

Uma abordagem variacional ao estudo de condensados de Bose-Einstein aprisionados por redes ópticas

(A variational approach to the study of Bose-Einstein condensates confined by optical lattices)

V.A. Nascimento¹, C.L. Silva, A.V.D. Lanoa, Valdir A. Nascimento, A.F. Silva, P.C. Cassino

Faculdade de Medicina, Universidade Federal de Mato Grosso do Sul, Campo Grande, MS, Brasil

Recebido em 18/7/2014; Aceito em 16/9/2014; Publicado em 28/10/2014

Nós investigamos as soluções de uma equação hidrodinâmica de campo médio unidimensional utilizando aproximações variacionais. Modelamos analiticamente e comparamos dois condensados de Bose-Einstein que podem ser usados para criar *gaps* sólitons iluminados experimentalmente, um deles aprisionado por uma rede óptica duplamente periódica e o outro aprisionado por uma rede óptica simples. Nesses dois casos não utilizamos um confinamento harmônico adicional. Através da aproximação variacional nós estudamos a possibilidade de que o coeficiente de não linearidade atuando em uma combinação com o potencial da rede óptica duplamente periódica, ou com o potencial de uma rede óptica simples, permite o surgimento de *gaps* sólitons iluminados em uma dimensão. Em ambos os casos, nós analisamos a existência e estabilidade de *gaps* sólitons iluminados usando um ansatz gaussiano. Este artigo pode ser utilizado como um guia de aprendizagem no estudo de átomos frios; incentivando os alunos a realizarem cálculos variacionais para outros tipos de redes ópticas.

Palavras-chave: condensado de Bose-Einstein, redes ópticas, aproximação variacional, *gaps* sólitons iluminados..

We investigate the solutions of a one-dimensional mean-field hydrodynamic equation using a variational approximation (VA). We analytically model and compare two Bose-Einstein condensates which can be used to create bright *gap* solitons experimentally, one of them trapped by a double-periodic optical lattice and the other one trapped by a single-periodic optical lattice. No additional harmonic confinement was employed in both cases. Through the variational approximation, we study the possibility that the nonlinearity coefficient, in a combination with the potential of either the double-periodic or the single-periodic optical lattice, allows the appearance of one dimensional bright *gap* solitons. In both cases, we analyze the existence and stability of bright *gap* solitons using a Gaussian ansatz. This paper can be used as a learning guide in the study of cold atoms. Students are encouraged to perform variational calculations for other types of optical lattices.

Keywords: Bose-Einstein condensate, optical lattices, variational approximation, bright gap solitons..

1. Introdução

Atualmente, o estudo de condensados de Bose-Einstein pode ser abordado em livros-texto de mecânica estatística e em artigos introdutórios [1]. Entretanto, trabalhos que enfatizam a utilização de novas formas de potenciais de aprisionamentos de átomos em condensados são poucos [2]. Diante desse contexto, estudantes de pós-graduação ou graduação em física, engenharia, matemática e química, não possuem ferramentas teóricas adequadas à compreensão de novos fenômenos físicos e químicos que surgem quando envolvem a utilização de potenciais de redes ópticas no aprisionamento de condensados. Ainda que, nas ementas de alguns cursos de ciências exatas, princípios variacionais

e formalismo lagrangeano sejam abordados através da mecânica clássica, não há aplicação voltada aos estudos de condensados. Assim, o artigo proposto servirá como um rigoroso guia adicional à interpretação e à formulação matemáticas de fenômenos físicos que envolvam o processo de gases atômicos aprisionados.

Com base em proposições teóricas e experimentais da inclusão e utilização de redes ópticas no estudo de condensados de Bose Einstein [3], é que se tornou possível reproduzir várias classes de fenômenos fundamentais já observados ou preditos na física de estado sólido [4], física atômica [5] e física molecular [6]. Dentre os fenômenos que merecem destaque temos: a superfluidez; isolantes de Mott; oscilações de Bloch [7] e processos colisionais de sólitons [8].

¹E-mail: aragao60@hotmail.com.

De fato, redes ópticas propiciam controlar propriedades importantes de condensados por meio de sua estrutura periódica, permitindo a existência e estabilidade de excitações não lineares localizadas com potenciais químicos dentro das bandas de *gaps* na presença de interações repulsivas (ou seja, comprimento de espalhamento positivo) [9, 10]. Efeitos não lineares e a formação de sólitons iluminados, também denominados de *gaps* sólitons iluminados, foram estudados em condensados atômicos de ^{7}Li [11] e ^{85}Rb [12]; como também observados em ambas as moléculas de ^{40}K e ^{6}Li [13]. A partir do controle de uma rede óptica, cada sítio da rede passa a ser ocupado por apenas um átomo em seu estado fundamental; dessa forma, condensados revelam-se promissores como registros para computação quântica [14].

Neste trabalho, utilizando aproximação variacional (AV), apresentamos um estudo que explora a possibilidade de que o coeficiente de não linearidade para bósons atuando em combinação com o potencial de uma rede duplamente periódica unidimensional, em um condensado de Bose-Einstein repulsivo sem confinamento harmônico adicional [15, 16], permite o surgimento de *gaps* sólitons iluminados. As mesmas possibilidades para o surgimento de *gaps* sólitons iluminados foram exploradas a partir do coeficiente de não linearidade para bósons na presença de uma rede óptica simples [17]. Estudos numéricos com o propósito de resolver a equação de Gross-Pitaevskii e compará-la com os resultados experimentais têm obtido grande sucesso [15, 17, 18, 19]. No entanto, em uma série de artigos publicados concernentes à utilização de métodos variacionais [2, 20], alguns grupos têm mostrado a sua eficácia na obtenção de vários parâmetros não estudados numericamente ou experimentalmente. Em face do exposto, nós procuraremos por soluções variacionais para as equações hidrodinâmicas de campo médio, ou equação de Gross-Pitaevskii, utilizando um *ansatz* gaussiano $u(x)$ unidimensional.

O trabalho está organizado como segue. Na seção 2 abordaremos os princípios físicos envolvidos na formação de *gaps* sólitons iluminados em sistemas ópticos e em condensados de Bose-Einstein. Na seção 3 nós apresentaremos a equação de Gross-Pitaevskii e procuraremos por *gaps* sólitons iluminados estáveis em 1D por meio da aproximação variacional para dois casos em estudos. Na seção 4 nós temos os resultados obtidos como consequência da aproximação variacional para *gaps* sólitons iluminados em 1D para ambos os casos considerados. A seção 5 consta com a conclusão dos resultados obtidos e algumas sugestões para trabalhos futuros, como também incentivamos ao leitor realizar os cálculos variacionais para outras formas de redes ópticas.

