



**UNIVERSIDADE FEDERAL DO CEARÁ**  
**CAMPUS SOBRAL**  
**PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA ELÉTRICA E**  
**COMPUTAÇÃO**

**ROSÂNGELA MARQUES DE ALBUQUERQUE**

**OBTENÇÃO DE PORTAS LÓGICAS QUÂNTICAS EM CONDENSADOS DE**  
**BOSE-EINSTEIN**

**SOBRAL**  
**2016**

ROSÂNGELA MARQUES DE ALBUQUERQUE

OBTENÇÃO DE PORTAS LÓGICAS QUÂNTICAS EM CONDENSADOS DE  
BOSE-EINSTEIN

Dissertação apresentada no Programa de Pós-Graduação em Engenharia Elétrica e de Computação do Campus de Sobral da Universidade Federal do Ceará como parte dos requisitos para obtenção do título de Mestre em Engenharia Elétrica e de Computação, Área de Concentração Sistemas de Comunicações.  
Orientador: José Cláudio do Nascimento

SOBRAL

2016

ROSÂNGELA MARQUES DE ALBUQUERQUE

OBTENÇÃO DE PORTAS LÓGICAS QUÂNTICAS EM CONDENSADOS DE  
BOSE-EINSTEIN

Dissertação apresentada no Programa de Pós-Graduação em Engenharia Elétrica e de Computação do Campus de Sobral da Universidade Federal do Ceará como parte dos requisitos para obtenção do título de Mestre em Engenharia Elétrica e de Computação, Área de Concentração Sistema de Comunicações.

Aprovada em: \_\_/\_\_/\_\_\_\_

BANCA EXAMINADORA

---

José Cláudio do Nascimento(Orientador)  
Universidade Federal do Ceará

---

Wilton Bezerra de Fraga  
Universidade Federal do Ceará

---

Olímpio Pereira de Sá Neto  
Universidade Estadual do Piauí

SOBRAL

2016

Dedico este trabalho a minha família: meu marido e minha filha pela compreensão e incentivo.

## AGRADECIMENTOS

Em primeiro lugar, agradeço ao professor Cláudio que propôs este trabalho e que me acompanhou ao longo dos últimos anos como orientador. Não posso deixar de agradecer aos professores do departamento de engenharia elétrica e de computação, em especial ao professor Vandilberto pelas ótimas aulas e conselhos. agradeço também aos funcionários, em especial ao Germano, que tornaram nosso dia-a-dia não somente possível como agradável. Agradeço ao Alexandre pelo apoio financeiro na apresentação de trabalhos em simpósio. Devo agradecer aos colegas do curso, em especial ao Aglailson pelas conversas que sempre me distraía quando estávamos trabalhando no laboratório. Devo também agradecer a Antoine Xavier e Duboscq Romain, autores do GPElab, por responder as minhas dúvidas sempre que eu solicitei.

Gostaria de agradecer especialmente a cinco amigos, pois sem eles não teria sido possível a concretização deste mestrado: muito obrigada Leonardo Tabosa pela ajuda em sistemas lineares, pela sua amizade, por todas as nossas conversas, pelas piadas, pelos conselhos e leveza de não me deixar esquecer que a felicidade é uma escolha; muito obrigada Bruno, pela amizade, por ter me dado aulas de matlab, por ser meu parceiro inseparável de estudos, fofocas e neuroses; muito obrigada Darielson pela parceria com os artigos. Nossos almoços e lanches na padaria com direito a brincadeiras, fofocas e piadas tornaram o curso mais leve e divertido.

Muito obrigada ao professor Jarbas, cujos conselhos e motivação me fizeram estar concluindo este mestrado. Muito obrigada pelo “puxão de orelha”, pelas críticas, por nunca ter esperado menos de mim, por sempre ter exigido o melhor, por ter me ensinado que “tudo que nos propomos a fazer deve ser feito da melhor forma possível”, por ter me ensinado a escrever artigos, pelas orientações, pelos conselhos, mas principalmente pela motivação.

Muito obrigada Netim por toda a ajuda que você me deu, por ter aprendido o GPElab só para me ensinar, por ter me ajudado com todas as modificações que eu precisei, por ser sempre presente e disponível, pelas conversas e brincadeiras na hora do almoço, por ter um coração maior do que você mesmo. Você é uma das melhores pessoas que eu tive a honra de conhecer.

“Podia escolher muitas vidas. Optei por esta. Com isto, perdi contato com as outras. De vez em quando me pego vagando pelos arredores baldios como se lá encontrasse minhas outras vidas não escolhidas. Com um pouco de magia, e alguma ciência, transmutou de lado e troco a vida escolhida pela vida desconhecida. Mas a troca é imperfeita. Nem a física clássica, nem a quântica, nem a mistura das duas dá conta. Deixo um pouco de mim nos espaços trocados. Construo fragmentos, partículas, corpos, em diferentes momentos. Em silêncio, recolho passagens e trajetos, desconstruo sonhos, remexo imagens, ultrapasso limites, desfaço a matéria e me encontro no caos. Descubro enfim, aliviada, que foi esta a vida que primeiro escolhi.”

(Sandhi Maria Barreto)

## RESUMO

Condensados de Bose-Einstein (CBE) acoplados é candidato promissor à computação quântica. Por ser um fenômeno quântico macroscópico, por ser um sistema quântico robusto (BÖHI *et al.*, 2009), por sua montagem e controle experimental dentro de um chip atômico (HÄNSEL *et al.*, 2001), além das construções em redes ópticas (GREINER OLAF MANDEL, 2001), onde são localizados e manipulados em diferentes sítios da rede, garantindo condições de implementação de protocolos de Informação Quântica. A definição de um q-bit em CBEs foi proposta considerando o acoplamento de dois CBEs em diferentes estados hiperfinos através de uma transição de dois fótons. Identificamos cada um dos condensados nos seus respectivos níveis hiperfinos como os estados  $|0\rangle$  e  $|1\rangle$  do q-bit. Experimentalmente, é possível tanto a identificação dos átomos que estão em cada um dos níveis hiperfinos quanto a medição da fase dos condensados. Com estas informações é possível determinar os coeficientes de superposição  $\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$ . No presente trabalho, estudamos a dinâmica de dois condensados de Bose-Einstein (CBE) no estado fundamental, armadilhados e acoplados por tunelamento quântico. Devido a esse acoplamento, há transferência de população entre os dois modos condensados. O acoplamento é ajustado de maneira que tenhamos probabilidade de ocupação em dois níveis. Demonstramos que este sistema pode ser considerado viável a um q-bit. Então, simulamos as portas quânticas NOT e Hadamard.

**Palavras-chave:** Condensados de Bose-Einstein, q-bits, portas quânticas, NOT e Hadamard.

## ABSTRACT

Bose-Einstein condensate (BEC) coupled is a promising candidate to quantum computing. Being a macroscopic quantum phenomenon, Being a strong quantum system (BÖHI *et al.*, 2009), its assembly and experimental control inside an atomic chip (HÄNSEL *et al.*, 2001), further the optical networks (GREINER OLAF MANDEL, 2001), where it is found and manipulated in different network sites, assuring implementation conditions of Quantum Information Protocol. The definition of a Qubit in BECs was proposed considering the couple of two BEC's in different hyperfine states through a two-photon transition. We have identified each one of the condensates in their respective hyperfine levels like the states  $|0\rangle$  and  $|1\rangle$  the Qubit. Experimentally, it is possible both the identification of atoms that are in each one of the hyperfine levels and the measurement of the condensate phase. With these information is possible to determine the superposition coefficients  $\alpha |0\rangle + \beta |1\rangle$ . In this coursework, we have studied the dynamics of two Bose-Einstein condensate (BEC) on its fundamental state, trapped and coupled by a quantum tunneling. Because of this coupling, there is population transference between two condensed modes. The coupling is adjusted in a way we have probability of occupation in two levels. We have shown that this system can be considerate viable to a Qubit. So, we have simulated the quantum gates NOT and Hadamard.

**Keywords:** Bose-Einstein condensate, qubits, quantum gates, NOT and Hadamard.

## LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1 – Comprimento de onda de De Broglie . . . . .	17
Figura 2 – Representação da transição de fase para BEC . . . . .	18
Figura 3 – Partículas distinguíveis e indistinguíveis . . . . .	19
Figura 4 – Estatística de Maxwell-Boltzmann . . . . .	22
Figura 5 – Estatística de Bose-Einstein . . . . .	23
Figura 6 – Estatística de Fermi-Dirac . . . . .	23
Figura 7 – Observação do Primeiro Condensado . . . . .	27
Figura 8 – Arrefecimento com lasers . . . . .	29
Figura 9 – Armadilha Magnética . . . . .	30
Figura 10 – Armadilha Magnética . . . . .	31
Figura 11 – Arrefecimento Evaporativo . . . . .	32
Figura 12 – Tunelamento . . . . .	36
Figura 13 – Esfera de Bloch . . . . .	55
Figura 14 – portas clássica de um bit (a esquerda) e quânticas de um q-bit. . . . .	58
Figura 15 – Portas clássicas de um ou mais bits (esquerda) e à direita a porta quântica CNOT ou não-controlado . . . . .	58
Figura 16 – Condensado no estado fundamental . . . . .	61
Figura 17 – Estado $ 0\rangle$ . . . . .	62
Figura 18 – Estado $ 1\rangle$ . . . . .	63
Figura 19 – Estado de superposição $\frac{1}{\sqrt{2}}( 0\rangle +  1\rangle)$ . . . . .	63
Figura 20 – Estado de superposição $\frac{1}{\sqrt{2}}( 0\rangle -  1\rangle)$ . . . . .	64
Figura 21 – Porta NOT: Iniciamos os condensados no estado $ 0\rangle$ e no final da simulação muda para o estado $ 1\rangle$ . . . . .	65
Figura 22 – Porta NOT: Iniciamos os condensados no estado $ 1\rangle$ e no final da simulação muda para o estado $ 0\rangle$ . . . . .	65
Figura 23 – Porta NOT no estado de superposição $\frac{1}{\sqrt{2}}( 0\rangle +  1\rangle)$ . . . . .	66
Figura 24 – Porta Hadamard: Iniciamos os condensados no estado $ 0\rangle$ e no final da si- mulação muda para o estado $\frac{1}{\sqrt{2}}( 0\rangle +  1\rangle)$ . . . . .	67
Figura 25 – Porta hadamard: iniciamos os condensados no estado $ 1\rangle$ e no final da simu- lação muda para o estado $\frac{1}{\sqrt{2}}( 0\rangle -  1\rangle)$ . . . . .	67
Figura 26 – Porta hadamard: iniciamos os condensados no estado $\frac{1}{\sqrt{2}}( 0\rangle +  1\rangle)$ e no final da simulação muda para o estado $ 0\rangle$ . . . . .	68

