conforme previstos em [61] indicados em linhas pontilhadas.

A figura 18 já explicita como o raio de convergência de cada função com contrapartida linear varia consideravelmente de acordo com o estado considerado para um poço quadrado infinito, o mais simples possível dos potenciais

$$V(x) = \begin{cases} 0 & 0 \leq x \leq \pi \\ \infty & x < 0 \text{ ou } x > \pi \end{cases} \quad (\text{B.21})$$

Essa divergência dá a idéia de que é possível a existência de estados sem contrapartida linear mesmo para o problema de poço simples. Essa possibilidade ainda está sendo considerada numericamente.

Vale apresentar, por fim, a seguinte relação obtida numericamente entre os potenciais químicos dos vários estados com contrapartida linear do poço quadrado infinito

$$\mu_n [(n+1)^2 \beta] = (n+1)^2 \mu_0(\beta) \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (\text{B.22})$$

Essa relação implica que, conhecendo-se o potencial químico do estado fundamental do poço quadrado infinito podemos calcular o potencial químico de todos os estados com contrapartida linear!

## B.1 UM RESUMO DOS RESULTADOS ANALÍTICOS

Base  $\{\varphi_n(x)\}$  satisfaz:

$$-\frac{1}{2} \frac{d^2 \varphi_n}{dx^2} + V(x) \varphi_n = \epsilon_n \varphi_n \quad (\text{B.23})$$

Soluções  $\{\tilde{\varphi}_n(x)\}$  satisfazem:

$$-\frac{1}{2} \frac{d^2 \tilde{\varphi}_n}{dx^2} + V(x) \tilde{\varphi}_n + \beta \tilde{\varphi}_n^3 = \mu_n \tilde{\varphi}_n \quad (\text{B.24})$$

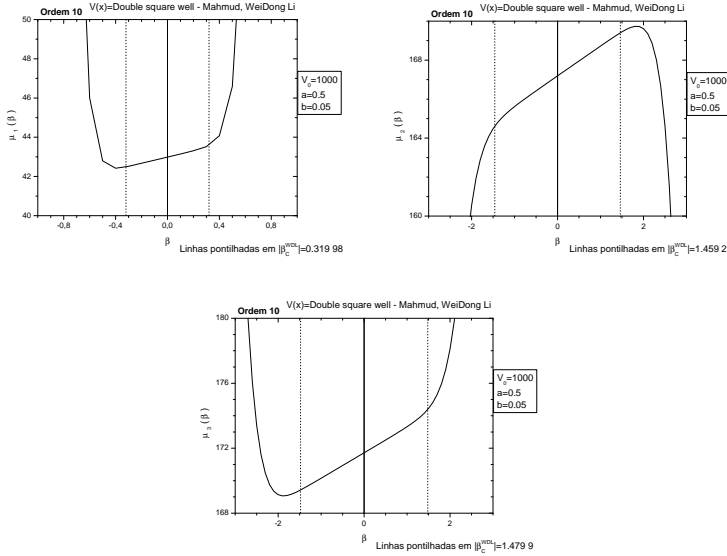


Figura 17: Gráfico do potencial químico em função do parâmetro de interação não linear  $\beta$  para os três primeiros estados com contrapartida linear de um duplo poço quadrado infinito. As linhas pontilhadas verticais indicam os pontos onde haveria quebra de simetria nas soluções e a consequente separação entre estados *com* e *sem contrapartida linear* correspondentes ao problema, conforme previsto semi-analiticamente por WeiDong Li em [61].

e são dadas por:

$$\tilde{\varphi}_n(\beta, x) = \sum_{m=0}^{\infty} \eta_m^n(x) \beta^m \quad (\text{B.25})$$

e os  $\mu_n$ 's, por sua vez, são dados por:

$$\mu_n(\beta) = \sum_{m=0}^{\infty} \alpha_m^n \beta^m. \quad (\text{B.26})$$

As funções  $\eta_m^n(x)$  são representadas por:

$$\eta_m^n(x) = \sum_{l=0}^{\infty} \lambda_l^{(m,n)} \varphi_l(x) \quad (\text{B.27})$$

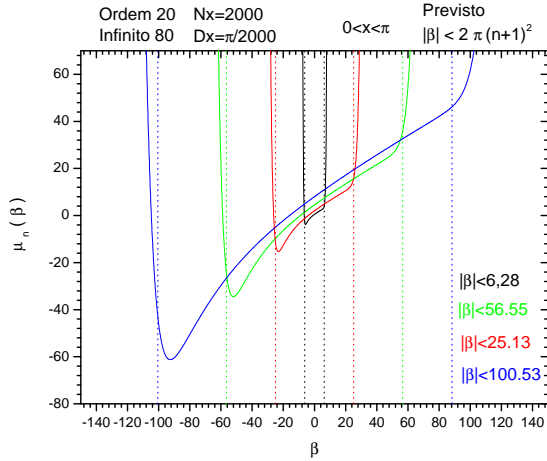


Figura 18: Amostra de como os raios de convergência das funções  $\mu_n(\beta)$  variam de acordo com o estado  $n$  considerado, mesmo para um poço de potencial simples, neste caso, um poço quadrado infinito. As divergências apresentadas para um determinado valor da interação *sugere* a existência de estados sem contrapartida linear (assimétricos) mesmo para poços simples. O mesmo comportamento é observado no caso de um potencial harmônico simples.

com coeficientes  $\lambda$ 's dados por:

caso  $l \neq n$  e  $m \geq 1$ :

$$\lambda_l^{(m,n)} = \frac{1}{\epsilon_n - \epsilon_l} \sum_{k=0}^{m-1} \left[ \sum_{j=0}^{m-k-1} \int \eta_k^n \eta_j^n \eta_{m-k-j-1}^n \varphi_l dx - \alpha_{m-k}^n \lambda_l^{(k,n)} \right] \quad (\text{B.28})$$

caso  $m = 0$ :

$$\lambda_l^{(0,n)} = \delta_{ln}. \quad (\text{B.29})$$

caso  $l = n$ :

$$\begin{aligned} \lambda_n^{(1,n)} &= 0 \\ \lambda_n^{(m,n)} &= -\frac{1}{2} \sum_{k=1}^{m-1} \sum_{j=0}^{\infty} \lambda_j^{(k,n)} \lambda_j^{(m-k,n)} \end{aligned}$$

para  $m \geq 2$ .

Finalmente, as constantes de correção ao potencial químico,  $\alpha$ 's, são dadas por:

$$\alpha_0^n = \epsilon_n$$

$$\alpha_1^n = \int \varphi_n^4 dx$$

$$\alpha_m^n = \sum_{l=0}^{m-1} \sum_{j=0}^{m-l-1} \int \eta_l^n \eta_j^n \eta_{m-l-j-1}^n \varphi_n dx - \sum_{l=1}^{m-1} \alpha_{m-l}^n \lambda_n^{(l,n)}$$

para  $m \geq 2$ .

## **APÊNDICE C – Modelo de 2 modos aplicado à ENPS**





Iniciaremos nossas considerações a partir da equação 3.20 da subseção 3.1

$$i \frac{\partial f}{\partial t} = \left[ -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{x}^2} + \mathbf{V} + \beta \frac{|f|^2}{\sqrt{1 + \frac{\beta}{\lambda} |f|^2}} + \frac{\lambda}{2} \left( \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{\beta}{\lambda} |f|^2}} + \sqrt{1 + \frac{\beta}{\lambda} |f|^2} \right) \right] f \quad (\text{C.1})$$

onde trocamos a função  $\psi(\mathbf{x}, t)$  pela função  $f(\mathbf{x}, t)$  e a constante  $\beta_{1D}$  foi abreviada para  $\beta$  por simplicidade. Além disso o potencial armadilhador foi redefinido como  $\mathbf{V}(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \mathbf{x}^2 + v(\mathbf{x})$ . Aplicaremos o modelo de dois modos a esta equação e tentaremos comparar os resultados com o modelo de dois modos aplicado à EGP1D. A ideia é investigar os efeitos de geometria na hamiltoniana semiclassical associada ao modelo de dois modos.

Seja o potencial armadilhador  $\mathbf{V}(\mathbf{x})$  simétrico de duplo poço. Concluimos que existirão, para barreira entre poços alta, dois estados quase degenerados no fundo do poço. Chamemos o estado simétrico de  $\bar{\phi}_0(\mathbf{x})$  e o estado antissimétrico de  $\bar{\phi}_1(\mathbf{x})$ . Estes dois estados são tais que satisfazem as seguintes equações:

$$-\frac{1}{2} \frac{d^2 \bar{\phi}_i}{d\mathbf{x}^2} + \mathbf{V} \bar{\phi}_i + \beta \frac{|\bar{\phi}_i|^2}{\sqrt{1 + \frac{\beta}{\lambda} |\bar{\phi}_i|^2}} \bar{\phi}_i + \frac{\lambda}{2} \left( \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{\beta}{\lambda} |\bar{\phi}_i|^2}} + \sqrt{1 + \frac{\beta}{\lambda} |\bar{\phi}_i|^2} \right) \bar{\phi}_i = \mu_i \bar{\phi}_i \quad (\text{C.2})$$

$$\int \bar{\phi}_i \bar{\phi}_j d\mathbf{x} = \delta_{ij} \quad (\text{C.3})$$

onde  $i = 0, 1$  e  $\mu_i$  são os respectivos potenciais químicos dos estados. Notar que a relação de ortonormalidade entre os dois estados é *exatamente* satisfeita, dada a paridade distinta dos dois estados considerados: aqui reside a exigência de paridade definida no potencial armadilhador.

Iremos tratar de uma aproximação para a dinâmica de  $f(\mathbf{x}, t)$  que envolva somente estes dois estados, ou seja, consideraremos

$$f(\mathbf{x}, t) = \bar{\psi}_0(t) \bar{\phi}_0(\mathbf{x}) + \bar{\psi}_1(t) \bar{\phi}_1(\mathbf{x}) \quad (\text{C.4})$$

Muito embora nas contas consideraremos somente integrais que envolvem as funções  $\bar{\phi}_i$ , ficará mais fácil interpretar a dinâmica do sistema se considerarmos as componentes locais que serão definidas conforme a mudança de base que segue:

$$\phi_0(x) \equiv \frac{\bar{\phi}_0(x) + \bar{\phi}_1(x)}{\sqrt{2}} \quad (\text{C.5})$$

$$\phi_1(x) \equiv \frac{\bar{\phi}_0(x) - \bar{\phi}_1(x)}{\sqrt{2}} \quad (\text{C.6})$$

que imediatamente implicam nas transformações inversas

$$\bar{\phi}_0(x) \equiv \frac{\phi_0(x) + \phi_1(x)}{\sqrt{2}} \quad (\text{C.7})$$

$$\bar{\phi}_1(x) \equiv \frac{\phi_0(x) - \phi_1(x)}{\sqrt{2}} \quad (\text{C.8})$$

que, por sua vez, quando substituídas no modelo de dois modos para  $f(x, t)$ , equação C.4, reexpressam  $f(x, t)$  na nova base conforme segue

$$f(x, t) = \psi_0(t)\phi_0(x) + \psi_1(t)\phi_1(x) \quad (\text{C.9})$$

onde fomos levados de modo natural à definição das amplitudes em cada estado localizado

$$\psi_0(t) \equiv \frac{\bar{\psi}_0(t) + \bar{\psi}_1(t)}{\sqrt{2}} \quad (\text{C.10})$$

$$\psi_1(t) \equiv \frac{\bar{\psi}_0(t) - \bar{\psi}_1(t)}{\sqrt{2}}. \quad (\text{C.11})$$

A relação inversa destas amplitudes é

$$\bar{\psi}_0(t) \equiv \frac{\psi_0(t) + \psi_1(t)}{\sqrt{2}} \quad (\text{C.12})$$

$$\bar{\psi}_1(t) \equiv \frac{\psi_0(t) - \psi_1(t)}{\sqrt{2}} \quad (\text{C.13})$$

e com isso iniciaremos as contas.

Vale ressaltar que as equações dinâmicas a serem obtidas estarão expressas em termos de  $\psi$ 's e não de  $\bar{\psi}$ 's por termos uma visualização física da dinâmica de modo imediato no primeiro caso. No entanto, as

integrais serão sobre  $\bar{\phi}$ 's e não sobre  $\phi$ 's, uma vez que as últimas não possuem paridade definida e integrais de potências delas não poderiam ser facilmente eliminadas por considerações de paridade.

