

Leonardo Brito da Silva

**Controle Coerente da Excitação de Modos
Topológicos em Condensados de Bose-Einstein**

São Carlos

2019

Leonardo Brito da Silva

Controle Coerente da Excitação de Modos Topológicos em Condensados de Bose-Einstein

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal de São Carlos para obtenção do título de Mestre em Física

Universidade Federal de São Carlos (Ufscar)

Centro de Ciências exatas e de Tecnologia (CCET)

Programa de Pós-Graduação em Física (PPGF)

Dissertação de Mestrado

Orientador: Prof. Dr. Emanuel Fernandes de Lima

São Carlos

2019

fichacatalografica

Brito da Silva, Leonardo

Controle coerente da excitação de modos topológicos em condensados de Bose-Einstein / Leonardo Brito da Silva. -- 2019.
95 f. : 30 cm.

Dissertação (mestrado)-Universidade Federal de São Carlos, campus São Carlos, São Carlos

Orientador: Prof. Dr. Emanuel Fernandes de Lima

Banca examinadora: Profa. Dra. Kilvia Mayre Farias, Prof. Dr. Francisco Ednilson Alves dos Santos

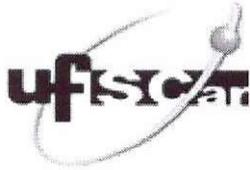
Bibliografia

1. Condensado de Bose-Einstein. 2. Equação de Gross-Pitaevskii. 3. Controle coerente.. I. Orientador. II. Universidade Federal de São Carlos. III. Título.

Ficha catalográfica elaborada pelo Programa de Geração Automática da Secretaria Geral de Informática (SIn).

DADOS FORNECIDOS PELO(A) AUTOR(A)

Bibliotecário(a) Responsável: Ronildo Santos Prado – CRB/8 7325



UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS

Centro de Ciências Exatas e de Tecnologia
Programa de Pós-Graduação em Física

Folha de Aprovação

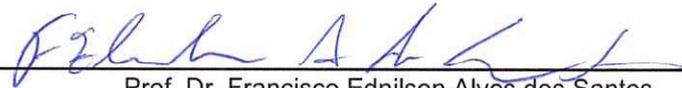
Assinaturas dos membros da comissão examinadora que avaliou e aprovou a Defesa de Dissertação de Mestrado do candidato Leonardo Brito da Silva, realizada em 04/07/2019:



Prof. Dr. Emanuel Fernandes de Lima
UFSCar



Profa. Dra. Kílvia Mayre Farias
IFSC/USP



Prof. Dr. Francisco Ednilson Alves dos Santos
UFSCar

Agradecimentos

Agradeço primeiramente ao Prof. Dr. Emanuel Fernandes de Lima pela confiança e orientação em todos projetos de pesquisa que realizei durante a Graduação e Mestrado e em especial pelo apoio para o crescimento das minhas habilidades para programação. Destaco também os docentes Prof. Dr. Leonardo Kleber Castelano, Prof. Dr. Francisco Ednilson Alves dos Santos e Profa. Dra. Kilvia Mayre Farias. O primeiro pelo apoio com os primeiros códigos numéricos para desenvolvimento do trabalho que permaneceram sendo implementados e aprimorados. O segundo pelas referências indicadas que vieram a se tornar fundamentais para o embasamento do projeto, bem como recomendações para consolidar os métodos utilizados e revisões de deduções teóricas. E a terceira por recomendar referências muito pertinentes ao contexto do trabalho que permitiram aprofundar a análise e por alertar sobre as questões experimentais que poderiam ser incorporadas ao estudo que tornariam o projeto e as suas proposições muito mais sólidas do ponto de vista da factibilidade em laboratório das ideias aqui defendidas.

Agradeço ao Departamento de Física da Universidade Federal de São Carlos e à Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) pelo apoio financeiro.

Resumo

Neste projeto foi realizado um estudo sobre controle da dinâmica de condensados de Bose-Einstein unidimensionais de gases atômicos dilutos através do desenvolvimento e aplicação de técnicas sobre sistemas que possam ser descritos pela equação de Gross-Pitaevskii. Foram construídos códigos numéricos capazes de obter estados e energias da hamiltoniana não linear característica do condensado, bem como simular a dinâmica do mesmo dirigido por campos externos. Deste modo, foi possível a observação do comportamento do condensado sob diversas formas de campos moduladores, os mesmos sendo do tipo modulador de armadilha ou do comprimento de espalhamento. O objetivo dessa análise é investigar a combinação de modulações de naturezas diferentes para induzir uma transição de estados desejadas, de maneira a formar condensados em modos topológicos, através da interferência das amplitudes desses dois caminhos de transição. Observamos que a modulação dupla é capaz de dirigir a transição desejada em um tempo menor que sob o uso de uma modulação individual sem perda significativa de átomos durante a aplicação dos campos, e apresenta uma resposta interessante à diferença de fase entre os campos, modulações de frequências bem como atraso de campos, de tal forma que a transição desejada possa ser submetida a diversas possibilidades do Controle Coerente. Interferindo as amplitudes de transição originada pelos dois campos, pode-se reduzir tempo de transição, controlar a fração de átomos que será migrada, bem como interromper a transição sem que seja necessário desligar os campos.

Palavras-chave: Condensado de Bose-Einstein. Equação de Gross-Pitaevskii. Controle Coerente.

Abstract

In this project were carried out a study on dynamics control of one dimensional Bose-Einstein condensates of dilute gases by development and application of techniques on systems that are described by Gross-Pitaevskii equation. Were built numeric codes able to return states and energies of condensate nonlinear hamiltonian and also simulate the dynamics of this one when driven by external fields. Therefore, it was possible the observation of condensate behavior under several shapes of space-temporal modulating fields, that are divided in two classes, the first one, the trap modulating, and the second one, the scattering length modulating. The objective of this analysis is to investigate the different natures modulations combined to induce target transitions, in order to built condensates in topological modes by amplitude of the two pathways interference. We noticed that the double modulation can drive the desired transition in a shorter time than only one modulation without significant loss of atoms during fields action and it presents a interesting response to fields relative phase , frequency modulation and fields dalay, in such a way that target transition can be submitted to different ways of Coherent Control. It can reduce the time of transition interfering fields and can control the fraction migrated, such as to interrupt the process without the need to turn off the fields.

Keywords: Bose-Einstein Condensate. Gross-Pitaevskii Equation. Coherent Control.

Lista de ilustrações

Figura 1 – Caminhos de transição do modo fundamental μ_0 para um modo topológico μ_j . A flecha vermelha (primeira da esquerda para direita) representa um primeiro caminho a uma dada frequência, as flechas azuis representam um segundo caminho com metade das frequências, enquanto que a última flecha (pontilhada amarela) representa um campo a uma frequência que pode ser próxima da primeira, com certo desvio. Fonte: Autor.	53
Figura 2 – Função de onda do Estado fundamental para fatores g_0 de não-linearidade diferentes. Fonte: Autor.	60
Figura 3 – Primeiro estado excitado. Fonte: Autor.	61
Figura 4 – Segundo estado excitado. Fonte: Autor.	61
Figura 5 – Terceiro estado excitado. Fonte: Autor.	62
Figura 6 – Evolução da função de onda estacionária para $g_0 = 20$ sob hamiltoniana característica de $g_0 = 10$	62
Figura 7 – Raio médio quadrático da função de onda em função do tempo. Fonte: Autor	63
Figura 8 – Ocupação dos estados fundamental n_0 , primeiro e segundo estado excitado, n_1 e n_2 , respectivamente. Fonte: Autor.	65
Figura 9 – Soma Σ das ocupações dos quatro primeiros autoestados da hamiltoniana não linear. Fonte: Autor.	65
Figura 10 – Comparação entre o cálculo direto e o modelo de 3 níveis para ocupação do primeiro estado excitado sob ação de modulador da armadilha de amplitude $A_V = 0.0625$. Fonte: Autor.	66
Figura 11 – Ocupação de estados excitados 1, 2, 3, 4 e 5 sob campo de amplitude $A_V = 0.1$. Fonte: Autor.	66
Figura 12 – Comparação entre o cálculo direto e o modelo de 2 níveis para ocupação do primeiro estado excitado sob ação de modulador da interação de amplitude $A_G = 0.5$. Fonte: Autor.	67
Figura 13 – Comparação entre o cálculo direto e o modelo de 2 níveis para ocupação do segundo estado excitado sob ação de modulador da interação de amplitude $A_G = 1$. Fonte: Autor.	68
Figura 14 – Comparação entre modulações da armadilha $A_V = 0.17$ e $A_G = 0.7$ para excitação do primeiro estado excitado. Fonte: Autor.	69
Figura 15 – Comparação entre modulações da armadilha $A_V = 0.5$ e $A_G = 1.4$ para excitação do segundo estado excitado. Fonte: Autor.	69

Figura 16 – Combinação das modulações para excitação do primeiro estado excitado. Dados da figura 14. Fonte: Autor.	70
Figura 17 – Combinação das modulações para excitação do segundo estado excitado. Dados da figura 15. Fonte: Autor.	70
Figura 18 – Comparação entre modulações individuais, da armadilha V, da interação G e combinadas VG para excitação do primeiro estado excitado. Dados da figura 14. Fonte: Autor.	71
Figura 19 – Comparação entre modulações individuais, da armadilha V, da interação G e combinadas VG para excitação do segundo estado excitado. Dados da figura 15. Fonte: Autor.	71
Figura 20 – Ocupação do primeiro estado excitado sob modulação dupla n comparada com modelo de 3 níveis Yn. Fonte: Autor.	72
Figura 21 – Ocupação do segundo estado excitado sob modulação dupla n comparada com modelo de 3 níveis Yn. Fonte: Autor.	72
Figura 22 – Ocupação do primeiro estado excitado em função da diferença de fase entre os moduladores. Dados da figura 16. Fonte: Autor.	73
Figura 23 – Ocupação do segundo estado excitado em função da diferença de fase entre os moduladores. Dados da figura 17. Fonte: Autor.	74
Figura 24 – Comparação entre modelos de Ocupação do primeiro estado excitado em função da Fase para tempo fixado em $t = 20$. Cálculo direto n e modelo de 2 níveis Yn. Dados da figura 16. Fonte: Autor.	74
Figura 25 – Modulação dupla com frequência ω no modulador da armadilha e $\omega/2$ no modulador da interação com amplitudes $A_V = 0.1$ e $A_G = 1$, conforme (6.3). a) n_1 em função do tempo para fase relativa nula . b) n_1 em função da fase para alguns tempos fixos. Fonte: Autor.	75
Figura 26 – Modulação dupla com frequência $\omega/2$ no modulador da armadilha e ω no modulador da interação com amplitudes $A_V = 0.5$ e $A_G = 0.4$, conforme (6.3) . a) n_1 em função do tempo para fase relativa nula . b) n_1 em função da fase para alguns tempos fixos. Fonte: Autor.	76
Figura 27 – Modulação da armadilha com amplitude $A_V = 0.1$ para popular o primeiro estado excitado, conforme (4.5). a) n_1 em função do tempo para fase relativa nula . b) n_1 em função da fase para alguns tempos fixos. Fonte: Autor.	77
Figura 28 – Modulação do comprimento de espalhamento com amplitude $A_G = 0.3$ para popular o primeiro estado excitado, conforme (6.4). a) n_1 em função do tempo para fase relativa nula . b) n_1 em função da fase para alguns tempos fixos. Fonte: Autor.	78

Figura 29 – Modulação $V_{control}(x, t)$ com frequência ω e $g_{control}(x, t)$ com frequência $\omega - \delta\omega$ Δt para popular primeiro estado excitado. Dados: $A_V = 0.1$, $A_G = 0.4$ e $\Delta\omega = 0.1\omega$. Fonte: Autor.	78
Figura 30 – Modulação $V_{control}(x, t)$ com frequência ω e $g_{control}(x, t)$ com frequência $\omega + \delta\omega$ Δt para popular primeiro estado excitado. Dados: $A_V = 0.1$, $A_G = 0.4$ e $\Delta\omega = 0.1\omega$. Fonte: Autor.	79
Figura 31 – Modulação $V_{control}(x, t)$ seguido de $g_{control}(x, t)$ após intervalo de tempo Δt para popular primeiro estado excitado. Dados: $A_V = 0.1$ e $A_G = 0.4$. Fonte: Autor.	79
Figura 32 – Campo $g_{control}(x, t)$ seguido de $V_{control}(x, t)$ após intervalo de tempo Δt para popular primeiro estado excitado. Dados: $A_V = 0.1$ e $A_G = 0.4$. Fonte: Autor.	80

Lista de símbolos

Ψ	Função de onda .
ψ	Parâmetro de ordem do sistema, ou função de onda do condensado.
\vec{r}	Posição em três dimensões.
H	Hamiltoniana.
∇	Gradiente.
t	Tempo.
\hbar	Constante de Planck.
m	Massa da partícula.
ϵ	Autoenergia da hamiltoniana.
\vec{k}	Vetor de onda.
E	Energia.
ϵ_i	Energia do orbital i .
N	Número total de partículas no sistema.
n_i	Número de partículas ocupando estado i .
Ξ	Função de partição grande-canônica.
k_B	Constante de Boltzmann
T	Temperatura.
β	Inverso de $k_B T$.
μ	Potencial químico.
N_0	Número de bósons no estado fundamental.
λ	Parâmetro real arbitrário.
Z	Função de partição canônica.
H_0	Hamiltoniana não-perturbada.

H_1	Operador perturbação.
F	Energia livre de Helmholtz.
σ	variância de uma variável.
U_0	Energia interna do sistema não-perturbado.
S_0	Entropia do sistema não-perturbado.
U_{ext}	Potencial externo confinador (ou armadilha) do gás.
V_{int}	Potencial de interação.
δ^3	Função delta de Dirac em três dimensões.
a	Comprimento de espalhamento.
g_0	Fator de não-linearidade.
Vol	Volume.
U_{trap}	Potencial externo correspondente a uma armadilha que confina o gás.
$\omega_{x,y,z}$	Frequência da armadilha nas direções x, y e z.
ρ	Variável de direção radial.
∇_{\perp}^2	Laplaciano nas direções y e z.
u	Termo da função de onda do condensado na direção radial.
ϑ	termo da função de onda do condensado na direção x.
ω_{\perp}	Frequência nas direções y e z.
κ_p	Constante da equação diferencial do oscilador harmônico bidimensional
C	constante auxiliar.
g_{1D}	Fator de não-linearidade correspondente a uma dimensão.
ψ_n	Funções coerentes, autovetores da hamiltoniana não-linear.
ω_{mn}	Frequência de transição entre estados m e n .
μ_n	Potenciais químicos, autovalores da hamiltoniana não-linear.
$V_{control}$	Campo modulador da armadilha.
V	Termo espacial do modulador da armadilha $V_{control}$.

ω	Frequência do campo modulador.
$\Delta\omega$	Detuning, diferença entre frequência aplicada e frequência de transição.
b_m	Coefficiente complexo de expansão da função de onda do condensado referente a autofunção ψ_n da hamiltoniana não-linear.
c_m	Coefficiente complexo auxiliar de expansão da função de onda de condensado referente a autofunção ψ_n da hamiltoniana não-linear.
n_m	Ocupação do estado ψ_n
$\langle \Gamma \rangle$	Média temporal de uma variável Γ dependente do tempo.
δ_{nm}	Delta de Kronecker relacionado aos índices n e m .
τ	Variável temporal auxiliar.
V_n	Variável auxiliar da equações diferenciais dependente da autofunção ψ_n da hamiltoniana não-linear.
α_{mn}	Coefficiente de interação das equações diferenciais para c_n .
β_{lk}	Coefficiente do modulador do armadilha.
$g_{control}$	Campo modulador da interação do condensado.
g	Termo espacial do modulador da interação $g_{control}$.
ϑ_n	Média auxiliar dependente da autofunção ψ_n da hamiltoniana não-linear.
$I_{j,k,l}$	Coefficiente do modulador da interação.
$W_{control}$	Campo de modulação dupla.
θ	Diferença de fase entre as frequências dos campos moduladores da armadilha e de interação.
T_n	Polinômio de Cheyshev.
X	Operador argumento do polinômio de Chebyshev.
a_n	Coefficientes da expansão do operador evolução.
$E_{min,max}$	Energias mínima e máxima correspondentes a hamiltoniana não-normalizada.
ΔE	Faixa acessível de energia.
H_{norm}	Hamiltoniana não-normalizada.

J_n	Função de Bessel de primeiro tipo e ordem n .
φ	Polinômios complexos de Chebyshev.
\hat{I}	Operador identidade.
\vec{f}_j	Autovetores da hamiltoniana.
λ_j	Autovalores da hamiltoniana.
	Matriz diagonal de autovalores.
F_M	Matriz de autovetores.
M_{aux}	Matriz auxiliar de autovalores.
R	Comprimento da grade.
\bar{x}	Variável espacial adimensional.
X_{RMS}	Raio médio quadrático médio.
A_V	Amplitude do campo modulador da armadilha.
A_G	Amplitude do campo modulador da interação.
Σ	Soma das ocupações dos estados 0, 1, 2 e 3 da hamiltoniana não linear.
ς	Função unidimensional.
K	Constante auxiliar.
ν	Multiplicador de Lagrange.
v	Função unidimensional que diz respeito a restrição do sistema.
J	Funcional de Custo.
η	Parâmetro de controle do sistema.
ξ	Fator de amplitude do parâmetro de controle.
p	Multiplicador de Lagrange.
L	Lagrangiana funcional.
P	Probabilidade de transição entre estados.

Sumário

1	INTRODUÇÃO	21
2	CONDENSADO DE BOSE-EINSTEIN NÃO-INTERAGENTE	25
3	EQUAÇÃO DE GROSS-PITAEVSKII	27
3.1	Teorema Variacional de Bogoliubov	27
3.2	Condensado Interagente	29
3.3	Gás Uniforme	31
3.4	Aproximação de Thomas-Fermi	33
3.5	Condensados Unidimensionais	33
4	MODOS COERENTES	37
4.1	Modulação da Armadilha	38
4.2	Modulação da Interação	43
5	MÉTODOS NUMÉRICOS PARA SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DE GROSS-PITAEVSKII	45
5.1	Polinômios de Chebyshev	45
5.2	Método de Propagação nos Polinômios de Chebyshev	46
5.2.1	Caso Independente do Tempo: Método da Relaxação	47
5.2.2	Estados Excitados	48
5.3	GPE na Grade	50
6	CONTROLE COERENTE	51
6.1	Aproximação perturbativa	54
7	RESULTADOS NUMÉRICOS	59
7.1	Estados topológicos da Hamiltoniana	59
7.2	Dinâmica do Sistema	62
7.3	Excitação de Estados Via Moduladores	63
7.3.1	Modulação da Armadilha	64
7.3.2	Modulação da Interação	66
7.4	Modulação Dupla	68
7.4.1	Controle Coerente	73
8	CONCLUSÕES	81

Referências	83
-----------------------	----

APÊNDICES	87
------------------	-----------

	APÊNDICE A – TEORIA DE CONTROLE ÓTIMO QUÂNTICO .	89
A.1	Otimização	89
A.2	Otimização Quântica	89
A.3	Controle Ótimo Quântico da GPE	90
	APÊNDICE B – APROXIMAÇÃO DE TRÊS NÍVEIS	93

1 Introdução

Um aspecto que surge ao se aprofundar em sistemas quânticos complexos é o desafio de controlá-los (BRIF; RABITZ, 2010; RABITZ R. DE VIVIE-RIEDLE; KOMPA, 2000), uma tal tarefa, se realizada, permite conduzir o sistemas a determinados estados quânticos, e ainda governar reações químicas (KREMS, 2010; ZARE, 1998). Dirigir esses fenômenos se tornou possível a partir do advento de técnicas de excitação e confinamento de sistemas através de pulsos de laser (BüCKER et al., 2011; FRANK et al., 2014; SHI; RABITZ, 1990), tornando-se assim factível guiar a evolução dinâmica de um sistema quântico. Dirigir sistemas dinâmicos a estados alvos pode demandar um grande esforço técnico para levar uma fração significativa do número de átomos inicial. Há portanto, configurações de campos externos que podem auxiliar nesta tarefa, tais como Controle Coerente (GORDON, 1997), no qual se explora o fenômeno de interferência entre amplitudes de caminhos de transição diferentes. Um tal controle pode ser realizado através da modulação das frequências de oscilação e diferença de fase entre os campos envolvidos para aumentar a população do estado desejado. Tais técnicas vêm sendo aplicadas no contexto de formação moléculas frias e ultrafrias por fotoassociação (KOCH; SHAPIRO, 2012; LIMA, 2017). Aos controles também podem ser incorporadas técnicas de otimização (JAGER et al., 2014; PEIRCE; RABITZ, 1988; HOHENESTER et al., 2007; HOHENESTER, 2014; HOCKER; RABITZ, 2016), para que a performance da transição possa ser controlada sem um grande custo energético associado aos parâmetros envolvidos, tais como amplitude e o tempo que um pulso deve permanecer ligado para catalisar a formação desejada.

O grau de complexidade do problema pode aumentar consideravelmente quando a hamiltoniana envolvida não é linear, e entramos numa classe de sistemas em que temos de resolver uma equação de Schrödinger não linear. SCondensados de Bose-Einstein incorporam situações realistas em que a não-linearidade se faz presente, constituindo um contexto ideal para aplicação do estudo do controle, uma vez que condensados já fazem parte dos fenômenos que já são factíveis em laboratórios e já se completam mais de duas décadas da criação do primeiro condensado em gases atômicos dilutos (ANDERSON et al., 1995; DALFOVO et al., 1999). Condensados de Bose-Einstein em gases dilutos podem ser estudados considerando a interação de contato entre os átomos, e utilizando teoria de campo médio, que simplifica o problema de muitos corpos ao estudo de uma única função média que representa o condensado inteiro, o chamado estado coletivo, ou função de onda macroscópica. Um tal tratamento conduz o problema a uma equação de campo médio que dirige a nuvem bosônica, chamada equação de Gross-Pitaevskii (PETHICK, 2002), que é uma equação de Schrödinger com termo de não-linearidade advindo da interação dos átomos. A mesma é capaz de descrever as propriedades do gás à temperatura $T = 0$,

permitindo extensões para descrever também efeitos térmicos. Uma maneira de resolver numericamente essa equação é escrever o operador evolução em uma série de polinômios, a escolha destes será mediante sua conveniência. É conhecido que características tais que retornem uma rápida convergência, assim como uma queda exponencial dos erros associados com o número de termos da série são satisfeitas pelos polinômios de Chebyshev (TAL-EZER; KOSLOFF, 1984). Optando por tal espécie de polinômio, o problema deve ser mapeado em uma grade de valores formada pelos chamados pontos de Chebyshev, que também pode ser construída com um número modesto de pontos. Além de ser possível simular a evolução temporal da função de onda. Se for feita a evolução no tempo imaginário, ainda se pode determinar os autoestados da hamiltoniana.

Em um sistema de tal tipo, o controle quântico pode assumir o papel de conduzir a função de onda macroscópica do condensado em transições entre estados estacionários não-lineares da hamiltoniana (HOCKER; RABITZ, 2016). Tarefa que pode ser realizada através de modulações do campo externo sobre a armadilha confinadora do gás (YUKALOV; BAGNATO, 1997; COURTEILLE; YUKALOV, 2001; YUKALOV; BAGNATO, 2002; YUKALOV; YUKALOVA, 2004), mas também sobre a amplitude do termo de não-linearidade (RAMOS et al., 2008; RAMOS; BAGNATO, 2012; RUSSEL; RABITZ, 2018; HOCKER; RABITZ, 2016; MEWES et al., 1996; POLLACK et al., 2010; DALFOVO; PITAEVSKII, 1997; HOHENESTER et al., 2007), permitindo guiar a dinâmica do condensado. Determinados os estados inicial e alvo, ambos autoestados da hamiltoniana, é possível promover uma transição através de campos ressonantes, isto é, campos com frequência muito próxima a frequência de transição entre tais estados (YUKALOV; BAGNATO, 1997; RAMOS et al., 2008; RAMOS; BAGNATO, 2012). Os casos que este projeto se propõe a estudar são as armadilhas harmônicas e anarmônicas, sob o controle de campos ressonantes como moduladores, sendo do tipo que modula a armadilha (YUKALOV; BAGNATO, 1997) ou do tipo que modula o comprimento de espalhamento (RAMOS et al., 2008; RAMOS; BAGNATO, 2012). E em especial, o foco é aprofundar o conhecimento sobre o controle de modulação dupla ambos na mesma frequência em torno da ressonância, e observando o impacto da diferença de fase entre esses campos, configurando portanto, uma oportunidade para estudar o controle coerente no contexto de condensados de Bose-Einstein.