Figura 27 – Porta hadamard: iniciamos os condensados no estado  $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle)$  e no final da simulação muda para o estado  $|1\rangle$  . . . . . 69

## LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Sistema semi-clássico . . . . .	24
Tabela 2 – Estatística de Bose-Einstein . . . . .	25
Tabela 3 – Estatística de Bose-Einstein . . . . .	25
Tabela 4 – Estatística de Maxwell-Boltzmann, de Férmí-Dirac e Bose-Einstein . . . . .	26

## SUMÁRIO

<b>1</b>	<b>INTRODUÇÃO</b>	<b>13</b>
<b>2</b>	<b>CONDENSADOS DE BOSE-EINSTEIN</b>	<b>16</b>
<b>2.1</b>	<b>Histórico</b>	<b>16</b>
<b>2.2</b>	<b>Estatística Quântica</b>	<b>17</b>
<b>2.2.1</b>	<i>Introdução</i>	<b>17</b>
<b>2.2.2</b>	<i>Indistinguibilidade de Partículas</i>	<b>19</b>
<b>2.2.3</b>	<i>Estatística</i>	<b>21</b>
<b>2.2.4</b>	<i>Função de Distribuição Estatística</i>	<b>22</b>
<b>2.2.5</b>	<i>Estatística de Maxwell-Boltzmann</i>	<b>24</b>
<b>2.2.6</b>	<i>Estatística de Bose-Einstein</i>	<b>24</b>
<b>2.2.7</b>	<i>Estatística de Fermi-Dirac</i>	<b>25</b>
<b>2.2.8</b>	<i>Distribuição de Fótons e dos átomos bosônicos</i>	<b>26</b>
<b>2.3</b>	<b>Realização Experimental</b>	<b>27</b>
<b>2.4</b>	<b>Arrefecimento com Lasers</b>	<b>28</b>
<b>2.5</b>	<b>Armadilha Magnética</b>	<b>29</b>
<b>2.6</b>	<b>Arrefecimento Evaporativo</b>	<b>30</b>
<b>2.7</b>	<b>A Teoria</b>	<b>32</b>
<b>2.8</b>	<b>A Equação de Gross-Pitaevskii</b>	<b>33</b>
<b>2.9</b>	<b>Modo Acoplado</b>	<b>35</b>
<b>2.10</b>	<b>Um Modelo Simples para Tunelamento</b>	<b>36</b>
<b>2.11</b>	<b>Tunelamento de um Condensado de Bose-Einstein num Poço Simétrico</b>	<b>36</b>
<b>2.12</b>	<b>Junção de Bose-Josephson</b>	<b>37</b>
<b>3</b>	<b>MÉTODOS NUMÉRICOS</b>	<b>38</b>
<b>3.1</b>	<b>Equação de Gross-Pitaevskii (GPE)</b>	<b>38</b>
<b>3.1.1</b>	<i>A dimensão da GPE</i>	<b>39</b>
<b>3.1.2</b>	<i>A GPE dependente do tempo</i>	<b>40</b>
<b>3.1.3</b>	<i>Estados Estacionários</i>	<b>41</b>
<b>3.1.4</b>	<i>Formulação e discretização do Gradiente (para um componente CEB)</i>	<b>42</b>
<b>3.2</b>	<b>Método Das Diferenças Finitas</b>	<b>43</b>
<b>3.2.1</b>	<i>Série de Taylor</i>	<b>43</b>

		12
3.2.2	<i>Método de Euler Explícito</i> . . . . .	44
3.2.3	<i>Método de Euler Implícito</i> . . . . .	45
3.2.4	<i>Método de Euler melhorado</i> . . . . .	46
3.2.5	<i>Aplicação do Método Euler Melhorado</i> . . . . .	47
3.2.6	<i>Método de Crank-Nicolson</i> . . . . .	49
3.2.6.1	<i>Solução de “potenciais” por Split-Step</i> . . . . .	51
<b>4</b>	<b>CONCEITOS FUNDAMENTAIS DE COMPUTAÇÃO QUÂNTICA</b> . . .	<b>54</b>
<b>4.1</b>	<b>O Bit Quântico</b> . . . . .	<b>54</b>
<b>4.2</b>	<b>Portas Lógicas</b> . . . . .	<b>55</b>
4.2.1	<i>Portas Quânticas</i> . . . . .	55
4.2.1.1	<i>Portas Lógicas de 1 q-bit</i> . . . . .	55
4.2.1.2	<i>Portas Lógicas de 2 q-bit</i> . . . . .	58
<b>5</b>	<b>SIMULAÇÃO DOS Q-BITS E DAS PORTAS LÓGICAS</b> . . . . .	<b>59</b>
5.1	<b>condensado no estado fundamental</b> . . . . .	<b>59</b>
5.2	<b>Condensados Acoplados</b> . . . . .	<b>61</b>
5.3	<b>Modulação por posição espacial de pulso</b> . . . . .	<b>62</b>
5.4	<b>Porta quântica NOT ou X</b> . . . . .	<b>64</b>
5.5	<b>Porta Hadamard (H)</b> . . . . .	<b>66</b>
<b>6</b>	<b>CONCLUSÕES</b> . . . . .	<b>70</b>
	<b>REFERÊNCIAS</b> . . . . .	<b>71</b>

## 1 INTRODUÇÃO

No final do século XIX acreditava-se que tínhamos alcançado uma completa compreensão das leis que governam todo o universo, pensando assim que tudo já estava explicado pelas teorias existentes e que apenas em alguns "detalhes" faltava explicação e as teorias da física estavam completas. Até que, em 1920 aconteceu uma revolução que mexeu nas bases da física, a explicação desses "detalhes" mudou todo o nosso modo de ver as coisas, de tal maneira que criou a moderna teoria da mecânica quântica. As regras dessa nova teoria são simples, porém não-intuitivas onde se tem um longo esforço para entendê-las, porém ela tornou-se parte indispensável da ciência e com ampla aplicabilidade em vários campos, tornando inegável seu grau de confiabilidade.

Nessa mesma época (no início do século XX), outra área estava ganhando força, a ciência da computação, tendo suas origens perdidas nas profundezas da história, os babilônios tinham ideias sofisticadas de algoritmos (cerca de 1750 a.c.), a moderna ciência da computação iniciou com Alan Turing em 1936 (TURING, 1936) que desenvolveu um modelo de computação conhecido como máquina de Turing, mostrando que existe uma máquina de Turing universal, no sentido que ela possa ser usada para simular qualquer outra máquina de Turing. Essa máquina universal representa o que significa realizar tarefas por meio de algoritmos. A tese de Church-Turing, em homenagem a Turing e a outro pioneiro da ciência da computação, Alonzo Church, estabelece a equivalência entre o conceito da realização de algoritmos em meios físicos e o conceito matemático de uma máquina de Turing universal.

Não demorou para que tivéssemos os primeiros computadores construídos a partir de componentes eletrônicos. John Von Neuman desenvolveu um modelo teórico de como juntar de forma prática todos os componentes necessários para a capacidade de um computador se igualar a uma máquina de Turing universal. O desenvolvimento do computador ganhou impulso com o desenvolvimento de um importante componente para essa área, o transistor, desenvolvido por John Bardeen, Walter Brattain e Will Shockley em 1947 (BARDEEN; BRATTAIN, 1948). A partir de então, essa área tem crescido de forma notável, levando a criação de uma lei chamada Lei de Moore, em homenagem a Gordon Moore, (MOORE, 2006) em 1965 que diz: "a um custo constante, a capacidade dos computadores dobra aproximadamente a cada dois anos".

Essa lei mantém-se verdadeira até o presente momento. No entanto, estamos começando a esbarrar em dificuldades impostas pela redução do tamanho dos componentes. À medida que eles se tornam menores temos efeitos quânticos a serem considerados. E é nesse momento que essas duas áreas se encontram criando uma nova teoria, a computação quântica,

baseada na ideia de se usar a mecânica quântica para fazer computação ao invés da física clássica.

Um avanço relacionado ao desenvolvimento da computação quântica foi na década de 1970, quando se começou a se ter um controle completo em sistemas quânticos isolados, pois aplicações da mecânica quântica anteriores envolviam um controle grosseiro sobre amostras macroscópicas. A partir de então várias técnicas que permitem o controle individual foram desenvolvidas. Por exemplo, aprisionamento de átomos individuais em "armadilhas atômicas".

Em 1982, Richard P. Feynman apontou que a simulação de um sistema quântico de  $N$  partículas só poderia ser simulado de forma eficiente por um computador que explorasse as leis da física quântica. Ou seja, só teríamos uma simulação eficiente de um sistema quântico se o mesmo fosse simulado por outro sistema quântico.

Três anos após a proposta de Feynman, em 1985, David Deutsch introduziu um modelo completo para a computação quântica e deu uma descrição de um computador quântico universal. Ele também criou o primeiro algoritmo quântico, o problema de dois bits de Deutsch. Este foi o primeiro problema computacional para o qual foi demonstrado que um computador quântico é superior aos computadores clássicos (DEUTSCH, 1985).

Em 1994, Shor (1994) apresenta seu algoritmo e demonstra que dois problemas importantes, o de encontrar os fatores primos de um número inteiro e o "problema do logaritmo discreto"(os quais não temos uma solução eficiente em um computador clássico) poderiam ser resolvidos eficientemente em um computador quântico. Outra evidência do poder dos computadores quânticos foi o algoritmo de Grover (1997), criado em 1995, mostrou outro problema importante que poderia ser resolvido de forma mais eficiente pelo computador quântico, o de realizar uma busca em uma lista desordenada que causa bastante impacto devido a sua aplicabilidade.

Nessa perspectivas, buscamos por um sistema físico que seja um candidato promissor à computação quântica. O requisito básico para um computador quântico é um conjunto de sistemas de dois níveis quânticos, chamados bits quânticos, ou q-bits que pode ser inicializado, acoplado e medido de uma maneira controlada. Muitos sistemas físicos parecem ser candidatos promissores para a implementação de computação quântica, entre eles são fótons individuais (EIBL *et al.*, 2004), spin (TRAUZETTEL *et al.*, 2007), íons (ROOS *et al.*, 2004) , junções Josephson supercondutor (MAJER *et al.*, 2007).