Quando substituirmos na equação não polinomial de Schrödinger (ENPS) para  $\mathbf{f}(\mathbf{x}, t)$  o modelo de dois modos proposto, diferentemente do que ocorre com a EGP para o caso unidimensional, não obtemos diretamente as equações de movimento para  $\psi$ 's em termos de integrais puras. Isso ocorre por termos a função  $\mathbf{f}$  dentro das raízes na ENPS. Sendo assim, uma forma de eliminar as raízes é por fazer aproximações sistemáticas do termo dentro delas adicionado à unidade.

Vemos que o termo dentro das raízes é do tipo  $1 + \epsilon$  onde  $\epsilon$  pode ser grande ou pequeno, a depender da relação entre  $\beta$ , o determinante da interação unidimensional entre partículas, e  $\lambda$ , o determinante da assimetria da armadilha. Vale lembrar que tal relação é ilusória, conforme chamamos atenção na subseção 3.1, uma vez que podemos escrever simplesmente  $\frac{\beta}{\lambda} = 2(N - 1)\frac{\alpha_s}{\alpha_x}$ , ou seja, a fração tratada depende somente do número de partículas e do comprimento de espalhamento de ondas  $\mathbf{s}$ ,  $\alpha_s$ .

Consideraremos em detalhes somente o caso em que o termo adicionado à unidade dentro das raízes da ENPS é muito menor que a unidade. O caso em que tal termo é muito maior que a unidade será abordado superficialmente ao término deste apêndice, mas podemos adiantar que, mesmo neste caso, quando a função se aproxima do contorno do potencial aprisionador ela tende a zero, tornando novamente o termo adicionado à unidade dentro da raiz muito pequeno e voltando ao caso que consideraremos em detalhes aqui, o que justifica nossa escolha de estudo em detalhe.

Sendo assim, apenas como critério de ordem, dividiremos a consideração do espaço de fases gerado pela ENPS em dois casos: (1)  $\frac{\beta}{\lambda}|\mathbf{f}|^2 \ll 1$  e (2)  $\frac{\beta}{\lambda}|\mathbf{f}|^2 \gg 1$ .

### C.1 CASO 1: $\frac{\beta}{\lambda}|\mathbf{F}|^2 \ll 1$

Neste caso, expandimos as raízes presentes na ENPS em série de Taylor no entorno da origem conforme segue:

$$\sqrt{1 + \alpha} = 1 + \frac{\alpha}{2} \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{(2n)!}{2^{2n}(n+1)!n!} \alpha^n \quad (\text{C.14})$$

$$\frac{1}{\sqrt{1+\alpha}} = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{(2n)!}{(2^n n!)^2} \alpha^n \quad (\text{C.15})$$

que permitem escrever:

$$\frac{1}{\sqrt{1+\alpha}} + \sqrt{1+\alpha} = 2 \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{(2n)!}{(2^n n!)^2} \binom{n-1}{2n-1} \alpha^n \quad (\text{C.16})$$

onde, para haver convergência, deve-se ter  $|\alpha| < 1$  em todas as três séries apresentadas. Olhando para a equação C.1 imediatamente identificamos  $\alpha = \frac{\beta}{\lambda} |f|^2$ .

Levando estas séries na equação C.1 obtemos:

$$\begin{aligned} i \frac{\partial f}{\partial t} &= -\frac{1}{2} \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + (V + \lambda) f \\ &\quad - \lambda f \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \frac{(2n)!}{(2^n n!)^2} \binom{n+1}{2n-1} \left( \frac{\beta}{\lambda} |f|^2 \right)^n \end{aligned} \quad (\text{C.17})$$

lembrando que tal resultado é válido se:  $\left| \frac{\beta}{\lambda} \right| |f|^2 < 1$ .

Já observamos na equação C.17 dois fatos dignos de nota. Primeiro, se  $\beta = \mathbf{0}$  recuperamos a equação de Schrodinger com uma redefinição na origem da energia, redefinição esta oriunda das energias de ponto zero nas outras dimensões que foram integradas quando do processo de unidimensionalização. Segundo, no caso em que  $\beta \ll 1$ , de modo que pode-se truncar a série infinita já no primeiro termo, então recuperamos a EGP1D:

$$i \frac{\partial f}{\partial t} = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + (V + \lambda) f + \beta |f|^2 f \quad (\text{C.18})$$

onde também observamos apenas a redefinição de origem de energia -tal correção estará presente em todas as ordens.

Ainda antes de aplicar o modelo de dois modos ao problema vale notar que, caso a intensidade de interação seja *pequena* - suficiente para validar as expansões em série dentro de todo o domínio das funções representativas dos dois modos - então os dois modos  $\bar{\phi}_i$  irão satisfazer a igualdade

$$-\frac{1}{2} \frac{d^2 \bar{\phi}_i}{dx^2} + (V + \lambda) \bar{\phi}_i - \lambda \bar{\phi}_i \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \frac{(2n)!}{(2^n n!)^2} \binom{n+1}{2n-1} \left( \frac{\beta}{\lambda} |\bar{\phi}_i|^2 \right)^n = \mu_i \bar{\phi}_i \quad (\text{C.19})$$

exatamente, para  $i = \mathbf{0}, \mathbf{1}$ , uma vez que esta é a própria ENPS expressa em série.

Levando o modelo de dois modos localizado para  $f(\mathbf{x}, t)$ , equação C.9, na equação C.17, e já utilizando o fato de os modos considerados satisfazerem a equação C.19, obtemos

$$\begin{aligned}
 i \frac{\partial}{\partial t} (\psi_0 \phi_0 + \psi_1 \phi_1) &= \frac{\psi_0 + \psi_1}{\sqrt{2}} \left[ \mu_0 \bar{\phi}_0 \right. \\
 &+ \lambda \bar{\phi}_0 \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \frac{(2n)!}{(2^n n!)^2} \left( \frac{n+1}{2n-1} \right) \left( \frac{\beta}{\lambda} \right)^n |\bar{\phi}_0|^{2n} \left. \right] \\
 &+ \frac{\psi_0 - \psi_1}{\sqrt{2}} \left[ \mu_1 \bar{\phi}_1 \right. \\
 &+ \lambda \bar{\phi}_1 \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \frac{(2n)!}{(2^n n!)^2} \left( \frac{n+1}{2n-1} \right) \left( \frac{\beta}{\lambda} \right)^n |\bar{\phi}_1|^{2n} \left. \right] \\
 &- \lambda (\psi_0 \phi_0 + \psi_1 \phi_1) \cdot \\
 &\cdot \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \frac{(2n)!}{(2^n n!)^2} \left( \frac{n+1}{2n-1} \right) \left( \frac{\beta}{\lambda} \right)^n |\psi_0 \phi_0 + \psi_1 \phi_1|^{2n}
 \end{aligned} \tag{C.20}$$

resultado longe de ser apresentável.

Iniciamos o trabalho de simplificação da equação C.20 por utilizar os seguintes resultados fáceis de demonstrar

$$\begin{aligned}
 \int \bar{\phi}_0 \phi_0 dx &= \int \bar{\phi}_1 \phi_0 dx = \frac{1}{\sqrt{2}} &= \int \bar{\phi}_0 \phi_1 dx = - \int \bar{\phi}_1 \phi_1 dx \\
 \int \bar{\phi}_0 \bar{\phi}_0^{2n} \phi_0 dx &= \frac{1}{\sqrt{2}} \int \bar{\phi}_0 \bar{\phi}_0^{2n} \bar{\phi}_0 dx &= \int \bar{\phi}_0 \bar{\phi}_0^{2n} \phi_1 dx \\
 \int \bar{\phi}_1 \bar{\phi}_1^{2n} \phi_0 dx &= \frac{1}{\sqrt{2}} \int \bar{\phi}_1 \bar{\phi}_1^{2n} \bar{\phi}_1 dx &= - \int \bar{\phi}_1 \bar{\phi}_1^{2n} \phi_1 dx.
 \end{aligned}$$

Tomando o produto de C.20 por  $\phi_0$  ( $\phi_1$ ) e integrando em  $\mathbf{x}$  obtemos as equações de movimento para  $\psi_0$  ( $\psi_1$ ):

$$\begin{aligned}
 i \frac{d\psi_0}{dt} &= \psi_0 \left[ \frac{\mu_0 + \mu_1}{2} \right. \\
 &+ \frac{\lambda}{2} \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \frac{(2n)!}{(2^n n!)^2} \left( \frac{n+1}{2n-1} \right) \left( \frac{\beta}{\lambda} \right)^n \left( \int \bar{\phi}_0 \bar{\phi}_0^{2n} \bar{\phi}_0 dx + \int \bar{\phi}_1 \bar{\phi}_1^{2n} \bar{\phi}_1 dx \right. \\
 &- 2 \sum_{m=0}^n \sum_{l=0}^n \binom{n}{m} \binom{n}{l} (\psi_0^*)^m (\psi_1^*)^{n-m} \psi_0^l \psi_1^{n-l} \int \phi_0 \phi_0^{m+l} \phi_1^{2n-m-l} \phi_0 dx \left. \right) \left. \right] \\
 &- \psi_1 \left[ \frac{\mu_1 - \mu_0}{2} \right.
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{\lambda}{2} \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \frac{(2n)!}{(2^n n!)^2} \left( \frac{n+1}{2n-1} \right) \left( \frac{\beta}{\lambda} \right)^n \left( \int \bar{\phi}_1 \bar{\phi}_1^{2n} \bar{\phi}_1 dx - \int \bar{\phi}_0 \bar{\phi}_0^{2n} \bar{\phi}_0 dx \right. \\
& \left. + 2 \sum_{m=0}^n \sum_{l=0}^n \binom{n}{m} \binom{n}{l} (\psi_0^*)^m (\psi_1^*)^{n-m} \psi_0^l \psi_1^{n-l} \int \phi_1 \phi_0^{m+l} \phi_1^{2n-m-l} \phi_0 dx \right) \Bigg] \\
& \hspace{15em} (C.21)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
i \frac{d\psi_1}{dt} & = \psi_1 \left[ \frac{\mu_0 + \mu_1}{2} \right. \\
& + \frac{\lambda}{2} \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \frac{(2n)!}{(2^n n!)^2} \left( \frac{n+1}{2n-1} \right) \left( \frac{\beta}{\lambda} \right)^n \left( \int \bar{\phi}_0 \bar{\phi}_0^{2n} \bar{\phi}_0 dx + \int \bar{\phi}_1 \bar{\phi}_1^{2n} \bar{\phi}_1 dx \right. \\
& \left. - 2 \sum_{m=0}^n \sum_{l=0}^n \binom{n}{m} \binom{n}{l} (\psi_0^*)^m (\psi_1^*)^{n-m} \psi_0^l \psi_1^{n-l} \int \phi_1 \phi_0^{m+l} \phi_1^{2n-m-l} \phi_1 dx \right) \Bigg] \\
& - \psi_0 \left[ \frac{\mu_1 - \mu_0}{2} \right. \\
& + \frac{\lambda}{2} \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \frac{(2n)!}{(2^n n!)^2} \left( \frac{n+1}{2n-1} \right) \left( \frac{\beta}{\lambda} \right)^n \left( \int \bar{\phi}_1 \bar{\phi}_1^{2n} \bar{\phi}_1 dx - \int \bar{\phi}_0 \bar{\phi}_0^{2n} \bar{\phi}_0 dx \right. \\
& \left. + 2 \sum_{m=0}^n \sum_{l=0}^n \binom{n}{m} \binom{n}{l} (\psi_0^*)^m (\psi_1^*)^{n-m} \psi_0^l \psi_1^{n-l} \int \phi_0 \phi_0^{m+l} \phi_1^{2n-m-l} \phi_1 dx \right) \Bigg] \\
& \hspace{15em} (C.22)
\end{aligned}$$

onde ainda resta trabalhar as integrais dentro das somas duplas em cada uma das equações de movimento.

Pode-se observar claramente que o termo de tunelamento é o mesmo para ambas as equações de movimento. Já o termo de interação em cada poço individual é diferente apenas pelas integrais dentro da soma dupla.