2. Sólitons iluminados ou *gaps* sólitons iluminados

No espaço livre, a relação de dispersão entre a energia e o momento de um sistema linear, tal como elétrons, luz, ou átomos frios, é usualmente contínua. Contudo, em um potencial periódico, *gaps* espectrais aparecem. O termo *gaps* proibidos, oriundo da física de estado sólido, surge com a finalidade de designar regiões espectrais – onde não existe propagação de ondas. Uma exceção é quando a não linearidade permite a localização de ondas dentro de uma banda de *gap* linear, formando *gaps* sólitons iluminados [21].

Em modernos estudos teóricos e experimentais de sólitons, os progressos mais significantes têm sido feitos na área de óptica e, recentemente, em condensados de Bose-Einstein. *Gaps* sólitons temporais foram criados em fibras ópticas. No ramo da óptica não linear temos o surgimento de sólitons escuros em fibras, sólidos iluminados em guias de onda e *gaps* sólitons em redes de Bragg [22]. Em todos os casos citados, o fenômeno responsável pelo surgimento de sólitons é a interação de dispersão cromática (no domínio temporal) – ou difração (sólitons espaciais) de ondas eletromagnéticas e não linearidade cúbica autofocalizada induzida pelo efeito Kerr. No caso dos condensados experimentais com comprimento de espalhamento positivo, ou seja, em um regime repulsivo, os sólitons iluminados são obtidos a partir de uma rede óptica tridimensional ou unidimensional. Uma rede óptica unidimensional origina-se da intersecção de dois feixes de lasers idênticos contrapropagantes com campos elétricos $E_1(x, t)$ e $E_2(x, t)$ [23], nos quais é gerado um padrão de interferência em que os átomos são aprisionados nos nodos e antinodos pela força de dipolo. A Fig. 1 ilustra o processo de interação entre os campos elétricos de dois lasers.

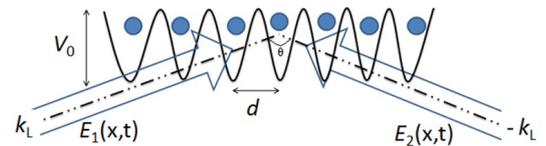


Figura 1 - Rede óptica unidimensional criada pela intersecção de feixes de lasers contrapropagantes, $E_1(x, t)$ e $E_2(x, t)$. O parâmetro V_0 é a profundidade e d o espaçamento da rede, θ refere-se ao ângulo de intersecção dos lasers. Os átomos são aprisionados nos nodos e antinodos pela força de dipolo. Figura adaptada das Refs. [24, 25].

A expressão $E(x, t) = E_0 e^{i(-\omega t + K_L x)}$ representa uma onda que se propaga. Isto pode ser visto, por exemplo, a partir do fato de que os nós da parte real da onda estão localizados nas posições onde $\omega t - k_L x = (n + 1/2)\pi$, com $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$. Portanto, os nós ocorrem sempre que $x = (n + 1/2)\pi k_L + \omega t/k_L$, e, como estes valores de x aumentam à medida que t aumenta, os nós se movem no sentido de x crescente. A intuição nos sugere que, para os mesmos valores de n , deve existir uma onda que se propaga no sentido de x

decrecente, ou seja, apenas com o sinal de $K_L x$ trocado. A conclusão está esboçada na Fig. 1, que mostra a superposição dos dois lasers, na qual se produz uma onda estacionária na forma

$$E(x, t) = E_0 e^{(-i\omega t + iK_L x)} + E_0 e^{(-i\omega t - iK_L x)} = 2E_0 \cos(K_L x) e^{(-i\omega t)}. \quad (1)$$

Para a Eq. (1) podemos escrever $K_L = 2\pi/\lambda$, sendo λ o comprimento de onda do laser e E_0 a amplitude, ω é a frequência do laser. O potencial de dipolo causado pelo momento de dipolo induzido [23] é dado por

$$V_{dip}(x) = \frac{3\pi c^2}{2\omega_0^3} \frac{\Gamma}{\Delta} I(x), \quad (2)$$

onde ω_0 corresponde a frequência de transição atômica no modelo semiclássico, e $\Delta = \omega - \omega_0$ trata-se de *detuning*, ou dessintonia, Γ corresponde à largura de linha natural da transição atômica de um átomo de dois níveis na aproximação semiclássica. Ao inserirmos a Eq. (1) na Eq. (2) e realizarmos algumas substituições como $\cos^2(k_L x)$ por $\sin^2(k_L x)$ e considerarmos $I = 2\varepsilon_0 c |E(x, t)|^2$ que se refere à intensidade do campo de luz, obtemos o potencial de dipolo ao longo da direção x dado por

$$V_{rede}(x) = V_0 \sin^2(k_L x). \quad (3)$$

A Eq. (3) trata-se de um potencial periódico simples unidimensional com periodicidade $d = \lambda/2$ e altura (amplitude) de rede $V_0 = I_{max}/\Delta$, o termo I_{max} representa o máximo de intensidade do campo de luz. Se dois feixes não são colineares conforme vemos na Fig. 1, o potencial periódico ao longo da direção axial x é dado por $V_{rede} = V_0 \sin^2(Kx)$ onde $K = k_L \sin(\theta/2)$, desde que $d = \lambda/[2 \sin(\theta/2)]$ [24]. A Eq. (3) pode tornar-se uma rede com dupla periodicidade, para isso basta ajustarmos alguns parâmetros conforme veremos nas próximas seções.

Potenciais oscilatórios similares ao da Eq. (3) são utilizados na física do estado sólido, basta lembrar que pelo teorema de Bloch esse tipo de potencial é causado pela presença de íons da rede que atuam sobre elétrons em uma determinada posição x , e quando inseridos na equação de Schrödinger linear na ausência de interações entre partículas, produz uma dependência da energia das bandas de Bloch em função do quase-momento, permitindo observarmos as estruturas de bandas de uma rede óptica e os respectivos *gaps* espectrais.

A Eq. (3) quando introduzida na equação de Gross-Pitaevskii, que é uma equação de Schrödinger não linear, devido à interação entre partículas, ou equação de hidrodinâmica de campo médio, permite através de métodos variacionais obter soluções solitônicas. Ou

seja, similar ao que ocorre na física do estado sólido, funções de ondas localizadas tomam a forma de sólitons iluminados e existem dentro de *gaps* proibidos do espectro da banda de *gap* linear, sendo então denominados de *gaps* sólitons iluminados [26]. Os sólitons em condensados de Bose-Einstein surgem devido à presença da rede óptica e dos efeitos não lineares. Uma conceitual introdução sobre este tópico pode ser encontrada na Ref. [27].