Um sistema promissor para a implementação de computação quântica que tem sido apontado como forte candidato é o condensado de Bose-Einstein (CBE), esse sistema ganhou muita repercussão após sua realização experimental (ANDERSON *et al.*, 1995), apresenta van-

tagens por ser um sistema quântico robusto, por sua montagem e controle experimental dentro de um chip atômico (BÖHI *et al.*, 2009; HÄNSEL *et al.*, 2001), além das construções em redes ópticas, onde são localizados e manipulados em diferentes sítios da rede, garantindo condições de implementação de protocolos de Informação Quântica.

A definição de um q-bit em CBEs foi proposta (BÖHI *et al.*, 2009) considerando o acoplamento de dois CBEs em diferentes estados hiperfinos do átomo alcalino através de uma transição de dois fótons (HALL *et al.*, 1998a). Identificamos cada um dos condensados nos seus respectivos níveis hiperfinos como os estados  $|0\rangle$  e  $|1\rangle$  do q-bit. Experimentalmente, é possível tanto a identificação dos átomos que estão em cada um dos níveis hiperfinos (HALL *et al.*, 1998a; BÖHI *et al.*, 2009) quanto a medição da fase dos condensados (HALL *et al.*, 1998b). Com estas informações, é possível determinar os coeficientes de uma superposição  $\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$ .

Uma vez definido um q-bit no sistema físico, precisamos realizar operações sobre ele, chamadas portas lógicas. Temos portas de um q-bit e de dois q-bits. Dentro desse panorama, analisamos a dinâmica dos CBEs acoplados e simulamos as portas lógicas NOT e Hadamard.

Esta dissertação está organizada de modo geral em três partes principais: introdução e métodos; simulação e conclusão. Na primeira parte, temos os capítulos 2, 3 e 4. No segundo capítulo, temos um panorama histórico e uma revisão de alguns conceitos básicos a respeito dos condensados de Bose-Einstein. No terceiro capítulo, discutimos os métodos numéricos utilizados neste trabalho e no capítulo 4, os conceitos fundamentais da computação quântica. Na segunda parte desta dissertação, no capítulo 5, descrevemos a simulação dos q-bits e das portas. E finalizamos com a conclusão.

## 2 CONDENSADOS DE BOSE-EINSTEIN

### 2.1 Histórico

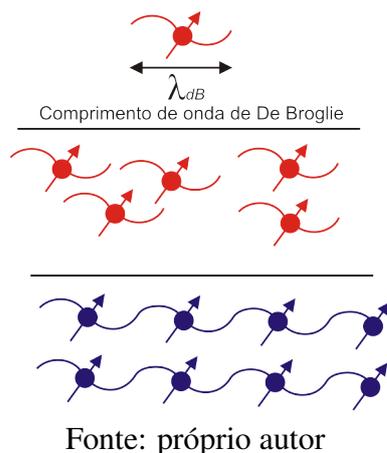
Em 1924, Albert Einstein teve acesso a um artigo de Bose intitulado "Planck's Law and The Light Quantum Hypothesis" no qual ele obtivera a fórmula de Planck para a distribuição de energia pelas diferentes frequências do espectro da radiação térmica. Bose havia descrito a radiação como sendo um gás de partículas, introduzindo uma maneira completamente nova de enumerar os estados possíveis dessas partículas, criando um novo método de contagem. Einstein interessou-se pelo trabalho, indicando sua publicação com o seguinte comentário:

"Na minha opinião, a dedução de Bose da fórmula de Planck constitui um avanço importante. O método usado aqui também dá a teoria quântica do gás ideal, conforme mostrarei noutro local, com maior detalhe"(PAIS, 1982).

Do ponto de vista clássico podemos pensar num gás ideal de partículas livres a uma temperatura alta como sendo formado por partículas que são como bolas de gude. Elas se deslocam entre as paredes do frasco e ocasionalmente colidem-se. A medida que a temperatura é reduzida começa a se manifestar os efeitos ondulatórios e usamos a hipótese de De Broglie na qual partículas são ondas de matéria, então temos que pensar nas partículas em termos de pequenos pacotes de onda, cujo tamanho é dado aproximadamente pelo comprimento de onda de De Broglie,  $\lambda_{dB}$  como representado na figura 1. Esse comprimento de onda é relacionado à velocidade térmica das partículas por  $\lambda_{dB} = \hbar/mv$ , onde  $m$  é a massa das partículas e  $\hbar$  é a constante de Planck. Enquanto a temperatura é alta, os pacotes de onda são muito pequenos, e o conceito de indistinguibilidade é irrelevante porque ainda podemos seguir a trajetória individual de cada pacote de onda e usar conceitos clássicos. No entanto, quanto mais frio o gás menor a velocidade das partículas que o compõem e, portanto, maior o comprimento de onda de de Broglie associado a elas.

Na temperatura crítica  $T_c$ , a distância entre as partícula torna-se tão pequena que agora é comparável com o tamanho de  $\lambda_{dB}$  de tal modo que os pacotes de onda individuais se sobrepõem ficando impossível distinguir pacotes individuais, reduzindo ainda mais a temperatura até o ponto em que é formada uma única grande onda de matéria, tem-se um condensado. A mesma situação pode ser descrita em termos do número de ocupação dos estados, que em temperatura  $T = T_c$  as partículas passam a ocupar o estado fundamental do sistema, como representado na 2. Por esta razão a condensação de Bose-Einstein é também definida como sendo um fenômeno em que ocorre a ocupação macroscópica dos bósons no estado fundamental do

Figura 1 – Comprimento de onda de De Broglie



sistema.

Ambas as definições são equivalentes e elas nos mostram o fato que as propriedades estatísticas do sistema são determinadas por um único estado quântico do sistema.

É essa a ideia básica que Einstein teve dando seguimento ao trabalho de Bose de 1924. Einstein aplicou o método de contagem de Bose a um gás de fótons em um gás de partículas, a grande diferença entre eles se deve que esse último conserva o número de partículas, o que obrigou Einstein a modificar a dedução de Bose para introduzir essa condição, responsável, em última análise, pela condensação, rendendo a Einstein três artigos (EINSTEIN, 1924), (EINSTEIN, 1925a), (EINSTEIN, 1925b) que revolucionariam a mecânica quântica. Nesses artigos, Einstein prevê que: “A partir de uma certa temperatura, as moléculas ‘condensam’ sem forças atrativas, isto é, acumulam-se a velocidades nulas”, o que mais na frente seria chamado de condensados de Bose-Einstein (ou na sigla em inglês *BEC*). A indistinguibilidade quântica de partículas idênticas é a chave desse raciocínio. A transição de fase prevista por Einstein acontece em sistemas formados por bósons. No caso de férmions o princípio de exclusão de Pauli garante que as partículas jamais ocuparão o mesmo estado quântico, o que faz com que o gás de férmions tenha um comportamento completamente distinto daquele do gás bosônico.

## 2.2 Estatística Quântica

### 2.2.1 Introdução

Ao analisarmos um sistema físico, temos em mente que a matéria é feita de partículas muito pequenas e em grande número; um grama de qualquer material tem cerca de  $10^{23}$  de partículas, tornando uma tarefa muito árdua a análise detalhada do seu comportamento (ou a análise detalhada do seu comportamento foge do nosso controle), mas ainda sim podemos

Figura 2 – Representação da transição de fase para BEC. Na esquerda temos a transição de fase: A temperatura ambiente, os átomos de um gás se comportam como partículas, ao ser resfriados as partículas passam a ter comportamento de luz-onda, ou seja, temos pequenos pacotes de onda que a medida que resfriamos eles ficam maiores. Na temperatura crítica  $T_c$ ,  $\lambda_B$  torna-se comparável à distância entre as partículas e ocorre uma superposição dos pacotes de onda, formando assim uma única onda de matéria. A direita temos a mesma situação descrita através do número de ocupação, na temperatura crítica  $T_c$ , ocorre uma ocupação macroscópica do estado fundamental (MUNIZ, 2002)

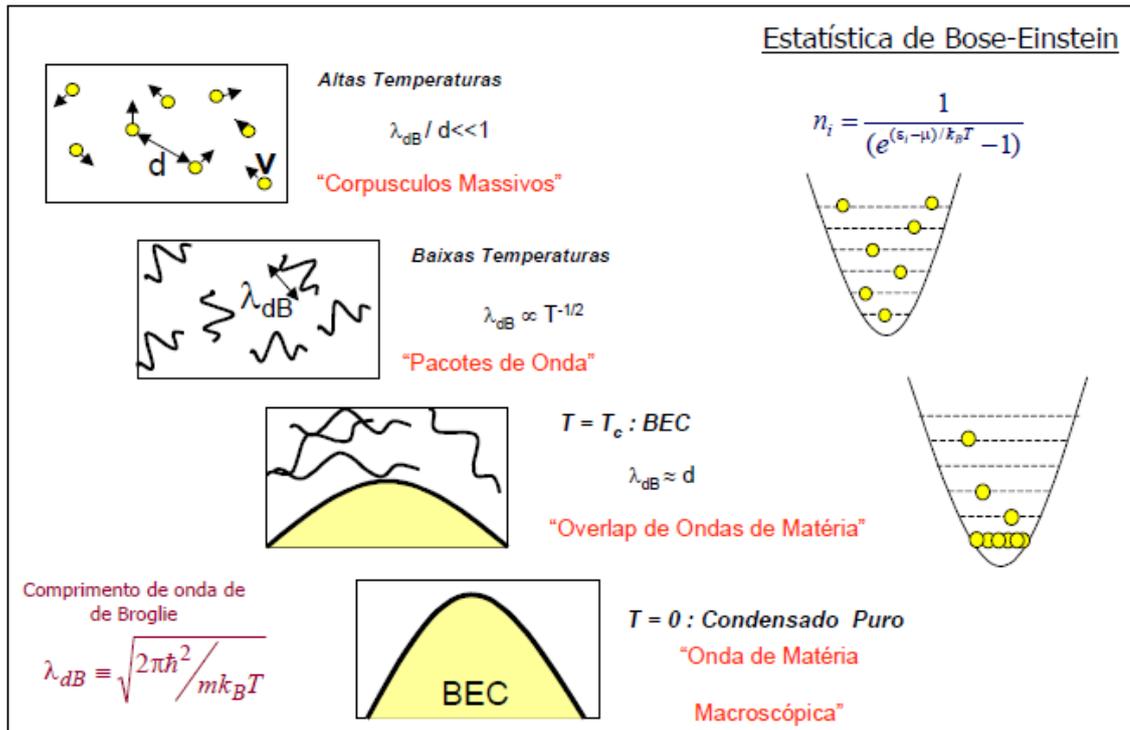


Figura adaptada de (KETTERLE, 2002)

fazer uma descrição por um conjunto de propriedades macroscópicas, tais como temperatura, pressão, densidade, resistência elétrica, etc. Sem a necessidade de conhecer detalhes do movimento de cada partícula. Para tanto, devemos ignorar detalhes do movimento das partículas (interações de cada partícula) e fazermos considerações exclusivamente estatísticas.