É fácil ver que as integrais ainda não determinadas nas somas duplas tem importância que decresce com  $\frac{1}{2^n}$  em termos de integrais das funções com paridade definida, basta notar que:

$$\int \phi_i \phi_0^{m+l} \phi_1^{2n-m-l} \phi_j dx = \frac{1}{2^n} \int \phi_i (\bar{\phi}_0 + \bar{\phi}_1)^{m+l} (\bar{\phi}_0 - \bar{\phi}_1)^{2n-m-l} \phi_j dx. \quad (C.23)$$

O outro fator  $\frac{1}{2}$  que se origina ao substituírmos  $\phi_i$  e  $\phi_j$  por suas respectivas combinações em termos das funções  $\bar{\phi}_0$  e  $\bar{\phi}_1$  irá cancelar o fator **2** em frente à soma dupla. Tudo isso estaria indicando que os termos oriundos desta soma dupla seriam cada vez menos relevantes conforme avançássemos na ordem  $n$  das séries que vieram das raízes.

Sabendo que todo número complexo é composto de um módulo e de uma fase escrevemos as amplitudes  $\psi_j(t)$  em sua representação polar

$$\psi_j = |\psi_j| e^{i\theta_j} \quad (\text{C.24})$$

para  $j = 0, 1$ .

Dando os mesmos passos da subseção 3.2 a caminho da obtenção das equações dinâmicas para diferença de fase e de população, vamos multiplicar a equação C.21 (C.22) por  $\psi_0^*$  ( $\psi_1^*$ ) e tomar o complexo conjugado da equação resultante.

A subtração da equação original de seu respectivo complexo conjugado resulta na regra do produto de derivadas aplicada à diferenciação do módulo quadrado da componente  $\psi$  em questão. Obtemos então duas equações para as populações:

$$\begin{aligned} \frac{d|\psi_0|^2}{dt} &= -|\psi_0|^2 2\lambda \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \frac{(2n)!}{(2^n n!)^2} \left( \frac{n+1}{2n-1} \right) \left( \frac{\beta}{\lambda} \right)^n \cdot \\ &\cdot \sum_{m=0}^n \sum_{l=0}^n \binom{n}{m} \binom{n}{l} \int \phi_0 \phi_0^{m+l} \phi_1^{2n-m-l} \phi_0 dx |\psi_0|^{m+l} |\psi_1|^{2n-m-l} \\ &\cdot \sin[(m-l)(\theta_1 - \theta_0)] \\ &- |\psi_0| |\psi_1| \{(\mu_1 - \mu_0) \sin(\theta_1 - \theta_0) \\ &+ \lambda \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \frac{(2n)!}{(2^n n!)^2} \left( \frac{n+1}{2n-1} \right) \left( \frac{\beta}{\lambda} \right)^n [(I_{0,n+1} - I_{n+1,0}) \sin(\theta_1 - \theta_0) \\ &+ 2 \sum_{m=0}^n \sum_{l=0}^n \binom{n}{m} \binom{n}{l} \int \phi_1 \phi_0^{m+l} \phi_1^{2n-m-l} \phi_0 dx |\psi_0|^{m+l} |\psi_1|^{2n-m-l} \\ &\cdot \sin[(m-l+1)(\theta_1 - \theta_0)]] \} \quad (\text{C.25}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{d|\psi_1|^2}{dt} &= -|\psi_1|^2 2\lambda \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \frac{(2n)!}{(2^n n!)^2} \left( \frac{n+1}{2n-1} \right) \left( \frac{\beta}{\lambda} \right)^n \cdot \\ &\cdot \sum_{m=0}^n \sum_{l=0}^n \binom{n}{m} \binom{n}{l} \int \phi_1 \phi_0^{m+l} \phi_1^{2n-m-l} \phi_1 dx |\psi_0|^{m+l} |\psi_1|^{2n-m-l} \\ &\cdot \sin[(m-l)(\theta_1 - \theta_0)] \\ &+ |\psi_0| |\psi_1| \{(\mu_1 - \mu_0) \sin(\theta_1 - \theta_0) \\ &+ \lambda \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \frac{(2n)!}{(2^n n!)^2} \left( \frac{n+1}{2n-1} \right) \left( \frac{\beta}{\lambda} \right)^n [(I_{0,n+1} - I_{n+1,0}) \sin(\theta_1 - \theta_0) \\ &- 2 \sum_{m=0}^n \sum_{l=0}^n \binom{n}{m} \binom{n}{l} \int \phi_0 \phi_0^{m+l} \phi_1^{2n-m-l} \phi_1 dx |\psi_0|^{m+l} |\psi_1|^{2n-m-l} \\ &\cdot \sin[(m-l-1)(\theta_1 - \theta_0)]] \} \quad (\text{C.26}) \end{aligned}$$

com as integrais  $I_{nm}$  definidas como

$$I_{nm} \equiv \int \bar{\phi}_0^{2n} \bar{\phi}_1^{2m} dx. \quad (C.27)$$

Por sua vez, a soma da equação original com o seu respectivo complexo conjugado, juntamente com a regra da diferenciação de frações de funções, fornece as seguintes duas equações para a dinâmica de fase das componentes do condensado:

$$\begin{aligned} \frac{d\theta_0}{dt} = & -\frac{\mu_0 + \mu_1}{2} - \frac{\lambda}{2} \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \frac{(2n)!}{(2^n n!)^2} \left( \frac{n+1}{2n-1} \right) \left( \frac{\beta}{\lambda} \right)^n (I_{n+1,0} + I_{0,n+1} \\ & - 2 \sum_{m=0}^n \sum_{l=0}^n \binom{n}{m} \binom{n}{l} \int \phi_0 \phi_0^{m+l} \phi_1^{2n-m-l} \phi_0 dx |\psi_0|^{m+l} |\psi_1|^{2n-m-l} \\ & \quad \cdot \cos[(m-l)(\theta_1 - \theta_0)]) \\ & + \frac{|\psi_1|}{|\psi_0|} \left\{ \frac{\mu_1 - \mu_0}{2} \cos(\theta_1 - \theta_0) \right. \\ & + \frac{\lambda}{2} \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \frac{(2n)!}{(2^n n!)^2} \left( \frac{n+1}{2n-1} \right) \left( \frac{\beta}{\lambda} \right)^n [I_{0,n+1} - I_{n+1,0}] \cos(\theta_1 - \theta_0) \\ & + 2 \sum_{m=0}^n \sum_{l=0}^n \binom{n}{m} \binom{n}{l} \int \phi_1 \phi_0^{m+l} \phi_1^{2n-m-l} \phi_0 dx |\psi_0|^{m+l} |\psi_1|^{2n-m-l} \\ & \quad \left. \cdot \cos[(m-l+1)(\theta_1 - \theta_0)] \right\} \end{aligned} \quad (C.28)$$

$$\begin{aligned} \frac{d\theta_1}{dt} = & -\frac{\mu_0 + \mu_1}{2} - \frac{\lambda}{2} \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \frac{(2n)!}{(2^n n!)^2} \left( \frac{n+1}{2n-1} \right) \left( \frac{\beta}{\lambda} \right)^n (I_{n+1,0} + I_{0,n+1} \\ & - 2 \sum_{m=0}^n \sum_{l=0}^n \binom{n}{m} \binom{n}{l} \int \phi_1 \phi_0^{m+l} \phi_1^{2n-m-l} \phi_1 dx |\psi_0|^{m+l} |\psi_1|^{2n-m-l} \\ & \quad \cdot \cos[(m-l)(\theta_1 - \theta_0)]) \\ & + \frac{|\psi_0|}{|\psi_1|} \left\{ \frac{\mu_1 - \mu_0}{2} \cos(\theta_1 - \theta_0) \right. \\ & + \frac{\lambda}{2} \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \frac{(2n)!}{(2^n n!)^2} \left( \frac{n+1}{2n-1} \right) \left( \frac{\beta}{\lambda} \right)^n [I_{0,n+1} - I_{n+1,0}] \cos(\theta_1 - \theta_0) \\ & + 2 \sum_{m=0}^n \sum_{l=0}^n \binom{n}{m} \binom{n}{l} \int \phi_0 \phi_0^{m+l} \phi_1^{2n-m-l} \phi_1 dx |\psi_0|^{m+l} |\psi_1|^{2n-m-l} \\ & \quad \left. \cdot \cos[(m-l-1)(\theta_1 - \theta_0)] \right\} \end{aligned} \quad (C.29)$$

Nas equações C.25 e C.26 temos a seguinte soma dupla para cada



$n$ :

$$s_i^n \equiv \sum_{m=0}^n \sum_{l=0}^n \binom{n}{m} \binom{n}{l} \int \phi_i \phi_0^{m+l} \phi_1^{2n-m-l} \phi_i dx |\psi_0|^{m+l} |\psi_1|^{2n-m-l} \cdot \sin[(m-l)(\theta_1 - \theta_0)] \quad (\text{C.30})$$

onde  $i = 0$  para a equação C.25 e  $i = 1$  para C.26.

Se nesta soma dupla trocarmos  $m \rightarrow l$  e  $l \rightarrow m$ , que pode ser feito uma vez que os índices de soma são mudos, então notamos que todos os termos permanecem inalterados, exceto o seno. No entanto, após a troca de índices este pode ser reescrito como o seno antes da troca de índices, bastando haver uma troca de sinal, uma vez que a função seno é ímpar. Ora, se a soma inicial é igual ao negativo dela mesma, então ela toda só pode ser nula. Com isso escrevemos:

$$S_i^n = 0 \quad (\text{C.31})$$

Como isso acontece para todo  $n$  em cada  $i$ , concluímos que os primeiros termos das equações C.25 e C.26 são nulos.

Observa-se também a presença do seguinte termo:

$$s_1 \equiv \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \frac{(2n)!}{(2^n n!)^2} \binom{n+1}{2n-1} \left(\frac{\beta}{\lambda}\right)^n (I_{0,n+1} - I_{n+1,0}) \sin(\theta_1 - \theta_0) \quad (\text{C.32})$$

Conhecemos os seguintes resultados:

$$\begin{aligned} \frac{n+1}{2n-1} &= \frac{n-1}{2n-1} + \frac{2}{2n-1} \\ 2 \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \frac{(2n)!}{(2^n n!)^2} \binom{n-1}{2n-1} x^n &= \frac{1}{\sqrt{1+x}} + \sqrt{1+x} - 2 \\ \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \frac{(2n)!}{(2^n n!)^2} \binom{1}{2n-1} x^n &= -\frac{x}{1 + \sqrt{1+x}} \end{aligned}$$

onde o primeiro vem de somar e subtrair 1 no numerador, o segundo vem da soma dada no início destas anotações, equação C.16, e o terceiro foi fornecido diretamente por programa de computador que executa contas analíticas.