Organizamos este texto fazendo inicialmente uma breve revisão de conceitos sobre a natureza dos bósons, uma explicação do fenômeno de condensação dessas partículas quando não interagem 2, seguido de uma introdução ao problema interagente, bem como a dedução da equação de Gross-Pitaevskii no capítulo 3. Introduzimos em 3.5 as condições de confinamento que podem tornar um condensado alongado em uma direção, tal que possa efetivamente ser descrito por um modelo unidimensional. Expomos as condições envolvidas na transição entre estado coerentes sob influência de campos ressonantes 4, moduladores da armadilha e do comprimento de espalhamento. . O tratamento teórico é estendido ao controle coerente de condensado no capítulo 6, o qual se aprofunda nas

condições de configuração entre os dois moduladores usados em conjunto, observando a coerência e impacto de fase entre os campos para aumentar a probabilidade de excitar um determinado estado estacionário da hamiltoniana não-linear. Conhecida a hamiltoniana que dirige o condensado, em 5 nossos esforços se voltam para métodos numéricos embasados nos polinômios de Chebyshev para propagação da função de onda. Apresentando o caso dinâmico, para função de onda que evolui no tempo (TAL-EZER; KOSLOFF, 1984), e o caso independente do tempo (KOSLOFF; TAL-EZER, 1986), através do qual podemos determinar os autoestados, energia e potencial químico correspondentes. Em seguida o foco do trabalho se volta para um estudo teórico do controle coerente, e impacto da fase ainda neste contexto de poucos níveis envolvidos e sob análise de aproximações perturbativas para investigar impacto da fase sobre a dinâmica de populações. E como último tópico, apresentamos no capítulo 7 os resultados das aplicações dos métodos levantados nas seções anteriores, obtendo assim a função de onda do estado fundamental e primeiros estados excitados, e autoenergias correspondentes para diferentes intensidades do termo de não-linearidade. Apresentamos evolução temporal da função do condensado dada uma mudança brusca no comprimento de espalhamento, os impactos de campos externos sobre a dinâmica, e especializamos o estudo no casos de modulação dupla, observando introduzindo diferença de fase entre os campos próximos da frequência de ressonância característica da transição desejada, com o fim de utilizar a interferência entre os campos para controlar a dinâmica de populações.

2 Condensado de Bose-Einstein Não-interagente

Um sistema quântico de partículas descrito por uma função de onda está sujeito à efeitos do spin sobre a estatística quântica. Partículas de spin inteiro retornam uma função de onda simétrica sob permutação de posição entre pares de partículas (TOMONAGA, 1997). Uma vez que uma partícula tenha spin inteiro, classificamos este como bóson. Se temos um sistema de N bósons, o seu comportamento é traduzido na paridade função de onda Ψ (2.1).

$$\Psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_i, \dots, \vec{r}_j, \dots, \vec{r}_N) = +\Psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_j, \dots, \vec{r}_i, \dots, \vec{r}_N) . \quad (2.1)$$

Sendo o sistema livre de campos externos e não interagente, observamos que no caso de uma única partícula a hamiltoniana tem a forma (2.2).

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 , \quad (2.2)$$

que deve satisfazer a equação de Schrödinger (2.3).

$$H\Psi(\vec{r}) = \epsilon\Psi(\vec{r}) , \quad (2.3)$$

cuja solução é o conjunto de autofunções da forma (2.4).

$$\Psi(\vec{r}) = \frac{e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}}{\sqrt{V}} , \quad (2.4)$$

com autoenergia (2.5).

$$\epsilon_k = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} , \quad (2.5)$$

Se forem impostas condições de contorno, os estados acessíveis ao sistema serão distribuídos em energias discretas $\{\epsilon_i\}$. Desta maneira, um estado quântico do sistema de muitas partículas pode ser descrito por um conjunto de números $\{n_i\}$, tais que informem o número de partículas que ocupam cada autoenergia ϵ_i da hamiltoniana do sistema. Visto que as partículas quânticas são indistinguíveis, importamo-nos apenas com a distribuição dessas em relação aos autoestados possíveis. Desta maneira a energia e o número de partículas total do sistema E e N , respectivamente são (2.6) e (2.7).

$$E = \sum_i n_i \epsilon_i \quad (2.6)$$

e

$$N = \sum_i n_i . \quad (2.7)$$

Descrito desse modo, temos todas informações que precisamos, uma vez que nos interessa apenas o número de partículas e as energias acessíveis. Caso desejemos trabalhar com um formalismo que permita que o número N de partículas possa flutuar, basta-nos considerar um ensemble grande-canônico (HUANG, 1987; PATHRIA, 1996). Em tal ensemble, se assumirmos $e^{-\beta(\epsilon_i - \mu)} < 1$, teremos (2.8)

$$\ln(\Xi) = - \sum_i \ln \left[1 - e^{-\beta(\epsilon_i - \mu)} \right] , \quad (2.8)$$

sendo μ o potencial químico do sistema e Ξ a função de partição grande-canônica. A distribuição de Bose-Einstein que caracteriza essa estatística se traduz na ocupação média $\langle n_i \rangle$ de um orbital i (2.9).

$$\langle n_i \rangle = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_i - \mu)} - 1} . \quad (2.9)$$

E desta maneira, considerando (2.6), (2.7) e a distribuição (2.9), somos capazes de expressar o número de termodinâmico de partículas N e a energia interna E do sistema, respectivamente em (2.10) e (??).

$$N = \sum_i \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_i - \mu)} - 1} \quad (2.10)$$

e

$$E = \sum_i \frac{\epsilon_i}{e^{\beta(\epsilon_i - \mu)} - 1} . \quad (2.11)$$

Expressões tais, são possíveis apenas quando a energia ϵ_i do orbital é maior que o potencial químico μ . Como a energia do estado fundamental pode ser escalada como zero, fica claro que o potencial químico necessariamente deve ser uma quantidade negativa. Se a temperatura for reduzida, o potencial químico pode aumentar, até que à uma temperatura crítica T_c , o potencial químico se torne nulo. E quando esse não pode ser maior que zero, conforme a temperatura for reduzida abaixo de T_c , o mesmo se mantém nulo. Significando então que nessas condições o sistema não gasta energia para popular o estado fundamental. Sendo as temperaturas baixas, os bósons que ocupam orbitais mais energéticos poderão passar a ocupar espontaneamente o orbital fundamental, gerando assim uma ocupação macroscópica de tal estado. Podemos observar isto matematicamente, pois note que usando (2.10), o número N_0 (2.12) de partículas no estado fundamental, cuja energia é $\epsilon_i = 0$, fica (2.13).

$$N_0 = \frac{1}{e^{-\beta\mu} - 1} . \quad (2.12)$$

E no limite em que o potencial químico vai a zero vindo de valores abaixo de zero

$$\lim_{\mu \rightarrow 0^-} N_0 \rightarrow \infty , \quad (2.13)$$

corroborando que ocorre uma ocupação macroscópica do estado fundamental. Quando uma fração efetiva dos bósons do sistema ocupa um único estado de uma partícula, chamamos o fenômeno de Condensação de Bose-Einstein.

3 Equação de Gross-Pitaevskii

3.1 Teorema Variacional de Bogoliubov

Existem inúmeros problemas na física, mas há soluções analíticas para apenas uma pequena e privilegiada classe de problemas que são os modelos mais simples para descrever sistemas. O que se faz é tentar modelar problemas mais realista a esses modelos ideais. E quando isso não é possível uma outra forma de abordar o problema é perturbativamente, isto é, dado um sistema bem conhecido e solúvel, considera-se um sistema mais sofisticado como se fosse uma pequena perturbação do sistema solúvel. E a solução desse novo sistema será baseada em aproximações em torno da solução do primeiro, que chamamos sistema não-perturbado.

Precisamos saber quais parâmetros introduzir na hamiltoniana perturbada de maneira a melhor representar as características do problema. Observaremos aqui um critério para escolha de parâmetros, este está pautado no teorema de Bogoliubov (CALLEN, 1985).

Considere um sistema caracterizado por uma hamiltoniana H que dependa do parâmetro que impomos λ . Tal hamiltoniana é escrita também em termos de uma hamiltoniana não-perturbada H_0 , isto é, referente a um sistema solúvel, o qual em certa medida é um sistema mais simples que o trabalhado. Definimos a hamiltoniana (3.1):

$$H(\lambda) = H_0 + \lambda H_1 \quad (3.1)$$

Chamamos $H(\lambda)$ de hamiltoniana perturbada, e H_1 de termo perturbativo. Ao parâmetro λ está associado a magnitude que separara o sistema solúvel do sistema em questão. A função de partição canônica Z associada às energias características E_j (HUANG, 1987; PATHRIA, 1996) é (3.2)

$$Z(\lambda) = \sum_j e^{-\beta E_j(\lambda)} \quad (3.2)$$

e em termos da hamiltoniana (3.1) fica (3.3).

$$Z(\lambda) = \sum e^{-\beta H(\lambda)} . \quad (3.3)$$

A energia livre de Helmholtz $F(\lambda)$ canônica (HUANG, 1987; PATHRIA, 1996) sendo (3.4).

$$F(\lambda) = -\frac{1}{\beta} \ln(Z(\lambda)) . \quad (3.4)$$

No nosso problema se torna (3.5).

$$F(\lambda) = -\frac{1}{\beta} \ln \left(\sum e^{-\beta H(\lambda)} \right) = \ln \left[\text{Tr} \left(e^{-\beta H(\lambda)} \right) \right] \quad (3.5)$$

e repare que aqui usamos uma propriedade de traço (Tr) de matriz, visto que as hamiltonianas que trabalhamos em mecânica quântica são na verdade operadores hamiltonianos, os quais recorrentemente representamos com matrizes. E quando calculamos o Traço de alguma matriz estamos somando os autovalores da mesma. Estudemos agora qual a relação da energia livre com o parâmetro λ que impomos no sistema, que a princípio não temos informação alguma. Calculando a primeira derivada de F com relação a esse parâmetro, obtemos (3.6).

$$\frac{dF}{d\lambda} = -\frac{1}{\beta} \frac{-\beta \text{Tr}(H_1) e^{-\beta H(\lambda)}}{\text{Tr}(-\beta H(\lambda))} = \langle H_1 \rangle . \quad (3.6)$$

E sua segunda derivada é (3.7).

$$\begin{aligned} \frac{d^2 F}{d\lambda^2} &= -\beta \left[\langle H_1^2 \rangle - \langle H_1 \rangle^2 \right] \\ &= -\beta \langle (H_1 - \langle H_1 \rangle)^2 \rangle \\ &= -\beta \sigma^2 \end{aligned} \quad (3.7)$$

Sendo os valores esperados representados por $\langle \rangle$, e σ^2 a variância da variável H_1 . Dado que a variância sempre é positiva e que β é um número positivo ($\beta = \frac{1}{k_B T}$, k_B sendo o fator de escala de Boltzman) é imediato de (3.7) que F satisfaz (3.8) para todo λ .

$$\frac{d^2 F(\lambda)}{d\lambda^2} \leq 0 . \quad (3.8)$$

Revelando que a energia livre é uma função côncava do parâmetro λ , e mais, $F(\lambda)$ está abaixo da reta tangente de F no ponto $\lambda = 0$, isto é, satisfazendo

$$F(\lambda) \leq F(0) + \lambda \left(\frac{dF}{d\lambda} \right)_{\lambda=0} \quad (3.9)$$

e recorde de (3.6) que $\frac{dF}{d\lambda}$ é o valor esperado de H_1 , assim obtemos

$$F(\lambda) \leq F(0) + \lambda \langle H_1 \rangle_{\lambda=0} \quad (3.10)$$

e tomando especificamente o valor $\lambda = 1$, segue o resultado

$$F(\lambda) \leq F(0) + \langle H_1 \rangle_{\lambda=0} , \quad (3.11)$$

note que $F(0)$ é a energia livre do sistema não-perturbado. Chamamos (3.11) de Inequação de Bogoliubov, esta diz que a energia livre do sistema perturbado é menor ou igual a energia livre do sistema não-perturbado somado ao valor esperado do termo perturbativo no ponto $\lambda = 0$. Deseja-se que essa soma seja a menor possível para que F esteja o mais próximo deste valores e a aproximação $F \approx F_0 + \langle H_1 \rangle_0$ seja boa. Portanto o critério de escolha do parâmetro é justamente esse, devemos escolher o parâmetro que minimize $F_0 + \langle H_1 \rangle_0$.

Podemos escrever a energia livre do sistema não-perturbado na forma (3.12) (HUANG, 1987; PATHRIA, 1996) (o índice 0 é usado para as propriedades referentes ao sistema não-perturbado).

$$F_0 = U_0 - TS_0 = \langle H_0 \rangle_0 - TS_0 \quad (3.12)$$

sendo U e S energia interna e entropia. E em (3.11) retorna (3.13).

$$F \leq \langle H_0 \rangle - TS_0 + \langle H_1 \rangle_0 \leq \langle H_0 + H_1 \rangle_0 - TS_0 \leq \langle H \rangle_0 - TS_0 \quad (3.13)$$

o que revela que nesse método devemos buscar minimizar a energia livre do sistema (CALLEN, 1985; KUZEMSKY, 2015) que chamamos não perturbado em relação ao parâmetro que escolhermos, e desta maneira poderemos obter uma aproximação mais realista para o sistema.

3.2 Condensado Interagente

Introduzamos agora uma hamiltoniana mais geral (3.14), capaz de descrever um sistema de bósons sujeitos a um campo externo e também a interação entre pares de partículas (PETHICK, 2002; ANNETT, 2004; ROGEL-SALAZAR, 2013)

$$\hat{H} = \sum_{k=1}^N \left(\frac{\hat{p}_k^2}{2m} + U_{ext}(r_k) + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i}^N V_{int}(|r_k - r_j|) \right), \quad (3.14)$$

sendo U_{ext} um potencial externo associado a uma possível armadilha confinadora do gás, e V_{int} um potencial de interação entre pares de bósons, que podemos modelar como sendo do tipo local, isto é, interação de contato

$$V_{int}(|r_k - r_j|) = \frac{4\pi\hbar^2}{m} a \delta^3(r_k - r_j), \quad (3.15)$$

com a sendo o comprimento de espalhamento, que mede a intensidade da interação, e ainda sua natureza. Se $a < 0$ a interação é atrativa e quando $a > 0$ a interação é repulsiva.

Dada a complexidade do termo de interação, que se soma par a par, podemos fazer aqui uma aproximação de que a função de onda do sistema possa ser escrita como o produto simétrico de funções de onda idênticas de cada partícula (PETHICK, 2002; ROGEL-SALAZAR, 2013), isto é

$$\Psi(r_1, r_2, \dots, r_N) = \psi(r_1) \cdots \psi(r_N) = \prod_i^N \psi(r_i), \quad (3.16)$$

tal aproximação é o que chamamos de aproximação de campo médio (CALLEN, 1985; KUZEMSKY, 2015), visto que cada partícula interage com todas as demais como se, individualmente, contribuíssem igualmente. E o problema de muitos corpos se reduz ao

estudo da função de onda de uma partícula. Com tal aproximação, é como se todos os bósons estivessem no mesmo estado de partícula única $\psi(\vec{r})$. A função de onda se comporta como uma função média que camufla os efeitos de correlação quando os átomos estão próximos. Chamamos tal função de parâmetro de ordem do sistema, ou até mesmo função de onda do condensado. E sendo uma aproximação dessa natureza, acaba por não contabilizar os átomos que visitam estados excitados de energia, portanto, na prática o número de átomos no estado ψ acaba por ser menor que N . Mas para que tal aproximação seja boa o suficiente é necessário que o gás tenha baixa densidade, a interação sendo de natureza repulsiva é um fator que permite que se considere o gás diluto. Para que nos asseguremos que o modelo irá representar o condensado deveremos minimizar a energia livre. Sendo o parâmetro de minimização justamente a função de onda, pois desejamos que o sistema se encontre no menor estado coletivo de energia, isto é, no estado fundamental, o que de fato caracteriza o condensado.

Precisamos determinar a energia livre, e sendo esse um sistema fluido, a energia livre é o potencial termodinâmico de Helmholtz

$$F(\psi) = E(\Psi) - \mu N = \langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle - \mu \langle \Psi | \Psi \rangle . \quad (3.17)$$

E normalizamos o problema definindo $\langle \Psi | \Psi \rangle = 1$. Explicitamente, a energia $E = \langle \Psi | H | \Psi \rangle$ se torna (3.18).

$$E(\psi) = \int d\vec{r} \left[-\frac{N\hbar^2}{2m} \psi^*(\vec{r}) \nabla^2 \psi(\vec{r}) + N U_{ext}(\vec{r}) |\psi(\vec{r})|^2 + \frac{1}{2} g N^2 |\psi(\vec{r})|^4 \right] . \quad (3.18)$$

E por sua vez a energia livre de Helmholtz $F(\psi)$ se torna (3.19).

$$F(\psi) = -\frac{N\hbar^2}{2m} \int d\vec{r} \psi^*(\vec{r}) \nabla^2 \psi(\vec{r}) + N \int d\vec{r} \psi^*(\vec{r}) U_{ext}(\vec{r}) \psi(\vec{r}) + \frac{1}{2} g N(N-1) \int d\vec{r} |\psi(\vec{r})|^4 - \mu \left(\int d\vec{r} |\psi(\vec{r})|^2 \right)^N , \quad (3.19)$$

com $g = a \frac{4\pi\hbar^2}{m}$. Obtida a energia livre em função do parâmetro, que no caso é a função de onda ψ , devemos encontrar a condição que tal função deve satisfazer para que a energia livre seja minimizada com relação ao parâmetro de ordem 3.1, e portanto retorne uma equação que descreva o condensado. O procedimento padrão para minimização é impor a condição de extremização (3.20) (ROGEL-SALAZAR, 2013) que podemos calcular em relação a ψ^* para obter uma relação em termos de ψ , uma vez que consideramos tais funções independentes no cálculo da derivada funcional

$$\frac{\delta F}{\delta \psi^*} = 0 . \quad (3.20)$$

Considerando o número de partículas grande ($N \gg 1$), somos capazes de obter a expressão

$$\left[\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U_{ext}(\vec{r}) \right) + g N |\psi(\vec{r})|^2 \right] \psi(\vec{r}) = \mu \psi(\vec{r}) , \quad (3.21)$$

que chamamos equação de Gross-Pitaevskii (ANNETT, 2004; PETHICK, 2002; ROGEL-SALAZAR, 2013) (ou pelo acrônimo GPE, fazendo referência às iniciais do termo em língua inglesa). E devido ao termo não-linear $g|\psi(\vec{r})|^2$, alternativamente chamamos (3.21) de equação de Schrödinger não-linear, visto que o hamiltoniano no lado esquerdo de (3.21) depende da própria função de onda. Uma tal equação independente do tempo reflete nos estados estacionários do condensado. Uma tal equação ainda possibilita que se determine a forma explícita do potencial químico, que pode ser encontrada multiplicando (3.21) por $\psi^*(\vec{r})$ e integrando no espaço

$$\mu = \int d\vec{r} \left[-\frac{N\hbar^2}{2m} \psi^*(\vec{r}) \nabla^2 \psi(\vec{r}) + NU_{ext}(\vec{r}) |\psi(\vec{r})|^2 + gN^2 |\psi(\vec{r})|^4 \right]. \quad (3.22)$$

Podemos pensar agora no problema dependente do tempo, esperando assim contemplar a evolução dinâmica da função de onda do condensado, que possa flutuar em relação ao estado fundamental. Posto isso a equação de Schrödinger que temos de resolver num tal sistema é

$$H(\psi, \vec{r}, t) \psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t}. \quad (3.23)$$

Obtemos aqui a equação de Gross-Pitaevskii dependente do tempo (ROGEL-SALAZAR, 2013)

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\vec{r}, t) + U_{ext}(\vec{r}) \psi(\vec{r}, t) + g|\psi(\vec{r}, t)|^2 \psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t}. \quad (3.24)$$

Assim, para que seja consistente com a forma estacionária (3.21), é necessário que a função de onda tenha dependência temporal da forma $\psi(\vec{r}, t) = e^{-i\mu t/\hbar}$ (PETHICK, 2002). Tornando assim a equação estacionária um caso particular da equação de dependente do tempo (3.24). Neste caso dinâmico a equação que irá dirigir a evolução do condensado de tal maneira que minimize a energia será o vínculo que minimize a ação S , isto é, o princípio da Mínima Ação

$$\delta S = 0. \quad (3.25)$$

É importante ressaltar que obtivemos uma descrição do condensado interagente através de um campo clássico em uma aproximação de campo médio, mas discutiremos posteriormente no capítulo 4 que a equação de Gross-Pitaevskii pode ser vista como uma equação exata no contexto da segunda quantização, e a função ψ como um campo coerente.

3.3 Gás Uniforme

Podemos trabalhar com a hipótese de um gás uniforme de bósons de tal maneira que se estiverem contidos em uma nuvem de volume Vol , a energia de interação por par de bósons será

$$E_{par} = \frac{g}{Vol}. \quad (3.26)$$

E se temos um estado coletivo de N bósons, a energia total será a energia por par multiplicada pelo número de pares nesse sistema. Como temos N bósons, teremos por sua vez $N/2$ pares, mas $N - 1$ maneiras de formar pares. Logo o número total N_T de pares que deve ser considerado é

$$N_T = (N - 1) \frac{N}{2} . \quad (3.27)$$

A energia total do sistema será então

$$E = \frac{N(N - 1)g}{2Vol} . \quad (3.28)$$

E para N grande ($N \gg 1$), segue

$$E = \frac{1}{2} Vol n^2 g , \quad (3.29)$$

com $n = N/Vol$ sendo a densidade de bósons na nuvem. Aqui podemos usar o conceito de função de onda do condensado, neste caso consideramos que o estado é coletivo e abriga todos os bósons num mesmo estado de uma partícula, passando a denotar a função de onda por uma normalização que subentende que os N bósons estão no mesmo estado

$$\psi(\vec{r}) \longrightarrow N^{1/2} \psi(\vec{r}) . \quad (3.30)$$

E a densidade n de partículas poderá ser escrita como

$$n = |\psi(\vec{r})|^2 . \quad (3.31)$$

Assim definida, o número total de partículas no sistema será N

$$N = \int d\vec{r} |\psi(\vec{r})|^2 . \quad (3.32)$$

Num gás uniforme a função de onda é a mesma em toda a nuvem (e podemos desprezar variações da mesma), e se esses bósons são livres, na equação de Gross-Pitaevskii (3.21) obtemos

$$g|\psi(\vec{r})|^2 \psi(\vec{r}) = \mu \psi(\vec{r}) , \quad (3.33)$$

que retorna

$$\mu = ng , \quad (3.34)$$

potencial químico que caracteriza uma nuvem uniforme. E se recordarmos a definição termodinâmica dessa propriedade

$$\mu = \frac{\partial E}{\partial N} . \quad (3.35)$$

Considerando $n = N/V$ e a energia (3.29), aplicando a derivada em (3.35), podemos constatar que concorda com o que obtivemos em (3.34), mostrando a consistência da aproximação uniforme.