Um exemplo simples é aquele de um gás isolado, não precisamos conhecer a velocidade de todas as moléculas, fazemos apenas a distribuição de Maxwell das velocidades das moléculas que dá a probabilidade de que uma molécula tenha velocidade entre  $v$  e  $v + dv$ , a partir dessa distribuição pode-se calcular propriedades macroscópicas importantes como pressão e temperatura do gás.

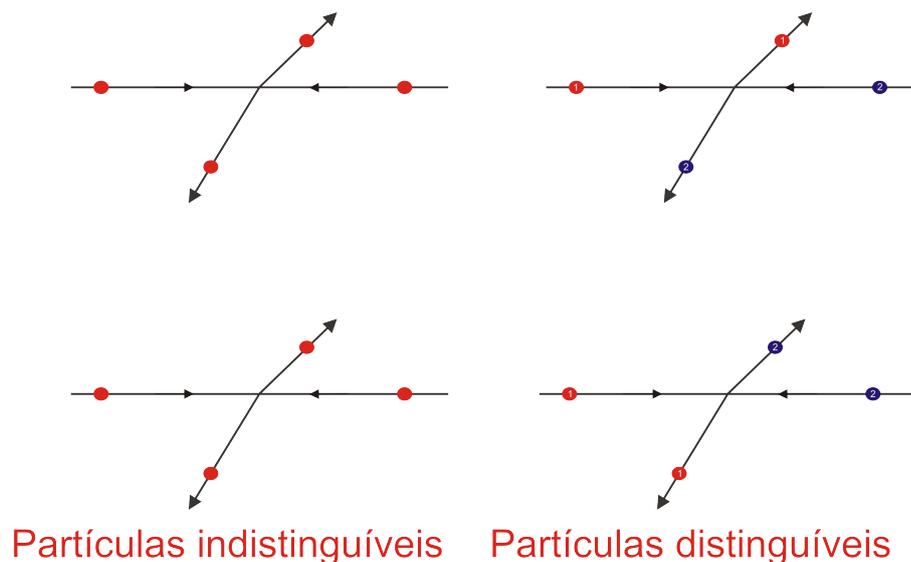
Sendo assim, basta que tenhamos posse das probabilidades com que as partículas ocupam diferentes estados de energia que obteremos uma série de propriedades macroscópicas importantes de todo o sistema, as quais são de nosso interesse.

Nesta secção, propõe-se analisar funções de distribuição aplicáveis em dois tipos de partículas: distinguíveis (sistema semi-clássico) que obedece uma distribuição de Maxwell-Boltzmann e indistinguíveis que podem obedecer duas possibilidades diferentes: uma distribuição de Bose-Einstein, que se aplica a partículas descritas por autofunções simétricas (bósons) e uma distribuição de Fermi-Dirac, que se aplica a partículas descritas por autofunções anti-simétricas (férmions). (SALINAS, 1997)

### 2.2.2 Indistinguibilidade de Partículas

Se temos duas partículas idênticas e elas interajam uma com a outra (passe por um processo de interação), sofra uma colisão por exemplo, de modo que as ondas de de Broglie se sobreponham, após sua interação elas sejam separadas, não conseguimos mais identificar essas partículas posteriormente, nas figuras abaixo, temos uma representação pictórica antes e após uma colisão entre partículas distinguíveis e indistinguíveis.

Figura 3 – Partículas distinguíveis e indistinguíveis



Fonte: próprio autor

Embora essa questão seja fácil de ser observada pensando em partículas classicamente como "bolas de bilhar", essa é uma questão fundamental da mecânica quântica: não temos como distinguir partículas idênticas e isso não é um problema de medição é uma característica fundamental da mecânica quântica.

A origem dessa indistinguibilidade está no *princípio de incerteza de Heisenberg*,  $\Delta x \Delta p \geq h$ , que impede que possamos ter toda a trajetória da partícula de seu movimento, na verdade o que temos é uma distribuição de probabilidade de ocupar todos os caminhos possíveis. Assim pelo fato de elas serem indistinguíveis podemos determinar a probabilidade de

encontrar uma partícula em uma certa região do espaço de fase, mas não podemos determinar qual partícula que se encontra na região.

Um outro aspecto importante de se tratar é a classificação das partículas em dois tipos distintos, através de suas funções de onda e em termos de suas simetria e anti-simetria. Existem então duas formas diferentes para a função de onda de duas partículas:

Um estado anti-simétrico

$$\Psi_{\alpha\beta}^A(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\Psi_{\alpha}^{(1)}\Psi_{\beta}^{(2)} - \Psi_{\beta}^{(1)}\Psi_{\alpha}^{(2)}] \quad (2.1)$$

Que satisfaz a condição

$$\Psi_{\alpha\beta}^A(1,2) = -\Psi_{\alpha\beta}^A(2,1) \quad (2.2)$$

E um estado simétrico

$$\Psi_{\alpha\beta}^A(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\Psi_{\alpha}^{(1)}\Psi_{\beta}^{(2)} + \Psi_{\beta}^{(1)}\Psi_{\alpha}^{(2)}] \quad (2.3)$$

Que satisfaz a condição

$$\Psi_{\alpha\beta}^A(1,2) = \Psi_{\alpha\beta}^A(2,1) \quad (2.4)$$

As partículas que têm spins semi-inteiros ( $1/2, 3/2, 5/2, \dots$ ) têm autofunções anti-simétricas e são conhecidas como férmions. Exemplos dessas partículas são elétrons, prótons, nêutrons e compostos de número ímpar de partículas, tais como o átomo de  $^3\text{He}$  ele possui dois prótons, um nêutron e dois elétrons (todas as partículas com spin semi-inteiro). Essas partículas obedecem a estatística de Fermi-Dirac, ou seja, são partículas cujos estados quânticos não podem ser coincidentes. Esse impedimento tem origem na simetria de troca e como consequência observável podemos citar a estabilidade de anãs brancas e estrelas de nêutrons contra a atração gravitacional e a distribuição eletrônica dos átomos obedecendo o princípio de exclusão de Pauli.

As partículas que têm spins inteiros ( $0, 1, 2, 3, \dots$ ) têm autofunções simétricas e são conhecidas como bósons. Exemplos dessas partículas são fótons, mésons e compostos de número par de partículas, tais como o átomo de  $^4\text{He}$  ele possui dois prótons, dois nêutrons e dois elétrons. Essas partículas obedecem a estatística de Bose-Einstein, ou seja, muitas partículas até mesmo infinitas podem possuir o mesmo conjunto de números quânticos identificadores de seu estado. Além disso, quanto mais um bóson ocupa um determinado estado microscópico há um aumento de probabilidade de aquele estado ser populado, ou seja, os bósons não só podem

está no mesmo estado quântico como eles também têm a tendência de estar, assim se temos um bóson em um estado quântico o próximo bóson tem maior probabilidade de ocupar o mesmo estado e o próximo bóson terá mais probabilidade de ocupar esse estado de modo que quanto mais bósons em um estado maior a probabilidade de um próximo bóson ocupar esse estado também.

Vale a pena discutirmos o que queremos dizer por sistemas compostos e por partículas não-interagentes. Partículas fundamentais da natureza (aquelas que, até onde vai nosso conhecimento hoje, não são formadas por nenhuma outra partícula e, portanto, não podem ser “quebradas” em constituintes mais fundamentais) possuem um estado de spin bem definido (inteiro ou semi-inteiro). Enquanto elas não interagirem entre si, serão necessariamente tratadas por meio desse estado quântico. Na medida que a interação entre as partículas existe e torna-se relevante, estados compostos podem surgir. Esses estados poderão ser caracterizados por um spin total que será a soma dos spins de cada partícula, o qual definirá a estatística do estado composto. Por exemplo, um próton é formado por três quarks (dois ups e um down), e possui spin semi-inteiro (obtido da soma do spin dos três quarks). A menos que consideremos em um experimento a possível quebra do próton, a interação forte que mantém os quarks ligados é suficientemente forte (e de curto alcance) e a estrutura do próton pode ser desprezada e tratá-lo como uma única partícula. Um outro exemplo é um par de Cooper, formado por dois elétrons ligados por um potencial atrativo originário da rede cristalina de alguns sólidos. Apesar de elétrons serem férmions (possuem spin semi-inteiro) o par de Cooper possui um spin inteiro (obtido pela soma dos dois spins semi-inteiro) e por isso obedece a estatística de spins inteiros, bosônica, dando origem ao fenômeno de supercondutividade.

No entanto, a interação é fraca e, a partir de certa temperatura, a atração é vencida pela energia térmica e o par se desfaz e os elétrons voltam a atuar individualmente, com spin  $1/2$  e o estado supercondutor deixa de existir. Portanto, para analisarmos um sistema físico, uma avaliação das forças de interação entre as partículas é necessária para uma escolha adequada da estatística do problema. Obviamente, poderíamos considerar as partículas todas a partir dos seus elementos constituintes fundamentais, sem nos preocuparmos com os estados compostos, mas isso tornaria o sistema físico intratável sob qualquer ponto de vista prático (PETHICK; SMITH, 2001).

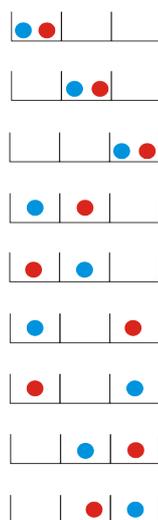
### **2.2.3 Estatística**

Para sabermos qual estatística devemos usar, precisamos saber quais partículas estão no nosso sistema. Partículas distinguíveis as quais vemos sua definição acima obedecem

a estatística de Maxwell-Boltzmann, enquanto que partículas indistinguíveis podem obedecer duas estatísticas: A primeira é a de Fermi-Dirac que é para férmions e a segunda é a de Bose-Einstein que é para bósons.