Usando estes resultados de somas podemos reescrever  $S_1$  conforme segue:

$$S_1 = \frac{1}{2}(L_1 - L_0) \sin(\theta_1 - \theta_0) \quad (\text{C.33})$$

onde foi definido:

$$L_i = \int \bar{\phi}_i^2 \left[ \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{\beta}{\lambda} \bar{\phi}_i^2}} + \sqrt{1 + \frac{\beta}{\lambda} \bar{\phi}_i^2} - 4 \frac{\beta}{\lambda} \bar{\phi}_i^2 \frac{1}{1 + \sqrt{1 + \frac{\beta}{\lambda} \bar{\phi}_i^2}} \right] dx \quad (\text{C.34})$$

Resta apenas tratar um pouco as seguintes somas duplas nas equações C.25 e C.26:

$$S_2^n = \sum_{m=0}^n \sum_{l=0}^n \binom{n}{m} \binom{n}{l} \int \phi_0 \phi_0^{m+l} \phi_1^{2n-m-l} \phi_1 dx |\psi_0|^{m+l} |\psi_1|^{2n-m-l} \cdot \sin[(m-l+1)(\theta_1 - \theta_0)] \quad (\text{C.35})$$

$$S_3^n = \sum_{m=0}^n \sum_{l=0}^n \binom{n}{m} \binom{n}{l} \int \phi_0 \phi_0^{m+l} \phi_1^{2n-m-l} \phi_1 dx |\psi_0|^{m+l} |\psi_1|^{2n-m-l} \cdot \sin[(m-l-1)(\theta_1 - \theta_0)] \quad (\text{C.36})$$

Notando que uma troca de índices mudos  $m \rightarrow l$  e  $l \rightarrow m$  leva ao resultado

$$S_2^n = -S_3^n \quad (\text{C.37})$$

reescrevemos as equações C.25 e C.26 da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \frac{d|\psi_0|^2}{dt} &= - \left[ (\mu_1 - \mu_0) + \frac{\lambda}{2} (L_1 - L_0) \right] |\psi_0| |\psi_1| \sin(\theta_1 - \theta_0) \\ &\quad - 2\lambda |\psi_0| |\psi_1| \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \frac{(2n)!}{(2^n n!)^2} \left( \frac{n+1}{2n-1} \right) \left( \frac{\beta}{\lambda} \right)^n \\ &\quad \cdot \sum_{m=0}^n \sum_{l=0}^n \binom{n}{m} \binom{n}{l} \int \phi_1 \phi_0^{m+l} \phi_1^{2n-m-l} \phi_0 dx \\ &\quad \cdot |\psi_0|^{m+l} |\psi_1|^{2n-m-l} \sin[(m-l+1)(\theta_1 - \theta_0)] \quad (\text{C.38}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{d|\psi_1|^2}{dt} &= \left[ (\mu_1 - \mu_0) + \frac{\lambda}{2} (L_1 - L_0) \right] |\psi_0| |\psi_1| \sin(\theta_1 - \theta_0) \\ &\quad + 2\lambda |\psi_0| |\psi_1| \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \frac{(2n)!}{(2^n n!)^2} \left( \frac{n+1}{2n-1} \right) \left( \frac{\beta}{\lambda} \right)^n \\ &\quad \cdot \sum_{m=0}^n \sum_{l=0}^n \binom{n}{m} \binom{n}{l} \int \phi_1 \phi_0^{m+l} \phi_1^{2n-m-l} \phi_0 dx \\ &\quad \cdot |\psi_0|^{m+l} |\psi_1|^{2n-m-l} \sin[(m-l+1)(\theta_1 - \theta_0)] \quad (\text{C.39}) \end{aligned}$$

e agora fica evidente a conservação da norma durante a evolução temporal em todas as ordens de aproximação, conforme já era de se esperar

que ocorresse.

Tratemos das dinâmicas de fases, equações C.28 e C.29.

Apenas usando os resultados para as somas que foram obtidos até agora já podemos reescrever as equações das dinâmicas das fases conforme segue:

$$\begin{aligned}
 \frac{d\theta_0}{dt} &= -\frac{\mu_0 + \mu_1}{2} - \frac{\lambda}{4}(L_0 + L_1) + \frac{1}{2} \left[ (\mu_1 - \mu_0) + \frac{\lambda}{2}(L_1 - L_0) \right] \frac{|\psi_1|}{|\psi_0|} \cos(\theta_1 - \theta_0) \\
 &+ \lambda \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \frac{(2n)!}{(2^n n!)^2} \binom{n+1}{2n-1} \left( \frac{\beta}{\lambda} \right)^n \sum_{m=0}^n \sum_{l=0}^n \binom{n}{m} \binom{n}{l} |\psi_0|^{m+l} |\psi_1|^{2n-m-l} \\
 &\cdot \left\{ \int \phi_0 \phi_0^{m+l} \phi_1^{2n-m-l} \phi_0 dx \cos[(m-l)(\theta_1 - \theta_0)] \right. \\
 &\quad \left. + \frac{|\psi_1|}{|\psi_0|} \int \phi_1 \phi_0^{m+l} \phi_1^{2n-m-l} \phi_0 dx \cos[(m-l+1)(\theta_1 - \theta_0)] \right\} \quad (C.40)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \frac{d\theta_1}{dt} &= -\frac{\mu_0 + \mu_1}{2} - \frac{\lambda}{4}(L_0 + L_1) + \frac{1}{2} \left[ (\mu_1 - \mu_0) + \frac{\lambda}{2}(L_1 - L_0) \right] \frac{|\psi_0|}{|\psi_1|} \cos(\theta_1 - \theta_0) \\
 &+ \lambda \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \frac{(2n)!}{(2^n n!)^2} \binom{n+1}{2n-1} \left( \frac{\beta}{\lambda} \right)^n \sum_{m=0}^n \sum_{l=0}^n \binom{n}{m} \binom{n}{l} |\psi_0|^{m+l} |\psi_1|^{2n-m-l} \\
 &\cdot \left\{ \int \phi_1 \phi_0^{m+l} \phi_1^{2n-m-l} \phi_1 dx \cos[(m-l)(\theta_1 - \theta_0)] \right. \\
 &\quad \left. + \frac{|\psi_0|}{|\psi_1|} \int \phi_1 \phi_0^{m+l} \phi_1^{2n-m-l} \phi_0 dx \cos[(m-l+1)(\theta_1 - \theta_0)] \right\} \quad (C.41)
 \end{aligned}$$

Diferentemente das equações nas populações, aqui não vemos conservação da fase total e nem mesmo o seu crescimento contínuo no tempo com velocidade dada pela energia do sistema, o que é estranho, uma vez que esta variável é uma variável cíclica da Hamiltoniana. Assim como outros autores faremos vista grossa a esse fato neste modelo e continuaremos as contas. Mas esse é um problema do modelo que merece atenção.

Fazendo a diferença entre C.39 e C.38 e entre C.41 e C.40 obtemos as seguintes equações para  $\mathbf{z}$  e  $\phi$ :

$$\begin{aligned}
 \frac{dz}{dt} &= \left[ (\mu_1 - \mu_0) + \frac{\lambda}{2}(L_1 - L_0) \right] \sqrt{1 - z^2} \sin \phi \\
 &+ 2\lambda \sqrt{1 - z^2} \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \frac{(2n)!}{(2^n n!)^2} \binom{n+1}{2n-1} \left( \frac{\beta}{2\lambda} \right)^n \\
 &\cdot \sum_{m=0}^n \sum_{l=0}^n \binom{n}{m} \binom{n}{l} \int \phi_1 \phi_0^{m+l} \phi_1^{2n-m-l} \phi_0 dx
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \cdot \sqrt{(1-z)^{m-l}(1+z)^{2n-m-l}} \sin(m-l+1)\phi \quad (C.42) \\
\frac{d\phi}{dt} = & - \left[ (\mu_1 - \mu_0) + \frac{\lambda}{2}(L_1 - L_0) \right] \frac{z}{\sqrt{1-z^2}} \cos \phi \\
& + \lambda \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \frac{(2n)!}{(2^n n!)^2} \left( \frac{n+1}{2n-1} \right) \left( \frac{\beta}{2\lambda} \right)^n \\
& \sum_{m=0}^n \sum_{l=0}^n \binom{n}{m} \binom{n}{l} \sqrt{(1-z)^{m+l}(1+z)^{2n-m-l}} \\
& \cdot \left\{ \left[ \int \phi_1 \phi_0^{m+l} \phi_1^{2n-m-l} \phi_1 dz - \int \phi_0 \phi_0^{m+l} \phi_1^{2n-m-l} \phi_0 dz \right] \cos(m-l)\phi \right. \\
& \left. - 2 \int \phi_1 \phi_0^{m+l} \phi_1^{2n-m-l} \phi_0 dz \frac{z}{\sqrt{1-z^2}} \cos(m-l+1)\phi \right\} \quad (C.43)
\end{aligned}$$

Com o fim de enxugarmos os resultados vamos definir as novas constantes:

$$a_n \equiv (-1)^n \frac{(2n)!}{(2^n n!)^2} \left( \frac{n+1}{2n-1} \right) \left( \frac{\beta}{\lambda} \right)^n \quad (C.44)$$

$$b_{ij}^{nml} \equiv \binom{n}{m} \binom{n}{l} \int \phi_i \phi_0^{m+l} \phi_1^{2n-m-l} \phi_j dx \quad (C.45)$$

$$c \equiv (\mu_1 - \mu_0) + \frac{\lambda}{2}(L_1 - L_0) \quad (C.46)$$

$$d \equiv \frac{\mu_1 + \mu_0}{2} + \frac{\lambda}{4}(L_0 + L_1) \quad (C.47)$$

para reescrever as equações de movimento em  $(z, \phi)$  sob o seguinte aspecto menos ruim de se observar:

$$\begin{aligned}
\frac{dz}{dt} = & c \sqrt{1-z^2} \sin \phi \\
& + 2\lambda \sqrt{1-z^2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{a_n}{2^n} \sum_{m=0}^n \sum_{l=0}^n b_{10}^{nml} \sqrt{(1-z)^{m+l}(1+z)^{2n-m-l}} \sin(m-l+1)\phi \quad (C.48)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{d\phi}{dt} = & -c \frac{z}{\sqrt{1-z^2}} \cos \phi \\
& + \lambda \sum_{n=1}^{\infty} \frac{a_n}{2^n} \sum_{m=0}^n \sum_{l=0}^n \sqrt{(1-z)^{m+l}(1+z)^{2n-m-l}}
\end{aligned}$$

$$\cdot \left[ (b_{11}^{nml} - b_{00}^{nml}) \cos(m-l)\phi - 2b_{10}^{nml} \frac{z}{\sqrt{1-z^2}} \cos(m-l+1)\phi \right] \quad (\text{C.49})$$

Notar que para escrever as equações em  $(z, \phi)$  na forma acima é necessário usar a normalização.

Vamos também reescrever as equações em população e fase, equações C.38-C.41, utilizando as definições das novas constantes  $\mathbf{a}$ ,  $\mathbf{b}$  e  $\mathbf{c}$ :

$$\begin{aligned} \frac{d|\psi_0|^2}{dt} &= -c|\psi_0||\psi_1| \sin(\theta_1 - \theta_0) \\ &\quad - 2\lambda|\psi_0||\psi_1| \sum_{n=1}^{\infty} a_n \sum_{m=0}^n \sum_{l=0}^n b_{10}^{nml} |\psi_0|^{m+l} |\psi_1|^{2n-m-l} \\ &\quad \cdot \sin[(m-l+1)(\theta_1 - \theta_0)] \end{aligned} \quad (\text{C.50})$$

$$\begin{aligned} \frac{d|\psi_1|^2}{dt} &= c|\psi_0||\psi_1| \sin(\theta_1 - \theta_0) \\ &\quad + 2\lambda|\psi_0||\psi_1| \sum_{n=1}^{\infty} a_n \sum_{m=0}^n \sum_{l=0}^n b_{10}^{nml} |\psi_0|^{m+l} |\psi_1|^{2n-m-l} \\ &\quad \cdot \sin[(m-l+1)(\theta_1 - \theta_0)] \end{aligned} \quad (\text{C.51})$$

$$\begin{aligned} \frac{d\theta_0}{dt} &= -d + \frac{1}{2}c \frac{|\psi_1|}{|\psi_0|} \cos(\theta_1 - \theta_0) \\ &\quad + \lambda \sum_{n=1}^{\infty} a_n \sum_{m=0}^n \sum_{l=0}^n |\psi_0|^{m+l} |\psi_1|^{2n-m-l} \\ &\quad \cdot \left\{ b_{00}^{nml} \cos[(m-l)(\theta_1 - \theta_0)] \right. \\ &\quad \left. + b_{10}^{nml} \frac{|\psi_1|}{|\psi_0|} \cos[(m-l+1)(\theta_1 - \theta_0)] \right\} \end{aligned} \quad (\text{C.52})$$

$$\begin{aligned} \frac{d\theta_1}{dt} &= -d + \frac{1}{2}c \frac{|\psi_0|}{|\psi_1|} \cos(\theta_1 - \theta_0) \\ &\quad + \lambda \sum_{n=1}^{\infty} a_n \sum_{m=0}^n \sum_{l=0}^n |\psi_0|^{m+l} |\psi_1|^{2n-m-l} \\ &\quad \cdot \left\{ b_{11}^{nml} \cos[(m-l)(\theta_1 - \theta_0)] \right. \\ &\quad \left. + b_{10}^{nml} \frac{|\psi_0|}{|\psi_1|} \cos[(m-l+1)(\theta_1 - \theta_0)] \right\} \end{aligned} \quad (\text{C.53})$$

lembrando que *aqui ainda não foi usada a condição de normalização*<sup>1</sup>.