3.4 Aproximação de Thomas-Fermi

No caso de um grande número de bósons na nuvem, podemos analisar qual termo é mais efetivo na energia. Observe a expressão da energia do condensado (3.18), se pensarmos numa densidade E/N podemos observar que ainda resta um fator N no termo de interação (termo quártico na função de onda), portanto quando temos uma nuvem bastante populada, isto é, um grande número de bósons, esse termo tende a se destacar em relação ao termo cinético de maneira que possamos desprezar a energia advinda desse termo. E na equação de Gross-Pitaevskii (3.21), teremos

$$\left[U(\vec{r}) + g|\psi(\vec{r})|^2 \right] \psi(\vec{r}) = \mu\psi(\vec{r}) , \quad (3.36)$$

do qual obtemos potencial químico, se recordarmos $n = |\psi(\vec{r})|^2$

$$\mu = ng + U(\vec{r}) . \quad (3.37)$$

E nesta análise podemos ainda determinar a função de onda homogênea, uma vez que por (3.36) segue

$$|\psi(\vec{r})|^2 = \frac{\mu - U(\vec{r})}{g} , \quad (3.38)$$

na região onde o lado direito de (3.38) é negativo, a função de onda está fora da nuvem e não existe, e no caso de ser positivo temos a solução

$$\psi(\vec{r}) = \sqrt{\frac{\mu - U(\vec{r})}{g}} . \quad (3.39)$$

Nas bordas da nuvem temos $\psi = 0$, e nesta condição o potencial químico é

$$\mu = U(\vec{r}) . \quad (3.40)$$

3.5 Condensados Unidimensionais

Em uma primeira análise de condensados, para consolidação de modelos numéricos que serão utilizados, é viável tratar inicialmente o sistema o mais simples possível, isto é sistemas unidimensionais, uma vez amadurecida a aplicação dos métodos, seria mais simples uma extensão do estudo e dos modelos de excitação do condensado para casos em duas e três dimensões. Contudo, embora a primeira motivação de tratar sistemas 1D seja a simplicidade, é factível em laboratório a construção de condensados alongados em uma dimensão, conhecidos como condensados em forma de charuto. Introduzimos nesta seção uma espécie de armadilha que simule um tal tipo de confinamento que torne o sistema aproximadamente unidimensional e destacamos quais propriedades devem ser satisfeitas para que a aproximação seja efetiva. Vamos supor um potencial externo confinador da forma (3.41) (KAMCHATNOV; SHCHESNOVICH, 2004)

$$U_{trap} = \frac{m}{2} (\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2) . \quad (3.41)$$

E consideremos uma simetria tal que as frequências nas direções y e z sejam iguais [3.42](#)

$$\omega_y = \omega_z = \omega_{\perp} . \quad (3.42)$$

Agora vamos considerar uma situação em que tenhamos a frequência definida em [3.42](#) expressivamente maior que a frequência na direção x ($\omega_{\perp} \gg \omega_x$). E esperamos que num tal limite possamos separar a função de onda $\psi(x)$ em coordenadas radiais ρ e x , e ainda considerar que a evolução temporal causa excitações efetivas apenas na direção x , uma vez que a maior frequência na direção radial mantém a energia em equilíbrio, conforme [\(3.43\)](#)

$$\psi(x, t) = \psi(\rho, x, t) = u(\rho) \vartheta(x, t) . \quad (3.43)$$

Definindo o laplaciano nas direções y e z como [\(3.44\)](#)

$$\nabla_{\perp}^2 = \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} , \quad (3.44)$$

podemos substituir u e ϑ na GPE [\(3.24\)](#) e multiplicar por ϑ^* , levando-nos a [\(3.45\)](#)

$$\left[-i\hbar \frac{\partial \vartheta}{\partial t} - \frac{\hbar}{2m} \frac{\partial^2 \vartheta}{\partial x^2} + \frac{1}{2} m \omega_x^2 x^2 \vartheta + g |\vartheta|^2 |u|^2 \vartheta + \kappa_p \vartheta \right] |u|^2 = 0 , \quad (3.45)$$

na qual supomos u solução do oscilador harmônico bidimensional [\(3.46\)](#)

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{\perp}^2 + \frac{1}{2} m \omega_{\perp}^2 \rho^2 u = \kappa_p u , \quad (3.46)$$

com solução [\(3.47\)](#)

$$u(\rho) = \left(\frac{m\omega_{\perp}}{\pi\hbar} \right)^{1/2} e^{-\frac{m\omega_{\perp}}{2\hbar} \rho^2} . \quad (3.47)$$

Podemos multiplicar [\(3.45\)](#) por ρ e integrar em tal variável, em seguida normalizar a equação pela integral em ρ de $\rho |u|^2$, de maneira que tenhamos uma equação com dependência apenas x e t [\(3.48\)](#)

$$i\hbar \frac{\partial \vartheta}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \vartheta}{\partial x^2} + \frac{1}{2} m \omega_x^2 x^2 \vartheta + gC |\vartheta|^2 \vartheta + \kappa_p \vartheta , \quad (3.48)$$

com a constante C sendo dada por [\(3.49\)](#)

$$C = \frac{\int d\rho \rho |u|^4}{\int d\rho \rho |u|^2} = \frac{1}{2} \frac{m\omega_{\perp}}{\pi\hbar} . \quad (3.49)$$

Se for feita uma mudança de variáveis [\(3.50\)](#)

$$\vartheta(x, t) = \psi(x, t) e^{-i\kappa_p t/\hbar} . \quad (3.50)$$

Obtemos uma forma da GPE em uma dimensão (3.51)

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} + \frac{1}{2} m \omega_x^2 x^2 \psi(x, t) + g_{1D} |\psi(x, t)|^2 \psi(x, t) , \quad (3.51)$$

com fator de não linearidade definido como $g_{1D} = Cg$. Para fins de simplificação da notação iremos adotar deste ponto em diante g_0 como sendo o fator de não linearidade do problema 1D, e a frequência ω subentendida como a frequência da armadilha na direção x. Fixado isso, a equação de interesse se torna (3.52)

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \psi(x, t) + g_0 |\psi(x, t)|^2 \psi(x, t) . \quad (3.52)$$

o que abre passagem para outras escolhas de potenciais externos $U_{ext}(x, t)$ além do caso harmônico, tais que funcionem como armadilhas que confinem o gás.

4 Modos Coerentes

Obtivemos no capítulo 3 a equação de Gross-Pitaevskii 3.23 em uma aproximação de campo médio, que descreve um condensado interagente através de um campo clássico ψ , funcionando como um parâmetro de ordem da quebra de simetria (PARKINS; WALLS, 1998). No entanto, cabe uma segunda interpretação, na qual ψ pode ser vista como um campo coerente, e a equação de Gross-Pitaevskii como uma equação exata. Basta neste modelo construir uma hamiltoniana do sistema interagente no formalismo da segunda quantização, considerando portanto campos bosônicos criação $\hat{\psi}^\dagger$ e aniquilação $\hat{\psi}$, de maneira que ψ pode ser visto como um campo coerente autoestado do operador aniquilação (YUKALOV; BAGNATO, 2002).

Propomos um potencial externo independente do tempo que funcione como uma armadilha confinadora 4.1 do gás bosônico

$$U_{ext}(x, t) = U_{trap}(x) . \quad (4.1)$$

Em (4.1), utilizamos o índice *trap* (devido ao termo *armadilha* na língua inglesa), tal armadilha leva a um problema de espectro discreto. E deve ter soluções da forma (COURTEILLE; YUKALOV, 2001)

$$\psi_n(x, t) = \psi_n(x) e^{-i\mu_n t/\hbar} , \quad (4.2)$$

de maneira que a função $\psi_n(x)$ e a autoenergia μ_n sejam definidas pelo problema de autovalores

$$H_0[\psi_n] \psi_n = \mu_n \psi_n . \quad (4.3)$$

As soluções estacionárias ψ_n são chamadas de modos coerentes, por vezes também chamadas modos não-lineares. Em geral, essa espécie de estados satisfaz duas propriedades, continuidade e completeza (KLAUDER; SKAGERSTAM, 1985). A forma dessas funções está diretamente associada a armadilha (4.1) que aprisiona o condensado, uma vez que cada modo coerente possui uma distribuição espacial particular, são chamados modos topológicos do condensado (YUKALOV; BAGNATO, 1997; YUKALOV; BAGNATO, 2002; YUKALOV; YUKALOVA, 2004). Apresentada a forma geral do problema de autovalores, devemos destacar que o condensado tem modos macroscópicos acessíveis, mas sua relação (4.3) fica descrita em termos do potencial químico de um determinado nível macroscópico, conforme (3.21), condicionando-nos a distinguir aqui as energias acessíveis por um conjunto de potenciais químicos acessíveis $\{\mu_n\}$. A questão que se sobrepõe agora é como levar o condensado a deixar um modo inicial para ocupar um determinado modo desejado, isto é, construir um condensado em um estado não-fundamental.

Um condensado de Bose-Einstein confinado por uma armadilha (4.1) tem estados coletivos acessíveis além do estado fundamental. Há especialmente modos coerentes estacionários da hamiltoniana não-linear. Tais modos podem ser populados a partir do estado fundamental através de campos externos com frequências próximas às frequências de ressonância característica dos estados envolvidos tais que possam excitar (YUKALOV; BAGNATO, 1997) o condensado.

Sistemas quânticos na faixa de um espectro discreto tem os níveis de energia (ou potencial químico) separados. E o intervalo entre os níveis é descrito pela frequência de transição

$$\omega_{mn} \equiv \frac{1}{\hbar} (\mu_m - \mu_n) . \quad (4.4)$$

Podemos incorporar ao sistema campos com frequência que permita que o sistema acesse demais estados nos baseando nessa distância entre os níveis acessíveis. Há duas maneiras já exploradas com sucesso de conduzir condensados a estados excitados, a primeira seria utilizar um campo modulador da armadilha que confina o gás (YUKALOV; BAGNATO, 2002) e a segunda seria o uso de um modulador da interação atômica (RAMOS et al., 2008; RAMOS; BAGNATO, 2012), isto é, do comprimento de espalhamento no modelo de interação de contato (3.15). Podemos analisar os dois casos e trabalhar com a implementação das duas naturezas de modulação, objetivando tornar a migração de população do estado fundamental para um determinado nível mais efetiva quando comparada ao efeito de exclusivo de uma das espécies de modulação.

4.1 Modulação da Armadilha

Na tentativa de conectar um determinado par de níveis do espectro acessível, ou seja, dois modos coerentes, podemos utilizar um campo oscilatório modulador da forma

$$V_{control}(x, t) = V(x) \cos(\omega t) , \quad (4.5)$$

com índice *control* fazendo referência ao controle. Digamos que estejamos interessados nos níveis 1 e 2, tal que $\mu_1 < \mu_2$. A frequência da transição é

$$\omega_{21} \equiv \frac{1}{\hbar} (\mu_2 - \mu_1) . \quad (4.6)$$

A condição para que haja ressonância, isto é, transição do sistema entre os dois níveis, é que a frequência ω do campo externo seja muito próxima da frequência de transição

$$\omega \approx \omega_{21} . \quad (4.7)$$

Ou mesmo, definindo a quantidade $\Delta\omega = \omega - \omega_{21}$, podemos estipular que a condição de ressonância possa ser colocada também como

$$\left| \frac{\Delta\omega}{\omega} \right| \ll 1 . \quad (4.8)$$

Considerando agora que o sistema é dirigido por um campo externo $\hat{V}_{control}$ (4.5) a equação de Schrödinger se torna

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = \left(\hat{H}_0[\psi] + \hat{V}_{control} \right) \psi(x, t) , \quad (4.9)$$

com hamiltoniana \hat{H}_0

$$\hat{H}_0[\psi] = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + U_{trap}(x) + g_0 |\psi(x, t)|^2 . \quad (4.10)$$

A função de onda $\psi(x, t)$ sendo uma função do espaço de Hilbert \mathcal{H} pode ser expandida como uma combinação linear dos estados coerentes $\{\psi_j\}$ da hamiltoniana normalizada, conjunto tal que verificando continuidade e a noção de produto interno pode ser usado para construir um envelope linear fechado formando uma base total de um subespaço de \mathcal{H} (YUKALOV; BAGNATO, 2002; KLAUDER; SKAGERSTAM, 1985). A Totalidade é uma forma mais fraca da propriedade de Completeza do que a baseada na resolução de unidade. A Totalidade não exige ortogonalidade das autofunções $\{\psi_j\}$, mas permite a expansão conforme (4.11).

$$\psi(x, t) = \sum_m b_m(t) \psi_m(x) , \quad (4.11)$$

dada a arbitrariedade do coeficiente complexo $b_m(t)$, podemos supô-lo da forma (4.12).

$$b_m(t) = c_m(t) e^{-i\mu_m t/\hbar} . \quad (4.12)$$

A situação de interesse na qual os modos coletivos possam ser separados requer que o coeficiente $c_m(t)$ seja uma função que varie lentamente no tempo quando comparada as oscilações do termo $e^{-i\mu_m t/\hbar}$, o que pode ser posto da forma (4.13).

$$\frac{\hbar}{\mu_m} \left| \frac{dc_m}{dt} \right| \ll 1 . \quad (4.13)$$

Dada a forma (4.12) e a condição (4.13) podemos buscar uma equação que descreva a dinâmica do coeficiente $c_n(t)$. Substituindo (4.11) e (4.12) em (4.9) e multiplicando a

igualdade resultante por $\psi_n^*(x) e^{i\mu_n t/\hbar}$

$$\sum_m e^{i\omega_{nm}t} \psi_n^* \left(i\hbar \frac{dc_m}{dt} + c_m \mu_m \right) \psi_m = \sum_m c_m e^{i\omega_{nm}t} \psi_n^* \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + U_{trap} + \hat{V} \right] \psi_m + g_0 \sum_{m,k,l} c_m e^{i\omega_{nm}t} \psi_n^* c_k^* c_l e^{i\omega_{kl}t} \psi_k^* \psi_l \psi_m, \quad (4.14)$$

omitimos em (4.14) as dependências temporal em c_m e espacial em ψ para simplificação da expressão. Podemos calcular sua uma média temporal, tal que dada uma função dependente do tempo $\Gamma(t)$, sua média seja dada por (4.15)

$$\langle \Gamma \rangle = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} \int_0^\tau dt \Gamma(t). \quad (4.15)$$

Se assumirmos as propriedades (4.16) e (4.17) (COURTEILLE; YUKALOV, 2001)

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} \int_0^\tau dt e^{i(\mu_n - \mu_m)t/\hbar} = \delta_{nm} \quad (4.16)$$

e também

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} \int_0^\tau dt e^{i(\mu_n + \mu_k - \mu_m - \mu_l)t/\hbar} = \delta_{nm} \delta_{kl} + \delta_{nl} \delta_{mk} - \delta_{nk} \delta_{ml}. \quad (4.17)$$

Considerando que os coeficientes $c_n(t)$ e $\frac{dc_n(t)}{dt}$ variam tão lentamente comparados às exponenciais, que sob cálculo da média são aproximadamente inalterados. O lado esquerdo de (4.14) se torna (4.18)

$$i\hbar \frac{dc_n}{dt} |\psi_n|^2 + c_n E_n |\psi_n|^2 \quad (4.18)$$

e o lado direito fica

$$c_n E_n |\psi_n|^2 + g \sum_{m \neq n} |c_m|^2 \left\{ |\psi_m|^2 [2|\psi_n|^2 - |\psi_m|^2] \right\} c_n + V_n, \quad (4.19)$$

com

$$V_n = \frac{1}{2} \delta_{n1} \psi_1^* V \psi_2 e^{i\Delta\omega t} + \frac{1}{2} \delta_{n2} \psi_2^* V \psi_1 e^{-i\Delta\omega t}. \quad (4.20)$$

Note que consideramos a forma

$$\cos(\omega t) = \frac{e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}}{2} \quad (4.21)$$

e a transformação

$$\langle e^{i(\omega + \omega_{ij})t} \rangle = e^{i(\omega - \omega_{21})t} \langle e^{i(\omega_{21} + \omega_{ij})t} \rangle = e^{i\Delta\omega t} \langle e^{i(\mu_2 + \mu_i - \mu_j - \mu_1)t/\hbar} \rangle, \quad (4.22)$$

levando em conta a aproximação de que $e^{i\Delta\omega t}$ varia tão lentamente quando $\omega \approx \omega_{21}$, que não é afetada pela média temporal. Se integrarmos (4.14) no espaço considerando (4.18) e (4.19), e definirmos (4.23) e (4.24)

$$\alpha_{mn} \equiv \frac{g_0}{\hbar} \int dx |\psi_m(x)|^2 [2|\psi_n(x)|^2 - |\psi_m(x)|^2] \quad (4.23)$$

e

$$\beta_{lk} \equiv \frac{1}{\hbar} \int dx \psi_l^*(x) V(x) \psi_k(x) . \quad (4.24)$$

Assim, obtemos

$$i \frac{dc_n}{dt} = \sum_{m \neq n} \alpha_{mn} |c_m(t)|^2 c_n(t) + \frac{1}{2} \delta_{n1} \beta_{12} e^{i\Delta\omega t} + \frac{1}{2} \delta_{n2} \beta_{12}^* e^{-i\Delta\omega t} . \quad (4.25)$$

Se $n \neq 1, 2$, os termos vindos do potencial externo se anulam e obtemos

$$i \frac{dc_n}{dt} = \sum_{m \neq n} \alpha_{mn} |c_m|^2 c_n , \quad (4.26)$$

que escrito na forma separável

$$\frac{dc_n}{c_n} = -i \sum_{m \neq n} \alpha_{mn} |c_m|^2 dt , \quad (4.27)$$

integrando na variável c_n no lado esquerdo e em t no lado direito segue

$$\ln(c_n(t)) - \ln(c_n(0)) = -i \sum_{m \neq n} \alpha_{mn} \int_0^t dt' |c_m(t')|^2 , \quad (4.28)$$

uma tal equação nos leva a

$$c_n(t) = c_n(0) \exp \left\{ -i \sum_{m \neq n} \alpha_{mn} \int_0^t dt' |c_m(t')|^2 \right\} . \quad (4.29)$$

Observe que num cenário no qual somente os níveis $n = 1, 2$ estejam populados, temos

$$c_n(0) = 0 , \quad n \neq 1, 2 . \quad (4.30)$$

E por (4.29), como consequência se verifica

$$c_n(t) = 0 , \quad n \neq 1, 2 . \quad (4.31)$$

Note que em (4.31) há um significado importante, se um determinado estado diferente dos envolvidos pelo campo ressonante não estiver populado antes do campo ser ligado, então este estado não será populado posteriormente, isto é, uma tal configuração funciona como um sistema de dois níveis. Assim a população total do sistema pode ser colocada como (4.32)

$$n \approx n_1 + n_2 \quad (4.32)$$

Entendido isso, devemos nos preocupar apenas com os níveis excitados pelo campo externo, no caso os níveis 1 e 2. Utilizando a relação geral (4.29), determinamos as equações de movimento que descrevem o sistema

$$i \frac{dc_1}{dt} = \alpha_{12} |c_2|^2 c_1 + \frac{1}{2} \beta_{12} c_2 e^{i\Delta\omega t} \quad (4.33)$$

e

$$i \frac{dc_2}{dt} = \alpha_{21} |c_1|^2 c_2 + \frac{1}{2} \beta_{12}^* c_1 e^{-i\Delta\omega t} . \quad (4.34)$$

A população $n_j(t)$ de cada modo j , pode ser determinado então por (4.35) (YUKALOV; BAGNATO, 2002)

$$n_j(t) = |c_j(t)|^2 , \quad j = 1, 2 . \quad (4.35)$$

Através das equações (4.33) e (4.34), somos capazes de escrever equações diferenciais para $c_1(t)$ e $c_2(t)$, considerando 4.32, e partindo de uma aproximação tal que as quantidades n_j (4.35) possam ser consideradas constantes de movimento quando comparadas às c_j , que oscilam mais rapidamente, método que chamamos separação de escala (YUKALOV; BAGNATO, 1997). Desta maneira, derivando as equações (4.33) e (4.34) em relação ao tempo e manipulando-as, nesta aproximação teremos $\frac{dn_j}{dt} \approx 0$ e seremos capazes de separar as equações para cada variável c_j em (4.36) e (4.37), onde observamos um caso mais simples no qual tenhamos $\alpha_{12} = \alpha_{21} = \alpha$ e $\beta_{12} = \beta_{21}^* = \beta$

$$\frac{d^2c_1}{dt^2} + i(\alpha - \Delta\omega) \frac{dc_1}{dt} + \left[\frac{|\beta|^2}{4} - \alpha n_2 (\alpha n_2 - \delta\omega) \right] c_1 = 0 \quad (4.36)$$

e

$$\frac{d^2c_2}{dt^2} + i(\alpha + \Delta\omega) \frac{dc_2}{dt} + \left[\frac{|\beta|^2}{4} - \alpha n_1 (\alpha n_2 + \delta\omega) \right] c_2 = 0 , \quad (4.37)$$

cujas soluções, considerados os n_j constantes de movimento, são dadas em (4.38) e (4.39) (YUKALOV; BAGNATO, 1997)

$$c_1 = \left[\cos\left(\frac{\Omega t}{2}\right) + i \frac{\alpha(n_1 - n_2) - \delta\omega}{\Omega} \sin\left(\frac{\Omega t}{2}\right) \right] e^{-i(\alpha - \Delta\omega)t/2} \quad (4.38)$$

e

$$c_2 = -i \frac{\beta^*}{\Omega} \sin\left(\frac{\Omega t}{2}\right) e^{-i(\alpha + \Delta\omega)t/2} , \quad (4.39)$$

com frequência efetiva Ω dada por (4.40)

$$\Omega^2 = [\alpha(n_1 - n_2)] + |\beta|^2 . \quad (4.40)$$

Assim, com (4.38) e (4.39) somos capazes de determinar a ocupação de cada nível em função do tempo através de (4.35), obtendo (4.42) e (4.42) válidas para funções que variam lentamente no tempo

$$n_1 = 1 - \frac{|\beta|^2}{\Omega^2} \sin^2\left(\frac{\Omega t}{2}\right) \quad (4.41)$$

e

$$n_2 = \frac{|\beta|^2}{\Omega^2} \sin^2\left(\frac{\Omega t}{2}\right) . \quad (4.42)$$

Podemos observar em $n_1(t)$ e $n_2(t)$ como se dá a dinâmica de populações na aproximação de dois níveis. Um aspecto interessante é a frequência efetiva Ω do sistema que funciona como um sistema atômico de dois níveis sob radiação coerente como uma frequência de Rabi (VITANOV et al., 2001), na qual podemos observar que a não-linearidade do sistema induz um comportamento especial, no qual a frequência efetiva do sistema depende das populações da cada nível, e portanto varie em cada instante de tempo.

É possível localizar quatro propriedades que se verificadas configuram as equações para $c_n(t)$ deduzidas aqui como verdadeiras. Estão associadas ao fato de que a frequência de transição deve se impor em relação as demais vibrações no sistema, tais como interações internas ou causadas pelo campo externo (4.43). E ainda devemos assegurar que a frequência do campo ressonante se aproxima o máximo possível da frequência de transição (4.8).

$$\left| \frac{\alpha_{12}}{\omega_{21}} \right| \ll 1, \quad \left| \frac{\alpha_{21}}{\omega_{21}} \right| \ll 1, \quad \left| \frac{\beta_{12}}{\omega_{21}} \right| \ll 1. \quad (4.43)$$

Destaca-se nesta seção a propriedade de que um campo externo na frequência de ressonância característica de um estado alvo deve levar a um sistema aproximadamente de dois níveis, uma vez que inicialmente apenas os estados inicial e alvo estejam ocupados. Porém, devemos nos atentar que na prática isto não deve ser verificado, quando é sabido que o sistema é não-linear, e as autofunções da hamiltoniana não são ortogonais, logo, se o sistema inicialmente está no estado fundamental, tem portanto projeções não nulas em demais autofunções da hamiltoniana, configurando uma população inicial não nula de outros estados além do fundamental e do alvo. Esclarecido este ponto, nada impede porém, que para determinadas amplitudes de interação a aproximação de dois níveis seja bastante eficaz.