3. Aproximação variacional para um gás de bósons em uma dimensão

Nesta seção, nós apresentamos os métodos de obtenção e soluções variacionais de duas lagrangeanas provenientes de uma equação de Gross-Pitaevskii unidimensional. Primeiramente, é necessário considerarmos a equação de Gross-Pitaevskii em uma dimensão para um gás de bósons na sua forma usual escrita como [17, 19, 28]

$$i \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} \psi + V(x) \psi(x, t) + g_{1D} |\psi(x, t)|^2 \psi(x, t), \quad (4)$$

onde para a Eq. (4), o primeiro termo da esquerda representa a dinâmica do sistema, $\nabla^2 = \partial^2/\partial x^2$ é o Laplaciano em 1D (operador energia cinética), $\psi(x, t)$ é a função de onda do condensado de bósons, $V(x)$ é o potencial de aprisionamento externo em 1D, que corresponde ao potencial da rede óptica. Assumiremos em nosso trabalho que o potencial de aprisionamento externo seja independente do tempo e não contém o potencial de aprisionamento harmônico, ou seja, ao longo da direção axial seja fraco (como considerado na Ref. [15]). A Eq. (4) na presença somente do potencial da rede óptica (Eq. (5)) foi adimensionalizada usando o comprimento característico do oscilador harmônico na direção do confinamento $a_L = d/\pi$, periodicidade da rede óptica d , energia $E_L = \hbar^2/m a_L^2$, massa do átomo de ^{87}Rb , tempo $\omega_L^{-1} = \hbar/E_L$. Quantidades físicas como $g_{1D} = 2(a_s/a_L)$ representam a força de interação repulsiva entre dois bósons em 1D (às vezes denominada como coeficiente de não linearidade) caracterizando a não linearidade na equação de Schrödinger, $a_s > 0$ o comprimento de espalhamento da interação repulsiva entre os átomos bosônicos. Parâmetros como o comprimento de espalhamento a_s podem ser controlados experimentalmente por meio da técnica de ressonância de Feshbach [29].

O potencial periódico da rede óptica unidimensional na Eq. (4) é obtido ao reescrevermos a Eq. (3) em função de alguns parâmetros de ajuste, como

$$V(x) = U [\varepsilon \sin^2(x) + (1 - \varepsilon) \sin^2(2x)], \quad (5)$$

onde podemos observar na Eq. (5) que a forma da rede óptica depende dos valores de U e $0 \leq \varepsilon \leq 1$. Ou seja,

se $\varepsilon \neq 0$ ou $\varepsilon \neq 1$, a Eq. (5) descreve uma rede duplamente periódica, neste caso U é definido através da amplitude da rede óptica V_0 e do parâmetro de ajuste ε , ou seja

$$U = 16V_0 \frac{(1 - \varepsilon)}{(4 - 3\varepsilon)^2}. \quad (6)$$

Para ilustrar a discussão precedente, mostramos na Fig. 2(a) a representação de uma rede com dupla periodicidade, considerando $\varepsilon = 0.3$, $V_0 = 5$ na Eq. (5) e $U = 5.82$ para Eq. (6). Ao contrário, quando $\varepsilon = 0$ ou $\varepsilon = 1$, a rede óptica duplamente periódica representada pela Eq. (5) torna-se uma rede simples (Eq. (3)), neste caso U coincide com a amplitude da rede V_0 [17, 28]. A Fig. 2(b) mostra a estrutura de uma rede óptica simples obtida considerando $\varepsilon = 1$, e $V_0 = 5$.

Com base nas considerações feitas a partir da Eq. (5), podemos constatar que existem dois tipos de redes ópticas, conforme os valores adotados para os parâmetros considerados na Eq. (6) (veja Fig. 2). Isso nos propicia, tomando como referência a Eq. (4), obtermos duas lagrangeanas unidimensionais: a primeira para bósons aprisionados por uma rede óptica com dupla periodicidade como explícito na Fig. 2(a), e a segunda para bósons aprisionados por uma rede periódica simples (Fig. 2(b)).

A seguir, nas próximas duas subseções, apresentaremos os cálculos variacionais realizados para obtermos e resolvermos as respectivas lagrangeanas.

3.1. Rede duplamente periódica

Para o primeiro caso em estudo, vamos incluir na Eq. (4) o potencial de aprisionamento da rede óptica duplamente periódica, cuja estrutura está explícita na

Fig. 2(a), ou seja, vamos considerar $\varepsilon = 0.3$, e $V_0 = 5$ (Eq. (5) e Eq. (6)). Na sequência assumiremos que estados estacionários de um condensado são descritos por soluções da Eq. (4) como $\psi(x, t) = e^{-i\mu_D t} u_D(x)$, onde μ_D é o potencial químico e $u_D(x)$ é uma função real sujeita à condição de normalização $\int u_D^2(x) dx = 1$. O subscrito D refere-se à rede óptica duplamente periódica. Dessa forma, diante de tais considerações, reescrevemos a Eq. (4) na forma estacionária contendo uma rede óptica com dupla periodicidade em 1D,

$$\mu_D u_D(x) = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2 u_D(x)}{\partial x^2} + 5.82 [0.3 \sin^2(x) + 0.7 \sin^2(2x)] u_D(x) + g_{1D} |u_D(x)|^2 u_D(x). \quad (7)$$

A obtenção da lagrangeana proveniente da Eq. (7) é dada como segue. Isto é, a Eq. (7) pode ser reescrita como um problema variacional correspondente à mínima ação relacionada com a densidade lagrangeana

$$L_D = -\mu_D |u_D(x)|^2 + |\nabla u_D(x)|^2 + 5.82 [0.3 \sin^2(x) + 0.7 \sin^2(2x)] |u_D(x)|^2 + \frac{g_{1D}}{2} |u_D(x)|^4 + \mu_D. \quad (8)$$

A fim de obtermos uma evolução da função de onda do condensado, nós iremos minimizar L_D através de um conjunto de funções tentativas (*ansatz*). Obviamente, o problema de seleção de funções de onda é trivial em decorrência de o *ansatz* gaussiano ser utilizado em vários estudos de condensados bosônicos e fermiônicos [20, 30, 31], inclusive na Ref. [32] foram deduzidas as equações para quatorze parâmetros da gaussiana. Nós consideraremos como solução variacional para a Eq. (8) o *ansatz* variacional em 1D na forma gaussiana