Ao truncarmos estas equações em  $\mathbf{n} = \mathbf{1}$  reobtemos as equações apresentadas pelo Ananikian em [57] já com uma correção no coeficiente da Hamiltoniana responsável pelas oscilações Josephson. As novas

---

<sup>1</sup>O uso ou não da condição de normalização é relevante para evidenciar posteriormente a presença da variável soma de populações na hamiltoniana, cuja variável conjugada é a soma de fases.

equações são:

$$\begin{aligned} \frac{dz}{dt} &= \left[ (\mu_1 - \mu_0) + \frac{\lambda}{2}(L_1 - L_0) - \frac{\beta}{2}(I_{20} - I_{02}) \right] \sqrt{1 - z^2} \sin \phi \\ &\quad - \frac{\beta}{4}(I_{20} + I_{02} - 2I_{11})(1 - z^2) \sin 2\phi \\ \frac{d\phi}{dt} &= -\frac{\beta}{4}(10I_{11} - I_{20} - I_{02})z \\ &\quad - \left[ (\mu_1 - \mu_0) + \frac{\lambda}{2}(L_1 - L_0) - \frac{\beta}{2}(I_{20} - I_{02}) \right] \frac{z}{\sqrt{1 - z^2}} \cos \phi \\ &\quad + \frac{\beta}{4}(I_{20} + I_{02} - 2I_{11})z \cos 2\phi \end{aligned}$$

que quando aproximamos as integrais  $L_i$  de suas expansões até  $n = 1$  reobtemos exatamente as equações do Ananikian. Notar que os coeficientes de autoarmadilhamento não recebem correção nesta ordem de aproximação. Um gráfico comparativo da dependência do coeficiente de oscilação Josephson com a não linearidade, do Ananikian e aqui apresentado, está na figura 19.

Vamos continuar tentando simplificar as equações de movimento em população e fase, equações C.50-C.53.

Usando as equações C.35 a C.37 junto com as identidades trigonométricas do seno da soma e da diferença de arcos podemos escrever:

$$s_2^n = \sin(\theta_1 - \theta_0) \sum_{m=0}^n \sum_{l=0}^n b_{10}^{nml} |\psi_0|^{m+l} |\psi_1|^{2n-m-l} \cos [(m-l)(\theta_1 - \theta_0)] \quad (C.54)$$

Levando C.54 em C.50 e C.51 podemos reescrever estas equações na população conforme segue:

$$\begin{aligned} \frac{d|\psi_0|^2}{dt} &= -|\psi_0||\psi_1| \sin(\theta_1 - \theta_0) \\ &\quad \left\{ c + 2\lambda \sum_{n=1}^{\infty} a_n \sum_{m=0}^n \sum_{l=0}^n b_{10}^{nml} |\psi_0|^{m+l} |\psi_1|^{2n-m-l} \right. \\ &\quad \left. \cdot \cos [(m-l)(\theta_1 - \theta_0)] \right\} \end{aligned} \quad (C.55)$$

$$\begin{aligned} \frac{d|\psi_1|^2}{dt} &= |\psi_0||\psi_1| \sin(\theta_1 - \theta_0) \\ &\quad \left\{ c + 2\lambda \sum_{n=1}^{\infty} a_n \sum_{m=0}^n \sum_{l=0}^n b_{10}^{nml} |\psi_0|^{m+l} |\psi_1|^{2n-m-l} \right. \\ &\quad \left. \cdot \cos [(m-l)(\theta_1 - \theta_0)] \right\} \end{aligned} \quad (C.56)$$

cuja elegância reside na simetria dos termos da soma dupla em relação aos índices de soma.

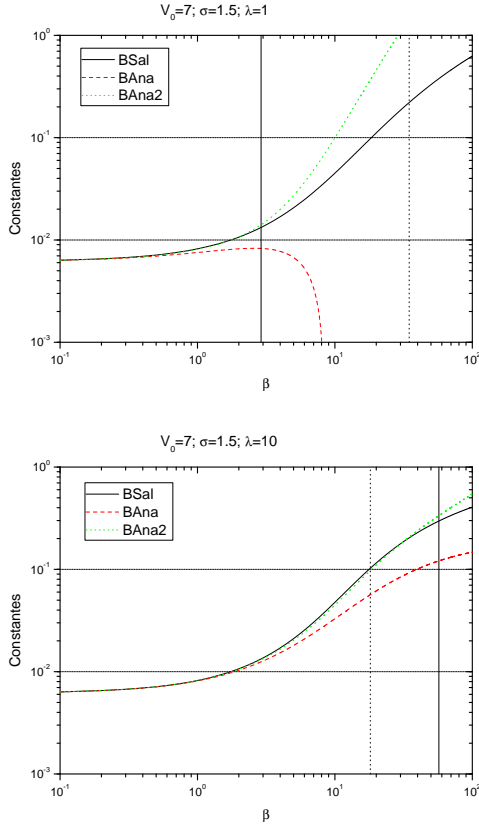


Figura 19: Comparação entre os valores da constante  $B$  oriundos dos modelos da EGP unidimensional e da ENPS, conforme obtido no texto. A linha sólida (preta) indica a variação do coeficiente  $B$  da Hamiltoniana de dois modos conforme dada pela ENPS. As linhas tracejada (vermelha) e pontilhada (verde) indicam o valor da mesma constante em primeira e segunda ordem de aproximação das raízes nas integrais  $L_i$ , respectivamente. A primeira ordem corresponde à constante  $B$  do Ananikian para a EGP unidimensional e a segunda ordem leva em conta a primeira correção a essa constante segundo o modelo de EGP unidimensional dado pelo Salasnich. As linhas verticais indicam: (pontilhada) o valor de  $\beta$  para o qual temos  $\mu_0 = V_0$ ; (sólida) o valor de  $\beta$  a partir do qual o critério de expansão das séries nas raízes da ENPS deixa de ser obedecido (onde  $\frac{\partial}{\partial \lambda} |f|^2 > 1$  para algum  $x$  do domínio de  $f$ ).

Igualmente, no tratamento das equações dinâmicas para as fases (C.52 e C.53) podemos definir as seguintes somas duplas:

$$C_2^n \equiv \sum_{m=0}^n \sum_{l=0}^n b_{10}^{nml} |\psi_0|^{m+l} |\psi_1|^{2n-m-l} \cos [(m-l+1)(\theta_1 - \theta_0)]$$

$$C_3^n \equiv \sum_{m=0}^n \sum_{l=0}^n b_{10}^{nml} |\psi_0|^{m+l} |\psi_1|^{2n-m-l} \cos [(m-l-1)(\theta_1 - \theta_0)]$$

Ora, dada a paridade da função cosseno basta fazer um intercâmbio de índices mudos de soma, usar que  $b_{ij}^{nml} = b_{ij}^{nlm}$  e então vemos que

$$C_2^n = C_3^n \quad (\text{C.57})$$

No entanto, se somarmos  $C_2^n$  e  $C_3^n$  e usarmos as identidades trigonométricas do cosseno da soma e da diferença de arcos, podemos reescrever  $C_2^n$  como:

$$C_2^n = \cos(\theta_1 - \theta_0) \sum_{m=0}^n \sum_{l=0}^n b_{10}^{nml} |\psi_0|^{m+l} |\psi_1|^{2n-m-l} \cos [(m-l)(\theta_1 - \theta_0)] \quad (\text{C.58})$$

Levando o resultado acima para  $C_2^n$  nas equações para dinâmica de fases, equações C.52 e C.53, reescrevemos estas conforme segue:

$$\begin{aligned} \frac{d\theta_0}{dt} &= -d + \lambda \sum_{n=1}^{\infty} a_n \sum_{m=0}^n \sum_{l=0}^n b_{00}^{nml} |\psi_0|^{m+l} |\psi_1|^{2n-m-l} \cos [(m-l)(\theta_1 - \theta_0)] \\ &+ \frac{1}{2} \frac{|\psi_1|}{|\psi_0|} \cos(\theta_1 - \theta_0) \left\{ c + 2\lambda \sum_{n=1}^{\infty} a_n \sum_{m=0}^n \sum_{l=0}^n b_{10}^{nml} |\psi_0|^{m+l} |\psi_1|^{2n-m-l} \right. \\ &\quad \cdot \cos [(m-l)(\theta_1 - \theta_0)] \left. \right\} \end{aligned} \quad (\text{C.59})$$

$$\begin{aligned} \frac{d\theta_1}{dt} &= -d + \lambda \sum_{n=1}^{\infty} a_n \sum_{m=0}^n \sum_{l=0}^n b_{11}^{nml} |\psi_0|^{m+l} |\psi_1|^{2n-m-l} \cos [(m-l)(\theta_1 - \theta_0)] \\ &+ \frac{1}{2} \frac{|\psi_0|}{|\psi_1|} \cos(\theta_1 - \theta_0) \left\{ c + 2\lambda \sum_{n=1}^{\infty} a_n \sum_{m=0}^n \sum_{l=0}^n b_{10}^{nml} |\psi_0|^{m+l} |\psi_1|^{2n-m-l} \right. \\ &\quad \cdot \cos [(m-l)(\theta_1 - \theta_0)] \left. \right\} \end{aligned} \quad (\text{C.60})$$

Com isso o novo sistema de equações de movimento, um pouco melhorado, é reescrito (equações C.55, C.56, C.59 e C.60):

$$\frac{d|\psi_0|^2}{dt} = -|\psi_0||\psi_1| \sin(\theta_1 - \theta_0)$$



$$\cdot \left\{ c + 2\lambda \sum_{n=1}^{\infty} a_n \sum_{m=0}^n \sum_{l=0}^n b_{10}^{n,ml} |\psi_0|^{m+l} |\psi_1|^{2n-m-l} \cos [(m-l)(\theta_1 - \theta_0)] \right\} \quad (\text{C.61})$$

$$\frac{d|\psi_1|^2}{dt} = |\psi_0||\psi_1| \sin(\theta_1 - \theta_0) \cdot \left\{ c + 2\lambda \sum_{n=1}^{\infty} a_n \sum_{m=0}^n \sum_{l=0}^n b_{10}^{n,ml} |\psi_0|^{m+l} |\psi_1|^{2n-m-l} \cos [(m-l)(\theta_1 - \theta_0)] \right\} \quad (\text{C.62})$$

$$\begin{aligned} \frac{d\theta_0}{dt} &= -d + \lambda \sum_{n=1}^{\infty} a_n \sum_{m=0}^n \sum_{l=0}^n b_{00}^{n,ml} |\psi_0|^{m+l} |\psi_1|^{2n-m-l} \cos [(m-l)(\theta_1 - \theta_0)] \\ &\quad + \frac{1}{2} \frac{|\psi_1|}{|\psi_0|} \cos(\theta_1 - \theta_0) \\ &\quad \cdot \left\{ c + 2\lambda \sum_{n=1}^{\infty} a_n \sum_{m=0}^n \sum_{l=0}^n b_{10}^{n,ml} |\psi_0|^{m+l} |\psi_1|^{2n-m-l} \cos [(m-l)(\theta_1 - \theta_0)] \right\} \end{aligned} \quad (\text{C.63})$$

$$\begin{aligned} \frac{d\theta_1}{dt} &= -d + \lambda \sum_{n=1}^{\infty} a_n \sum_{m=0}^n \sum_{l=0}^n b_{11}^{n,ml} |\psi_0|^{m+l} |\psi_1|^{2n-m-l} \cos [(m-l)(\theta_1 - \theta_0)] \\ &\quad + \frac{1}{2} \frac{|\psi_0|}{|\psi_1|} \cos(\theta_1 - \theta_0) \\ &\quad \cdot \left\{ c + 2\lambda \sum_{n=1}^{\infty} a_n \sum_{m=0}^n \sum_{l=0}^n b_{10}^{n,ml} |\psi_0|^{m+l} |\psi_1|^{2n-m-l} \cos [(m-l)(\theta_1 - \theta_0)] \right\} \end{aligned} \quad (\text{C.64})$$