4.2 Modulação da Interação

O comprimento de espalhamento é a quantidade que descreve a magnitude da interação interatômica no gás e através de um campo magnético homogêneo é possível controlar a interação (RAMOS; BAGNATO, 2012). Quando considerado um campo oscilante no tempo em uma frequência próxima da transição característica, é possível excitar modos topológicos do condensado (RAMOS et al., 2008; RAMOS; BAGNATO, 2012). Se for incorporando ao fator de não linearidade um termo oscilante no tempo $g_{control}$ em (4.44).

$$g_{control}(t) = A_G \cos(\omega t), \quad (4.44)$$

com A_G sendo a amplitude da onda, e ω uma frequência tal que seja próxima da frequência característica da transição entre os níveis desejados, isto é, $\omega \approx \omega_{21}$. A hamiltoniana do

sistema toma a forma

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) + (1 + g_{control}(t)) |\psi(x, t)|^2 \quad (4.45)$$

Vimos na seção anterior 4.1 que a aproximação de dois níveis embora não incorpore por completo a realidade de um sistema não linear, pode ser uma boa aproximação. Na presente seção trabalharemos com esta aproximação, pois aqui a modulação sendo realizada sobre a interação, torna-se complicado determinar as equações diferenciais se considerado a expansão completa (4.11). Truncamos portanto, a expansão em dois níveis (4.46).

$$\psi(x, t) = c_1(t) e^{-i\mu_1 t} \psi_1(x) + c_2(t) e^{-i\mu_2 t} \psi_2(x) . \quad (4.46)$$

Aplicando o mesmo método e aproximação para médias temporais da seção anterior e implementando agora (4.46), os termos de interação α_{mn} se mantêm com mesma forma, mas os termos devido ao campo não são mais os mesmos, pois agora a modulação envolve o termo não linear $|\psi(x, t)|^2$ e não mais a armadilha. O termo externo que perturba a hamiltoniana \hat{H}_0 nesse caso será

$$\vartheta_n = \langle \psi_n^* e^{i\mu_n t} g_{control}(t) \psi(x, t) \rangle , \quad (4.47)$$

para $n = 1, 2$ os termos que sobrevivem são

$$\vartheta_1 = \frac{A_G}{2} e^{i\Delta\omega} (|c_2|^2 c_2 \psi_1^* |\psi_2|^2 \psi_2 + 2|c_1|^2 c_2 \psi_1^* |\psi_1|^2 \psi_2) + \frac{g(x)}{2} e^{-i\Delta\omega} c_2^* c_1^2 \psi_2^* |\psi_1|^2 \psi_1 \quad (4.48)$$

e

$$\vartheta_2 = \frac{A_G}{2} e^{-i\Delta\omega} (|c_1|^2 c_1 \psi_2^* |\psi_1|^2 \psi_1 + 2|c_2|^2 c_1 \psi_2^* |\psi_2|^2 \psi_1) + \frac{g(x)}{2} e^{i\Delta\omega} c_1^* c_2^2 \psi_1^* |\psi_2|^2 \psi_2 . \quad (4.49)$$

E se definirmos as integrais $I_{j,k,l}$ (4.50)

$$I_{j,k,l} = A_G \int dx \psi_j^* |\psi_k|^2 \psi_l . \quad (4.50)$$

Obtemos as equações diferenciais para os níveis 1 e 2

$$i \frac{dc_1}{dt} = \alpha_{12} |c_2|^2 c_1 + \frac{1}{2} e^{i\Delta\omega t} (|c_2|^2 c_2 I_{1,2,2} + 2|c_1|^2 c_2 I_{1,1,2}) + \frac{1}{2} e^{-i\Delta\omega t} c_2^* c_1^2 I_{2,1,1} \quad (4.51)$$

e

$$i \frac{dc_2}{dt} = \alpha_{21} |c_1|^2 c_2 + \frac{1}{2} e^{-i\Delta\omega t} (|c_1|^2 c_1 I_{2,1,1} + 2|c_2|^2 c_1 I_{2,2,1}) + \frac{1}{2} e^{i\Delta\omega t} c_1^* c_2^2 I_{1,2,2} . \quad (4.52)$$

As equações (4.51) e (4.52) dirigem a dinâmica de populações do sistema, mas aqui devido a natureza dos termo advindos da modulação do comprimento de espalhamento, torna-se complicado assumir um procedimento como o realizado na seção 4.1 para modulação da armadilha, dificultando a equações diferenciais para c_1 e c_2 de maneira separada, o que inviabiliza a busca por soluções analíticas como no caso da modulação anterior.

5 Métodos Numéricos para Solução da Equação de Gross-Pitaevskii

Introduzimos aqui os polinômios de Chebyshev e explicamos sua utilidade na construção de uma grade no qual escrevemos o sistema em 5.1, o que facilita escrever e solucionar equações diferenciais do tipo equação de Schrödinger, utilizamos tais polinômios também para expandir o operador evolução em 5.2 com o fim de simular a dinâmica do condensado, procedimento que caracteriza um método alternativo dentre várias formas de aproximação numérica para propagação da função de onda em problemas no contexto da equação de Gross-Pitaveskii, apresentando em diversas situações vantagens de performance em relação a métodos bem difundidos na comunidade científica (KOSLOFF et al., 1991; DIJK; TOYAMA, 2007; FORMÁNEK; HOUFEK, 2010). E com procedimento análogo, mas com tempo imaginário, destacamos o método de relaxação utilizado para obter informações de um condensado na seção 5.2.1, tais como função de onda, potencial químico e energia, dados o comprimento de espalhamento característico e os parâmetros da armadilha que o confina, especialmente nos casos em que se deseja obter informações dos estados excitados em 5.2.2 do condensado.

5.1 Polinômios de Chebyshev

Dada uma aproximação de uma função por uma expansão em polinômios, o tipo que retorna o menor valor do erro máximo em um determinado intervalo são os polinômios T_n de Chebyshev, que satisfazem a relação de recorrência (MASON; HANDSCOMB, 2003; TREFETHEN, 2000)

$$T_{n+1}(X) = 2XT_n(X) - T_{n-1}(X) , \quad (5.1)$$

com $T_0(X) = 1$ e $T_1(X) = X$. Escrevemos a função e os pontos do domínio dessa função no que chamamos de grade, que é um conjunto de pontos que variam no intervalo $[-1, 1]$ e são igualmente espaçados, e permitem uma interpolação que é capaz de convergir para a função desejada com um número de pontos N razoavelmente baixo. Os pontos x são escritos na forma que chamamos pontos de Chebyshev, se escolhermos N pontos da grade, para $j = 0, \dots, N$

$$X_j = \cos\left(\frac{j}{N}\pi\right) . \quad (5.2)$$

E através destes pontos, é possível construir uma matriz de diferenciação, que calcula derivadas e através e sua inversa, também calcular integração facilitando os procedimentos numéricos abrindo mão de demais métodos para esses dois tipos de cálculo.

5.2 Método de Propagação nos Polinômios de Chebyshev

Dada a função de onda ψ que representa o estado quântico do sistema, a sua evolução dinâmica de um tempo inicial t_0 até um tempo t é dirigido pela equação de Schrödinger

$$i\frac{d\psi}{dt} = \hat{H}\psi . \quad (5.3)$$

Uma vez que o operador hamiltoniano \hat{H} não dependa do tempo a função que guiará a função de onda do estado inicial ao estado final é o operador evolução $\hat{U}(t, t_0) = \exp(-i\hat{H}(t - t_0)/\hbar)$ (SAKURAI, 1994), tal que a função de onda será propagada da forma

$$\psi(t) = \hat{U}(t, t_0)\psi(t_0) = e^{-i\hat{H}(t-t_0)/\hbar}\psi(t_0) . \quad (5.4)$$

No caso em que a hamiltoniana $H(t)$ dependa do tempo, se tomarmos um passo de tempo dt pequeno entre os tempos inicial e final, neste intervalo a hamiltoniana será aproximadamente independente do tempo, e podemos utilizar o mesmo operador evolução, assim

$$\psi(t + dt) \approx e^{-i\hat{H}(t)dt/\hbar}\psi(t) , \quad (5.5)$$

uma tal expressão em geral não pode ser resolvida exatamente, então uma alternativa é fazer uma expansão apropriada do operador evolução

$$e^{-i\hat{H}(t)dt/\hbar} \approx \sum_{n=0}^M a_n \varphi_n(-i\hat{H}(t)/\hbar) . \quad (5.6)$$

Escolhemos tal expansão nos polinômios de Chebyshev φ_n com coeficientes a_n (MASON; HANDSCOMB, 2003) que possibilitam uma rápida convergência, isto é, com um pequeno número de termos da expansão (5.6) já podemos ter uma boa aproximação. Além disso, os erros associados à aproximação diminuem exponencialmente com M , distribuindo-se uniformemente no intervalo $[-i, i]$ dos polinômios. A aproximação polinomial de Chebyshev tem o menor erro comparado com as demais aproximações polinomiais, justamente pelo fato de que o erro máximo é o menor possível numa expansão feita nesses polinômios. Discretizando a função de onda nos pontos da grade, calculando a operação de \hat{U} sobre a função de onda em um tempo dt e propagando iterativamente a função de onda ao longo de um período de tempo discretizado em intervalos dt aplicamos ao todo o que se chama de método de Chebyshev (TAL-EZER; KOSLOFF, 1984), que propaga a evolução dinâmica através de pontos e Polinômios de Chebyshev.

Uma vez que os polinômios varrem valores entre $[-i, i]$, a hamiltoniana deve ser normalizada de maneira que tome somente valores no intervalo $[-1, 1]$. Considerando que sua grade de valores se distribuem na faixa entre energia mínima e máxima $\Delta\mu = \mu_{max} - \mu_{min}$, propõe-se a renormalização \hat{H}_{norm} (KOSLOFF et al., 1991)

$$\hat{H}_{norm} = 2\frac{\hat{H} - \hat{I}(\Delta\mu/2 + \mu_{min})}{\Delta\mu} , \quad (5.7)$$

e a evolução da função de onda se torna

$$\psi(t + dt) \approx e^{-i(\Delta\mu/2 + \mu_{min})dt/\hbar} \sum_{n=0}^M a_n \left(\frac{\Delta\mu dt}{2\hbar} \right) \varphi(-i\hat{H}_{norm}) \psi(t) . \quad (5.8)$$

E os coeficientes a_n comportam-se como a função de Bessel de primeiro tipo

$$a_n(\Delta\mu dt/2\hbar) = 2J_n(\Delta\mu dt/2\hbar) , \quad (5.9)$$

para $n \neq 0$ e $a_0 = J_0$. Definido o argumento do polinômio φ como o operador $\hat{X} = -i\hat{H}_{norm}$, a relação de recorrência característica se torna

$$\varphi_{n+1}(\hat{X}) = 2\hat{X}\varphi_n(\hat{X}) + \varphi_{n-1}(\hat{X}) , \quad (5.10)$$

com $\varphi_0(\hat{X}) = \hat{I}$ e $\varphi_1(\hat{X}) = \hat{X}$.

5.2.1 Caso Independente do Tempo: Método da Relaxação

Quando esperamos encontrar estados estacionários da hamiltoniana, o nosso problema se torna independente do tempo. Portanto resolvemos o problema em uma forma semelhante como foi dada na seção anterior, porém calculado no tempo imaginário. Se fizermos a transformação de variáveis $\tau = it$, e supormos uma função de onda inicial qualquer $\psi(0)$ que chamamos chute inicial, a solução da equação de Schrödinger independente do tempo é dada pela propagação

$$\psi(\tau) = e^{-\hat{H}_{norm}\tau} \psi(0) . \quad (5.11)$$

Sendo $\psi(0)$ uma função do espaço de Hilbert \mathcal{H} pode aproximadamente ser expandida como uma combinação linear dos estados coerentes $\{\psi_j\}$ da hamiltoniana

$$\psi(\tau) = e^{-\hat{H}_{norm}\tau} \sum_j c_j \psi_j , \quad (5.12)$$

e se observarmos que a operação $e^{-\hat{H}_{norm}[\psi_j]\tau}$ aplicada em $\psi(0)$ mesmo no caso em que a hamiltoniana não é linear, podemos aproximar $H_{norm}[\psi] \approx H_{norm}[\psi_j]$ (MURUGANANDAM; ADHIKARI, 2009), e tal operação sobre os ψ_j em (5.12) retorna termos $e^{-\mu_j\tau}$, segue que sob sucessivas aplicações do operador evolução no tempo imaginário, isto é, para um tempo τ grande e considerando que as autoenergias μ_j aumentam com j , a função de onda deve convergir ao estado de energia μ_0 , isto é, o estado fundamental, cujo termo exponencial decai mais lentamente, quando sua energia é o menor dos autoestados da hamiltoniana. Portanto, se aplicarmos a propagação para um intervalo $d\tau$ seguidas vezes até um tempo τ grande a função de onda que era o palpite inicial deve convergir ao estado fundamental da hamiltoniana como em (5.13) (CHIN; KROTSCHKECK, 2005; BAYE; SPARENBERG, 2010; ATOINE et al., 2016).

$$\psi(\tau) = \prod_k e^{-\hat{H}_{norm}d\tau} \psi(0) \rightarrow \psi_0 . \quad (5.13)$$

Um tal procedimento chamamos de método da relaxação (KOSLOFF; TAL-EZER, 1986). Então, assim como anteriormente expandiremos o operador evolução numa série de polinômios de Chebyshev, porém agora para um tempo imaginário grande o suficiente para a função inicial convergir ao estado fundamental da hamiltoniana. Considerando agora $\hat{X} = -H_{norm}$, os coeficientes a_n da expansão na série de Chebyshev se comportarão como a função de Bessel modificada de primeiro tipo I_n , tal que $a_n = 2I_n$ com $a_0 = I_0$. Atente ainda que, uma vez obtido o estado estacionário da hamiltoniana não linear, o potencial químico, autovalor dessa hamiltoniana pode ser encontrado por (5.14), quando ψ_0 é normalizada.

$$\mu_0 = \langle \psi_0 | \hat{H}_{norm} | \psi_0 \rangle . \quad (5.14)$$

Este procedimento além de levar ao estado fundamental da hamiltoniana, também pode determinar os demais estados estacionários, isto é, autoestados de maior energia, desde que se use um método que retire o estado fundamental original do espaço de Hilbert (KOSLOFF; TAL-EZER, 1986), assim a relaxação levará ao primeiro estado excitado, que por sua vez sendo retirado do sistema, permitirá que se encontre o segundo estado excitado e assim sucessivamente.

5.2.2 Estados Excitados

O problema tratado aqui é solucionar uma hamiltoniana não linear, sendo desta natureza a dificuldade de encontrar seus estados aumenta pelo fato de não bastar uma simples diagonalização da hamiltoniana. No método da relaxação visto na seção 5.2.1, uma vez que se utilize como função inicial o estado fundamental da armadilha ou o primeiro estado fundamental, a função de onda converge ao estado fundamental e primeiro estado excitado da hamiltoniana não linear, respectivamente. Porém o mesmo não acontece para estados excitados a partir do segundo isto é, se for utilizado uma função inicial autoestado da armadilha, esta não convergirá ao autoestado correspondente da hamiltoniana não linear, convergindo por sua vez a um dos primeiros autoestados, uma função de onda inicial par converge ao estado fundamental e casos seja ímpar converge ao primeiro autoestado excitado. Portanto é necessário utilizar um método para retirar os autoestados anteriores ao autoestado desejado.

O método que podemos utilizar seria um análogo ao esquema S-AITP (do termo em inglês *spectrum-adapted imaginary time propagation*) (HOCKER; RABITZ, 2016), que é capaz de ocultar os estados não convenientes numa determinada situação. Os passos desse método iterativo que podemos destacar seriam:

1. Desejado encontrar o estado ψ_j da hamiltoniana não linear, podemos utilizar uma função de onda inicial tal que seja o autoestado φ_j da armadilha, uma vez que supomos que o fator de não linearidade é uma espécie de perturbação do sistema dirigido apenas pela armadilha. esperando-se então que haja alguma semelhança na forma dessas

autofunções.

$$\psi(x, 0) = \varphi_j(x) . \quad (5.15)$$

2. Realizamos uma diagonalização da hamiltoniana não-linear (3.52) escrita para o termo inicial $\psi(x, 0)$, armazenando seus autovalores $\{\lambda_j\}$ e autovetores $\{\vec{f}_j\}$ correspondentes nas matrizes Λ diagonal e F_M respectivamente, com

$$\Lambda = \text{Diag}[\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_N] \quad (5.16)$$

e

$$F_M = [\vec{f}_1, \vec{f}_2, \dots, \vec{f}_N] , \quad (5.17)$$

com $\lambda_1 < \lambda_2 < \dots < \lambda_N$.

3. Criamos uma matriz auxiliar diagonal M_{aux} , a qual substitui todos autovalores menores que o autoestado j por valores λ_{max} suficientemente grandes a ponto de serem maiores que λ_j , que por exemplo pode ser o maior dos autovalores.

$$M_{aux} = \text{Diag}[\lambda_{max}, \lambda_{max}, \dots, \lambda_{max}, \lambda_j, \lambda_{j+1}, \lambda_{j+2}, \dots, \lambda_N] \quad (5.18)$$

4. Podemos tornar a hamiltoniana diagonal por uma hamiltoniana por uma transformação \tilde{H} tal que use a matriz de autovetores F .

$$\tilde{H} = F_M^\dagger M_{aux} F_M , \quad (5.19)$$

levando-a no operador evolução \tilde{U}

$$\tilde{U} = e^{-\tilde{H}d\tau} . \quad (5.20)$$

5. Aplicado o operador evolução sobre a função de onda $\psi(x, 0)$, obtemos $\psi(x, d\tau)$, sendo tal operação calculada no tempo imaginário, é acrescido à ψ um fator constante, portanto devemos renormalizá-la de maneira que tenha norma 1.

6. Devemos repetir o processo por um tempo suficientemente grande tal que a função de onda convirja ao estado desejado

$$\psi(\tau) = \prod_k e^{-\tilde{H}d\tau} \psi(0) \rightarrow \psi_j . \quad (5.21)$$

Com esse processo é possível determinar os estados excitados da hamiltoniana não-linear, bastando que tenhamos como função de entrada a autofunção correspondente da armadilha que confina o sistema.

5.3 GPE na Grade

Para que se possa resolver o problema da GPE através da expansão nos polinômios, é necessário mapear o problema nos pontos de Chebyshev. Primeiramente precisamos normalizar o problema de maneira que seus valores não variem além da grade dos pontos de Chebyshev, isto é, permaneçam entre $[-1, 1]$. Escreveremos a hamiltoniana do sistema na nova variável já normalizada $\bar{x} = x/R$, com R sendo o comprimento da grade inicial. Se escolhermos $m = \omega_0 = \hbar = 1$ e uma armadilha $V(x)$, obteremos a hamiltoniana escrita na grade

$$\hat{H} = -\frac{1}{2R^2} \frac{d^2}{d\bar{x}^2} + V(R\bar{x}) + \frac{g_0}{R} |\psi(\bar{x}, t)|^2 . \quad (5.22)$$

Feito isto e escrevendo também a função de onda ψ nos pontos \bar{x} , seremos capazes de resolver numericamente o problema, realizando também derivadas e integrais através da matriz de Chebyshev ([MASON; HANDSCOMB, 2003](#); [TREFETHEN, 2000](#)).

6 Controle Coerente

Até aqui trabalhamos separadamente com duas formas de modulação, ambas fortemente embasadas por (YUKALOV; BAGNATO, 2002; RAMOS et al., 2008; RAMOS; BAGNATO, 2012), o caminho natural agora é utilizar as duas modulações simultaneamente com o objetivo de tornar mais eficaz a transição de estados desejada quando comparada com o uso de apenas um dos tipos de modulação. Entendemos por mais eficaz características tais como menor tempo de transição e maior deslocamento de população para o estado desejado em relação ao número inicial de átomos. Em um refinamento do controle é possível construir Funcionais de Custo, tais que retornem condições que os moduladores devem satisfazer para maximização da probabilidade de ocorrer uma determinada transição. Exploramos no apêndice A as possibilidades mais comuns de construção deste funcional bem como os parâmetros que podem ser controlados, este tipo de análise configura o Controle quântico ótimo. Destacadas os caminhos possíveis para otimizar o controle do condensado, aqui voltamos nossa atenção em especial para o impacto da diferença de fase entre os campos sobre qualidade da transição.

Em gases atômicos frios e ultrafrios é bem estabelecido o uso de Ressonância de Feshbach para configurar um gás em um determinado comprimento de espalhamento desejado. O mesmo pode ser feito em condensados até mesmo em comprimentos de espalhamento naturalmente desfavoráveis a condensação, visto que há uma faixa acessível de valores em torno da ressonância. A factibilidade de tais tarefas é suportada pelo uso de campos magnéticos sintonizados (TIESINGA E.; STOOFF, 1993). Em uma tal aplicação é possível determinar a dependência do comprimento de espalhamento com o campo (MOERDIJK; AXELSSON, 1995). Quando se utiliza um aprisionamento magnético, utilizar um campo modulador de mesma natureza para controlar o espalhamento pode interferir nos parâmetros da armadilha, tal fato destaca a relevância do uso adicional de controle óptico, introduzindo redes ópticas para configurar uma armadilha, de maneira que o campo magnético seja usado apenas na modulação, ou ainda é possível induzir diretamente com lasers a ressonância de Feshbach, que trabalhando apenas nas variações de frequência e intensidade da luz possibilita construir modulações espaço-temporais para dirigir o comprimento de espalhamento (CLARK LI-CHUNG HA; CHIN, 2015; ARUNKUMAR; THOMAS, 2019), trazendo vantagens como uma menor perda de átomos e maior equilíbrio do condensado, evitando em maior grau o aquecimento devido a espalhamento espontâneo, e conseqüentemente, maior tempo de vida do condensado nas condições almejadas. Este amparo experimental assegura que é possível realizar controles espaço-temporais da interação, motivando portanto, a exploração de variedades de dependências espaciais e estimar seus possíveis impactos.

Sabemos das seções 4.1 e 4.2 que um condensado excitado por campos moduladores da armadilha ou do comprimento de espalhamento com frequências próximas a frequência característica da transição desejada leva a uma dinâmica de populações que pode ser descrita aproximadamente por um sistema de dois níveis. Nesta aproximação podemos ter um sistema semelhante a um gás atômico sob efeito de radiação numa aproximação também de dois níveis quânticos, assim como foi visto nas soluções analíticas no caso de modulação da armadilha em (4.42) e (4.42), uma tal semelhança motiva o experimentação do uso de interferência quântica entre caminhos de transição para controlar a dinâmica de populações do sistema usualmente utilizado em gases atômicos frios (GORDON, 1997; VITANOV et al., 2001; KOCH; SHAPIRO, 2012), mas agora adaptado ao problema de condensados, no qual os níveis são modos topológicos da hamiltoniana não-linear.

A ideia do controle quântico coerente é aplicar um campo $\epsilon(t)$ da forma (6.1) com amplitudes ϵ_j , frequências ω_j e fase relativa ϕ (GORDON, 1997), de maneira que seja uma combinação de campos tais que excitem o estado alvo através de caminhos de transição diferentes, a fase relativa e as frequências podem ser configuradas de uma maneira tal que ocorra interferência quântica dos campos, que é uma maneira de conduzir uma transição ou interrompê-la.

$$\epsilon(t) = \epsilon_1 \cos(\omega_1 t + \phi_1) + \epsilon_2 \cos(\omega_2 t + \phi_2) . \quad (6.1)$$

É possível ainda utilizar mais campos com outros parâmetros e simultaneamente para que ocorra interferência com os demais. Podem ser construídos com a frequência característica da transição, ou com metade desta frequência, ou mesmo uma frequência um intervalo acima ou abaixo da frequência de transição, veja a figura 1. Cada um desses campo representam um caminho de transição, e se em algum intervalo de tempo coexistirem ligados, haverá interferência entre as amplitudes de transição devido a esses, e conseqüentemente algum impacto sobre a dinâmica de populações, levando a uma probabilidade de transição da forma (6.2), na qual podemos verificar um termo dependente de ϕ , que contém a informação da interferência entre amplitudes de transição devido a diferentes fontes.

$$P_{\mu_0 \mu_j} \propto |A_1|^2 + |A_2|^2 + 2A_1 A_2 \cos(\theta) . \quad (6.2)$$

Com o fim de observar a resposta à essas ideias no contexto de controle do condensado para construí-lo, ou conduzi-lo do estado fundamental a um estado não-fundamental, ou mesmo, um modo topológico, introduziremos aqui um campo da externo do tipo (6.3)

$$W_{control}(x, t) = V_{control}(x, t) + g_{control}(x, t) . \quad (6.3)$$

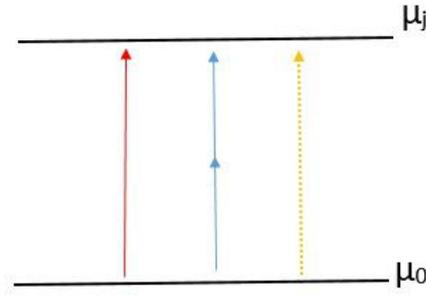


Figura 1: Caminhos de transição do modo fundamental μ_0 para um modo topológico μ_j . A flecha vermelha (primeira da esquerda para direita) representa um primeiro caminho a uma dada frequência, as flechas azuis representam um segundo caminho com metade das frequências, enquanto que a última flecha (pontilhada amarela) representa um campo a uma frequência que pode ser próxima da primeira, com certo desvio. Fonte: Autor.