Vamos fazer a seguinte alusão para entendermos melhor as três estatísticas: Imagine que as partículas são pessoas e que os estados quânticos são casinhas onde podemos colocá-las. De quantas maneiras diferentes você pode distribuir duas pessoas diferentes em três casinhas? A figura abaixo 4 mostra as nove maneiras de distribuir.

Figura 4 – Estatística de Maxwell-Boltzmann



Fonte: próprio autor

Essa distribuição segue a estatística de Maxwell-Boltzmann para partículas distinguíveis.

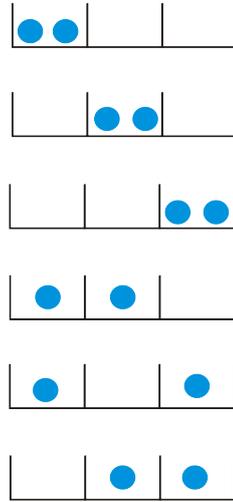
Agora temos duas pessoas iguais para ser distribuídas em três casinhas e para saber como fazer as distribuições temos que saber que tipo de pessoas são: se são sociáveis, podem ocupar a mesma casinha (os bósons), temos então seis configurações possíveis representadas na figura 5. Ou se são pessoas insociáveis, não podem ocupar a mesma caixinha (os férmions), assim temos apenas três configurações possíveis representadas na figura 6.

Essa distribuição segue a estatística de Fermi-Dirac para férmions.

#### 2.2.4 Função de Distribuição Estatística

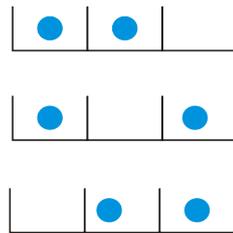
Uma função de distribuição  $n_i$  fornece o número médio de partículas que ocupam estados de energia  $\varepsilon_i$  à temperatura  $T$ . A função de distribuição depende da temperatura do gás, que ao ser aumentado, as partículas são redistribuídas a estados de mais altas energias e  $n_i$  é

Figura 5 – Estatística de Bose-Einstein



Fonte: próprio autor

Figura 6 – Estatística de Fermi-Dirac



Fonte: próprio autor

alterado como também da natureza das partículas. Para férmions:

$$n_i = 0 \text{ ou } 1 \quad (2.5)$$

No caso de férmions,  $n_i$  deve ser zero ou um, por causa do princípio de exclusão de Pauli (o estado encontra-se vazio ou ocupado por uma única partícula), duas partículas idênticas não podem ocupar o mesmo estado simultaneamente. Para bósons,

$$n_i = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (2.6)$$

No caso de bósons,  $n_i$  pode ter um número infinito de partículas em cada estado, consistente com a forte tendência de elas ocuparem o mesmo estado. (TOBOCHNIK, 2010)

### 2.2.5 Estatística de Maxwell-Boltzmann

Temos um sistema físico com  $N$  partículas que será descrito por uma função de onda,

$$\Psi = \Psi(q_1, q_2, \dots, q_i) \quad (2.7)$$

Onde  $q_i$  refere-se a todas as coordenadas da  $i$ -ésima partícula (posição, spin, etc). Vamos considerar um sistema simples de apenas dois estados quânticos, 1,2 e duas partículas A,B distinguíveis, teríamos uma aproximação semi-clássica na construção do estado físico representado na tabela 1.

Tabela 1 – Sistema semi-clássico

$n_1$	$n_2$
AB	-
-	AB
A	B
B	A

Essa estatística é chamada de Maxwell-Boltzmann e as partículas que a obedecem são partículas clássicas ou partículas quânticas distinguíveis. O número médio de partículas  $n_i$  mais provável com estados de energia  $\epsilon_i$  é

$$n_i = \frac{1}{e^{\alpha} e^{\beta \epsilon_i}} \quad (2.8)$$

Essa é a função distribuição de Maxwell-Boltzmann. Os parâmetros  $\alpha$  e  $\beta$  são denominados de multiplicadores de Lagrange. Sendo que  $\beta$  está associado diretamente à temperatura absoluta  $T$  do sistema

$$\beta = \frac{1}{k_{\beta} T} \quad (2.9)$$

onde,  $k_{\beta} = 1,38 \times 10^{-23} \text{ J/K}$ , é a constante de Boltzmann.

### 2.2.6 Estatística de Bose-Einstein

Vamos considerar o mesmo sistema do exemplo anterior de apenas dois estados quânticos e duas partículas indistinguíveis, as diferentes maneiras de se permutá-las estão representadas na tabela 2.

Tabela 2 – Estatística de Bose-Einstein

$n_1$	$n_2$	<b>Função de onda</b>
AB	-	$\Psi_1(\vec{r}_B)\Psi_1(\vec{r}_A)$
-	AB	$\Psi_2(\vec{r}_A)\Psi_2(\vec{r}_B)$
A	B	$\frac{1}{\sqrt{2}}[\Psi_1(\vec{r}_A)\Psi_2(\vec{r}_B) + \Psi_1(\vec{r}_B)\Psi_2(\vec{r}_A)]$

Observe que, diferentemente das partículas distinguíveis, se trocarmos os índices A e B, não criamos um estado novo.

### 2.2.7 Estatística de Fermi-Dirac

A questão é encontrar as diferentes maneiras de se permutar  $N$  partículas fermiônicas sobre os níveis quânticos formados por  $M$  sistemas idênticos. Cada nível  $i$ , de cada um dos  $M$  sistemas, deve definir um estado quântico específico. Como agora se trata de férmions, somente uma das  $n_i$  partículas, disponibilizadas para o nível  $i$ , pode ocupá-lo em cada um dos  $M$  sistemas.

Vamos considerar o mesmo sistema supracitado no exemplo anterior, de apenas dois estados quânticos, 1,2 e duas partículas A,B, agora distinguíveis e as diferentes maneiras de se permutar está representado na tabela 3.

Tabela 3 – Estatística de Bose-Einstein

$n_1$	$n_2$	<b>Função de onda</b>
A	B	$\frac{1}{\sqrt{2}}[\Psi_1(\vec{r}_A)\Psi_2(\vec{r}_B) - \Psi_1(\vec{r}_B)\Psi_2(\vec{r}_A)]$

De modo geral, o número médio de partículas  $n_i$  mais provável com estados de energia  $\varepsilon_i$  é

$$\langle n_i \rangle_{FD, BE} = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_i - \mu)} \pm 1} \quad (2.10)$$

Refere-se a estatística de Fermi-Dirac e Bose-Einstein, respectivamente. O sinal "+" refere-se a férmions e o sinal "-" a bósons. (GREINER, 1994)

Para melhor representar as três estatísticas, abaixo representamos uma tabela com os possíveis estados para duas partículas idênticas não interagentes ( $A, B$ ) e três estados quânticos ( $n_1, n_2, n_3$ ):

Tabela 4 – Estatística de Maxwell-Boltzmann, de Férmí-Dirac e Bose-Einstein

Maxwell-Boltzmann			Férmí-Dirac			Bose-Einstein		
$n_1$	$n_2$	$n_3$	$n_1$	$n_2$	$n_3$	$n_1$	$n_2$	$n_3$
AB	-	-	Inválido			AB	-	-
-	AB	-	Inválido			-	AB	-
-	-	AB	Inválido			-	-	AB
A	B	-	A	B	-	A	B	-
B	A	-	Idênticas:A=B			Idênticas:A=B		
A	-	B	A	-	B	A	-	B
B	-	A	Idênticas:A=B			Idênticas:A=B		
-	A	B	-	A	B	-	A	B
-	B	A	Idênticas:A=B			Idênticas:A=B		

### 2.2.8 Distribuição de Fótons e dos átomos bosônicos

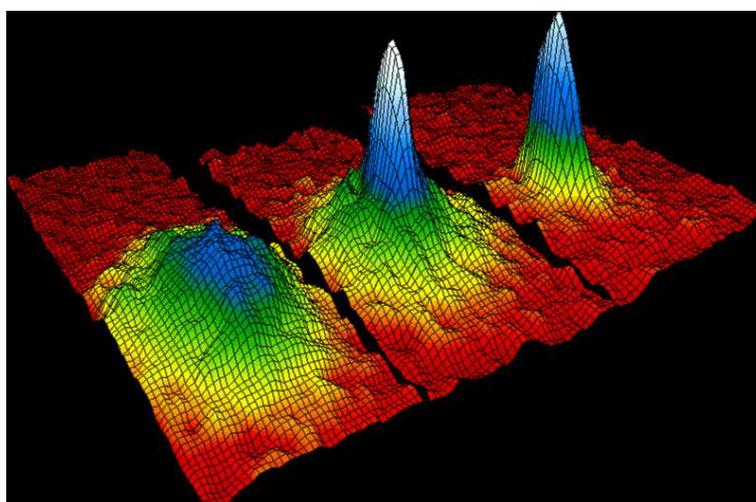
Bose inovou no seu método de contagem, de modo que no caso do nosso exemplo, duas partículas e dois estados; existem quatro configurações possíveis no caso clássico e apenas três configurações para fótons e apenas uma configuração com uma partícula em cada estado (trocar as partículas não gera um novo estado), pois são indistinguíveis. Essa alteração pode parecer inócua, mas torna-se muito importante quando o número de estados e partículas é muito grande (que é o caso de sistemas macroscópicos). Ao distribuir fótons por orbitais, o peso relativo de estados com muitos bósons na mesma órbita seria muito superior ao do caso clássico, simplesmente porque a redução do número de configurações microscópicas é tanto maior quanto mais órbitas forem ocupadas e algo impensável no caso de férmions, pois não poderia ter mais de uma partícula na mesma órbita.

Einstein percebeu que o sistema de contagem de Bose poderia também ser aplicado para átomos em um gás homogêneo sem interações entre elas, ou seja, as forças interações mútuas possam ser desprezadas (atração e repulsão). Precisamos ressaltar uma diferença importante na aplicação desse método de contagem para fótons e para um gás: no caso de fótons, o número total de partículas não precisa ser conservado, pois ao interagir com a matéria, eles podem ser absorvidos ou emitidos, enquanto que em um gás, o número total de átomos precisa ser conservado, o mesmo com a energia do sistema. Ao refazer os cálculos levando em conta essa prescrição adicional, Einstein chegou na condensação dos átomos a partir de uma temperatura crítica  $T_c$  (temperatura de condensação de Bose-Einstein) (GREINER, 1994).