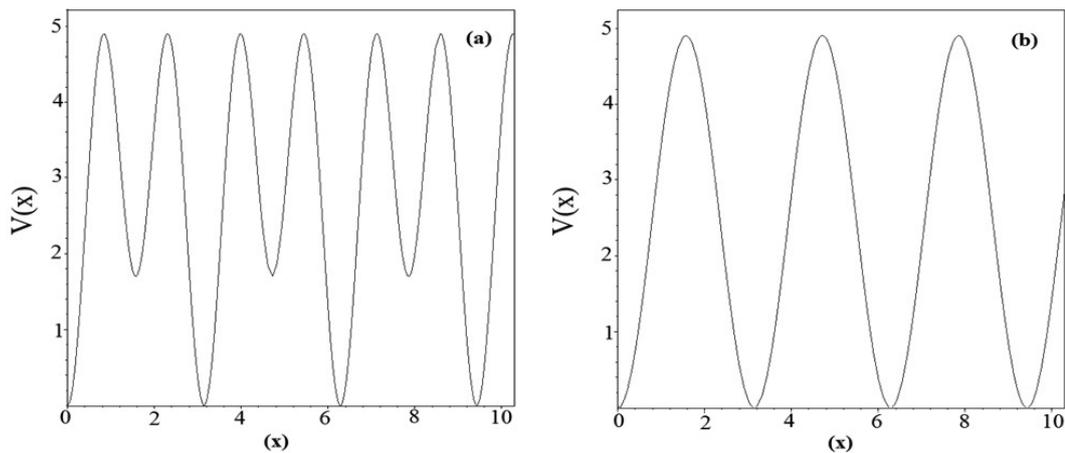


Figura 2 - Estrutura das redes ópticas obtidas com base na Eq. (5), mediante considerações estabelecidas pela Eq. (6). (a) rede óptica com potencial duplamente periódico considerando $\varepsilon = 0.3$, e $V_0 = 5$. (b) rede óptica simples considerando $\varepsilon = 1$, e $V_0 = 5$.

$$u_D(x) = \frac{\sqrt{N}}{\pi^{1/4}V^{1/2}} \exp\left(-\frac{x^2}{2V^2}\right), \quad (9)$$

onde N (norma) e V (largura) são os parâmetros variacionais do sóliton em 1D. Nosso objetivo é encontrar as equações que fornecem a evolução de todos esses parâmetros variacionais. Com esse intuito, nós substituímos a Eq. (9) na Eq. (8) para obtermos a lagrangeana efetiva através da densidade lagrangeana no espaço de coordenadas utilizando a relação

$$L_{D,ef} = \langle L_D \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} [L_D] dx, \quad (10)$$

ou seja, a lagrangeana efetiva obtida da Eq. (10) é escrita como

$$L_{D,ef} = \langle L_D \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} [-\mu_D u_D^2(x) + (\nabla u_D(x))^2 + 5.82 [0.3 \sin^2(x) + 0.7 \sin^2(2x)] u_D^2(x) + \frac{g_{1D}}{2} u_D^4(x)] dx + \mu_D. \quad (11)$$

Após integrarmos a Eq. (11) em relação a x obtemos a lagrangeana efetiva em 1D para bósons aprisionados por uma rede óptica com dupla periodicidade, escrita em termos dos parâmetros da função de onda da gaussiana

$$L_{D,ef} = \mu_D (1 - N) + \frac{N}{4V^2} + \frac{N}{2} (-1.74e^{-V^2} + 1.74) + \frac{N}{2} (-4.07e^{-4V^2} + 4.07) + \frac{N^2}{4\sqrt{2}\sqrt{\pi}V} g_{1D}. \quad (12)$$

A seguir, as equações de evolução dos parâmetros μ_D , N e V explícitos na Eq. (12), são obtidas ao resolvermos as equações de Euler-Lagrange

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L_{D,ef}}{\partial \dot{q}_j} \right) - \frac{\partial L_{D,ef}}{\partial q_j} = 0, \quad (13)$$

onde usaremos a notação $q_j = \{\mu_D, N, V\}$. A primeira equação variacional é obtida a partir da lagrangeana efetiva Eq. (12), assim, $\partial L_{D,ef}/\partial \mu_D = 0$ produz como esperado $N = 1$, dessa forma $N = 1$ será substituído nas outras equações variacionais abaixo. Desenvolvendo os cálculos $\partial L_{D,ef}/\partial V = 0$, teremos a relação entre a largura do sóliton (V) e o coeficiente de não linearidade (g_{1D})

$$1 - 0.87 V^4 e^{-V^2} + \frac{V}{2\sqrt{2}\sqrt{\pi}} g_{1D} = 32.56 V^4 e^{-4V^2}. \quad (14)$$

O potencial químico (μ_D) em função da largura do sóliton (V) é obtido pela equação $\partial L_{D,ef}/\partial N = 0$, que resultará na expressão

$$\frac{1}{4V^2} + \frac{1}{2} (-1.74 e^{-V^2} + 1.74) + \frac{1}{2} (-4.07 e^{-4V^2} + 4.07) + \frac{g_{1D}}{2\sqrt{2}\pi^{1/2}V} = \mu_D. \quad (15)$$

As soluções das Eqs. (14) e (15) produzem uma dependência do coeficiente de não linearidade (g_{1D}) em função do potencial químico (μ_D) para *gaps* sólitons iluminados em 1D. Estando de posse da expressão da não linearidade em função do potencial químico, devemos procurar o valor de V que minimiza esta expressão. Os dois sistemas de equações (14) e (15) são equivalentes; nesse caso, toda solução de qualquer um dos sistemas também é solução do outro. Uma solução de um sistema é uma sequência de números (valores dos parâmetros variacionais) que satisfaz as equações simultâneas. Uma alternativa para resolvermos um sistema de equações lineares é utilizarmos o método de Gauss-Seidel (método de iteração), ou outros métodos abordados extensamente e disponíveis em livros-texto de física computacional e métodos numéricos.

3.2. Rede periódica simples

Para o segundo caso em estudo, obteremos uma rede periódica simples ao considerarmos $\varepsilon = 1$, e $V_0 = 5$ na Eq. (6) e Eq. (5). Similar ao que fizemos na subseção anterior, para a Eq. (4) tornar-se estacionária, devemos considerar como soluções $\psi(x, t) = e^{-i\mu_S t} u_S(x)$, onde μ_S representa o potencial químico para o caso de uma rede periódica simples, $u_S(x)$ é uma função real sujeita à condição de normalização $\int u_S^2(x) dx = 1$. Nesta subseção o subscrito S refere-se à rede óptica simples. Em face dessas considerações e de um cálculo não extenso, a Eq. (4) torna-se estacionária contendo uma rede periódica simples em 1D para bósons, possuindo a seguinte forma

$$\mu_S u_S(x) = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2 u_S(x)}{\partial x^2} + 5 (\sin^2(x)) u_S(x) + G_{1S} |u_S(x)|^2 u_S(x). \quad (16)$$

O potencial da rede óptica $V(x) = 5 \sin^2(x)$ é uniforme e caracterizado pela profundidade $V_0 = 5$ medida em unidades da energia de recuo e período da rede óptica [19, 28]. A força de interação entre dois corpos ou coeficiente de não linearidade, para o caso de uma rede simples, é representada por $G_{1S} = 2(a_s/a_L)$, na qual é similar a g_{1D} . A densidade lagrangeana para a Eq. (16) pode ser escrita como

$$L_S = -\mu_S \left| u_S(x) \right|^2 + |\nabla u_S(x)|^2 + 5 (\sin^2(x)) \left| u_S(x) \right|^2 + \frac{G_{1S}}{2} \left| u_S(x) \right|^4 + \mu_S. \quad (17)$$