Um tal campo tem $V_{control}$ seguindo a mesma forma de (4.5), enquanto que $g_{control}$ aqui tem a forma espaço-temporal (6.4)

$$g_{control}(x, t) = g(x) \cos(\omega t) , \quad (6.4)$$

ambas modulações com frequência $\omega \approx \omega_{21}$ e amplitudes A_V e A_G , contidas nos termos $V(x)$ e $g(x)$, respectivamente. Podemos construímos modulações na mesma frequência $\omega \approx \omega_{21}$, separadas apenas por uma diferença de fase θ para dar generalidade ao formalismo, mas sendo nula ou 2π , as contribuições são coerentes e se somam, aumentando a probabilidade de ocorrer a transição entre o estado 1 e o estado 2.

$$W_{control}(x, t) = V(x) \cos(\omega t + \theta) + g(x) |\psi(x, t)|^2 \cos(\omega t) \quad (6.5)$$

Aplicando as mesmas técnicas de cálculo de médias temporais realizadas nas seções anteriores 4.1 e 4.2, onde se assumia que o modulador da interação dependia apenas do tempo. E considerando a aproximação de dois níveis, obtemos as equações diferenciais (6.6) e (6.7).

$$i \frac{dc_1}{dt} = \alpha_{12} |c_2|^2 c_1 + \frac{1}{2} \beta_{12} c_2 e^{i(\Delta\omega t + \theta)} + \frac{1}{2} e^{i\Delta\omega t} \left(|c_2|^2 c_2 I_{1,2,2} + 2|c_1|^2 c_2 I_{1,1,2} \right) + \frac{1}{2} e^{-i\Delta\omega t} c_2^* c_1^2 I_{2,1,1} \quad (6.6)$$

e

$$i \frac{dc_2}{dt} = \alpha_{21} |c_1|^2 c_2 + \frac{1}{2} \beta_{21} c_1 e^{-i(\Delta\omega t + \theta)} + \frac{1}{2} e^{-i\Delta\omega t} \left(|c_1|^2 c_1 I_{2,1,1} + 2|c_2|^2 c_1 I_{2,2,1} \right) + \frac{1}{2} e^{i\Delta\omega t} c_1^* c_2^2 I_{1,2,2} , \quad (6.7)$$

com a definição

$$I_{j,k,l} = \int dx g(x) \psi_j^* |\psi_k|^2 \psi_l . \quad (6.8)$$

É possível ainda ajustar os parâmetros de uma maneira tal que as duas formas de modulação separadamente conduzam a uma dinâmica de transição aproximadamente igual, isto é, com semelhantes tempo de transição e número de átomos deslocados para o estado desejado. Uma vez configurado isso, esperamos que unindo as duas modulações nessas mesmas características, para diferenças de fase $\theta = 0, 2\pi$ a contribuição dobre, e para $\theta = \pi$ os termos se anulem e o sistema seja dirigido pela hamiltoniana \hat{H}_0 , o sistema no autoestado inicial $\psi_0(x)$ sendo estacionário, não será induzido por \hat{H}_0 a ocupar um outro nível.

Construído um modelo em que as modulações de naturezas diferentes são consideradas caminhos diferentes de transição e podem interferir entre si, as questões que surgem são se de fato há uma maneira prévia analítica de observar se a fase tem alguma efetividade sobre a dinâmica de populações e se o uso fase nos campos quando usados individualmente representa também uma maneira de controlar a transição. Objetivando elucidar esses problemas, podemos aplicar uma teoria de perturbação válida para tempos curtos e observar se há uma resposta à fase em cada caso, modulações individuais da armadilha ou espalhamento e modulação dupla.

6.1 Aproximação perturbativa

Na tentativa de observar uma resposta preliminar analítica ao impacto da diferença de fase entre os campos sobre a dinâmica de populações, poderemos analisar uma situação tal que os campos moduladores possam ser considerados um campo perturbativo $W_{control}(x, t)$ sobre a hamiltoniana não perturbada H_0 (4.10). Assim a hamiltoniana perturbada pode ser escrita como (6.9).

$$H(t) = H_0 + \lambda W_{control}(x, t) , \quad (6.9)$$

ou mesmo, na forma explícita (6.10)

$$H(t) = H_0 + \lambda [g_{control}(x, t) + V_{control}(x, t)] . \quad (6.10)$$

Desejamos analisar a probabilidade $P_{1 \rightarrow 2}(t)$ (6.11) do sistema popular o estado desejado ψ_2 uma vez que seu estado inicial seja o estado ψ_1

$$P_{1 \rightarrow 2}(t) = |\langle \psi_2 | \psi(t) \rangle|^2 . \quad (6.11)$$

Se podemos escrever os coeficientes $b_2(t)$ como (6.12)

$$b_2(t) = \langle \psi_2 | \psi(t) \rangle , \quad (6.12)$$

segue de (4.12) que a probabilidade $P_{1 \rightarrow 2}(t)$ se torna (6.13)

$$P_{1 \rightarrow 2}(t) = |b_2(t)|^2 = |c_2(t)|^2 . \quad (6.13)$$

É possível realizar uma expansão dos coeficientes $c_1(t)$ e $c_2(t)$ em uma série de potências de λ , respectivamente em (6.14) e (6.15)

$$c_1(t) = c_1^{(0)}(t) + \lambda c_1^{(1)}(t) + \lambda^2 c_1^{(2)}(t) + \dots \quad (6.14)$$

e

$$c_2(t) = c_2^{(0)}(t) + \lambda c_2^{(1)}(t) + \lambda^2 c_2^{(2)}(t) + \dots \quad (6.15)$$

Os coeficientes $c_1^{(n)}$ e $c_2^{(n)}$ para $n = 0, 1, 2, \dots$ podem ser encontrados um a um a partir da comparação entre termos de mesma ordem em λ , quando (6.14) e (6.15) forem substituídos nas equações (6.6) e (6.6) (COHEN-TANNOUJJI; LALOE, 1991) e observando as condições iniciais (6.16), na qual se faz uma aproximação de que seja possível popular inicialmente o estado 1, com projeções muito baixas da função de onda $\psi(x, t = 0)$ nos demais estados, em especial o estado alvo 2, cuja ocupação inicial é muito próxima de zero.

$$c_1(t = 0) = 0, \quad c_2(t = 0) = 0. \quad (6.16)$$

Com essas ideias poderemos ter um primeiro retorno do impacto da fase sobre os modelos de controles em uma forma analítica, permitindo analisar a dinâmica de populações quando os termos β e I forem muito pequenos comparados aos termos de interação. Introduzindo as expansões (6.14) e (6.15) nas equações da dinâmica de populações (6.6) e (6.7), obtemos em ordem zero em λ as equações (6.17) e (6.18).

$$i \frac{dc_1^{(0)}}{dt} = \alpha_{12} |c_2^{(0)}|^2 c_1^{(0)} \quad (6.17)$$

e

$$i \frac{dc_2^{(0)}}{dt} = \alpha_{21} |c_1^{(0)}|^2 c_2^{(0)}. \quad (6.18)$$

E as soluções de (6.17) e (6.18) são respectivamente (6.19) e (6.20).

$$c_1^{(0)}(t) = c_1^{(0)}(0) \exp \left[-i \alpha_{12} \int_0^t dt' |c_2^{(0)}(t')|^2 \right] \quad (6.19)$$

e

$$c_2^{(0)}(t) = c_2^{(0)}(0) \left[-i \alpha_{21} \int_0^t dt' |c_1^{(0)}(t')|^2 \right]. \quad (6.20)$$

Considerando (6.16), obtemos em (6.19) e (6.19) soluções que refletem exatamente as condições iniciais. Uma aproximação em ordem zero não é, portanto, capaz de fornecer alguma informação sobre o impacto dos campos. Desta maneira podemos avançar em uma análise em ordem um em λ . Novamente nas equações (6.6) e (6.7), introduzimos as expansões (6.14) e (6.15), e separando termos de ordem λ , obtemos as equações (6.21) e (6.22).

$$\begin{aligned} i \frac{dc_1^{(1)}}{dt} = & \alpha_{12} \left[\left(c_2^{*(0)} c_2^{(1)} + c_2^{*(1)} c_2^{(0)} \right) c_1^{(0)} + |c_2^{(0)}|^2 c_1^{(1)} \right] + \frac{1}{2} \beta_{12} c_2^{(0)} e^{i(\Delta\omega t + \theta)} \\ & + \frac{1}{2} e^{i\Delta\omega t} \left[|c_2^{(0)}|^2 c_2^{(0)} I_{1,2,2} + 2 |c_1^{(0)}|^2 c_2^{(0)} I_{1,1,2} \right] + \frac{1}{2} e^{-i\Delta\omega t} c_2^{*(0)} c_1^{(0)2} I_{2,1,1} \end{aligned} \quad (6.21)$$

e

$$i \frac{dc_2^{(1)}}{dt} = \alpha_{21} \left[\left(c_1^{*(0)} c_1^{(1)} + c_1^{*(1)} c_1^{(0)} \right) c_2^{(0)} + |c_1^{(0)}|^2 c_2^{(1)} \right] + \frac{1}{2} \beta_{21} c_1^{(0)} e^{-i(\Delta\omega t + \theta)} + \frac{1}{2} e^{-i\Delta\omega t} \left[|c_1^{(0)}|^2 c_1^{(0)} I_{2,1,1} + 2 |c_2^{(0)}|^2 c_1^{(0)} I_{2,2,1} \right] + \frac{1}{2} e^{i\Delta\omega t} c_1^{*(0)} c_2^{(0)2} I_{1,2,2} . \quad (6.22)$$

E através das soluções em ordem zero $c_1^{(0)}$ e $c_2^{(0)}$, obtidas em (6.19) e (6.20), somos capazes de tornar as equações em ordem um (6.21) e (6.22) mais simples, como podemos ver em (6.23) e (6.24).

$$i \frac{dc_1^{(1)}}{dt} = 0 \quad (6.23)$$

e

$$i \frac{dc_2^{(1)}}{dt} = \alpha_{21} c_1^{(1)} + \frac{1}{2} \beta_{21} e^{-i(\Delta\omega t + \theta)} + \frac{1}{2} I_{2,1,1} e^{-\Delta\omega t} . \quad (6.24)$$

A solução de (6.23) é uma constante, e se sabemos que numa aproximação de ordem um temos $c_1(t) \approx c_1^0(t) + \lambda c_1^{(1)}(t)$, sabido que $c_1(0) = 1$, como $c_1^{(0)} = 1$, segue que a aproximação de ordem um é nula, conforme (6.25).

$$c_1^{(1)}(t) = 0 . \quad (6.25)$$

Através da solução (6.25), podemos simplificar (6.24) e solucionar $c_2^{(1)}(t)$ em (6.26)

$$c_2^{(1)}(t) = \frac{1}{2\Delta\omega} \left(\beta_{21} e^{-i\theta} + I_{2,1,1} \right) \left(e^{-i\Delta\omega} - 1 \right) . \quad (6.26)$$

Agora podemos calcular em primeira ordem a probabilidade de transição entre os níveis 1 e 2 $P_{1 \rightarrow 2}(t)$ em (6.27).

$$P_{1 \rightarrow 2}(t) = |\langle \psi_2(x) | \psi(x, t) \rangle|^2 = |c_2(t)|^2 , \quad (6.27)$$

se observado (6.27) em ordem um, poderemos expressar a probabilidade como (6.28)

$$P_{1 \rightarrow 2}(t) \approx \left| \frac{1}{2\Delta\omega} \left(\beta_{21} e^{-i\theta} + I_{2,1,1} \right) \left(e^{-i\Delta\omega} - 1 \right) \right|^2 \quad (6.28)$$

Através de simples manipulações algébricas em (6.28), poderemos explicitar a probabilidade de transição $P_{1 \rightarrow 2}$ na forma (6.29).

$$P_{1 \rightarrow 2}(t) \approx \frac{1}{|\delta\omega|^2} \left[\beta_{21}^2 + I_{2,1,1}^2 + 2\beta_{21} I_{2,1,1} \cos(\theta) \right] \sin^2 \left(\frac{\Delta\omega t}{2} \right) . \quad (6.29)$$

Somos capazes de observar em (6.29) uma dependência explícita da fase relativa θ entre os campos, mostrando que a amplitude de transição é impactada pela interferência entre as amplitudes de transição assim como introduzido em (6.2) nas ideias levantadas sobre controle coerente. Então em uma teoria perturbativa de primeira ordem fomos capazes de encontrar o caráter de interferência no contexto de condensados modulados por campos externos. Em uma primeira análise podemos destacar alguns pontos. Veja que se θ fosse

igual 0, ou 2π , a amplitude da probabilidade deveria somar o terceiro termo entre colchetes, de maneira a aumentar a probabilidade de transição, enquanto que se $\theta = \pi$ teríamos uma subtração desse termo, levando a uma queda da probabilidade $P_{1 \rightarrow 2}$, e se as amplitudes de interação β e I fossem de ordem muito próximas, esperaria-se que a probabilidade de ocorrer transição nesta fase relativa fosse muito próxima de zero, entretanto se fossem de ordens diferentes a queda da amplitude de transição seria esperada mas de maneira que não anulasse a probabilidade de transição. Um detalhe importante que se põe explicitamente em (6.29) é que se qualquer dos campos estivesse desligado o termo misto dependente da fase seria nulo, uma vez que os coeficientes β_{21} ou $I_{2,1,1}$ seriam nulos, levando a uma independência da fase relativa. Neste último contexto então podemos concluir que a interferência entre amplitudes de transição é um fenômeno característico da modulação dupla, e não deve ter um grande impacto modular a fase quando se utiliza apenas um campo.

7 Resultados Numéricos

Aqui apresentaremos alguns resultados numéricos obtidos através dos métodos trabalhados nas seções 5.2, 5.2.1, 5.2.2 e 5.3, submetendo-os a comparação com trabalhos semelhantes, nas tarefas de encontrar estados estacionários da hamiltoniana, determinar sua dinâmica, e observar o impacto de campos externos sobre a evolução do condensado. Para as presentes comparações os trabalhos mais importantes, que além de referência para confirmar os resultados, ainda foram fortemente influentes sobre os caminhos assumidos neste projeto são as tabelas de energias do condensado para armadilhas harmônicas (HOCKER; RABITZ, 2016), bem como seu método de encontrar estados excitados da hamiltoniana não-linear, podemos citar aqui também a miscelânea de códigos numéricos para diversas configurações de condensados (MURUGANANDAM; ADHIKARI, 2009), que foram estudados e explorados ao longo da construção dos métodos particulares da nossa pesquisa e submetidos a parâmetros específicos dos problemas que tratamos. E por último, e especialmente o trabalho mais influente sobre nosso projeto são as aproximações de poucos níveis para tratar condensados em três dimensões quando submetidos a campos moduladores da armadilha confinadora ou comprimento de espalhamento (COURTEILLE; YUKALOV, 2001; YUKALOV; BAGNATO, 2002; YUKALOV; YUKALOVA, 2004; RAMOS et al., 2008; RAMOS; BAGNATO, 2012), que sob diversas adaptações de formas de armadilhas e campos, bem como redução de dimensão, foi um importante degrau para sustentar nossos resultados.

7.1 Estados topológicos da Hamiltoniana

A primeira aplicação realizada foi a implementação do método da relaxação para determinar estados estacionários da hamiltoniana não-linear (5.22) sob confinamento de uma armadilha harmônica $U(x) = x^2/2$. Para um número de iterações no tempo imaginário grande o suficiente foi possível convergir a função de onda $\psi(x)$ ao estado fundamental ψ_0 da hamiltoniana não linear para vários fatores de não-linearidade, que apresentamos na figura 2. Uma vez que o termo de não-linearidade aumenta seu papel observamos que a função do condensado tende a ocupar maior espaço do domínio da grade, o que se deve ao fato da interação ser repulsiva, e quanto o maior o papel de tal interação, a ocupação das regiões do centro da nuvem de bósons se torna menor. Um tal resultado concorda com o comportamento apresentado para mesmos valores de g , mas para espaços maiores em (MURUGANANDAM; ADHIKARI, 2009). Ainda trabalhando com tais funções de ondas, calculamos o potencial químico μ (3.22) e a energia E (3.18) do sistema na tabela 1. Tais potenciais químicos concordam com os encontrados em (HOCKER; RABITZ, 2016) para

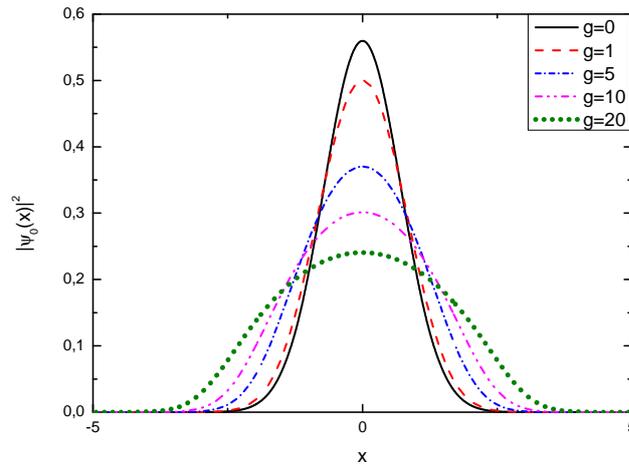


Figura 2: Função de onda do Estado fundamental para fatores g_0 de não-linearidade diferentes. Fonte: Autor.

os mesmos valores de g .

Tabela 1: Potencial químico e Energia do estado fundamental para diferentes fatores g_0 de não-linearidade. Fonte: Autor.

g_0	μ	E
0	0.500000000	0.500000000
1	0.869943805	0.689487034
5	2.011460452	1.316061719
10	3.107243090	1.947127215
20	4.873005097	2.984733317

Obtivemos ainda o primeiro estado excitado ψ_1 também para vários fatores de não linearidade g_0 na figura 3. E utilizando o método S-AITP da seção 5.2.2, retornamos o segundo e o terceiro estado excitado nas figuras 4 e 5 respectivamente.

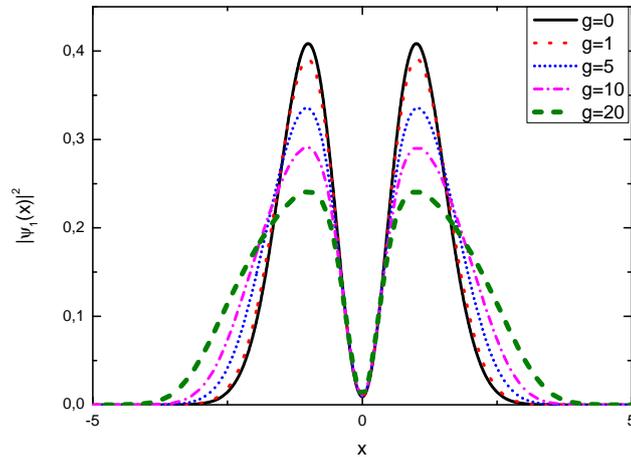


Figura 3: Primeiro estado excitado. Fonte: Autor.

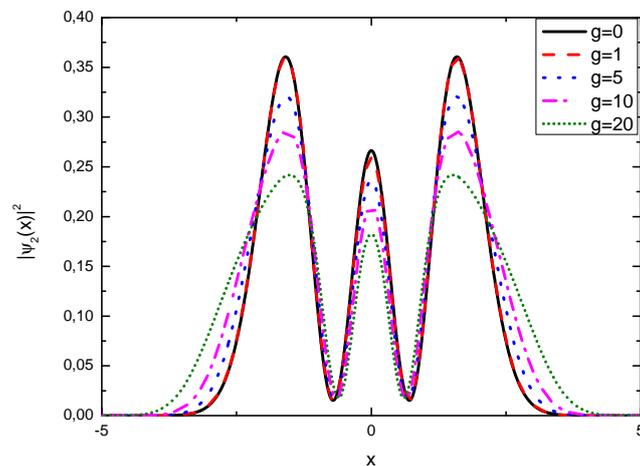


Figura 4: Segundo estado excitado. Fonte: Autor.

Até aqui, é possível observar que os resultados apresentam comportamento semelhante ao estado excitado correspondente do problema do oscilador harmônico quântico (veja o caso $g_0 = 0$), porém sob efeito da interação a função de onda se espalha no espaço. Concordando também com (HOCKER; RABITZ, 2016)

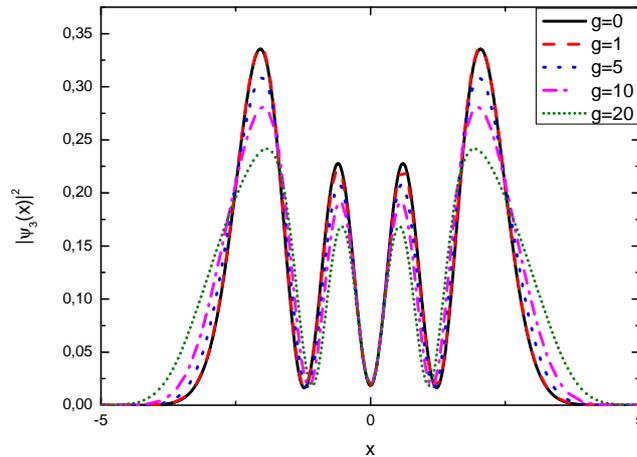


Figura 5: Terceiro estado excitado. Fonte: Autor.

7.2 Dinâmica do Sistema

Em sequência, submetemos (vide figura 7.2) a função do estado fundamental do potencial harmônico $\exp(-x^2/2)/(\pi)^{\frac{1}{4}}$ característica de $g_0 = 20$ a uma evolução temporal dirigida pela hamiltoniana não-linear para $g_0 = 10$, de tal maneira que não seja autoestado da hamiltoniana a qual está sujeita. Observamos na figura 7.2 que a função de onda tem

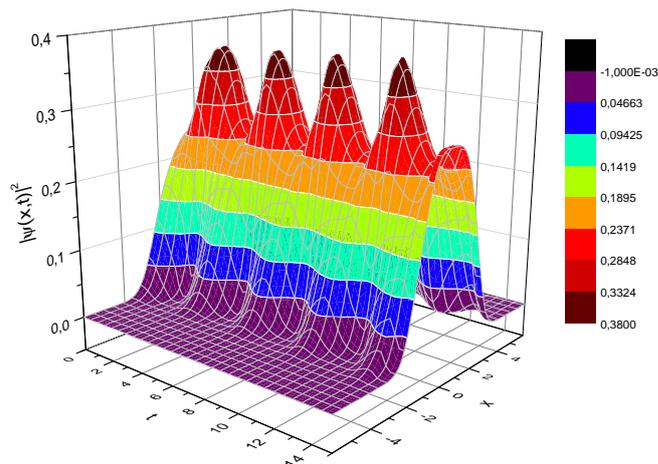


Figura 6: Evolução da função de onda estacionária para $g_0 = 20$ sob hamiltoniana característica de $g_0 = 10$

. Fonte: Autor

comportamento não estacionário, permanecendo numa oscilação harmônica em torno de um raio médio. O que pode ser visto de maneira mais clara na figura 7, na qual se explicita

o raio quadrático médio X_{RMS} (RMS vem do termo *root mean square* em inglês), calculado via (7.1).

$$X_{RMS} = \int dx x^2 |\psi(x, t)|^2, \quad (7.1)$$

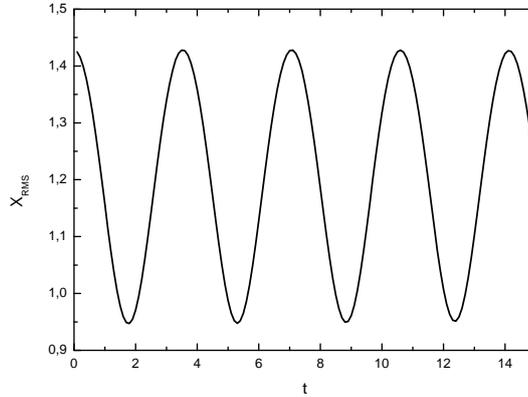


Figura 7: Raio médio quadrático da função de onda em função do tempo. Fonte: Autor

Tal processo de evolução do condensado de perfil estacionário para um determinado fator de não-linearidade sob uma hamiltoniana com metade do fator de não-linearidade g_0 característico é uma ideia proveniente de (MURUGANANDAM; ADHIKARI, 2009) e o comportamento aqui apresentado concorda com seus resultados. Comportamento que é razoável, um vez que a dinâmica é regida por uma hamiltoniana atuando sobre uma função de onda que não é sua autofunção.