### 2.3 Realização Experimental

A realização experimental dos condensados revelou-se difícil, apenas em junho de 1995, setenta anos após sua previsão podemos comprovar esses condensados com uma série de experimentos com átomos de Rubídio  $^{87}\text{Rb}$  (na figura 7 vemos a primeira imagem divulgada de um condensado de Bose-Einstein em laboratório), com átomo de Lítio  $^7\text{Li}$  e quatro meses após, com átomos de sódio  $^{23}\text{Na}$  (DAVIS *et al.*, 1995).

Figura 7 – Imagem com simulação em cor da distribuição de velocidades em uma nuvem de átomos de Rubídio  $^{87}\text{Rb}$ . O quadro da esquerda corresponde a um gás à temperatura imediatamente antes da condensação; o quadro do meio, imediatamente após o aparecimento da condensação; no quadro da direita, a amostra, após evaporação, é quase um condensado puro.



Fonte: (ANDERSON *et al.*, 1995)

O motivo por ter demorado tanto tempo para a comprovação experimental dos condensados é o seguinte: a condensação prevista por Einstein dizia respeito a partículas que não interagem; mas todas as partículas próximas umas das outras sofrem forças mútuas; a maneira de ter um sistema onde as partículas não interajam é usar um gás muito diluído a tal ponto que as partículas estarão distantes e possamos desprezar as forças que cada partícula exerce nas outras. Sabendo que a temperatura de condensação é tanto menor quanto menor for a densidade de um gás para um gás muito diluído precisaríamos de uma temperatura muito baixa. O problema é que ao baixar muito a temperatura de uma substância ela se solidifica. A substância estando em estado sólido, as partículas estão próximas novamente e as interações entre elas passam a ser significativas.

Então estávamos com o seguinte problema: como baixar muito a temperatura de um gás sem que ele se solidifique? A solução encontrada para esse problema é deixar o gás em uma fase gasosa metaestável, ou seja, deixá-lo tão diluído a ponto que colisões de três

partículas sejam extremamente raras, assim a solidificação demora um tempo tão longo que a fase gasosa permanece, embora a fase estável seja sólida. A consequência de diluir tanto esse gás é que a temperatura de condensação dele passa a ser extremamente baixa, cerca de  $10^{-9}$ K. E o problema passou a ser: como arrefecer um gás de bósons a uma temperatura tão baixa?

## 2.4 Arrefecimento com Lasers

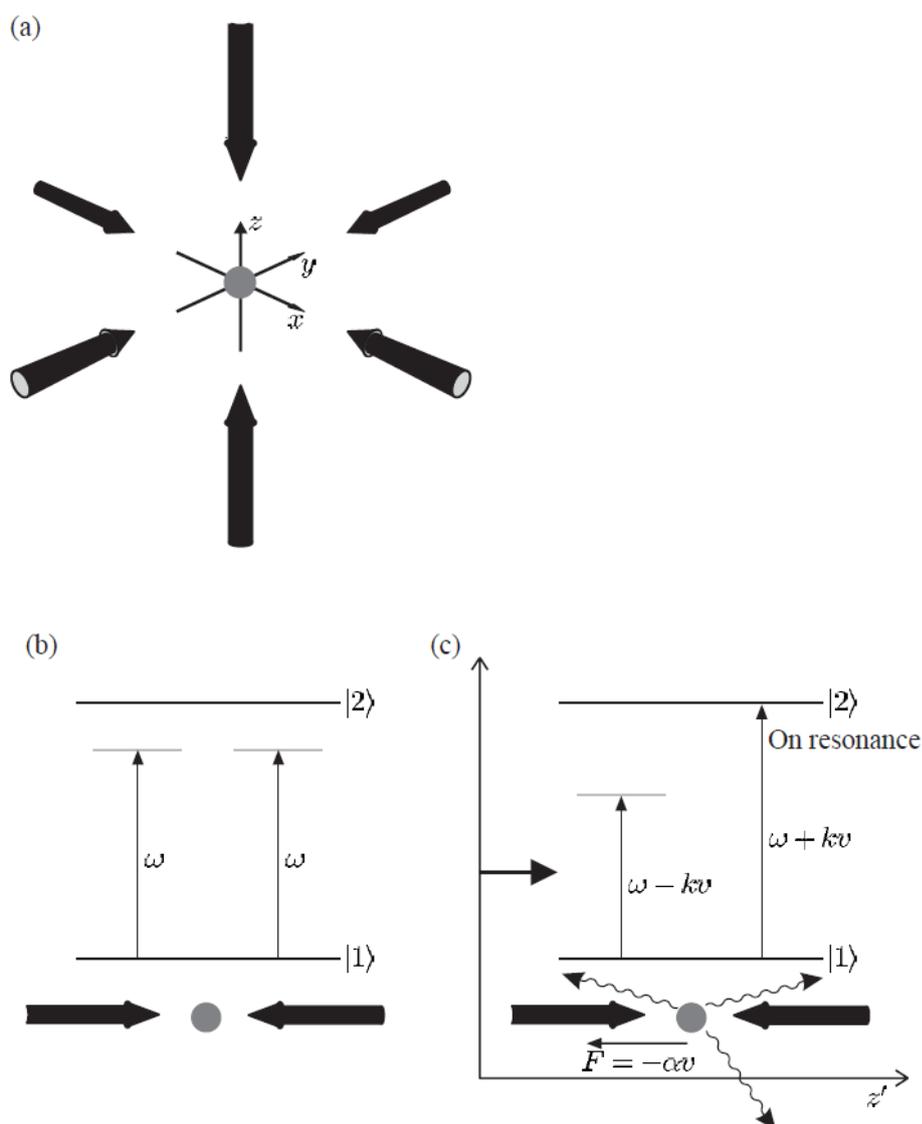
O processo de arrefecimento com laser utiliza o efeito Döppler, que consiste na variação da frequência da radiação com o movimento relativo da fonte e receptor, foi desenvolvido por Steve Chu (Universidade de Stanford) e aperfeiçoado por William Phillips (NIST) e Claude Cohen-Tannoudji (École Normal Supérieure, Paris) (CHU, 1998) (COHEN-TANNOUDJI, 1998) (PHILLIPS, 1998).

Quando um átomo recebe radiação, ele o faz em pacotes discretos, para tanto, a frequência desta radiação precisa ser proporcional à diferença de energia de dois níveis de energia do átomo  $hf = E_1 - E_2$ . Um feixe laser ao passar por uma nuvem de átomos idênticos, com uma frequência longe de qualquer ressonância ( $hf \neq E_i - E_j$ , para todos os pares de níveis atômicos) não sofre qualquer absorção.

Se iluminarmos um átomo com dois feixes de lasers contrapropagantes com uma frequência ( $\omega$ ) um pouco menor do que a frequência de ressonância ( ver figura 8 b). Observamos que, devido ao efeito Doppler , o átomo vê o feixe de laser que está se movendo na sua direção com uma frequência um pouco maior do que a frequência do laser (no referencial do laboratório) ( $\omega + kv$ ) que propositalmente é a frequência de ressonância, passando assim a absorver os fótons desse laser. Enquanto que o laser que está em direção oposta é visto por ele com uma frequência ainda menor do que a de ressonância ( $\omega - kv$ ) e assim irá absorver poucos fótons desse feixe (ver figura 8 c).

Em uma nuvem atômica onde os átomos estão se movendo em todas as direções, requer lasers em todas as direções, sendo assim é colocado três pares de feixes contrapropagantes ortogonais (ver figura 8 a). Ao absorver fótons do feixe que se move em sua direção, o átomo sofre um recuo no mesmo sentido de propagação do laser, ou seja, no sentido oposto ao átomo, ( $F = -\alpha v$ ), reduzindo assim sua velocidade. Dessa maneira, conseguimos reduzir muito a velocidade dos átomos, o que corresponde a baixar a temperatura da nuvem atômica. Porém esse processo não resolveu totalmente o problema, essa configuração até consegue baixar a temperatura da nuvens para microkelvin, mas não é uma temperatura baixa o suficiente para termo a condensação que precisa de uma temperatura de nanoKelvin, ou seja mil vezes mais do que a temperatura que esse processo conseguiu e não poderíamos, apenas com esse

Figura 8 – Arrefecimento com lasers



Fonte:(FOOT, 2005)

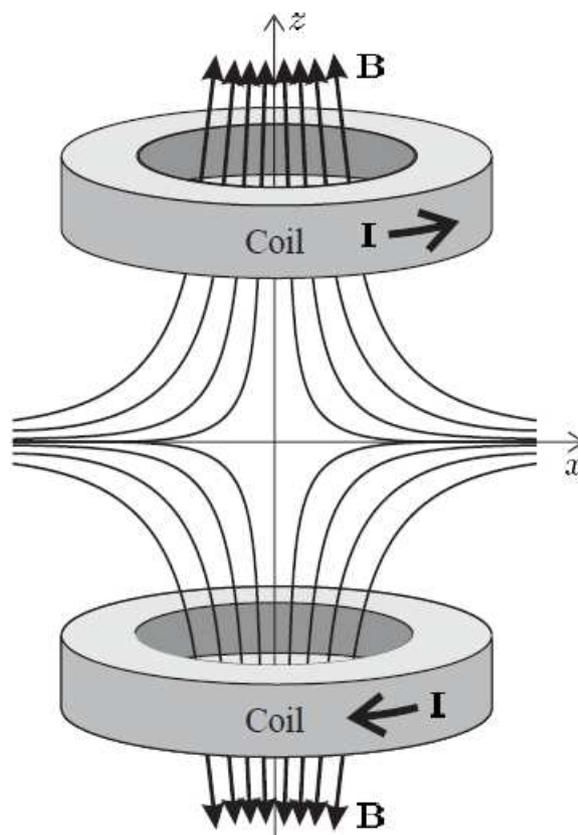
processo conseguir uma temperatura mais baixa porque átomos tão lentos assim a nuvem cai. Foi então que percebemos que para diminuir a temperatura da nuvem a escala de nanokelvin precisamos aprisioná-los.