Como última simplificação, se agruparmos nas somas duplas os termos com mesma frequência em cossenos reescrevemos as equações acima conforme segue:

$$\begin{aligned} \frac{d|\psi_0|^2}{dt} &= -|\psi_0||\psi_1| \sin(\theta_1 - \theta_0) \left\{ c + 2\lambda \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{l=0}^n a_n b_{10}^{n,l} |\psi_0|^{2l} |\psi_1|^{2n-2l} \right. \\ &\quad + 4\lambda \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{l=0}^n a_{n+m} b_{10}^{n+m,l,m+l} |\psi_0|^{2l+m} |\psi_1|^{2n+m-2l} \\ &\quad \cdot \cos [m(\theta_1 - \theta_0)] \left. \right\} \end{aligned} \quad (\text{C.65})$$

$$\begin{aligned} \frac{d|\psi_1|^2}{dt} &= |\psi_0||\psi_1| \sin(\theta_1 - \theta_0) \left\{ c + 2\lambda \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{l=0}^n a_n b_{10}^{n,l} |\psi_0|^{2l} |\psi_1|^{2n-2l} \right. \\ &\quad + 4\lambda \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{l=0}^n a_{n+m} b_{10}^{n+m,l,m+l} |\psi_0|^{2l+m} |\psi_1|^{2n+m-2l} \\ &\quad \cdot \cos [m(\theta_1 - \theta_0)] \left. \right\} \end{aligned} \quad (\text{C.66})$$

$$\begin{aligned}
\frac{d\theta_0}{dt} &= -d + \lambda \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{l=0}^n a_n b_{00}^{nll} |\psi_0|^{2l} |\psi_1|^{2n-2l} \\
&+ 2\lambda \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{l=0}^n a_{n+m} b_{00}^{n+m,l,m+l} |\psi_0|^{2l+m} |\psi_1|^{2n+m-2l} \cos [m(\theta_1 - \theta_0)] \\
&+ \frac{1}{2} \frac{|\psi_1|}{|\psi_0|} \cos(\theta_1 - \theta_0) \left\{ c + 2\lambda \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{l=0}^n a_n b_{10}^{nll} |\psi_0|^{2l} |\psi_1|^{2n-2l} \right. \\
&+ 4\lambda \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{l=0}^n a_{n+m} b_{10}^{n+m,l,m+l} |\psi_0|^{2l+m} |\psi_1|^{2n+m-2l} \cos [m(\theta_1 - \theta_0)] \left. \right\} \\
&\hspace{15em} (C.67)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{d\theta_1}{dt} &= -d + \lambda \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{l=0}^n a_n b_{11}^{nll} |\psi_0|^{2l} |\psi_1|^{2n-2l} \\
&+ 2\lambda \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{l=0}^n a_{n+m} b_{11}^{n+m,l,m+l} |\psi_0|^{2l+m} |\psi_1|^{2n+m-2l} \cos [m(\theta_1 - \theta_0)] \\
&+ \frac{1}{2} \frac{|\psi_0|}{|\psi_1|} \cos(\theta_1 - \theta_0) \left\{ c + 2\lambda \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{l=0}^n a_n b_{10}^{nll} |\psi_0|^{2l} |\psi_1|^{2n-2l} \right. \\
&+ 4\lambda \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{l=0}^n a_{n+m} b_{10}^{n+m,l,m+l} |\psi_0|^{2l+m} |\psi_1|^{2n+m-2l} \cos [m(\theta_1 - \theta_0)] \left. \right\} \\
&\hspace{15em} (C.68)
\end{aligned}$$

Embora esta última forma apresente os cossenos agrupados, por ser mais compacta ainda preferiremos a forma dada pelas equações C.61, C.62, C.63 e C.64, lembrando que ainda não foi usada a condição de normalização em nenhuma destas equações.

Ainda não obtivemos uma forma fechada da hamiltoniana com todos os termos oriundos das séries infinitas, a dificuldade residindo no agrupamento de integrais iguais disfarçadas em coeficientes  $\mathbf{b}$  distintos. Este trabalho está em desenvolvimento e ainda carece de análise mais detalhada de relevância.

A título de curiosidade apresentam-se as hamiltonianas de ordem  $\mathbf{0}$ , ordem  $\mathbf{1}$  e ordem  $\mathbf{2}$  dadas em termos das variáveis  $\mathbf{n}_i$ ,  $i = \mathbf{0}, \mathbf{1}$ , definidas como

$$\mathbf{n}_i(t) = |\psi_i(t)|^2. \quad (C.69)$$

As equações de movimento são reobtidas por meio variações parciais

das Hamiltonianas conforme as relações

$$\frac{d\theta_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial n_i} \quad \frac{dn_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial \theta_i}. \quad (\text{C.70})$$

Hamiltoniana de ordem 0:

$$H_0(n_0, n_1, \theta_0, \theta_1) = -d(n_0 + n_1) + c\sqrt{n_0 n_1} \cos(\theta_1 - \theta_0) \quad (\text{C.71})$$

Hamiltoniana de ordem 1:

$$\begin{aligned} H_1(n_0, n_1, \theta_0, \theta_1) = & -d(n_0 + n_1) + \frac{1}{2}\lambda_{a_1} B_{10}(n_0^2 + n_1^2) + 2\lambda_{a_1} B_{12} n_0 n_1 \\ & + c\sqrt{n_0 n_1} \cos(\theta_1 - \theta_0) + 2\lambda_{a_1} B_{11}(n_0 + n_1) \sqrt{n_0 n_1} \cos(\theta_1 - \theta_0) \\ & + \lambda_{a_1} B_{12} n_0 n_1 \cos 2(\theta_1 - \theta_0) \end{aligned} \quad (\text{C.72})$$

onde foram definidas as integrais

$$B_{nj} \equiv \int \phi_0^{2n+2-j} \phi_1^j dx. \quad (\text{C.73})$$

Hamiltoniana de ordem 2:

$$\begin{aligned} H_2(n_0, n_1, \theta_0, \theta_1) = & -d(n_0 + n_1) + \frac{1}{2}\lambda_{a_1} B_{10}(n_0^2 + n_1^2) + 2\lambda_{a_1} B_{12} n_0 n_1 \\ & + \frac{1}{3}\lambda_{a_2} B_{20}(n_0^3 + n_1^3) + 3\lambda_{a_2} B_{22} n_0 n_1 (n_0 + n_1) \\ & + c\sqrt{n_0 n_1} \cos(\theta_1 - \theta_0) + 2\lambda_{a_1} B_{11}(n_0 + n_1) \sqrt{n_0 n_1} \cos(\theta_1 - \theta_0) \\ & + 2\lambda_{a_2} B_{21}(n_0^2 + n_1^2) \sqrt{n_0 n_1} \cos(\theta_1 - \theta_0) \\ & + 6\lambda_{a_2} B_{23} n_0 n_1 \sqrt{n_0 n_1} \cos(\theta_1 - \theta_0) \\ & + \lambda_{a_1} B_{12} n_0 n_1 \cos 2(\theta_1 - \theta_0) + 2\lambda_{a_2} B_{22} n_0 n_1 (n_0 + n_1) \cos 2(\theta_1 - \theta_0) \\ & + \frac{2}{3}\lambda_{a_2} B_{23} n_0 n_1 \sqrt{n_0 n_1} \cos 3(\theta_1 - \theta_0). \end{aligned} \quad (\text{C.74})$$

## C.2 CASO 2: $\frac{\beta}{\lambda} |F|^2 \gg 1$

Neste caso não convém realizar a expansão das raízes do termo não linear porque desejamos estudar os efeitos de não linearidade grande sobre o espaço de fases de um modelo de dois modos. A expansão das raízes em  $|f|$  faria com que a função ficasse no denominador da variável de expansão e sabemos que a função tende a zero no infinito. Ora, se o denominador tende a zero então a fração diverge, e uma vez que isso ocorra a expansão não será válida.

Apenas para tornar evidente o dito acima, notemos que o termo não linear da equação C.1 pode ser reescrito como:

$$\beta \frac{|f|^2}{\sqrt{1 + \frac{\beta}{\lambda} |f|^2}} f + \frac{\lambda}{2} \left( \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{\beta}{\lambda} |f|^2}} + \sqrt{1 + \frac{\beta}{\lambda} |f|^2} \right) f = \left( 1 + \frac{3}{2} \frac{\beta}{\lambda} |f|^2 \right) \frac{\lambda f}{\sqrt{1 + \frac{\beta}{\lambda} |f|^2}} \quad (\text{C.75})$$

e agora notemos a seguinte série, onde  $|\alpha| \gg 1$ :

$$\frac{1 + \frac{3}{2}\alpha}{\sqrt{1 + \alpha}} = \sqrt{\alpha} \left[ \frac{3}{2} + \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \frac{(2n)!}{(2^n n!)^2} \left( \frac{2n-3}{2n-1} \right) \left( \frac{1}{\alpha} \right)^n \right] \quad (\text{C.76})$$

Tendo observado este fato a respeito da expansão das raízes, cabe observar também que um tratamento deste caso necessitaria de uma nova divisão em dois casos: uma semelhante ao caso 1 que já estudamos (este seria por estar  $\mathbf{f} \rightarrow \mathbf{0}$ ) e outra onde  $\mathbf{f}$  não tende a zero e é o caso em estudo.

Com isso vamos simplificar todo o trabalho e simplesmente desprezar o fator 1 da raiz frente a  $\frac{\beta}{\lambda} |\mathbf{f}|^2$ , ou seja, vamos considerar somente o primeiro termo da expansão, o de ordem 0.

Fazendo isso escrevemos a equação 3.20 conforme segue:

$$i \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial t} = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2 \mathbf{f}}{\partial x^2} + \mathbf{V} \mathbf{f} + \frac{3}{2} \sqrt{\lambda \beta} |\mathbf{f}| \mathbf{f} \quad (\text{C.77})$$

que é a equação (10) do Salasnich [55], adimensionalizada, quando ele considera o mesmo caso considerado aqui. Para encontrar esta equação também desprezamos uma constante que carregaria o sinal de  $\mathbf{f}$  ( $\frac{\lambda}{2} \sqrt{\frac{\lambda}{\beta}} \frac{\mathbf{f}}{|\mathbf{f}|}$ ). Uma constante na derivada temporal de  $\mathbf{f}$  quando integrada resultaria em um termo proporcional a um tempo complexo, devido ao  $i$  em frente à derivada temporal, cujo significado seria o de uma fase na função de onda, ou seja, corresponderia a um deslocamento da origem da contagem da energia.

Aqui cabe notar como o espaço de fases de um modelo de dois modos aplicado a esta equação irá diferir do espaço de fases do modelo de dois modos aplicado à equação de Gross-Pitaevskii unidimensional. Faremos a dedução do espaço de fases da equação acima.

Usando o mesmo modelo de dois modos do caso 1, estudado anteriormente, onde agora temos as funções  $\bar{\phi}_i$  satisfazendo:

$$-\frac{1}{2} \frac{d^2 \bar{\phi}_i}{dx^2} + \mathbf{V} \bar{\phi}_i + \frac{3}{2} \sqrt{\lambda \beta} |\bar{\phi}_i| \bar{\phi}_i = \mu_i \bar{\phi}_i \quad (\text{C.78})$$

para  $i = 0, 1$ , e levando na equação que desejamos deduzir o espaço de fases, equação C.77, obtemos:

$$\begin{aligned} i\phi_0 \frac{d\psi_0}{dt} + i\phi_1 \frac{d\psi_1}{dt} &= \frac{\psi_0}{\sqrt{2}} \left( \mu_0 \bar{\phi}_0 - \frac{3}{2} \sqrt{\lambda\beta} |\bar{\phi}_0| \bar{\phi}_0 + \mu_1 \bar{\phi}_1 - \frac{3}{2} \sqrt{\lambda\beta} |\bar{\phi}_1| \bar{\phi}_1 \right) \\ &\quad + \frac{\psi_1}{\sqrt{2}} \left( \mu_0 \bar{\phi}_0 - \frac{3}{2} \sqrt{\lambda\beta} |\bar{\phi}_0| \bar{\phi}_0 - \mu_1 \bar{\phi}_1 + \frac{3}{2} \sqrt{\lambda\beta} |\bar{\phi}_1| \bar{\phi}_1 \right) \\ &\quad + \frac{3}{2} \sqrt{\lambda\beta} |\psi_0 \phi_0 + \psi_1 \phi_1| (\psi_0 \phi_0 + \psi_1 \phi_1). \end{aligned}$$

Tomando o produto da equação acima por  $\phi_0$  ( $\phi_1$ ) e depois integrando obtemos:

$$\begin{aligned} i \frac{d\psi_0}{dt} &= \psi_0 \left[ \frac{\mu_0 + \mu_1}{2} - \frac{3}{4} \sqrt{\lambda\beta} (J_0 + J_1) \right] \\ &\quad - \psi_1 \left[ \frac{\mu_1 - \mu_0}{2} + \frac{3}{4} \sqrt{\lambda\beta} (J_0 - J_1) \right] \\ &\quad + \frac{3}{2} \sqrt{\lambda\beta} \int \phi_0 |\psi_0 \phi_0 + \psi_1 \phi_1| (\psi_0 \phi_0 + \psi_1 \phi_1) dx \\ i \frac{d\psi_1}{dt} &= \psi_1 \left[ \frac{\mu_0 + \mu_1}{2} - \frac{3}{4} \sqrt{\lambda\beta} (J_0 + J_1) \right] \\ &\quad - \psi_0 \left[ \frac{\mu_1 - \mu_0}{2} + \frac{3}{4} \sqrt{\lambda\beta} (J_0 - J_1) \right] \\ &\quad + \frac{3}{2} \sqrt{\lambda\beta} \int \phi_1 |\psi_0 \phi_0 + \psi_1 \phi_1| (\psi_0 \phi_0 + \psi_1 \phi_1) dx \end{aligned}$$

onde definimos as integrais:

$$J_i \equiv \int \bar{\phi}_i |\bar{\phi}_i| \bar{\phi}_i dx \quad (\text{C.79})$$

para  $i = 0, 1$ .