7.3 Excitação de Estados Via Moduladores

Construídos os códigos numéricos capazes de simularem a dinâmica de um condensado 1D, nosso trabalho se volta agora para o entendimento do impacto que campos externos podem ter sobre a excitação de estados desejados da hamiltoniana. trabalharemos aqui os regimes em que determinadas armadilhas são convenientes, bem como as diferentes naturezas de modulação externa, observando o grau de eficiência em cada escolha. Nesta etapa do trabalho nossos resultados buscam forte apoio nos trabalhos (COURTEILLE; YUKALOV, 2001; YUKALOV; BAGNATO, 2002; YUKALOV; YUKALOVA, 2004; RAMOS et al., 2008; RAMOS; BAGNATO, 2012), que são trabalhos envolvidos no estudo da excitação dos modos topológicos da hamiltoniana não-linear através de campos na frequência de transição característica de um determinado estado alvo, uma vez conhecido que o estado inicial sempre é o fundamental. tais trabalhos além de observarem diferentes formas de armadilhas e moduladores ainda empregam grande esforço em obter um modelo simples de poucos níveis que possa representar bem o que é obtido com o cálculo direto. Assumido aqui que nossos resultados são testados e comparados sistematicamente com os

modelos de poucos níveis, devemos nos atentar a escolha de parâmetros conveniente, tais que satisfaçam em bom grau todas as condições exigidas para validade dessas aproximações. Em geral as maiores preocupações se voltam para a magnitude do fator de não-linearidade g_0 e a amplitude dos campos externos, e acrescenta-se aqui o fato de a armadilha pode ter grande influência sobre a validade dos modelos aproximados, uma vez que dependendo de sua natureza pode se tornar uma tarefa muito difícil, até mesmo com campos de baixa magnitude, manter os átomos em poucos níveis. Destacamos ainda que o interesse deste trabalho se volta para a excitação de estados topológicos coerentes da própria hamiltoniana não linear, uma vez que na prática desejamos trabalhar com uma situação tal que ao levar um condensado ao estado desejado através do efeito de um campo por um tempo limitado, após desligado o campo, o sistema permaneça no estado desejado. Isto é factível quando o estado alvo é justamente um estado estacionário da hamiltoniana não-linear.

7.3.1 Modulação da Armadilha

Nos resultados anteriores todos testes foram realizados com uma armadilha harmônica, aqui submeteremos um sistema confinado por uma tal armadilha ao efeito de um campo externo e observar se tal armadilha pode oferecer um cenário esperado pelo modelo de poucos níveis. utilizando uma armadilha harmônica de frequência $\omega_x = 1$, isto é, $U(x) = x^2/2$ com fator de não linearidade $g_0 = 1$, observamos na figura 8 através do nosso modelo numérico a ocupação dos três primeiros estados da hamiltoniana sob um modulador da forma (4.5) com $V(x) = A_V x^3 e^{-x^2}$ (recomendado em (YUKALOV; YUKALOVA, 2004) para armadilhas de mesma natureza) e amplitude $A_V = 0.1$, quando o campo é ligado os átomos se dispersam em estados que não se limitam apenas aos primeiros vizinhos do estado fundamental, nota-se na figura 9 que a soma Σ das populações do estados 0, 1, 2 e 3 (fundamental, primeiro excitado, e assim por diante) é fortemente reduzida de maneira generalizada, o que não pode ser descrito por um modelo aproximado de dois ou três níveis como o desejado.

Uma vez verificado que o sistema confinado pela armadilha harmônica não é suportado por um modelo de dois ou três níveis, o trabalho se volta para a escolha de uma armadilha em que seja válido o limite de poucos níveis acessados, quando aplicado um campo externo. Em (YUKALOV; YUKALOVA, 2004) também foi tratado o caso de uma armadilha anarmônica do tipo quártica sob efeito de um campo linear, mostrando uma resposta mais alinhada com o modelo aproximado de poucos níveis quando realizado o cálculo direto do que o modelo de armadilha harmônica. Uma tal armadilha além de representar uma boa concordância com o modelo aproximado, ainda suporta excitação de estados alvo sob campos mais simples. Portanto aplicamos nosso método numérico para o caso de uma armadilha $U(x) = x^4/4$ sob ação de um campo da forma (4.5) com $V(x) = A_G x$ e o comparamos com um modelo de 3 níveis. Uma tal concordância é muito

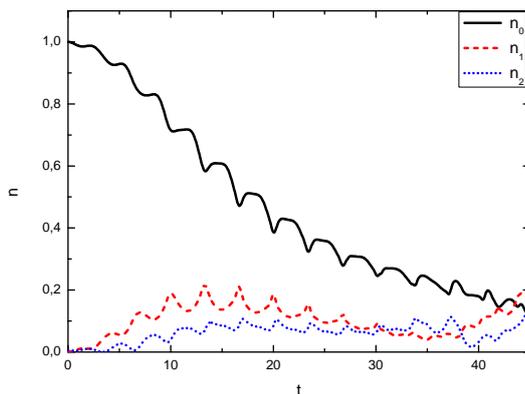


Figura 8: Ocupação dos estados fundamental n_0 , primeiro e segundo estado excitado, n_1 e n_2 , respectivamente. Fonte: Autor.

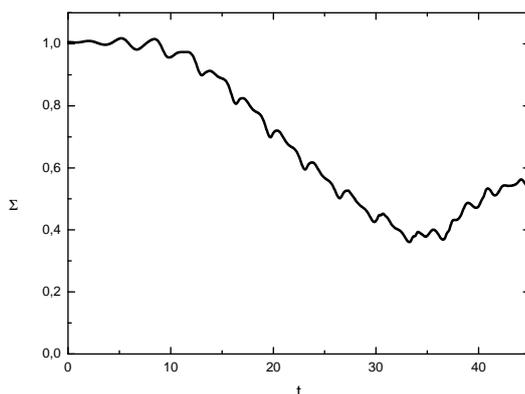


Figura 9: Soma Σ das ocupações dos quatro primeiros autoestados da hamiltoniana não linear. Fonte: Autor.

sensível às magnitudes da interação e amplitude do campo aplicado. Portanto haverá casos em que um modelo de 2 níveis é suficiente para descrevê-lo e outros em que é necessário adicionar mais níveis à análise. Na figura 10, observamos que mesmo para uma amplitude baixa comparada ao fator de interação $g_0 = 1$, foi necessário trabalhar com 3 níveis para que os métodos tivessem boa concordância. Esta sensibilidade dos modelos justifica uma escolha de interação baixa quando se deseja compará-los.

Posto que nosso método passa pelo crivo de um modelo de poucos níveis, habilitamos a explorar variações de dependências espaciais no campo. Mostrando-se eficaz o campo linear para excitação do primeiro estado excitado, motivamo-nos a utilizar campos polinomiais, isto é, proporcionais a x^n , utilizando a ordem $n = j$ em acordo com o estado excitado psi_j que se deseja ocupar. Observamos na figura 11 que um tal procedimento se

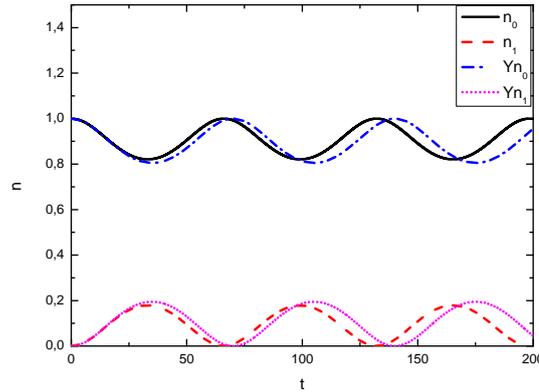


Figura 10: Comparação entre o cálculo direto e o modelo de 3 níveis para ocupação do primeiro estado excitado sob ação de modulador da armadilha de amplitude $A_V = 0.0625$. Fonte: Autor.

mostra eficaz até o quarto estado excitado.

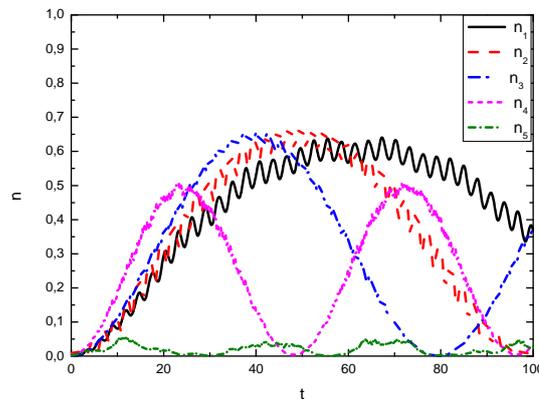


Figura 11: Ocupação de estados excitados 1, 2, 3, 4 e 5 sob campo de amplitude $A_V = 0.1$. Fonte: Autor.

7.3.2 Modulação da Interação

Seguindo o modelo proposto de moduladores espaço-temporais do comprimento de espalhamento exposto na seção 4.1, motivamo-nos a explorar o impacto de espécies diferentes de dependências espaciais no campo. Porém, devemos ter atenção na factibilidade da construção de um tal modulador em laboratório. Como já discutido é factível explorar dependências espaciais na prática, através de aplicações de campos magnéticos e controle óptico, tais que retornem uma configuração desejada do comprimento de espalhamento e uma interação efetiva que tenha dependência espacial (CLARK LI-CHUNG HA; CHIN,

2015; ARUNKUMAR; THOMAS, 2019). Posto este lastro experimental, e visto o sucesso do uso de dependências polinomiais para excitar os primeiros estados excitados na modulação da armadilha (vide seção 7.3.1), estendemos aqui esse tipo de dependência. Utilizando campos da forma (4.44) com $g(x) = A_G x^n$ e $n = 1, 2$. Exploramos o caso da excitação dos primeiro e segundo estados excitados do condensado com $n = 1$ e $n = 2$, respectivamente. Considerando ainda a armadilha do tipo anarmônica como em 7.3.1. E Submetemos à comparação com o modelo de poucos níveis nas figuras 12 e 13 . Originalmente a aproximação de 2 níveis para o caso de modulação da interação (RAMOS et al., 2008; RAMOS; BAGNATO, 2012) foi construída com moduladores sem a dependência espacial além do termo $|\psi|^2$, isto é sem o termo $g(x)$, isto explica as defasagens entre o cálculo direto seguindo o cálculo direto da solução numérica proposta no presente trabalho e o modelo original. Para um fator de não-linearidade g_0 relativamente baixo tal que não distancie o sistema de maneira tão aguda do comportamento devido a armadilha e um campo de baixa ordem polinomial como o caso aqui tratado os modelos têm concordância considerável.

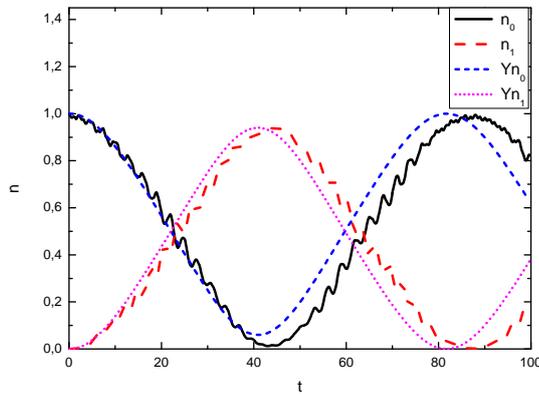


Figura 12: Comparação entre o cálculo direto e o modelo de 2 níveis para ocupação do primeiro estado excitado sob ação de modulador da interação de amplitude $A_G = 0.5$. Fonte: Autor.

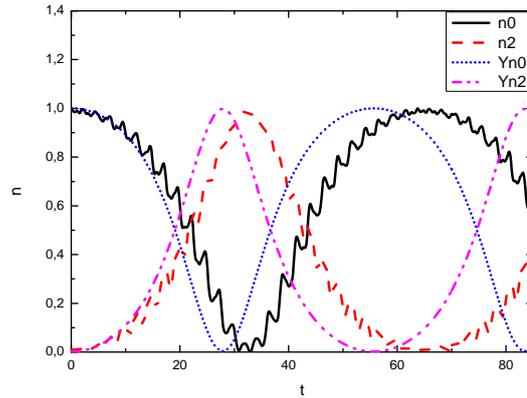


Figura 13: Comparação entre o cálculo direto e o modelo de 2 níveis para ocupação do segundo estado excitado sob ação de modulador da interação de amplitude $A_G = 1$. Fonte: Autor.

7.4 Modulação Dupla

Observado o sucesso do uso de moduladores espaço-temporais da armadilha ou da interação para conduzir o condensado a estados alvos introduzidos em (COURTEILLE; YUKALOV, 2001; YUKALOV; BAGNATO, 2002; YUKALOV; YUKALOVA, 2004; RAMOS et al., 2008; RAMOS; BAGNATO, 2012) e bem explorados aqui, o foco do trabalho se volta para o uso conjunto das duas formas de controle. Uma tal abordagem tem como base o uso de modulações duplas no contexto de controle ótimo (HOCKER; RABITZ, 2016), os quais abordam o uso de Funcionais de custo tais que determinem as condições vínculos que maximizam a probabilidade de transição entre estados estacionários de maneira a poder avaliar quais tipos de moduladores são mais eficazes, veja apêndice A. Tal estudo desperta a motivação para estudar como podem ser configurados os campos de maneira que usados simultaneamente retornem uma transição mais eficaz que o uso individual de uma espécie ou outra. É preciso tomar cuidado com o fato de que o sistema é muito sensível a amplitude de $V_{control}$, que se aumentada sem a devida atenção pode levar a dispersão dos átomos em estados vizinhos não desejados. Para que a modulação $g_{control}$ possa ser usada conjuntamente, é necessário que amplitude da primeira seja consideravelmente menor que a da segunda. Considerado isso, nosso procedimento primeiramente foi encontrar amplitudes características de cada modulador tal que levem a um comportamento similar no tempo de inversão de população. Ainda na situação de uma armadilha anarmônica quártica e $g_0 = 1$, nas figuras 14 e 15 obtemos boa concordância entre as modulações. O primeiro caso destacando a excitação do primeiro estado excitado e a outra o segundo estado excitado através de campos com dependência espacial x e x^2 , respectivamente.

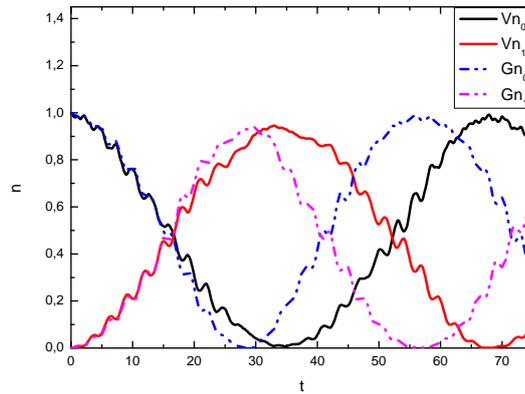


Figura 14: Comparação entre modulações da armadilha $A_V = 0.17$ e $A_G = 0.7$ para excitação do primeiro estado excitado. Fonte: Autor.

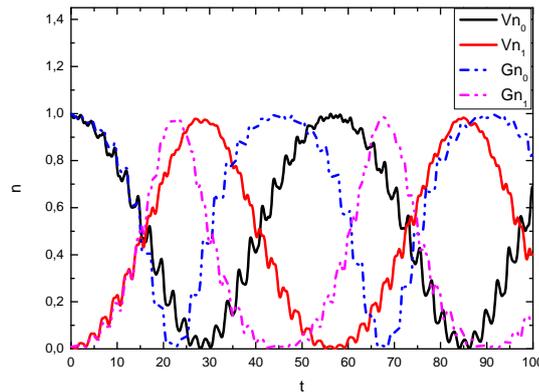


Figura 15: Comparação entre modulações da armadilha $A_V = 0.5$ e $A_G = 1.4$ para excitação do segundo estado excitado. Fonte: Autor.

Devido a natureza dessas modulações, após determinado tempo os comportamentos passam a ter uma certa defasagem, mas têm boa concordância entre os períodos de oscilação e nos dois casos o número de átomos descolados ao estados alvo é aproximadamente o número total. Uma vez que os dois campos levam a comportamentos aproximadamente equivalentes, passamos a nos voltar para observação destes campos ligados simultaneamente. Verificamos nas figuras 16 e 17 que o uso conjuntos dos moduladores efetivamente aumenta a frequência da transição aproximadamente 3 vezes nesses casos, o custo disso é que número dos átomos levados ao estado desejado são entre 10% e 15% menor do que através dos métodos de modulações individuais, o que podemos ver mais nitidamente nas figuras 18 e 19.

A modulação dupla pode ainda ser submetida a uma comparação com o modelo de

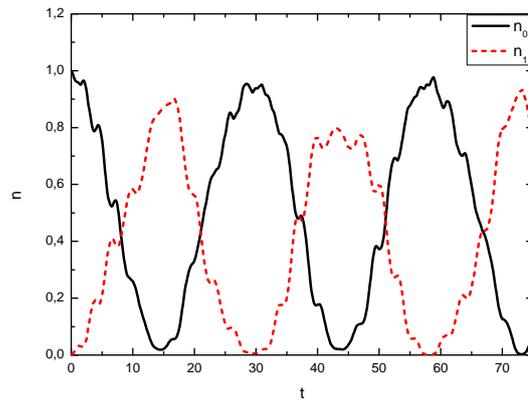


Figura 16: Combinação das modulações para excitação do primeiro estado excitado. Dados da figura 14. Fonte: Autor.

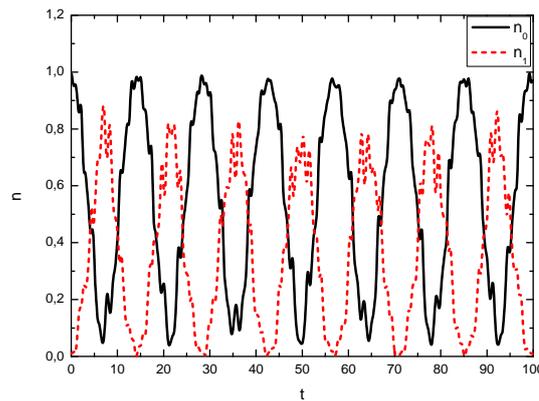


Figura 17: Combinação das modulações para excitação do segundo estado excitado. Dados da figura 15. Fonte: Autor.

três níveis, apresentando boa concordância nas figuras 20 e 21, as defasagens possivelmente são características da menor concordância entre os modelos para a modulação da interação. Deve-se entender nesses exemplos que a concordância entre os modelos construídos aqui e o de poucos níveis depende da armadilha utilizada, da magnitude da interação, uma vez que todos esses fatores influem sobre os coeficientes α , β e I . Há casos em que esses coeficientes podem ser nulos, ou superarem os limites requeridos, de maneira que os modelos não representarão o mesmo problema. Cabe ressaltar aqui um fenômeno interessante, a frequência da transição aumenta com a modulação dupla. Uma explicação para tal fato é que em um sistema não-linear a frequência da transição depende das populações dos níveis, e como os dois campos influenciam as populações, é natural esperar que a frequência seja influenciada de maneira mais efetiva quando há dois campos ligados. Vide em (4.40),

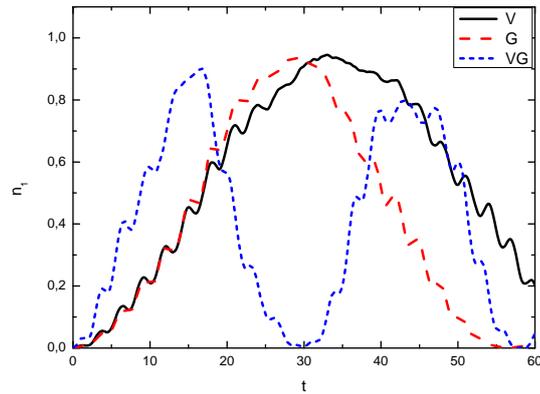


Figura 18: Comparação entre modulações individuais, da armadilha V, da interação G e combinadas VG para excitação do primeiro estado excitado. Dados da figura 14. Fonte: Autor.

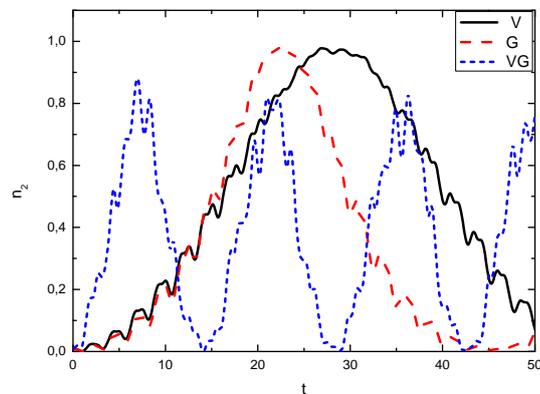


Figura 19: Comparação entre modulações individuais, da armadilha V, da interação G e combinadas VG para excitação do segundo estado excitado. Dados da figura 15. Fonte: Autor.

quando no modelo de poucos níveis para modulador da armadilha, foi possível explicitar a frequência de transição, de maneira que observamos a dependência das populações. Cabe ressaltar também que a frequência de transição aumenta na modulação dupla e não há uma perda significativa de átomos no processo, quando comparado ao número de átomos deslocados com modulações individuais, destacando portanto, sua vantagem.

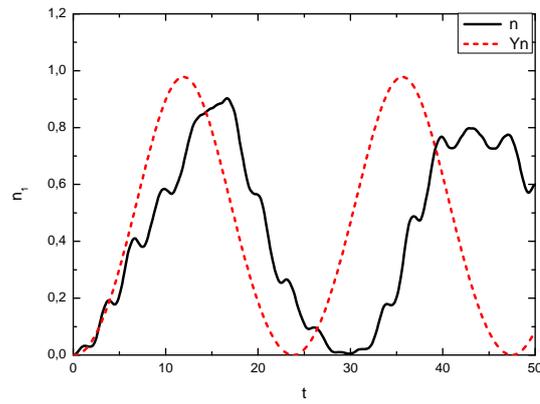


Figura 20: Ocupação do primeiro estado excitado sob modulação dupla n comparada com modelo de 3 níveis Yn . Fonte: Autor.

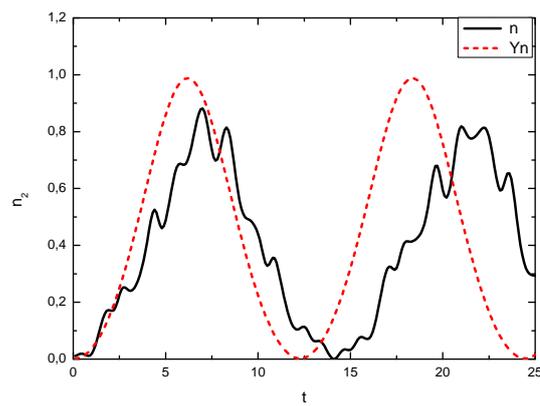


Figura 21: Ocupação do segundo estado excitado sob modulação dupla n comparada com modelo de 3 níveis Yn . Fonte: Autor.