## 2.5 Armadilha Magnética

A armadilha magnética normalmente possui a configuração quadrupolar que é produzido por um par de bobinas na configuração anti-Helmholtz. Nas duas bobinas passam correntes elétricas de mesmo valor mas em sentidos opostos, isto gera um campo magnético mínimo ( $B = 0$ ) no centro do sistema de referência e que tem um gradiente aproximadamente constante em torno dessa região e aumenta linearmente em todas as direções a partir do centro,

como mostrado na figura 9.

Figura 9 – Armadilha Magnética



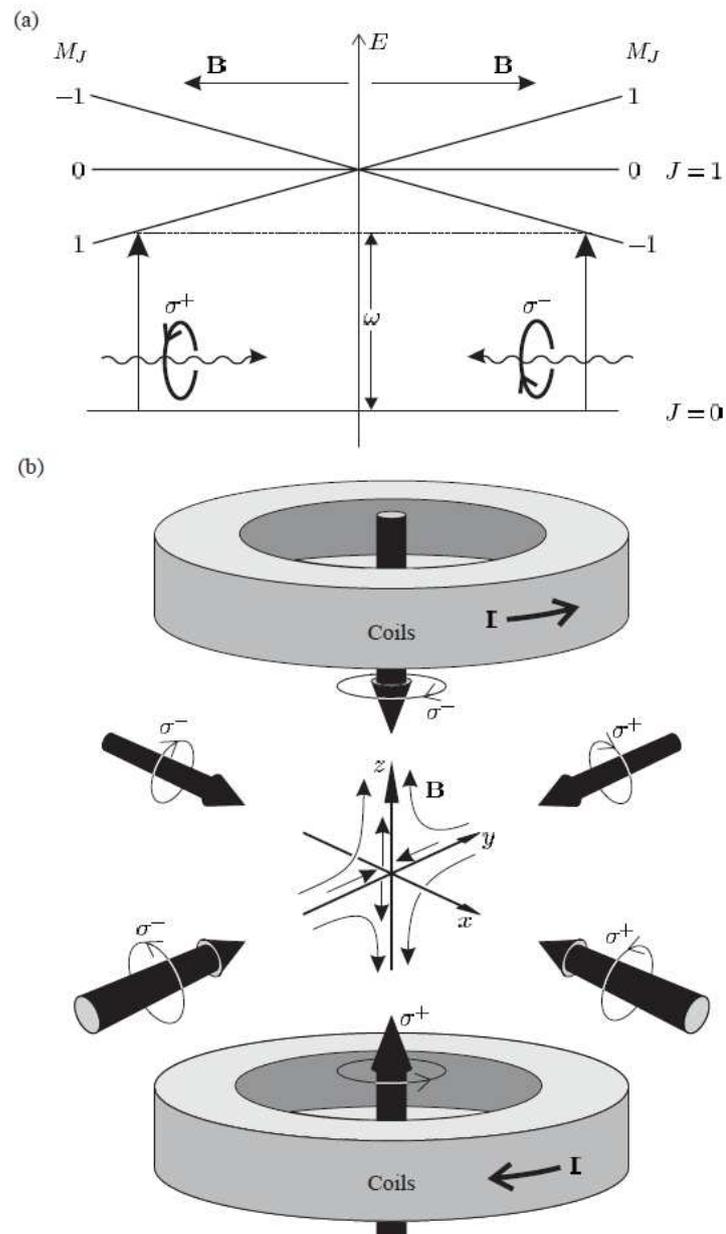
Fonte:(FOOT, 2005)

A armadilha magnética usa configurações magnéticas, ilustradas na figura 9 que, devido a interação com os momentos magnéticos dos átomos, sendo que os mesmos têm momentos magnéticos opostos ao da armadilha, os mantém confinados na região central.

## 2.6 Arrefecimento Evaporativo

Com uma nuvem de átomos presos em uma armadilha, temos apenas que arrefecê-los, a solução de Wieman, Cornell e Ketterle, foi inspirada num processo simples que usamos para esfriar líquidos demasiado quentes: soprar. Em uma xícara de café quente com temperatura próxima de ebulição, as moléculas mais energéticas escapam da sua superfície; ao soprar, removemo-las da vizinhança do mesmo. Deste modo removemos seletivamente as moléculas de maior energia; a energia média das moléculas fica baixa e a temperatura diminui, é dessa forma que esfriamos nosso café todos os dias e foi inspirado nesse esfriamento que foi desenvolvido a técnica de resfriamento evaporativo (CORNELL; WIEMAN, 2002).

Figura 10 – Armadilha Magnética

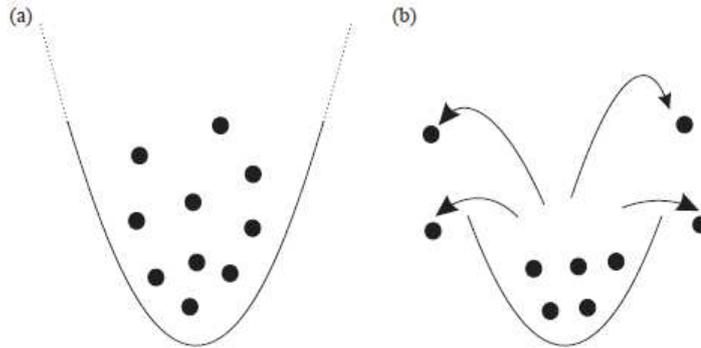


Fonte:(FOOT, 2005)

Na armadilha, os átomos mais energéticos ficam na extremidade; com um campo magnético oscilante podemos inverter o momento magnético dos átomos, assim as forças magnéticas deixam de ser atrativas e passam a ser repulsivas para átomos com momento magnético invertido, assim podemos criar um buraco onde os átomos podem escapar, variando a frequência do campo oscilante, podemos mudar o local desse buraco, conseguindo assim baixar a temperatura da nuvem.

Finalmente, O problema só foi resolvido durante o ano de 1995, três grupos de pesquisa, utilizando técnicas que conjugam resfriamento a laser, aprisionamento magnético de

Figura 11 – (a) Uma representação esquemática de átomos confinados num potencial harmônico. (b) A altura do potencial é reduzido de modo que os átomos que escapam têm energia acima da média; os átomos restantes têm uma energia média mais baixa do que a distribuição inicial, após um tempo, as colisões entre os átomos são reestabelecidas e o gás passa a ter uma temperatura inferior a temperatura inicial.



Fonte: (FOOT, 2005)

átomos e resfriamento evaporativo, conseguiram reunir as condições necessárias para observação da CBE em gases. Os pesquisadores do laboratório do JILA em Boulder (Colorado), conseguiram obter o estado condensado a partir de uma nuvem térmica de átomos de  $^{87}\text{Rb}$ . Ainda no mesmo ano, foi realizada também a condensação de vapores de  $^7\text{Li}$  (Rice University-Houston) $^{23}\text{Na}$  (ANDERSON *et al.*, 1995).

## 2.7 A Teoria

Consideremos um sistema de  $N$  bósons, confinados em um potencial harmônico. Nosso sistema pode ser descrito através de uma função de onda simétrica pela troca de duas partículas quaisquer. Usando a distribuição de Bose-Einstein para partículas não interagentes à temperatura infinita

$$N_i(E_i, T) = \left[ \exp\left(\frac{E_i - \mu}{k_B T}\right) - 1 \right]^{-1} \quad (2.11)$$

onde  $k_B$  é a constante de Boltzmann,  $N_i$  e  $E_i$  são, respectivamente, a população e a energia do  $i$ -ésimo autoestado,  $T$  é a temperatura e  $\mu$  é o potencial químico definido pela condição de normalização para o número total de partículas  $N = \sum_i N_i(\mu)$ . Para uma grande quantidade de partículas em baixas temperaturas, o potencial químico é comparável a energia fundamental e a condição de normalização pode ser reescrita como

$$N = N_0 + \sum_{i>0} N_i(T) = N_0 + \sum_{i>0} \left[ \exp\left(\frac{E_i - E_0}{k_B T}\right) - 1 \right]^{-1} \quad (2.12)$$

onde  $E_0$  é a energia do estado fundamental. É fácil ver que à temperatura finita, apenas um número finito de partículas poderá permanecer em níveis mais energéticos do que o estado fundamental. Dependendo do potencial externo e de alguns parâmetros experimentais, podemos definir uma temperatura crítica  $T_c$ , em que o estado fundamental se tornará macroscopicamente ocupado  $N_0 \gg N_{i>0}$ . Essa ocupação macroscópica é o condensado de Bose-Einstein (PITA-EVSKII; STRINGARI, 2003).

## 2.8 A Equação de Gross-Pitaevskii

Vamos considerando  $N$  bósons idênticos confinados em uma armadilha  $U_{trap}(\mathbf{r})$  (é o potencial da armadilha) em equilíbrio à temperatura  $T = 0$  K. Como estamos trabalhando com um gás rarefeito, podemos considerar apenas interações binárias entre as partículas. Assim, o hamiltoniano de muitos corpos que descreve nosso sistema é dado por

$$\hat{H} = \int d\mathbf{r} \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}) \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U_{trap}(\mathbf{r}) \right] \hat{\Psi}(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} \iint d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}') V_{int}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \hat{\Psi}(\mathbf{r}) \hat{\Psi}(\mathbf{r}') \quad (2.13)$$

onde,  $V_{int}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$  é o potencial interatômica, o termo  $1/2$  é adicionado para evitar a contagem dupla da interação,  $\hat{\Psi}(\mathbf{r})$  e  $\hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r})$  são operadores de campo bosônico que aniquilam e criam uma partícula na posição  $\mathbf{r}$ . Esses operadores obedecem as relações de comutação

$$\left[ \hat{\Psi}(\mathbf{r}), \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}') \right] = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (2.14)$$

$$\left[ \hat{\Psi}(\mathbf{r}), \hat{\Psi}(\mathbf{r}') \right] = 0 \quad (2.15)$$

$$\left[ \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}), \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}') \right] = 0 \quad (2.16)$$

Como estamos interessados na dinâmica do sistema, para observarmos como o operador  $\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t)$  evolui no tempo usamos a equação de Heisenberg

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) = \left[ \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t), \hat{H} \right] \quad (2.17)$$

Substituindo a equação 2.13 em 2.17 e utilizando as relações de comutação supracitadas, temos

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U_{trap}(\mathbf{r}) + \int V_{int}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}', t) \hat{\Psi}(\mathbf{r}', t) d\mathbf{r}' \right] \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) \quad (2.18)$$

A existência do último termo na hamiltoniana 2.18, o termo de interações entre os bósons, faz que o sistema se torne intratável tanto quanto qualquer outro sistema de muitos corpos. A dinâmica de cada um dos bósons depende da dinâmica de outros, ao contrário do que acontece no caso de gás livre.