Após trabalho simples nas últimas integrais de cada uma das equações anteriores obtemos:

$$\begin{aligned} i \frac{d\psi_0}{dt} &= \psi_0 \left[ \frac{\mu_0 + \mu_1}{2} \right. \\ &\quad \left. - \frac{3}{4} \sqrt{\lambda\beta} \left( J_0 + J_1 - 2 \int \phi_0 |\psi_0 \phi_0 + \psi_1 \phi_1| \phi_0 dx \right) \right] \\ &\quad - \psi_1 \left[ \frac{\mu_1 - \mu_0}{2} \right. \end{aligned}$$

$$+ \frac{3}{4} \sqrt{\lambda\beta} \left( J_0 - J_1 - 2 \int \phi_0 |\psi_0 \phi_0 + \psi_1 \phi_1| \phi_1 dx \right) \Big] \quad (\text{C.80})$$

$$\begin{aligned} i \frac{d\psi_1}{dt} = & \psi_1 \left[ \frac{\mu_0 + \mu_1}{2} \right. \\ & - \frac{3}{4} \sqrt{\lambda\beta} \left( J_0 + J_1 - 2 \int \phi_1 |\psi_0 \phi_0 + \psi_1 \phi_1| \phi_1 dx \right) \Big] \\ & - \psi_0 \left[ \frac{\mu_1 - \mu_0}{2} \right. \\ & \left. + \frac{3}{4} \sqrt{\lambda\beta} \left( J_0 - J_1 - 2 \int \phi_1 |\psi_0 \phi_0 + \psi_1 \phi_1| \phi_0 dx \right) \right] \quad (\text{C.81}) \end{aligned}$$

Em termos de população e fase reescrevemos as equações acima como  $(\psi_i(t) = |\psi_i(t)|e^{i\theta_i(t)})$ , para  $i = 0, 1$ :

$$\begin{aligned} \frac{d|\psi_0|^2}{dt} = & -[\mu_1 - \mu_0 \\ & + \frac{3}{2} \sqrt{\lambda\beta} \left( J_0 - J_1 - 2 \int \phi_0 |\psi_0 \phi_0 + \psi_1 \phi_1| \phi_1 dx \right) \Big] \\ & \cdot |\psi_0| |\psi_1| \sin(\theta_1 - \theta_0) \quad (\text{C.82}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{d|\psi_1|^2}{dt} = & [\mu_1 - \mu_0 \\ & + \frac{3}{2} \sqrt{\lambda\beta} \left( J_0 - J_1 - 2 \int \phi_0 |\psi_0 \phi_0 + \psi_1 \phi_1| \phi_1 dx \right) \Big] \\ & \cdot |\psi_0| |\psi_1| \sin(\theta_1 - \theta_0) \quad (\text{C.83}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{d\theta_0}{dt} = & - \left[ \frac{\mu_1 + \mu_0}{2} \right. \\ & - \frac{3}{4} \sqrt{\lambda\beta} \left( J_0 + J_1 - 2 \int \phi_0 |\psi_0 \phi_0 + \psi_1 \phi_1| \phi_0 dx \right) \Big] \\ & + \frac{1}{2} [\mu_1 - \mu_0 \\ & + \frac{3}{2} \sqrt{\lambda\beta} \left( J_0 - J_1 - 2 \int \phi_0 |\psi_0 \phi_0 + \psi_1 \phi_1| \phi_1 dx \right) \Big] \\ & \cdot \frac{|\psi_1|}{|\psi_0|} \cos(\theta_1 - \theta_0) \quad (\text{C.84}) \end{aligned}$$

$$\frac{d\theta_1}{dt} = - \left[ \frac{\mu_1 + \mu_0}{2} \right.$$

$$\begin{aligned}
& -\frac{3}{4}\sqrt{\lambda\beta} \left( J_0 + J_1 - 2 \int \phi_1 |\psi_0 \phi_0 + \psi_1 \phi_1| \phi_1 dx \right) \\
& + \frac{1}{2} [\mu_1 - \mu_0 \\
& + \frac{3}{2}\sqrt{\lambda\beta} \left( J_0 - J_1 - 2 \int \phi_0 |\psi_0 \phi_0 + \psi_1 \phi_1| \phi_1 dx \right) \\
& \cdot \frac{|\psi_0|}{|\psi_1|} \cos(\theta_1 - \theta_0)
\end{aligned} \tag{C.85}$$

onde ainda não foi utilizada a condição de normalização. Deve-se notar a exata conservação de norma e, mais uma vez, a fase total não conservada.

Utilizando a condição de normalização sobre estas equações e as variáveis conhecidas  $z$  e  $\phi$  de diferença de população e de diferença de fase, podemos obter:

$$\begin{aligned}
\frac{dz}{dt} &= \left[ \mu_1 - \mu_0 + \frac{3}{2}\sqrt{\lambda\beta} \left( J_0 - J_1 - 2 \int \phi_0 |\psi_0 \phi_0 + \psi_1 \phi_1| \phi_1 dx \right) \right] \\
&\cdot \sqrt{1 - z^2} \sin \phi
\end{aligned} \tag{C.86}$$

$$\begin{aligned}
\frac{d\phi}{dt} &= - \left[ \mu_1 - \mu_0 + \frac{3}{2}\sqrt{\lambda\beta} \left( J_0 - J_1 - 2 \int \phi_0 |\psi_0 \phi_0 + \psi_1 \phi_1| \phi_1 dx \right) \right] \\
&\cdot \frac{z}{\sqrt{1 - z^2}} \cos \phi \\
&+ \frac{3}{2}\sqrt{\lambda\beta} \left( \int \phi_0 |\psi_0 \phi_0 + \psi_1 \phi_1| \phi_0 dx - \int \phi_1 |\psi_0 \phi_0 + \psi_1 \phi_1| \phi_1 dx \right)
\end{aligned} \tag{C.87}$$

e vemos que os coeficientes desta dinâmica são *dependentes do tempo*. Apenas para melhor interpretar o resultado vamos escrever a hamiltoniana semiclassica do modelo como se os coeficientes fossem constantes; obtemos:

$$\begin{aligned}
H(z, \phi) &= - \left[ \mu_1 - \mu_0 + \frac{3}{2}\sqrt{\lambda\beta} \left( J_0 - J_1 - 2 \int \phi_0 |\psi_0 \phi_0 + \psi_1 \phi_1| \phi_1 dx \right) \right] \\
&\cdot \sqrt{1 - z^2} \cos \phi \\
&- \frac{3}{2}\sqrt{\lambda\beta} \left( \int \phi_0 |\psi_0 \phi_0 + \psi_1 \phi_1| \phi_0 dx - \int \phi_1 |\psi_0 \phi_0 + \psi_1 \phi_1| \phi_1 dx \right) z.
\end{aligned} \tag{C.88}$$

Apenas por curiosidade, e para finalizar o estudo deste caso, as frequências dos regimes onde  $(z, \phi) \ll 1$  podem ser obtidas analiticamente para os casos 1 e 2, indicados pelos valores de  $\beta$  que validam as

aproximações:

$$\omega_0^2 \stackrel{\beta \rightarrow 0}{=} \mu_1 - \mu_0 + \frac{\lambda}{2}(L_1 - L_0)$$

$$\omega_0^2 \stackrel{\beta \rightarrow \infty}{=} \mu_1 - \mu_0 - \frac{3}{2}\sqrt{\lambda\beta} \left( J_0 + J_1 - \int \bar{\phi}_1 |\bar{\phi}_0| \bar{\phi}_1 dx \right).$$

Um gráfico do módulo destes valores quadráticos como função de  $\beta$  está na figura 20. Seja notada a grande diferença entre as frequências, perto de 2 ordens de grandeza. (Não podemos comparar as duas linhas, sólida (preta) e tracejada (vermelha), para um mesmo valor de  $\beta$  pois cada uma das linhas corresponde a um domínio de validade de interações.) As linhas sólidas são as frequências de plasma para baixos valores de  $\beta$  enquanto que as linhas tracejadas são para grandes valores de  $\beta$ .



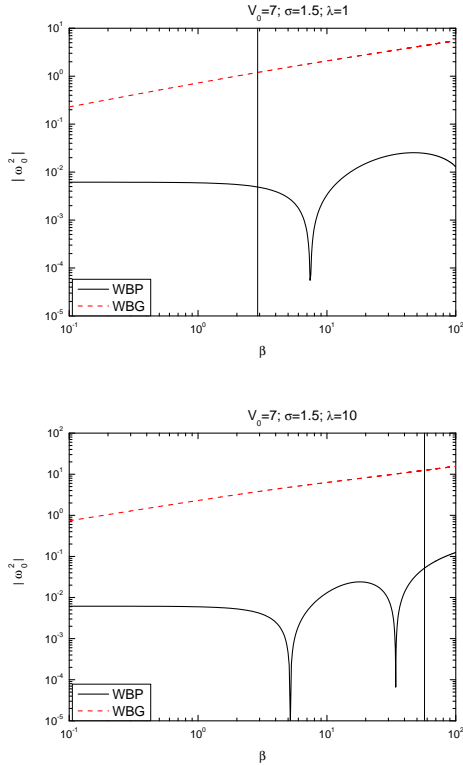


Figura 20: Comparação entre as frequências de plasma da junção Bose-Josephson nos limites de baixa interação ( $\beta \rightarrow 0$ ), representado pela linha sólida (preta) e alta interação ( $\beta \rightarrow \infty$ ), representado pela linha tracejada (vermelha). As integrais em  $L_i$  necessárias para obter a frequência para baixas interações foram aproximadas em segunda ordem nas expansões das raízes e o gráfico é, na realidade, do *módulo do quadrado das frequências*, o que explica os aparentes valores nulos da frequência natural para baixas interações. Estes valores nulos têm origem nas aproximações feitas para as integrais. A linha vertical sólida indica o valor de  $\beta$  a partir do qual o critério de expansão das séries nas raízes da ENPS deixa de ser obedecido (onde  $\frac{\partial}{\lambda} |\mathbf{f}|^2 > 1$  para algum  $\mathbf{x}$  do domínio de  $\mathbf{f}$ .)