7.4.1 Controle Coerente

Observado o sucesso em configurar moduladores de uma maneira tal que, individualmente, levem a comportamentos muito similares do condensado, notando que no uso conjunto desses, uma fração considerável dos átomos são mantidos nos estados de interesse e que o tempo de inversão de população é reduzido quando comparado a modulações individuais, a questão que se põe é que impacto teria a defasagem entre as frequências dos campos envolvidos sobre a dinâmica do condensado. Nas mesmas configurações anteriores testamos as hipóteses levantadas na aproximação perturbativa em primeira ordem na seção 6.1, confirmando o impacto que a fase entre os campos tem sobre a coerência do sistema, para o caso de excitação do primeiro estado excitado vide figura 22, enquanto que o segundo 23, tais sistemas ainda passam pelo crivo do modelo de 2 níveis, mostrando considerável concordância entre os métodos, veja para o primeiro caso em 24. Tais resultados corroboram a tese de que a modulação dupla de maneira que configure um controle coerente pode ser mais eficiente que o uso de uma espécie apenas de modulação, em especial para excitação do primeiro estado excitado a resposta a fase é muito direta, havendo aproximadamente um cancelamento dos campos em π , enquanto que no segundo caso, de excitação do segundo estado excitado, há uma resposta efetiva à fase, mas não a ponto de interromper por completo a transição, isto já era esperado do ponto de vista de uma aproximação perturbativa, na qual foi possível observar que a amplitude da probabilidade de transição terá uma maior sensibilidade à modulação de fase, quando as amplitudes de interação forem de mesma ordem. Nas configurações que produziram os gráficos 22 e 23 respectivamente temos amplitudes de probabilidade de transição $\beta_{21}^2 + I_{2,1,1}^2 + 2\beta_{21}I_{2,1,1}\cos(\theta)$ em $\theta = \pi$ da ordem de 10^{-4} e 10^{-1} , em (6.29). Tais ordens de amplitude de justificam o comportamento da população do estado alvo em função da fase.

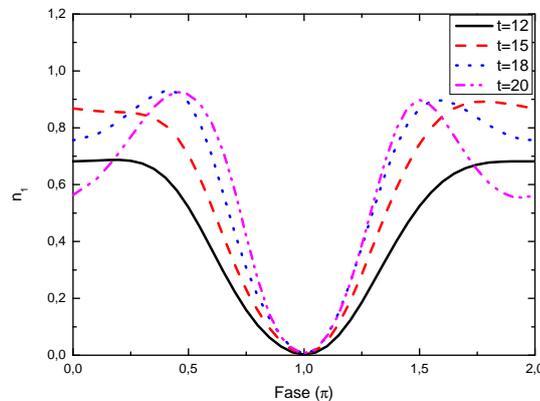


Figura 22: Ocupação do primeiro estado excitado em função da diferença de fase entre os moduladores. Dados da figura 16. Fonte: Autor.

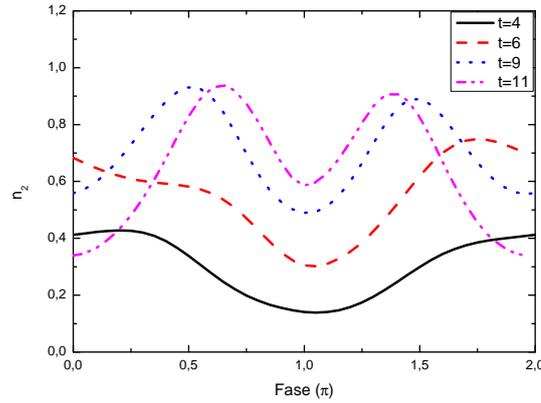


Figura 23: Ocupação do segundo estado excitado em função da diferença de fase entre os moduladores. Dados da figura 17. Fonte: Autor.

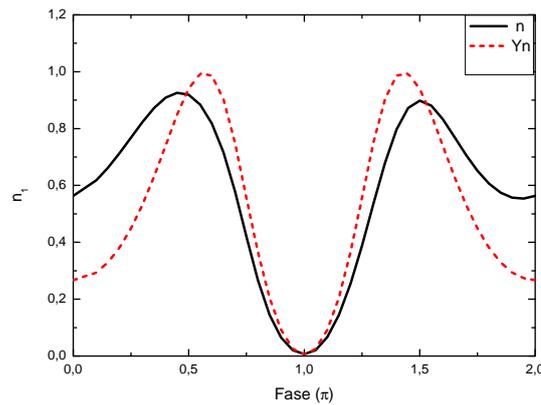


Figura 24: Comparação entre modelos de Ocupação do primeiro estado excitado em função da Fase para tempo fixado em $t = 20$. Cálculo direto n e modelo de 2 níveis Y_n . Dados da figura 16. Fonte: Autor.

Notamos que no problema não-linear tratado, uma característica interessante é que é possível interferir amplitudes de transição advinda de campos com mesma frequência, o que não é usual na mecânica quântica com problemas lineares, nos quais o fenômeno de interferência é observado para campos de diferentes frequências. Levantado esse ponto, observamos agora, a interferência de campos de frequência diferentes para excitar o primeiro estado excitado. Em um primeiro caso utilizamos frequência $\omega \approx \omega_{10}$ na modulação da armadilha e $\omega/2$ no modulador da interação, vide figura 25. Em seguida, verificamos o caso trocado na figura 26. Tais casos destacam uma forte resposta à fase relativa e diferentemente do caso de frequências iguais, aqui há um intervalo de fases no qual os campos se anulam e interrompem a transição.

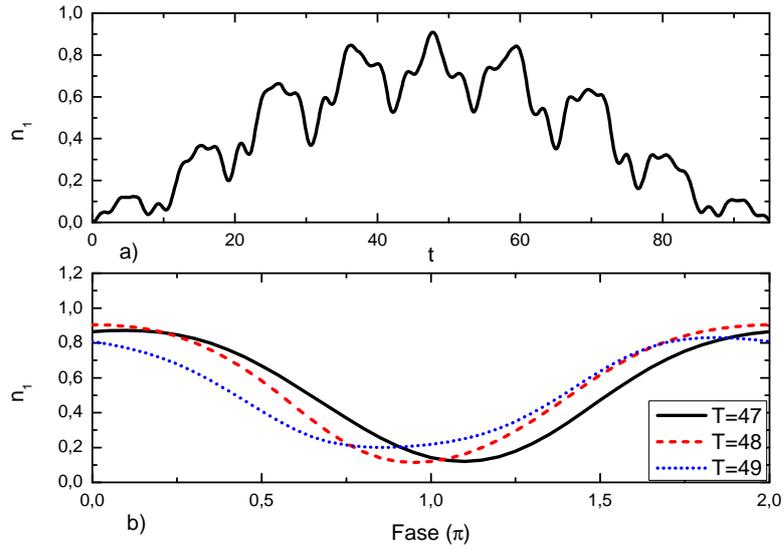


Figura 25: Modulação dupla com frequência ω no modulador da armadilha e $\omega/2$ no modulador da interação com amplitudes $A_V = 0.1$ e $A_G = 1$, conforme (6.3). a) n_1 em função do tempo para fase relativa nula. b) n_1 em função da fase para alguns tempos fixos. Fonte: Autor.

Podemos indagar sobre o impacto que a fase relativa pode ter sobre as modulações quando usadas individualmente, uma vez que não representaria mais uma forma de interferir amplitudes de transição de diferentes campos, como já discutido na aproximação perturbativa na seção 6.1, mas uma expectativa quanto uma possível resposta do caráter não-linear do sistema. Observamos na figura 27 fase na modulação da armadilha e em 28 o impacto da fase sobre a modulação da interação, que fase tem algum impacto sobre a dinâmica do sistema, mas em ordem significativamente mais baixa do que no caso de modulação dupla, sendo incapaz de deslocar uma fração considerável dos átomos, como previsto numa análise perturbativa, quando o termo de interferência de amplitudes é nulo na probabilidade de transição. Testes como esses indicam que não representa uma oportunidade para explorar as vantagens do controle coerente como verificado na modulação dupla. É evidenciado em todos testes de impacto da fase sobre a dinâmica de populações que há grande concordância entre o cálculo numérico direto e a aproximação perturbativa de primeira ordem no modelo de dois níveis.

Podemos destacar aqui mais algumas possibilidades do controle coerente no contexto de condensados. Podemos configurar os campos de maneira que uma das frequências em um dos campos seja sintonizada próxima da frequência de transição desejada, por exemplo $\omega \approx \omega_{21}$ com um desvio muito baixo $\Delta\omega \ll 1$, enquanto que o segundo campo pode ser modulado com frequência $\omega \pm \Delta\omega$, para mais ou menos da frequência ω do primeiro campo, mas com um desvio $\Delta\omega$ finito, por exemplo, na ordem de $\Delta\omega = 0.1\omega$, essa dessintonia

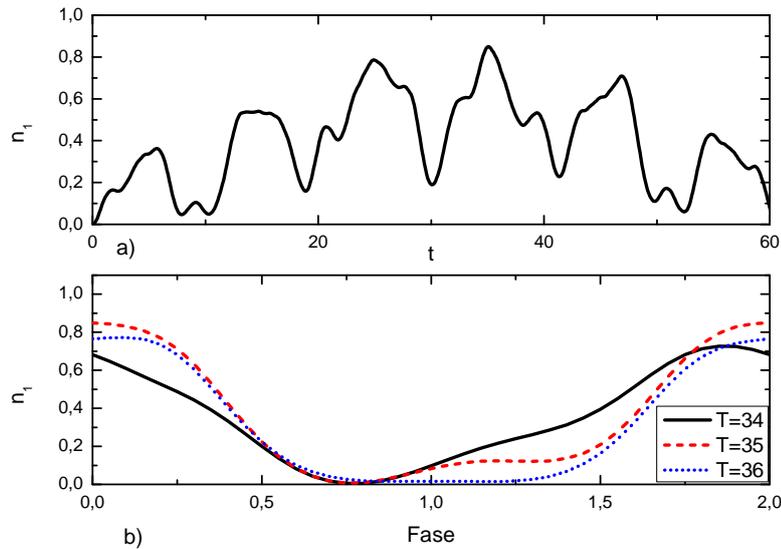


Figura 26: Modulação dupla com frequência $\omega/2$ no modulador da armadilha e ω no modulador da interação com amplitudes $A_V = 0.5$ e $A_G = 0.4$, conforme (6.3). a) n_1 em função do tempo para fase relativa nula. b) n_1 em função da fase para alguns tempos fixos. Fonte: Autor.

entre os campos pode criar um cenário de interferência entre amplitudes de transição com uma resposta muito sensível a modulações de fase entre as frequências dos campos, que podemos observar nas figuras 29 e 30. O primeiro e o segundo caso mostram uma simetria no comportamento da dinâmica da população do primeiro estado excitado diretamente relacionado a forma que foi configurada a dessintonia entre os campos em relação a frequência de transição, e diferentemente de outros casos abordados no projeto a dinâmica é efetiva em uma faixa de fases muito localizada em torno de uma fase específica, fenômeno que necessitaria um estudo aprofundado em uma teoria de poucos níveis para frequências diferentes.

Outro cenário que podemos considerar é a situação em que os campos são ligados em atraso, isto é, escolhe-se um determinado campo para ligar primeiro e após um determinado intervalo de tempo Δt o segundo campo é ligado e a modulação passa a ser dupla. Nas figuras 31 e 32 para excitação do primeiro estado excitado, observamos que não há uma diferença significativa na dinâmica de populações qual campo é escolhido para ser ligado primeiro, no entanto podemos observar que há um limite de atraso para que ocorra a transição, isto é para um Δt maior que um certo valor, os campos não induzirão uma excitação estado excitado de interesse, mas é possível observar que a dinâmica tem uma forte resposta a esse atraso de campos, de maneira que se comporta como a diferença de fase entre as frequências, destacando aqui outra possibilidade de modulação de campos externos para controlar a excitação do estado desejado.

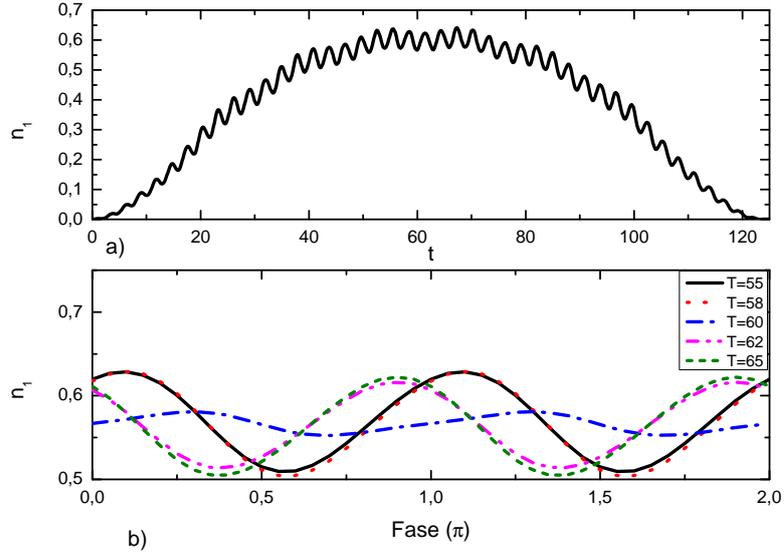


Figura 27: Modulação da armadilha com amplitude $A_V = 0.1$ para popular o primeiro estado excitado, conforme (4.5). a) n_1 em função do tempo para fase relativa nula. b) n_1 em função da fase para alguns tempos fixos. Fonte: Autor.

Compilando todos resultados obtidos, podemos concluir que obtivemos uma resposta positiva quanto a efetividade do controle coerente no contexto de condensados de Bose-Einstein de gases atômicos dilutos no limite de validade da aproximação de campo médio. Observamos que há uma variedade de configurações sobre as modulações de armadilha e comprimento de espalhamento que podemos ser realizadas para controlar a performance da transição desejada, de maneira a criar cenários em que se torna possível construir um condensado em um estado não fundamental em um tempo de transição menor do que poderia ser realizado com modulações individuais, bastando um controle de frequências, diferença de fase ou atraso de campos.

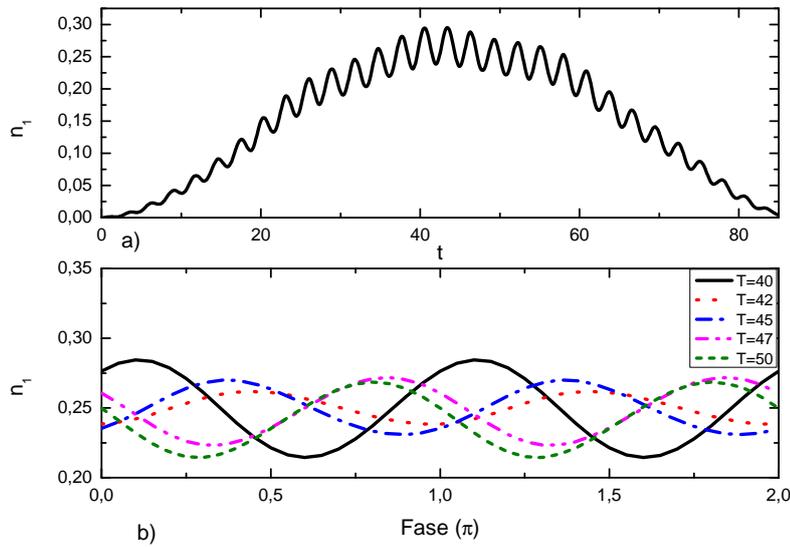


Figura 28: Modulação do comprimento de espalhamento com amplitude $A_G = 0.3$ para popular o primeiro estado excitado, conforme (6.4). a) n_1 em função do tempo para fase relativa nula. b) n_1 em função da fase para alguns tempos fixos. Fonte: Autor.

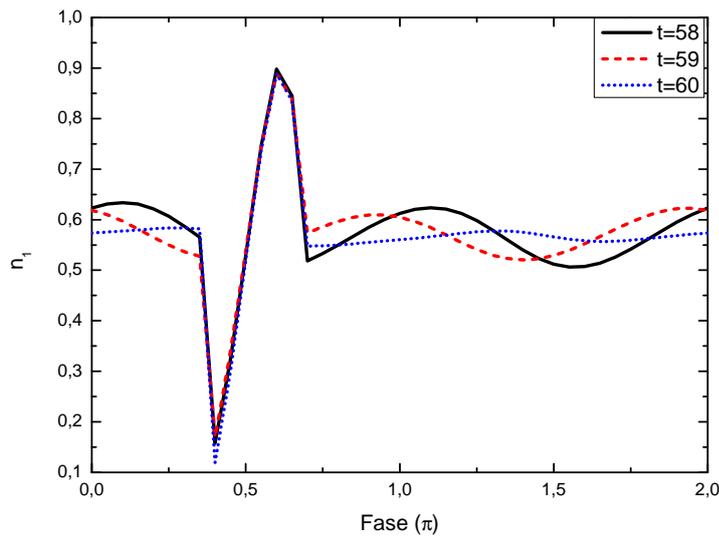


Figura 29: Modulação $V_{control}(x,t)$ com frequência ω e $g_{control}(x,t)$ com frequência $\omega - \delta\omega$ para popular primeiro estado excitado. Dados: $A_V = 0.1$, $A_G = 0.4$ e $\Delta\omega = 0.1\omega$. Fonte: Autor.

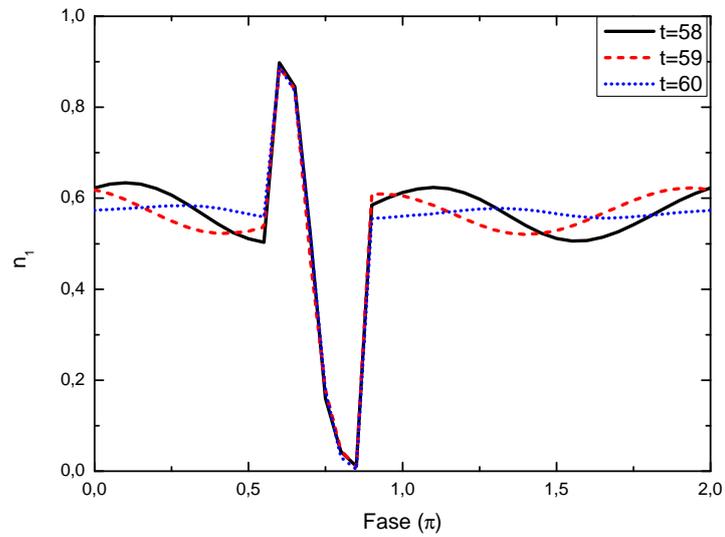


Figura 30: Modulação $V_{control}(x, t)$ com frequência ω e $g_{control}(x, t)$ com frequência $\omega + \delta\omega$ Δt para popular primeiro estado excitado. Dados: $A_V = 0.1$, $A_G = 0.4$ e $\Delta\omega = 0.1\omega$. Fonte: Autor.

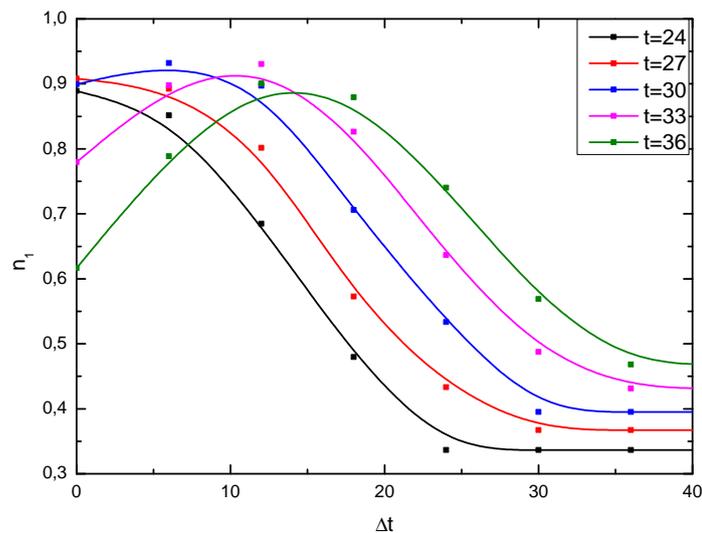


Figura 31: Modulação $V_{control}(x, t)$ seguido de $g_{control}(x, t)$ após intervalo de tempo Δt para popular primeiro estado excitado. Dados: $A_V = 0.1$ e $A_G = 0.4$. Fonte: Autor.

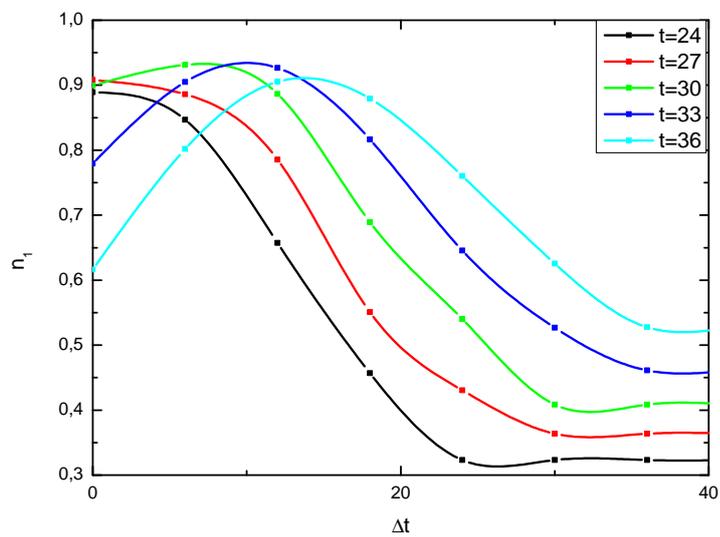


Figura 32: Campo $g_{control}(x, t)$ seguido de $V_{control}(x, t)$ após intervalo de tempo Δt para popular primeiro estado excitado. Dados: $A_V = 0.1$ e $A_G = 0.4$. Fonte: Autor.

8 Conclusões

O presente trabalho se empenhou no estudo unidimensional de controle coerente através da interferência entre amplitudes de transição originadas por modulações conjuntas da armadilha e da interação para dirigir um condensado de Bose-Einstein a populações de estados topológicos, no limite da validade da aproximação de campo médio, isto é, no contexto da equação de Gross-Pitaevskii. Foram construídos códigos numéricos capazes de obter autoestados e correspondentes autoenergias da hamiltoniana não-linear, e ainda simular a evolução dinâmica da função de onda do condensado sob ação de campos externos. Para tais tarefas foi aplicado o método da relaxação em tempo imaginário para determinar estados estacionários da hamiltoniana não-linear via expansão do operador evolução em polinômios de Chebyshev (TAL-EZER; KOSLOFF, 1984; KOSLOFF; TAL-EZER, 1986; KOSLOFF et al., 1991), aplicando ainda o método S-AITP (HOCKER; RABITZ, 2016) para obter modos excitados do condensado. Realizando uma expansão semelhante, mas em tempo real, foi possível elaborar um código que simula a evolução temporal do condensado, suportando ainda a implementação de campos moduladores da armadilha, bem como do comprimento de espalhamento que influem fortemente a dinâmica do sistema. Tais métodos trabalham em uma grade construída também via polinômios de Chebyshev (MASON; HANDSCOMB, 2003; TREFETHEN, 2000), no qual o destaque é ser capaz de resolver termos espaciais e temporais da hamiltoniana simultaneamente, e fazer tal tarefa com poucos pontos, quando os métodos mais utilizados em problemas de mesma natureza, tais como Método de Crank-Nicolson de discretização de espaço e tempo requerem uma separação destes termos (HOHENESTER et al., 2007; MURUGANANDAM; ADHIKARI, 2009; HOHENESTER, 2014). Nossos cálculos passam pelo crivo de trabalhos em problemas semelhantes (COURTEILLE; YUKALOV, 2001; YUKALOV; BAGNATO, 2002; YUKALOV; YUKALOVA, 2004; RAMOS et al., 2008; RAMOS; BAGNATO, 2012; HOCKER; RABITZ, 2016; MURUGANANDAM; ADHIKARI, 2009), apresentando relativa concordância quando nestes modelos são escritos os parâmetros particulares do projeto. Além dos métodos numéricos empregados colocarem modelos de expansão em polinômios de Chebyshev no contexto de hamiltonianas não-lineares, ainda se especializa no impacto de moduladores de espécies diferentes usados conjuntamente, em aprofundada análise sobre o impacto da coerência entre esses campos e sensibilidade à diferença de fase entre os campos enviando a maior eficiência da transição desejada.