Utilizando a Eq. (17) e considerando $L_{S,ef} = \langle L_S \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} L_S dx$, obtemos a lagrangeana efetiva

$$L_{S,ef} = \int_{-\infty}^{\infty} \left[-\mu_S u_S^2(x) + (\nabla u_S(x))^2 + 5 (\sin^2(x)) u_S^2(x) + \frac{G_{1S}}{2} u_S^4(x) \right] dx + \mu_S. \quad (18)$$

As soluções variacionais para a Eq. (18) são obtidas ao assumirmos um *ansatz* variacional em 1D na forma gaussiana [32]

$$u_S(x) = \frac{\sqrt{N}}{\pi^{1/4} W^{1/2}} \exp\left(-\frac{x^2}{2W^2}\right). \quad (19)$$

Os parâmetros variacionais do sóliton em 1D para o caso de uma rede periódica simples são N (norma) e W (largura). Ao substituírmos a Eq. (19) na Eq. (18) e integrarmos em relação a x obtemos a lagrangeana efetiva em 1D para bósons na presença de uma rede óptica simples, escrita como

$$L_{S,ef} = \mu_S (1 - N) + \frac{N}{4W^2} + \frac{N}{2} \left(-5e^{-W^2} + 5 \right) + \frac{N^2}{4\sqrt{2}\sqrt{\pi}W} G_{1S}. \quad (20)$$

As equações variacionais serão obtidas tomando como base a lagrangeana efetiva. Faremos uso da Eq. (13) de Euler-Lagrange, onde usaremos a notação $q_j = \{\mu_S, N, W\}$. Primeiro, para a Eq. (20) façamos $\partial L_{S,ef}/\partial \mu_S = 0$, a qual produz como esperado $N = 1$, dessa forma $N = 1$ será substituído nas outras equações variacionais abaixo. O cálculo $\partial L_{S,ef}/\partial W = 0$, prediz a relação entre a largura do sóliton (W) e coeficiente de não linearidade (G_{1S}),

$$1 + \frac{W}{2\sqrt{2}\sqrt{\pi}} G_{1S} = 10W^4 e^{-W^2}. \quad (21)$$

Finalmente, a equação $\partial L_{S,ef}/\partial N = 0$ fornece a relação entre o potencial químico (μ_S) e função da largura do sóliton (W),

$$\frac{1}{4W^2} + \frac{5}{2} \left(-e^{-W^2} + 1 \right) + \frac{G_{1S}}{2\sqrt{2}\pi^{1/2}W} = \mu_S. \quad (22)$$

A solução da Eq. (21) e Eq. (22) produz uma dependência do coeficiente de não linearidade (G_{1S}) em

função do potencial químico (μ_S) para *gaps* sólitons iluminados em 1D. Usando as Eqs. (21) e (22), devemos procurar o valor de W que minimiza esta expressão. Os dois sistemas de Eqs. (21) e (22) são equivalentes, neste caso, toda solução de qualquer um dos sistemas também é solução do outro. Como citado na subseção anterior, existem outros métodos alternativos para resolvermos esse sistema de equações lineares, os quais são abordados extensamente e disponíveis em livros-texto de física computacional e métodos numéricos.

4. Resultados obtidos através da aproximação variacional

Na Fig. 3 nós temos os resultados obtidos através das aproximações variacionais para os dois casos em estudo. A Fig. 3(a) ilustra o comportamento do coeficiente de não linearidade (g_{1D}) *vs.* potencial químico (μ_D) para uma rede duplamente periódica ($\varepsilon = 0.3$, $V_0 = 5$), e na Fig. 3(b) nós apresentamos o coeficiente de não linearidade (G_{1D}) *vs.* potencial (μ_S) para uma rede simples ($\varepsilon = 1$, $V_0 = 5$).

Os valores para os potenciais químicos foram obtidos considerando o potencial periódico “ $V(x)$ ” independente do tempo (estacionário). As barras verticais na Fig. 3 representam as primeiras bandas de Bloch que separam os *gaps*. A metodologia para a obtenção e análise dos valores das bordas das bandas é a seguinte: em um regime linear, para o primeiro caso em estudo (Eqs. (14) e (15)), ao considerarmos $g_{1D} = 0$ a solução variacional fornece o valor para o potencial químico $\mu_D = -3.20$ (Fig. 3(a)), o qual coincide com o valor da primeira borda esquerda na primeira banda de *gap*. No segundo caso em estudo (Eqs. (21) e (22)) no regime linear, ou seja, quando $G_{1S} = 0$, obtivemos para o potencial químico $\mu_S = 2.48$, que corresponde ao valor da primeira borda esquerda na primeira banda de *gap* (Fig. 3(b)). Por outro lado, para o regime não linear, adotamos valores para a não linearidade $g_{1D} > 0$ e $G_{1S} > 0$. Embora métodos numéricos prevejam os valores para as bordas das bandas de *gaps* [15, 17, *Berata et al.* Ref.[28]], a aproximação variacional também o faz, com a mesma precisão [20, 30, 31].

As famílias de sólitons iluminados, ou *gaps* sólitons iluminados, para gases bosônicos são encontradas na primeira borda da banda de *gap* do potencial duplamente periódico ($\varepsilon = 0.3$, $V_0 = 5$) através das soluções das Eqs. (14) e (15), (Fig. 3(a)), e Eqs. (21) e (22) para o potencial simples ($\varepsilon = 1$, $V_0 = 5$), (Fig. 3(b)). Apesar das soluções variacionais predizerem famílias de *gaps* sólitons iluminados na primeira e através da segunda banda de *gap*, elas não sentem a presença das bandas de Bloch que separam as bandas de *gap* [20, 30, 31]. Dessa forma, o nosso estudo é realizado apenas para valores próximos à primeira borda da banda de *gap*, apesar de que outros valores para a localização de outras bandas foram encontrados.

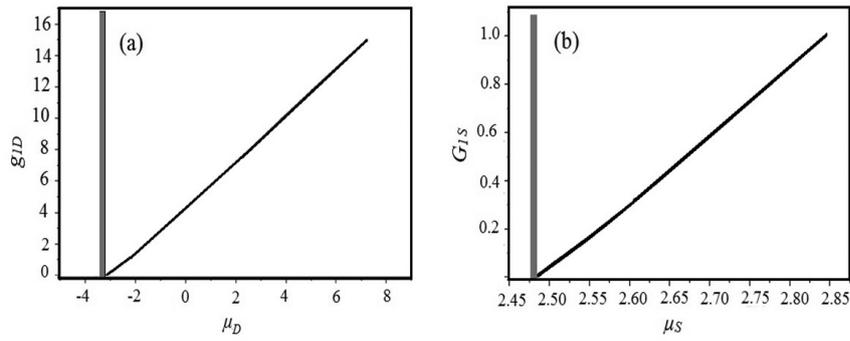


Figura 3 - Resultados variacionais para os coeficientes de não linearidades *vs.* potenciais químicos obtidos da primeira banda de *gap*. (a) Coeficiente de não linearidade (g_{1D}) *vs.* potencial químico (μ_D) para uma rede duplamente periódica ($\varepsilon = 0.3$, $V_0 = 5$). (b) Coeficiente de não linearidade (G_{1S}) *vs.* potencial (μ_S) para uma rede simples ($\varepsilon = 1$, $V_0 = 5$). Os valores para os potenciais químicos foram obtidos considerando os potenciais periódicos “ $V(x)$ ” estacionários. A barra vertical representa a primeira banda de Bloch que separam os *gaps*.