## REFERÊNCIAS

- [1] W Pauli, *The connection between spin and statistics*, Physical Review **58**, 716 (1940)
- [2] F Dalfovo, S Giorgini, L P Pitaevskii, S Stringari, *Theory of Bose-Einstein Condensation in trapped gases*, Reviews of Modern Physics **71**, 463 (1999)
- [3] A J Leggett, *Bose-Einstein condensation in the alkali gases: some fundamental concepts*, Review of Modern Physics **73**, 307 (2001)
- [4] M H Anderson, J R Ensher, M R Matthews, C E Wieman, E A Cornell, *Observation of Bose-Einstein condensation in a dilute atomic vapor*, Science **269**, 198 (1995)
- [5] K B Davis, M -O Mewes, M R Andrews, N J van Druten, D S Durfee, D M Kurn, W Ketterle, *Bose-Einstein Condensation in a gas of Sodium atoms*, Physical Review Letters **75**, 3969 (1995)
- [6] C C Bradley, C A Sackett, J J Tollett, R G Hulet, *Evidence of Bose-Einstein Condensation in an atomic gas with attractive interactions*, Physical Review Letters **75**, 1687 (1995)
- [7] S Inouye, M R Andrews, J Stenger, H -J Miesner, D M S-Kurn, W Ketterle, *Observation of Feshbach resonances in a Bose-Einstein condensate*, Nature **392**, 151 (1998)
- [8] J L Roberts, N R Claussen, J P Burke Jr, C H Greene, E A Cornell, C E Wieman, *Resonant Magnetic Field Control of Elastic Scattering in Cold  $^{85}\text{Rb}$* , Physical Review Letters **81**, 5109 (1998)
- [9] S L Cornish, N R Claussen, J L Roberts, E A Cornell, C E Wiemann, *Stable  $^{85}\text{Rb}$  Bose-Einstein Condensates with Widely Tunable Interactions*, Physical Review Letters **85**, 1795 (2000)
- [10] B P Anderson, M A Kasevich, *Macroscopic Quantum Interference from Atomic Tunnel Arrays*, Science **282**, 1686 (1998)
- [11] S Denisov, L M-Molina, S Flach, P Hänggi, *Periodically driven quantum ratchets: Symmetries and resonances*, Physical Review A **75**, 063424 (2007)

- [12] Y V Bludov, V A Brazhnyi, V V Konotop, *Delocalizing transition in one-dimensional condensates in optical lattices due to inhomogeneous interactions*, Physical Review A **76**, 023603 (2007)
- [13] P Carruthers, M M Nieto, *Phase and angle variables in Quantum Mechanics*, Reviews of Modern Physics **40**, 411 (1968)
- [14] B D Josephson, *Possible new effects in superconductive tunnelling*, Physics Letters **1**, 251 (1962)
- [15] P W Anderson, J M Rowell, *Probable observation of the Josephson superconducting tunneling effect*, Physical Review Letters **10**, 230 (1963)
- [16] M Albiez, R Gati, J Fölling, S Hunsmann, M Cristiani, M K Oberthaler, *Direct observation of tunneling and nonlinear self-trapping in a single bosonic Josephson junction*, Physical Review Letters **95**, 010402 (2005)
- [17] R Gati, M K Oberthaler, *A bosonic Josephson junction*, Journal of Physics B: atomic, molecular and optical physics **40**, R61 (2007)
- [18] M R Andrews, C G Townsend, H -J Miesner, D S Durfee, D M Kurn, W Ketterle, *Observation of interference between two Bose condensates*, Science **275**, 637 (1997)
- [19] C J Myatt, E A Burt, R W Ghrist, E A Cornell, C E Wieman, *Production of Two Overlapping Bose-Einstein Condensates by Symmetric Cooling*, Physical Review Letters **78**, 586 (1997)
- [20] G J Milburn, J Corney, E M Wright, D F Walls, *Quantum dynamics of an atomic Bose-Einstein condensate in a double-well potential*, Physical Review A **55**, 4318 (1997)
- [21] A Smerzi, S Fantoni, S Giovanazzi, S R Shenoy, *Quantum coherent atomic tunneling between two trapped Bose-Einstein condensates*, Physical Review Letters **79**, 4950 (1997)
- [22] S Raghavan, A Smerzi, S Fantoni, S R Shenoy, *Coherent oscillations between two weakly coupled Bose-Einstein condensates: Josephson effects,  $\pi$  oscillations, and macroscopic quantum self-trapping*, Physical Review A **59**, 620 (1999)
- [23] K W Mahmud, H Perry, W P Reinhardt, *Quantum phase-space picture of Bose-Einstein condensates in a double well*, Physical Review A **71**, 023615 (2005)

- [24] J Denschlag, J E Simsarian, D L Feder, C W Clark, L A Collins, J Cubizolles, L Deng, E W Hagley, K Helmerson, W P Reinhardt, S L Rolston, B I Schneider, W D Phillips, *Generating solitons by phase engineering of a Bose-Einstein condensate*, Science **287**, 97 (2000)
- [25] T Zibold, E Nicklas, C Gross, M K Oberthaler, *Classical bifurcation at the transition from Rabi to Josephson dynamics*, Physical Review Letters **105**, 204101 (2010)
- [26] M Holthaus, *Towards coherent control of a Bose-Einstein condensate in a double well*, Physical Review A **64**, 011601(R) (2001)
- [27] J C A Barata, D A Cortez, *Time evolution of two-level systems driven by periodic fields*, Physics Letters A **301**, 350 (2002)
- [28] M Plummer, C J Noble, *Non-Hermitian Floquet dynamics of argon atoms at 248 nm*, Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics **36**, L219 (2003)
- [29] G -F Wang, L -B Fu, J Liu, *Periodic modulation effect on self-trapping of two weakly coupled Bose-Einstein condensates*, Physical Review A **73**, 013619 (2006)
- [30] H Deng, W Hai, Q Zhu, *Exact Floquet states of a two-component Bose-Einstein condensate induced by a laser standing wave*, Journal of Physics A: Mathematical and General **39**, 15061 (2006)
- [31] Q Xie, *Nonlinear Floquet solutions of two periodically driven Bose-Einstein condensates*, Physical Review A **76**, 043622 (2007)
- [32] W Hai, C Lee, Q Zhu, *Exact Floquet states of a driven condensate and their stabilities*, Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics **41**, 095301 (2008)
- [33] L M -Molina, E Arévalo, *Accurate control of a Bose-Einstein condensate by managing the atomic interaction*, Physical Review A **82**, 013642 (2010)
- [34] C J Pethick, H Smith, *Bose-Einstein Condensation in dilute gases*, Cambridge University Press, 2002
- [35] W H Wing, *On neutral particle trapping in quasistatic electromagnetic fields*, Progress in Quantum Electronics **8**, 181 (1984)

- [36] A Görlitz, J M Vogels, A E Leanhardt, C Raman, T L Gustavson, J R A -Shaeer, A P Chikkatur, S Gupta, S Inouye, T Rosenband, W Ketterle, *Realization of Bose-Einstein Condensates in Lower Dimensions*, Physical Review Letters **87**, 130402 (2001)
- [37] S Burger, K Bongs, S Dettmer, W Ertmer, K Sengstock, A Sanpera, G V Shlyapnikov, M Lewenstein, *Dark solitons in Bose-Einstein condensates*, Physical Review Letters **83**, 5198 (1999)
- [38] F S Cataliotti, S Burger, C Fort, P Maddaloni, F Minardi, A Trombettoni, A Smerzi, M Inguscio, *Josephson Junction Arrays with Bose-Einstein Condensates*, Science **293**, 843 (2001)
- [39] J H Denschlag, J E Simsarian, H Häffner, C McKenzie, A Browaeys, D Cho, K Helmerson, S L Rolston, W D Phillips, *A Bose-Einstein condensate in an optical lattice*, Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics **35**, 3095 (2002)
- [40] J P Ronzheimer, M Schreiber, S Braun, S S Hodgman, S Langer, I P McCulloch, F H -Meisner, I Bloch, U Schneider, *Expansion Dynamics of Interacting Bosons in Homogeneous Lattices in One and Two Dimensions*, Physical Review Letters **110**, 205301 (2013)
- [41] M Greiner, O Mandel, T Esslinger, T W Hänsch, I Bloch, *Quantum phase transition from a superfluid to a Mott insulator in a gas of ultracold atoms*, Nature **415**, 39 (2002)
- [42] E M Wright, J Arlt, K Dholakia, *Toroidal optical dipole traps for atomic Bose-Einstein condensates using Laguerre-Gaussian beams*, Physical Review A **63**, 013608 (2000)
- [43] T Schumm, S Hofferberth, L M Andersson, S Wildermuth, S Groth, I B -Joseph, J Schmiedmayer, P Krüger, *Matter-wave interferometry in a double well on an atom chip*, Nature Physics **1**, 57 (2005)
- [44] E H Lieb, R Seiringer, J Yngvason, *Bosons in a trap: A rigorous derivation of the Gross-Pitaevskii energy functional*, Physical Review A **61**, 043602 (2000)
- [45] F K Fatemi, K M Jones, P D Lett, *Observation of Optically Induced Feshbach Resonances in Collisions of Cold Atoms*, Physical Review Letters **85**, 4462 (2000)

- [46] A Marte, T Volz, J Schuster, S Dürr, G Rempe, E G M van Kempen, B J Verhaar, *Feshbach Resonances in Rubidium 87: Precision Measurement and Analysis*, Physical Review Letters **89**, 283202 (2002)
- [47] M Theis, G Thalhammer, K Winkler, M Hellwig, G Ruff, R Grimm, J H Denschlag, *Tuning the Scattering Length with an Optically induced Feshbach Resonance*, Physical Review Letters **93**, 123001 (2004)
- [48] M R Matthews, B P Anderson, P C Haljan, D S Hall, C E Wieman, E A Cornell, *Vortices in a Bose-Einstein condensate*, Physical Review Letters **83**, 2498 (1999)
- [49] J R A -Shaer, C Raman, J M Vogels, W Ketterle, *Observation of Vortex Lattices in Bose-Einstein Condensates*, Science **292**, 476 (2001)
- [50] E Sakellari, N P Proukakis, M Leadbeater, C S Adams, *Josephson tunnelling of a phase-imprinted Bose-Einstein condensate in a time-dependent double-well potential*, New Journal of Physics **6**, 42 (2004)
- [51] J Javanainen, *Oscillatory exchange of atoms between traps containing Bose condensates*, Physical Review Letters **57**, 3164 (1986)
- [52] S V Pereverzev, A Loshak, S Backhaus, J C Davis, R E Packard, *Quantum oscillations between two weakly coupled reservoirs of superfluid  $^3\text{He}$* , Nature **388**, 449 (1997)
- [53] A N Salgueiro, A F R T Piza, G B Lemos, R Drumond, M C Nemes, M Weidemüller, *Quantum dynamics of bosons in a double-well potential: Josephson oscillations, self-trapping and ultralong tunneling times*, The European Physical Journal D **44**, 537 (2007)
- [54] P Muruganandam, S K Adhikari, *Fortran programs for the time-dependent Gross-Pitaevskii equation in a fully anisotropic trap*, Computer Physics Communications **180**, 1888 (2009)
- [55] L Salasnich, A Parola, and L Reatto, *Effective wave equations for the dynamics of cigar-shaped and disk-shaped Bose condensates*, Physical Review A **65**, 043614 (2002)
- [56] W Bao, Q Du, *Computing the ground state solution of Bose-Einstein condensates by a normalized gradient flow*, SIAM Journal on Scientific Computing **25**, 1674 (2004)

- [57] D Ananikian, T Bergeman, *Gross-Pitaevskii equation for Bose particles in a double-well potential: two-mode models and beyond*, Physical Review A **73**, 013604 (2006)
- [58] R D'Agosta, B A Malomed, C Presilla, *Stationary solutions of the Gross-Pitaevskii equation with linear counterpart*, Physics Letters A **275**, 424 (2000)
- [59] R D'Agosta, C Presilla, *States without a linear counterpart in Bose-Einstein condensates*, Physical Review A **65**, 043609 (2002)
- [60] K W Mahmud, J N Kutz, W P Reinhardt, *Bose-Einstein condensates in a one-dimensional double square well: analytical solutions of the nonlinear Schrödinger equation*, Physical Review A **66**, 063607 (2002)
- [61] WD Li, *Stationary solutions of Gross-Pitaevskii equations in a double square well*, Physical Review A **74**, 063612 (2006)
- [62] XY Jia, WD Li, H Ezawa, *The symmetry breaking states and bifurcation of Bose-Einstein condensates in a double well*, Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical **40**, 6023 (2007)
- [63] A L Fetter, J D Walecka, *Quantum Theory of Many-Particle Systems*, McGraw-Hill Book Company, 1971
- [64] D J Griffiths, *Introduction to Quantum Mechanics*, 2ed., Pearson Prentice Hall