Em um tal estudo foi concluído que uma armadilha anarmônica responde muito bem ao feito de moduladores e para popular os primeiros estados excitados basta que os moduladores tenham dependências espaciais polinomiais de ordem proporcional ao nível que se deseja popular, nesse contexto identificamos forte efeito da fase sobre a interferência

entre as amplitudes de transição induzidas pelos campos para popular o primeiro estado excitado, efeito cuja magnitude é maior quando as amplitudes de interação são de mesma ordem, e menor quando são de ordens muito diferentes, mas que evidencia uma forte resposta à interferência entre caminhos de transição. A modulação dupla apresenta um aspecto interessante, que é especialmente devido ao caráter não-linear do problema, que seria tornar uma transição mais rápida, uma vez que a frequência de transição depende das populações, e as mesmas são influenciadas pelos dois campos. Tal fenômeno ocorre sem perdas significativas de átomos, bem como pode ser interrompido sem desligamento dos campos, permitindo portanto mais liberdade sobre o controle de um condensado do que o uso de um modulador de uma natureza específica individualmente. Tais estudos, especialmente passando grande parte por análise numérica, também são submetidos a comparações com modelo aproximado de poucos níveis, e dentro desse modelo uma análise perturbativa que permitem em alguns regimes prever o comportamento da dinâmica de populações sob impacto de modulação dupla, bem como a resposta à interferência de amplitudes de transição. O trabalho é concluído com dois exemplos de maneiras diferentes de manipular os dois campos com o objetivo de influenciar a performance da transição. A primeira maneira é ligar campos em diferentes tempos, e o intervalo de tempo entre a aplicação do primeiro campo e a aplicação do segundo, para configurar modulação dupla, funciona como uma diferença de fase entre os campos, levando a uma resposta da dinâmica de populações a essa defasagem. A segunda maneira seria configurar

Uma análise sistemática como a feita aqui de caráter teórico elucidada as diferentes formas de controle coerente no condensado de Bose-Einstein de gases atômicos dilutos, abrindo caminho para um leque possibilidades para controlar uma transição via modulações da frequência, fase e atraso entre campos. Os resultados deste trabalho gera uma expectativa positiva para especulação de sua validade também em condensados de duas e três dimensões, onde se espera que se verifiquem também as vantagens do Controle coerente.

Referências

- ANDERSON, M. H. et al. *Science*, v. 269, p. 198, 1995. [21](#)
- ANNETT, J. F. *Superconductivity, Superfluids and, Condensates*. [S.l.]: Oxford university Press, 2004. [29](#), [31](#)
- ARFKEN, G. B. et al. *Mathematical Methods for Physicists*. seventh. [S.l.]: Elsevier, 2013. [89](#)
- ARUNKUMAR, A. J. N.; THOMAS, J. E. *Phys. Rev. Lett.*, v. 122, p. 040405, 2019. [51](#), [67](#)
- ATOINE, X. et al. *Computer Physics Communications*, v. 219, p. 70–78, 2016. [47](#)
- BAYE, D.; SPARENBERG, J.-M. *Phys. Rev. E*, v. 82, p. 056701, 2010. [47](#)
- BüCKER, R. et al. *Nature Physics*, v. 7, p. 608, 2011. [21](#)
- BRIF, R. C. C.; RABITZ, H. *New Journal of Physics*, v. 12, p. 075008, 2010. [21](#)
- CALLEN, H. B. *Thermodynamics and an Introduction to Thermostatistics*. second. [S.l.]: John Wiley Sons, 1985. [27](#), [29](#)
- CHIN, S. A.; KROTSCHHECK, E. *Phys. Rev. E*, v. 72, p. 036705, 2005. [47](#)
- CLARK LI-CHUNG HA, C.-Y. X. L. W.; CHIN, C. *Phys. Rev. Lett.*, v. 115, p. 155301, 2015. [51](#), [67](#)
- COHEN-TANNOUDJI, B. D. C.; LALOE, F. *Quantum Mechanics*. New York: John Wiley Sons Inc, 1991. [55](#)
- COURTEILLE, V. S. B. P. W.; YUKALOV, V. I. *Laser physics*, v. 11, p. 659–800, 2001. [22](#), [37](#), [40](#), [59](#), [63](#), [68](#), [81](#)
- DALFOVO, C. M. F.; PITAEVSKII, L. P. *Phys. Rev. A*, v. 56, p. 4855, 1997. [22](#)
- DALFOVO, F. et al. *Rev. Mod. Phys.*, v. 71, p. 463, 1999. [21](#)
- DIJK, W. van; TOYAMA, F. M. Accurate numerical solutions of the time-dependent schrödinger equations. *Phys. Rev. E*, v. 75, p. 036707, 2007. [45](#)
- FORMÁNEK, M. V. M.; HOUFEK, K. Comparison of the chebyshev method and the generalized crank-nicholson method for time propagation in quantum mechanics. *AIP Conference Proceedings*, v. 1281, p. 667, 2010. [45](#)
- FRANK, S. V. et al. *Nature Communications*, v. 5, p. 4009, 2014. [21](#)
- GORDON, S. A. R. R. J. *Annu. Rev. Chem.*, v. 48, p. 601–641, 1997. [21](#), [52](#)
- HOCKER, J. Y. D.; RABITZ, H. Optimal nonlinear coherent mode transitions in bose-einstein condensates utilizing spatiotemporal controls. *Phys. Rev. A*, v. 93, p. 053612, 2016. [21](#), [22](#), [48](#), [59](#), [61](#), [68](#), [81](#), [90](#), [91](#)

- HOHENESTER, U. Octbec- a matlab toolbox for optimal quantum control of bose-einstein condensates. *Computer Physics Communications*, v. 185, p. 194–216, 2014. [21](#), [81](#)
- HOHENESTER, U. et al. Optimal quantum control of bose-einstein condensates in magnetic microtraps. *Phys. Rev. A*, v. 75, p. 023602, 2007. [21](#), [22](#), [81](#), [89](#), [90](#)
- HUANG, K. *Statistical Mechanics*. second. [S.l.]: John Willey Sons, 1987. [26](#), [27](#), [29](#)
- JAGER, G. et al. *Phys. Rev. A*, v. 90, p. 033628, 2014. [21](#)
- KAMCHATNOV, A. M.; SHCHESNOVICH, V. S. *Phys. Rev. A*, v. 70, p. 023604, 2004. [33](#)
- KLAUDER, J. R.; SKAGERSTAM, B. S. *Coherent States*. Singapore: World Scientific, 1985. [37](#), [39](#)
- KOCH, C. P.; SHAPIRO, M. *Chem. Rev.*, v. 112, p. 4928–4948, 2012. [21](#), [52](#)
- KOSLOFF, R. et al. A comparison of different propagation schemes for the time dependent schrödinger equation. *Journal of Computational Physics*, v. 94, p. 59–80, 1991. [45](#), [46](#), [81](#)
- KOSLOFF, R.; TAL-EZER, H. A direct relaxation method for calculating eigenfunctions and eigenvalues of the schrödinger equation on a grid. *Chem. Phys. Lett.*, v. 127, 1986. [23](#), [48](#), [81](#)
- KREMS, R. V. *Science*, v. 3, p. 10, 2010. [21](#)
- KUZEMSKY, A. L. Variational principle of bogoliubov and generalized mean fields in many-particle interacting systems. *Int. J. Mod. Phys. B*, v. 29, p. 1530010, 2015. [29](#)
- LIMA, E. F. de. *Phys. Rev. A*, v. 95, p. 013411, 2017. [21](#)
- MASON, J. C.; HANDSCOMB, D. *Chebyshev Polynomials*. [S.l.]: CRC Press Company, 2003. [45](#), [46](#), [50](#), [81](#)
- MEWES, M. O. et al. *Phys. Rev. Lett.*, v. 77, p. 988, 1996. [22](#)
- MOERDIJK, B. J. V. A. J.; AXELSSON, A. *Phys. Rev. A*, v. 51, p. 4852, 1995. [51](#)
- MURUGANANDAM, P.; ADHIKARI, S. K. Fortran programs for the time-dependent gross-pitaevskii equation in a fully anisotropic trap. *Computer Physics Communications*, v. 180, p. 1888–1912, 2009. [47](#), [59](#), [63](#), [81](#)
- PARKINS, A. S.; WALLS, D. F. *Phys. Rep.*, v. 303, p. 1–80, 1998. [37](#)
- PATHRIA, R. K. *Statistical Mechanics*. second. [S.l.]: Butterworth-Heinemann, 1996. [26](#), [27](#), [29](#)
- PEIRCE, M. A. D. A. P.; RABITZ, H. Optimal control of quantum-mechanical systems: Existence, numerical approximation, and applications. *Phys. Rev. A*, v. 37, 1988. [21](#), [89](#), [90](#)
- PETHICK, H. S. C. J. *Bose-Einstein Condensation in Dilute Gases*. [S.l.]: Cambridge University Press, 2002. [21](#), [29](#), [31](#)

- POLLACK, S. E. et al. *Phys. Rev. A*, v. 81, p. 053627, 2010. [22](#)
- RABITZ R. DE VIVIE-RIEDLE, M. M. H.; KOMPA, K. *Science*, v. 288, p. 824, 2000. [21](#)
- RAMOS, E. R. F.; BAGNATO, V. S. *Oscillatory interaction in a Bose-Einstein condensate: collective and topological excitations*. Tese (Doutorado) — Universidade de São Paulo, 2012. [22](#), [38](#), [43](#), [51](#), [59](#), [63](#), [67](#), [68](#), [81](#)
- RAMOS, E. R. F. et al. *Phys. Rev. A*, v. 78, p. 063412, 2008. [22](#), [38](#), [43](#), [51](#), [59](#), [63](#), [67](#), [68](#), [81](#)
- ROGEL-SALAZAR, J. The gross-pitaevskii equation and bose-einstein condensates. *Eur. J. Phys.*, v. 34, p. 247, 2013. [29](#), [30](#), [31](#)
- RUSSEL, S. V. B.; RABITZ, H. *Journal of Physics A*, v. 51, p. 335103, 2018. [22](#)
- SAKURAI, J. J. *Modern Quantum Mechanics*. [S.l.]: Addison-Wesley Publishing Company, 1994. [46](#)
- SHI, S.; RABITZ, H. *The Journal of Chemical Physics*, v. 92, p. 364, 1990. [21](#)
- TAL-EZER, H.; KOSLOFF, R. An accurate and efficient scheme for propagating the time dependent schrödinger equation. *J. Chem. Phys.*, v. 81, 1984. [22](#), [23](#), [46](#), [81](#)
- TIESINGA E., M. A. J.-V. B. J.; STOOF, H. T. C. *Phys. rev. A*, v. 47, p. 4114–4122, 1993. [51](#)
- TOMONAGA, S.-I. *The Story of Spin*. [S.l.]: The University of Chicago Press, 1997. [25](#)
- TREFETHEN, L. N. *Spectral Methods in Matlab*. [S.l.]: www.MathWorks.ir, 2000. [45](#), [50](#), [81](#)
- VITANOV, N. V. et al. *Advances in Atomic, Molecular, and Optical Physics*, v. 46, p. 55–190, 2001. [43](#), [52](#)
- YUKALOV, E. P. Y. V. I.; BAGNATO, V. S. *Phys. Rev. A*, v. 56, p. 4845, 1997. [22](#), [37](#), [38](#), [42](#)
- YUKALOV, E. P. Y. V. I.; BAGNATO, V. S. *Phys. Rev. A*, v. 66, p. 043602, 2002. [22](#), [37](#), [38](#), [39](#), [42](#), [51](#), [59](#), [63](#), [68](#), [81](#)
- YUKALOV, K.-P. M. V. I.; YUKALOVA, E. P. *Phys. Rev. A*, v. 69, p. 023620, 2004. [22](#), [37](#), [59](#), [63](#), [64](#), [68](#), [81](#)
- ZARE, R. N. *Science*, v. 279, p. 1875, 1998. [21](#)

Apêndices

APÊNDICE A – Teoria de Controle Ótimo Quântico

Nesta seção esperamos construir uma teoria que seja capaz de retornar as condições que o sistema deve satisfazer para que possamos maximizar a possibilidade de fazer o condensado migrar do seu estado inicial para um estado de nossa escolha (PEIRCE; RABITZ, 1988), sendo ambos os estados autofunções da hamiltoniana não linear do condensado interagente. E ainda poder controlar o caminho dessa transição através de parâmetros externos associados armadilhas óticas e campos magnéticos (HOHENESTER et al., 2007), o que é será possível no formalismo da otimização, a qual pode determinar qual o efeito externo incluir e quais condições devemos respeitar para que num tempo finito aproximemos a função de onda o máximo possível do estado desejado.

A.1 Otimização

Em alguns problemas físicos podemos estar interessados na minimização de uma integral sujeita à vínculos, então se temos uma função unidimensional $\varsigma(x)$ que respeita a restrição $v(x) = K$, com K sendo uma constante, devemos minimizar a função ς sobre a reta formada por essa constante. E para isso é útil usar a técnica dos multiplicadores de Lagrange, considerando um único vínculo, teremos apenas um multiplicador ν , o problema da extremização (ARFKEN et al., 2013) se torna a resolução de

$$\frac{d}{dx} (\varsigma(x) - \nu v) = 0 . \quad (\text{A.1})$$

Para mais vínculos teremos mais multiplicadores, que irão incluir a informação sobre as restrições ao procedimento variacional de minimização.

A.2 Otimização Quântica

Dado um sistema quântico unidimensional definido em um intervalo finito de tempo $[0, T]$, assumindo uma condição inicial da função de onda $\psi(x, 0) = \psi_0(x)$, e uma condição final desejada $\psi(x, T) = \psi_T(x)$, desde que estas sejam autofunções da hamiltoniana do sistema podemos tentar construir um funcional que conta a possibilidade da função de onda visitar um estado diferente do alvo ao final do tempo T , que chamaremos funcional Custo, e minimizá-lo com relação aos parâmetros envolvidos, e usando a teoria de otimização para garantir que no mínimo a equação de Schrödinger, o vínculo do sistema, seja satisfeita, devemos na verdade minimizar a Lagrangiana do sistema, que conterà os multiplicadores

de Lagrange que fará o cálculo levar em conta tal equação. É possível controlar essa transição se introduzirmos parâmetros arbitrários de controle no funcional Custo, levando nos a constatar quais efeitos externos devem ser causados para que a função de onda se aproxime o máximo possível do estado alvo (PEIRCE; RABITZ, 1988).

Podemos construir o funcional Custo de várias maneiras, numa abordagem que devamos minimizá-lo ou numa abordagem que devamos maximizá-lo. Num posicionamento análogo a otimização clássica, introduziremos a teoria construindo um funcional J que nos interesse o seu mínimo (HOHENESTER et al., 2007)

$$J(\psi, \eta) = \frac{1}{2} [1 - |\langle \psi_T | \psi(T) \rangle|^2] + \frac{\xi}{2} \int_0^T dt [\dot{\eta}(t)]^2. \quad (\text{A.2})$$

Atentar aqui para o fato de que ξ é um fator que dá a medida do efeito que desejamos que o parâmetro de controle η tenha sobre o sistema. O primeiro termo está associado a probabilidade de não haver transição, e o segundo termo está associado a uma penalidade associada presença da modulação η no controle da transição. E para que no mínimo a equação de Schrödinger seja satisfeita, construímos a Lagrangiana funcional

$$L(\psi, p, \eta) = J(\psi, \eta) + Re \left\{ \int_0^T \int_{-\infty}^{\infty} dx p^* (i\dot{\psi} - H(\eta)\psi) \right\}, \quad (\text{A.3})$$

sendo p o multiplicador de Lagrange e H a hamiltoniana do sistema. Agora, para encontrar as condições ótimas basta que a Lagrangiana funcional seja minimizada com relação a cada uma das variáveis da qual depende.

A.3 Controle Ótimo Quântico da GPE

Desejamos ser capazes de popular um determinado estado alvo $\psi_f(x)$ com o condensado após um determinado período de tempo T uma vez que sabemos a função de onda inicial $\psi_0(x)$, sendo ambas funções estados estacionários da GPE, que por sua vez funciona no sistema como um vínculo. Para isso podemos tentar usar a teoria de otimização quântica para maximizar a probabilidade $P_{0 \rightarrow f}$ de transição do estado inicial ao estado alvo

$$P_{0 \rightarrow f} = \left| \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_f^*(x) \psi(x, T) \right|^2. \quad (\text{A.4})$$

Modelamos o problema de maneira que a função de onda do condensado satisfaça as condições $\psi(x, 0) = \psi_0(x)$ e $\psi(x, T) = \psi_f(x)$. Para que possamos maximizar (A.4) incluímos ainda parâmetros de controle (HOCKER; RABITZ, 2016) (que carregam o índice "control") sobre a GPE, estes são o termo de não linearidade $g_{control}(x, t)$ e um potencial adicional $V_{control}(x, t)$, que funcionarão como variáveis também da extremização da função Custo, permitindo que se observe quais condições externas devem ser incluídas no sistema para catalisar a otimização da transição de estados desejada. Com tais parâmetros

a equação de vínculo ou GPE se torna

$$i\dot{\psi}(x, t) = \left[H_0 + (U_{trap}(x) + V_{control}(x, t)) + (g_0 + g_{control}(x, t)) |\psi(x, t)|^2 \right] \psi(x, t) , \quad (\text{A.5})$$

com H_0 fazendo referência ao termo cinético, aqui U_{trap} corresponde ao campo externo confinador do condensado e o ponto superior à derivada temporal. Introduzamos agora um funcional Custo $J[\psi, p, V_{control}, g_{control}]$ modificado (HOCKER; RABITZ, 2016), de tal maneira que inclua a dependência dos multiplicadores de Lagrange, abrindo mão do uso da lagrangiana para comportar a informação do vínculo e não inclua a penalidade associada aos parâmetros de controle

$$J = \left| \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_f^*(x) \psi(x, T) \right|^2 + 2Re \left\{ \int_0^T dt \int_{-\infty}^{\infty} dx p^*(x, t) (-i\partial_t + H(x, t)) \psi(x, t) \right\} , \quad (\text{A.6})$$

e embora omitido, o funcional na sua forma complexa \tilde{J} depende também do conjugado das variáveis ψ e p . Uma vez construído o Funcional, devemos extremizá-lo com relação a cada uma de suas variáveis e seus conjugados complexos, necessitando escrever J também na forma complexa, e desta maneira seremos capazes de obter as condições ótimas que devem ser satisfeitas para que a transição desejada tenha maior possibilidade de ocorrer. Fazendo então o cálculo

$$\frac{\delta J}{\delta \beta_k} = 0 , \quad (\text{A.7})$$

para $k = 1, \dots, 6$ com $(\beta_1, \beta_2, \beta_3, \beta_4, \beta_5, \beta_6) = (\psi, \psi^*, p, p^*, g_{cont}, V_{cont})$, obtemos as condições para a função de onda

$$i\hbar\dot{\psi} = H\psi , \quad (\text{A.8})$$

para o multiplicador

$$i\hbar\dot{p} = [H + g|\psi|^2] p + g\psi^2 p^* , \quad (\text{A.9})$$

o potencial de controle

$$\frac{\delta \tilde{J}}{\delta V_{cont}} = 2Re [p^* \psi] , \quad (\text{A.10})$$

e por último, para o fator de não-linearidade

$$\frac{\delta \tilde{J}}{\delta g_{cont}} = 2Re [p^* |\psi|^2 \psi] . \quad (\text{A.11})$$

Observe que omitimos as dependências em (x, t) , embora todos os termos envolvidos dependam dessas variáveis. As equações (A.10) e (A.11) devem ser iguais a zero quando as condições ótimas são encontradas, porém não o são no caminho que maximiza a probabilidade de transição. Equações análogas às (A.8) e (A.9) podem ser deduzidas para ψ^* e p^* , somando ao todo então 6 equações que impõem as condições que devem ser satisfeitas para otimizar a excitação do estado alvo.

APÊNDICE B – Aproximação de Três Níveis

Aqui fazemos uma extensão do modelo aproximado de poucos níveis para três níveis para o caso específico no qual se aplique um campo externo para levar o sistema do nível 1 para o nível 2. Incorporamos além de mais um estado acessível, os dois tipos de modulação com a forma espaço-temporal, bem como uma diferença de fases entre esses. Suponha que a função de onda possa ser suficientemente descrita pela expansão nos 3 primeiros autoestados da hamiltoniana não-linear

$$\psi(x, t) = \psi_1(x) e^{-i\mu_1 t/\hbar} + \psi_2(x) e^{-i\mu_2 t/\hbar} + \psi_3(x) e^{-i\mu_3 t/\hbar} \quad (\text{B.1})$$

e que tenhamos os moduladores externos da armadilha

$$V(x, t) = V(x) \cos(\omega t + \theta) \quad (\text{B.2})$$

e da interação

$$g_{control}(x, t) = g(x) \cos(\omega t) |\psi(x, t)|^2 \quad (\text{B.3})$$

com frequência $\omega \approx \omega_{21}$ e θ sendo uma diferença de fase entre os campos. Obtemos as equações

$$\begin{aligned} i \frac{dc_1}{dt} &= (\alpha_{12}|c_2|^2 + \alpha_{13}|c_3|^2) c_1 + \frac{1}{2} \beta_{12} c_2 e^{i\theta} e^{i\Delta\omega t} \\ &+ \frac{1}{2} e^{i\Delta\omega} (|c_2|^2 c_2 I_{1,2,2} + 2|c_1|^2 c_2 I_{1,1,2} + 2|c_3|^2 c_2 I_{1,3,2}) + \frac{1}{2} e^{-i\Delta\omega t} c_2^* c_1^2 I_{2,1,1} \end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

e também

$$\begin{aligned} i \frac{dc_2}{dt} &= (\alpha_{21}|c_1|^2 + \alpha_{23}|c_3|^2) c_2 + \frac{1}{2} \beta_{21} c_1 e^{-i\theta} e^{-i\Delta\omega t} \\ &+ \frac{1}{2} e^{-i\Delta\omega} (|c_1|^2 c_1 I_{2,1,1} + 2|c_2|^2 c_1 I_{2,2,1} + 2|c_3|^2 c_1 I_{2,3,1}) + \frac{1}{2} e^{i\Delta\omega t} c_1^* c_2^2 I_{1,2,2} \end{aligned} \quad (\text{B.5})$$

e por último

$$i \frac{dc_3}{dt} = (\alpha_{31}|c_1|^2 + \alpha_{32}|c_2|^2) c_3 + \frac{1}{2} e^{i\Delta\omega t} c_1^* c_2 c_3 I_{1,3,2} + e^{-i\Delta\omega t} c_2^* c_1 c_3 I_{2,3,1}, \quad (\text{B.6})$$

com $\Delta\omega \equiv \omega - \omega_{21}$. Os coeficientes α_{ij} , β_{mn} e $I_{j,k,l}$ representam termos de interação não-linear, modulador de armadilha e modulador de interação, respectivamente. Têm a mesma forma explicitada em 4.1 e 6, mas no modelo de 3 níveis os termos α e I envolvem os três estados, isto é, os índices podem assumir valores $i, j, k, l = 1, 2, 3$, enquanto que os termos β acoplam apenas os estados inicial e alvo, de maneira que os índices assumem apenas valores $m, n = 1, 2$.