Famílias de *gaps* sólitons iluminados são localizadas em um único sítio da rede óptica para pequenos valores do coeficiente de não linearidade [15, 17, 19, 20, 30, 31]. Em vista disso, é possível obtermos vários tipos de *gaps* sólitons estáveis com distintos valores de μ_D ou μ_S próximos das bordas das bandas de *gap*. Como na Fig. 3 há várias famílias de *gaps* sólitons iluminados para bósons, podemos observar as suas formas utilizando as gaussianas dadas pela Eq. (9) que possuem larguras (V) obtidas através da solução da Eq. (14) quando consideramos uma rede duplamente periódica; ou observá-las através da Eq. (19) na qual os valores das larguras (W) são obtidos ao resolvermos a Eq. (21)

para uma rede óptica simples. As soluções das Eqs. (14) e (15) acopladas fornecem os valores para os potenciais químicos μ_D , para o outro caso em estudo, as Eq. (21) e Eq. (22) fornecem os valores para μ_S . As Figs. 4 e 5 mostram, cada uma, seis exemplos de *gaps* sólitons iluminados pertencentes à primeira banda de *gap* do espectro em 1D, onde constam os valores dos coeficientes de não linearidades e potenciais químicos. Em ambas as Figs. 4 e 5, conforme cresce o valor dos coeficientes de não linearidades, também aumentam os valores para os potenciais químicos e as larguras das gaussianas V e W .

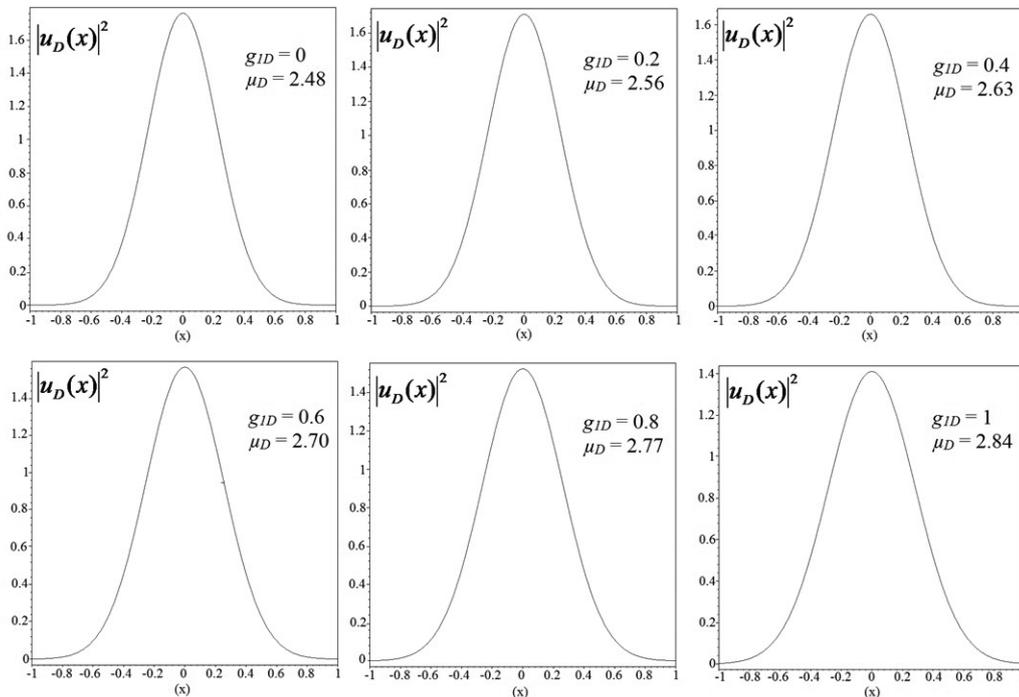


Figura 4 - Formas típicas de *gaps* sólitons iluminados para um gás de bósons em 1D. Exemplo de seis picos estáveis para *gaps* sólitons, na forma gaussiana para a Eq. (9), obtidos próximos à borda da primeira banda de *gap* do espectro da Fig. 3(a). Nos gráficos constam os valores dos coeficientes de não linearidades (g_{1D}) e potenciais químicos (μ_D) para o caso de uma rede duplamente periódica ($\varepsilon = 0.3$, $V_0 = 5$).

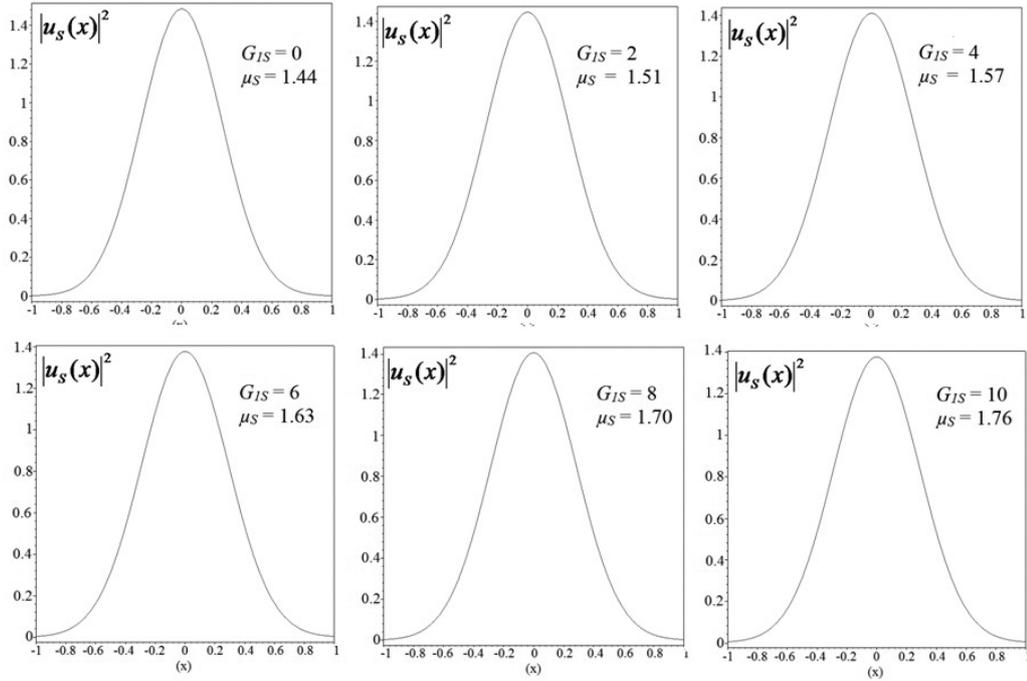


Figura 5 - Formas típicas de *gaps* sólitons iluminados para um gás de bósons em 1D. Exemplos de seis picos estáveis para *gaps* sólitons, na forma gaussiana para a Eq. (19), obtidos próximos à borda da primeira banda de *gap* do espectro da Fig. 3(b). Nos gráficos constam os valores dos coeficientes de não linearidades (G_{1S}) e potenciais químicos (μ_S) para uma rede simples ($\varepsilon = 1$, $V_0 = 5$).

Os respectivos aumentos de $g_{1D}(\mu_D)$ ou $G_{1S}(\mu_S)$ podem ser observados à medida que nos afastamos da borda da primeira banda de *gap* (Veja Fig. 3), ou seja, é evidente que famílias de *gaps* sólitons iluminados em condensados repulsivos originam do fundo da banda de *gap*. Isto é, não linearidade fraca (pequenos valores para N), acarreta em estados de *gaps* sólitons iluminados que surgem próximos das bordas inferiores das bandas de *gap* linear. Como o potencial químico está aumentando, o número de átomos no *gap* também aumenta. Os *gaps* sólitons iluminados em condensados repulsivos surgem do fundo da banda devido à instabilidade modulacional de ondas de Bloch [15, 17].

Estudos numéricos e variacionais para uma família de sólitons iluminados próximos à borda da primeira banda de *gap* realizados para condensados repulsivos [20, 30, 31], revelam que gases fermiônicos aprisionados em uma rede óptica simples possuem o mesmo comportamento para a não linearidade *vs.* potencial químico. De certa forma, o condensado, em média, responde ao potencial externo como uma partícula clássica. Portanto, a existência e a estabilidade de condensados podem ser determinadas por equações para as larguras da gaussiana.

Os resultados expostos neste trabalho fornecem importantes contribuições para o estudo de condensados repulsivos, no caso para um gás de bósons na ausência de um potencial externo da armadilha magnética, porém confinados por uma rede duplamente periódica ou rede óptica simples. Esses resultados nos revelam que a mesma evolução no comportamento (existência

e estabilidade) dos *gaps* sólitons iluminados confinados em uma rede duplamente periódica, também ocorre para uma rede simples. Na literatura existem trabalhos que estudam a dependência de N (norma, proporcional ao número de átomos) em função do potencial químico [17, 33, 34], potencial químico em função da amplitude da rede duplamente periódica [15] ou rede óptica simples [17, 28]. Porém, não encontramos trabalhos teóricos, experimentais ou teórico-experimentais que explorem o papel do coeficiente de não linearidade em função do potencial químico para o caso de uma rede duplamente periódica. Ao contrário, para uma rede simples, existe uma minoria. É interessante ressaltarmos que os valores adotados em nosso trabalho, como os parâmetros de ajuste $\varepsilon = 0.3$, amplitude ou profundidade da rede duplamente periódica $V_0 = 5$, e para a rede simples $\varepsilon = 1$, $V_0 = 5$, são os mesmos adotados em trabalhos numéricos [15, 17].

5. Conclusão

Neste artigo, nós mostramos que as soluções de uma equação de Gross-Pitaevskii (ou hidrodinâmica de campo médio), podem ser obtidas através de aproximações variacionais. Os cálculos realizados podem ser reproduzidos por alunos de graduação ou pós-graduação de cursos de ciências exatas, para isso basta seguir os detalhes matemáticos e considerações físicas apresentadas nas subseções anteriores.

Constatamos, a partir dos resultados obtidos, que métodos variacionais revelam-se eficazes para descrever

e prever famílias de *gaps* sólitons iluminados aprisionadas por um potencial unidimensional de uma rede óptica duplamente periódica, ou rede óptica simples, na ausência de um potencial da armadilha magneto óptica. Através da aproximação variacional nós demonstramos a possibilidade de que o coeficiente de não linearidade para bósons atuando em combinação com o potencial de rede óptica duplamente periódica, ou uma rede óptica simples, permite o surgimento de *gaps* sólitons iluminados em 1D; apresentando, em ambos os casos, o mesmo comportamento (existência e estabilidade). Nossos resultados confirmam a validade dos ansatz gaussianos utilizados nas aproximações variacionais.

Comportamento similar do coeficiente de não linearidade repulsiva *vs.* potencial químico, também foi observado nos estudos de gases bosônicos e fermiônicos em 1D e 3D [2, 20, 31], nos quais a equação de Gross-Pitaevskii foi modificada para cada caso em estudo. Em nossas análises obtidas pela aproximação variacional, nós detectamos a existência de *gaps* sólitons iluminados oriundo da primeira banda de *gap*, entretanto, a aproximação variacional também prevê a existência de uma segunda banda ou terceira banda.

Os resultados apresentados neste artigo, abrem portas para a realização de futuros trabalhos, como o estudo teórico de *gaps* sólitons iluminados em 1D e 2D confinados por potenciais de redes ópticas duplamente periódica para um gás de férmions degenerados; transição de *gaps* sólitons em um regime estável para instável através do movimento da rede óptica duplamente periódica; vórtices quantizados e efeitos colisionais entre sólitons. O mesmo procedimento pode ser realizado experimentalmente, porém é necessária a introdução de tais potenciais de confinamentos.

O comportamento dos *gaps* sólitons iluminados obtidos para os dois casos em estudos são similares, embora as redes ópticas sejam diferentes. Como a forma do potencial periódico de uma rede óptica unidimensional depende de alguns parâmetros de ajuste (Eq. (5)), incentivamos ao leitor realizar os cálculos variacionais para outras formas de redes ópticas.

Agradecimentos

Gostaríamos de agradecer ao Prof. Dr. Sadhan K. Adhikari (IFT/UNESP) pelos valiosos ensinamentos na aprendizagem de métodos variacionais.

Referências

- [1] K. Huang, *Statistical Mechanics* (John Wiley and Sons Ltd., New York, 1988); S.R.A. Salinas, *Introdução à Física Estatística* (Editora Universidade de São Paulo, São Paulo, 2013) 2^a ed, 3^a reimp; S.R. Dahmen, Revista Brasileira de Ensino de Física **27**, 271 (2005); S.R. Dahmen, Revista Brasileira de Ensino de Física **27**, 283 (2005); N.D. Gomes, M.A. Caracanhas e V.S. Bagnato, Revista Brasileira de Ensino de Física **36**, 1311 (2014).
- [2] V.A. Nascimento, Revista Brasileira de Ensino de Física **33**, 2305 (2011).
- [3] D. Jaksch, C. Bruder, J.I. Cirac, C.W. Gardiner and P. Zoller, Phys. Rev. Lett. **81**, 3108 (1998); M. Greiner, O. Mandel, T. Esslinger, T.W. Hänsch and I. Bloch, Nature **415**, 39 (2002).
- [4] J. Javanainen, Phys. Rev. A. **60**, 4902 (1999); A. Trombettoni and A. Smerzi, Phys. Rev. Lett. **86**, 2353 (2001).
- [5] C.S. Adams, M. Sigel and J. Mlynek, Phys. Rep. **240**, 143 (1994); I. Bloch, J. Dalibard and W. Zwerger, Rev. Mod. Phys. **80**, 885 (2008); S. Giorgini, L.P. Pitaevskii and S. Stringari, Rev. Mod. Phys. **80**, 1215 (2008).
- [6] G.J. Dong, W.P. Lu and P.F. Barker, Phys. Rev. A. **69**, 013409 (2004); P.F. Barker and M.N. Schneider, Phys. Rev. A. **66**, 065402 (2002); R. Fulton, A.I. Bishop, M.N. Schneider and P.F. Barker, Nat. Phys. **2**, 465 (2006); M.N. Schneider and P.F. Barker, Opt. Commun. **284**, 1238 (2011).
- [7] O. Morsch, J.H. Müller, M. Cristiani, D. Ciampini and E. Arimondo, Phys. Rev. Lett. **87**, 140402 (2001); I. Carusotto, L. Pitaevskii, S. Stringari, G. Modugno and M. Inguscio, Phys. Rev. Lett. **95**, 093202 (2005).
- [8] G. Dong, J. Zhu, W. Zhang and B.A. Malomed, Phys. Rev. Lett. **110**, 250401 (2013).
- [9] B. Eiermann, Th. Anker, M. Albiez, M. Taglieber, P. Treutlein, K.P. Marzlin and M.K. Oberthaler, Phys. Rev. Lett. **92**, 230401 (2004).
- [10] L. Khaykovich, F. Schreck, G. Ferrari, T. Bourdel, J. Cubizolles, L.D. Carr, Y. Castin and C. Salomon, Science **296**, 1290 (2002).
- [11] K.E. Strecker, G.B. Partridge, A.G. Truscott and R.G. Hulet, Nature **417**, 150 (2002).
- [12] S.L. Cornish, S.T. Thompson and C.E. Wieman, Phys. Rev. Lett. **96**, 170401 (2006).
- [13] M. Greiner, C.A. Regal and D.S. Jin, Nature **426**, 537 (2003); M.W. Zwierleinn, C.A. Stan, C.H. Schunck, S.M.F. Raupach, S. Gupta, Z. Hadzibabic and W. Ketterle, Phys. Rev. Lett. **91**, 250401 (2003).
- [14] J.V. Porto, S. Rolston, B.L. Tolra, C.J. Williams and W.D. Phillips, Phil. Trans. Math. Phys. Eng. Sci. **361**, 1471 (2003); K.G.H. Vollbrecht, E. Solano and J.I. Cirac, Phys. Rev. Lett. **93**, 220502 (2004).
- [15] P.J.Y. Louis, Elena A. Ostrovskaya and Y.S. Kivshar, Phys. Rev. A. **71**, 023612 (2005).
- [16] P.G. Kevrekidis and D.J. Frantzeskakis, Mod. Phys. Lett. B. **18**, 173 (2004).
- [17] P.J.Y. Louis, E.A. Ostrovskaya, C.M. Savage and Y.S. Kivshar, Phys. Rev. A. **67**, 013602 (2003).
- [18] A. Gammal, T. Frederico and L. Tomio, Phys. Rev. A. **64**, 055602 (2002); A. Gammal, L. Tomio and T. Frederico, Phys. Rev. A. **66**, 043619 (2002).
- [19] E.A. Ostrovskaya and Y.S. Kivshar, Phys. Rev. Lett. **90**, 160407 (2003); E.A. Ostrovskaya, T.J. Alexander and Y.S. Kivshar, Phys. Rev. A. **74**, 023605 (2006).
- [20] S.K. Adhikari and B.A. Malomed, Europhys. Lett. **79**, 50003 (2007).

- [21] C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics* (Wiley & Sons, New York, 2005), 8th ed.
- [22] B.J. Eggleton, R.E. Slusher, C.M. de Sterke, P.A. Krug and J.E. Sipe, *Phys. Rev. Lett* **76**, 1627 (1996).
- [23] W.D. Phillips and H.J. Metcalf, *Scientific American* **256**, 50 (1987).
- [24] S. Peil, J.V. Porto, B.L. Tolra, J.M. Obrecht, B.E. King, M. Subbotin, S.L. Rolston, and W.D. Phillips, *Phys. Rev. A* **67**, 051603 (2003).
- [25] O. Morsch and M. Oberthaler, *Rev. Mod. Phys* **78**, 179 (2006).
- [26] B.B. Baizakov, B.A. Malomed and M. Salerno, *Phys. Rev. E* **74**, 066615 (2006).
- [27] B.A. Malomed, *Soliton Management in Periodic Systems* (Springer Science + Business Media, New York, 2006); C.J. Pethick and H. Smith, *Bose-Einstein Condensation in Dilute Gases* (Cambridge University Press, Cambridge, 2002).
- [28] V.M. Pérez Garcia, H. Michinel and H. Herrero, *Phys. Rev. A* **57**, 3837 (1998); B.J. Dabrowska, E.A. Ostrovskaya and Y.S. Kivshar, *J. Opt. B. Quantum Semiclass. Opt.* **6**, 423 (2004).
- [29] S. Inouye, M.R. Andrews, J. Stenger, H.J. Miesner, D.M. Stamper-Kurn and W. Ketterle, *Nature* **392**, 151 (1998); P. Timmermans, P. Tommasini, M. Hussein and A. Kerman, *Phys. Rep.* **315**, 199 (1999).
- [30] C.T. Giner, R. Cipelatti and T.C.H. Liew, *Eur. Phys. J. D.* **67**, 143 (2013).
- [31] B.A. Malomed, V.A. Nascimento and S.K. Adhikari, *Mathematics and Computers in Simulation (Print)* **80**, 648 (2009).
- [32] V.M. Pérez Garcia, H. Michinel, J.I. Cirac, M. Lewenstein and P. Zoller, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 5320 (1996); V.M. Pérez Garcia, H. Michinel, J.I. Cirac, M. Lewenstein and P. Zoller, *Phys. Rev. A* **56**, 1424 (1997).
- [33] T. Mayteevarunyoo and B.A. Malomed, *Phys. Rev. A* **74**, 033616 (2006).
- [34] A. Gubeskys, B.A. Malomed and I.M. Merhasin, *Etud. Appl. Math.* **115**, 255 (2005).