Uma abordagem que simplifica a análise de tais sistemas é a aproximação de campo médio (ACM). Essa aproximação consiste em tratar a dinâmica de uma partícula levando em conta apenas o efeito “médio” de sua interação com as outras. Este efeito médio é descrito simplesmente por um potencial adicional, ao qual cada uma das partículas está sujeita, que depende, no entanto, do estado das demais. Como o estado de cada uma das partículas que contribui para esse potencial adicional depende dele (do potencial), o que se perde nesse tipo de tratamento é a linearidade característica das equações da mecânica quântica. Assim, a aproximação de campo médio resulta em uma equação não-linear. Essa aproximação foi formulada por Bogoliubov em 1947 (BOGOLUBOV, 1947). Suponha que esse operador possa ser representado por um campo médio  $\Phi(\mathbf{r}, t)$ , normalizados na unidade. Como

$$\int \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r} = N \quad (2.19)$$

em que  $N$  é o número de átomos do condensado, podemos escrever o operador como

$$\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) = \sqrt{N} \Phi(\mathbf{r}, t) \quad (2.20)$$

Substituindo 2.20 em 2.18, temos

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Phi(\mathbf{r}, t) = \left[ -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + U_{\text{trap}}(\mathbf{r}) + N \int V_{\text{int}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') |\Phi(\mathbf{r}', t)|^2 d\mathbf{r}' \right] \Phi(\mathbf{r}, t) \quad (2.21)$$

Embora as equações 2.20 e 2.18 tenham a mesma estrutura, representam diferentes situações. A equação 2.18 é uma equação exata para o operador de campo, enquanto a equação 2.20 é uma aproximação de campo médio para um campo clássico, que é um parâmetro de ordem do condensado, também chamado de função de onda do condensado. Usamos o fato que para um gás diluído e frio, as colisões entre dois átomos são caracterizadas por um parâmetro único: o comprimento de espalhamento de onda  $s$ . Isto permite que se substitua  $V_{\text{int}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$  na equação 2.21 por uma interação efetiva

$$V_{\text{int}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = g \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (2.22)$$

onde  $g$  está relacionado ao comprimento de espalhamento de dois corpos  $a_s$ :

$$g = \frac{4\pi\hbar^2 a_s}{m} \quad (2.23)$$

Este procedimento resulta em equação para o parâmetro de ordem:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Phi(\mathbf{r}, t) = \left( -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + U_{trap}(\mathbf{r}) + gN |\Phi(\mathbf{r}, t)|^2 \right) \Phi(\mathbf{r}, t) \quad (2.24)$$

Substituindo  $\Psi(\mathbf{r}, t) = \sqrt{N}\Phi(\mathbf{r}, t)$ , obtemos finalmente:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \left[ -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + U_{trap} + g |\Psi|^2 \right] \Psi \quad (2.25)$$

Esta equação (PITAEVSKII, 2003) foi deduzida independentemente por E. P. Gross e L. P. Pitaevskii (PITAEVSKII, 1961) no ano de 1961, resultando em seu nome (GROSS, 1961). Sua validade é baseada na condição de que o comprimento de espalhamento de onda  $s$  é muito menor que a distância média entre os átomos:  $n|a_s|^3 \ll 1$  ( $n$  é a densidade média do gás). A constante  $a$  é o comprimento de espalhamento médio da onda, quando  $a > 0$  a interação entre as partículas no condensado é repulsiva, para  $a < 0$  a interação é atrativa. Essa constante pode ser alterada no condensado, tanto no tempo como no espaço, usando técnicas conhecidas como “ressonância de Feshbach”. A equação 2.24 é uma equação clássica no sentido que  $\Psi$  não é um operador, mas ainda contém a constante  $\hbar$  explicitamente.

Apesar de suas limitações, pois quando fizemos a aproximação de campo médio desconsideramos partículas em estados excitados e correlações de duas ou mais partículas, sua validade foi largamente testada em experimentos com condensados de bósons e ela se tem mostrado extremamente robusta para descrever estes sistemas, fornecendo concordância com os dados extraídos dos experimentos. Por esta razão, usaremos a EGP como modelo matemático para simular condensados em armadilhas.

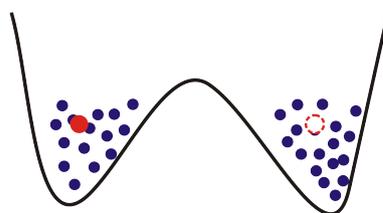
## 2.9 Modo Acoplado

Um método de se obter um acoplamento fraco entre duas funções de onda macroscópica de matéria (chamado de junção Josephson bosônica) é através do confinamento de um condensado em dois pacotes de onda localizados e conectados entre si através do tunelamento de partículas por uma barreira. Neste capítulo discutiremos os conceitos teóricos fundamentais para o entendimento da física por trás do tunelamento, junção de Josephson bosônica, seguindo pelo modelo de dois modos, que é a descrição formal do acoplamento fraco.

## 2.10 Um Modelo Simples para Tunelamento

Segundo a mecânica clássica se uma partícula está localizada de um lado de um poço de potencial duplo e não tem energia suficiente para ultrapassar a barreira central, ela está fadada a ficar eternamente daquele lado do poço. Porém, segundo a mecânica quântica, se a barreira for finita então existe uma probabilidade não-nula da partícula passar para o outro lado da barreira, fenômeno conhecido como tunelamento, uma forma clássica desse fenômeno é a solução da equação de Schrödinger em uma barreira de potencial que será abordado com mais detalhes no apêndice. Se o sistema é isolado e a partícula está num nível de energia baixo então a dinâmica da partícula apresentará oscilações entre os estados localizados do lado direito e esquerdo da barreira central e em geral a partícula estará localizada nos dois lados do poço.

Figura 12 – Tunelamento



Fonte: Próprio autor

## 2.11 Tunelamento de um Condensado de Bose-Einstein num Poço Simétrico

O primeiro experimento que pode ser observado o tunelamento de um condensado de Bose-Einstein armadilhado num poço de potencial duplo foi em 2005. Um condensado de  $^{87}\text{Rb}$  é preparado num poço duplo assimétrico, ou seja, a barreira está descentralizada no potencial. Espera-se que o condensado atinja o equilíbrio e então o potencial duplo é simetrizado de forma não-adiabática (em relação a dinâmica de tunelamento). A partir daí a dinâmica do sistema é observada através da medição *in situ* da distribuição de densidade das partículas. Fica evidente então que a forma inicial do potencial determina a distribuição inicial de partículas. Os experimentais observaram que essa distribuição inicial tem um papel crucial na dinâmica do condensado de Bose-Einstein evoluindo no poço duplo simétrico. Se a diferença inicial de população entre os dois poços está abaixo de um valor crítico, os experimentais observam oscilações de Josephson, isto é, os átomos tunelam para a direita e para a esquerda no tempo (ALBIEZ *et al.*, 2005).

## 2.12 Junção de Bose-Josephson

Em 1962 Brian David Josephson (JOSEPHSON, 1962) investigando supercondutores fracamente interligados observou um comportamento anômalo (completamente contraintuitivo): (i) mesmo na ausência de diferença de potencial entre os componentes da junção haveria fluxo contínuo de portadores de carga de um componente para o outro; (ii) caso uma diferença de potencial constante fosse estabelecida entre os elementos então haveria, além da corrente contínua, uma corrente alternada de fundo. Após um ano da previsão teórica, em 1963, tivemos a observação experimental do fenômeno. Este comportamento estranho dos portadores de carga recebeu o nome de efeito Josephson. Esse efeito acontece devido a existência de uma função de onda macroscopicamente ocupada em superposição com outra função de onda também macroscopicamente ocupada, cada uma tendo fase global bem definida. Seu trabalho foi estendido para tratar de quaisquer dois sistemas que exibam essas propriedades de fase bem definida e duas ondas superpostas que permitam troca de partículas entre si. Sendo assim, esse feito também pode ser observado em uma junção de superfluidos e em condensados de Bose-Einstein. Em condensados o fenômeno foi observado com um potencial de poço duplo onde a barreira entre os poços permitia tunelamento de partículas através dela.

### 3 MÉTODOS NUMÉRICOS

Neste capítulo vamos explicitar os métodos numéricos utilizados para solucionar as equações diferenciais parciais de segunda ordem na forma da equação de Schrödinger não linear (NLS), presente neste trabalho como equação de Gross-Pitaevskii, a qual pode ser resolvida através de uma série de métodos diferentes. Optamos pelo método das diferenças finitas semi-implícito de Euler e o implícito Crank-Nicolson que já vêm sendo largamente utilizado em condensados de Bose-Einstein. Este capítulo tem como referência geral (ANTOINE; DUBOSCQ, 2014).

#### 3.1 Equação de Gross-Pitaevskii (GPE)

Vamos considerar um sistema de  $N$  átomos em um gás frio que estão confinados por meio de um sistema de armadilhas. Vamos além disso, supor que a temperatura  $T$  é menor do que a temperatura crítica  $T_c$ .

$$T_c \approx \left( \frac{N}{\zeta(3/2)} \right)^{3/2} \frac{h^2}{2\pi m k_B}, \quad (3.1)$$

onde  $h$  é a constante de Planck,  $m$  é a massa atômica,  $k_B$  é a constante de Boltzmann e  $\zeta$  é a função zeta. Nós podemos descrever um BEC por meio de uma função de onda macroscópica  $\psi$  que depende da variável espacial  $\mathbf{x} := (x, y, z) \in R^3$  e do tempo  $t > 0$ . Esta função tem uma dinâmica que é governada por uma equação não linear Schrodinger, a chamada equação de Gross-Pitaevskii, dada pela

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(t, \mathbf{x}) + (N-1)U_0 |\psi|^2 - \Omega L_z \right) \psi \quad (3.2)$$

onde  $\hbar = h/2\pi$  é a constante de Planck reduzida e  $\Omega$  é a velocidade angular do condensado ao longo do eixo  $z$ . O número complexo  $i$  é a unidade imaginária:  $i^2 = -1$ . A função potencial  $V$  é uma armadilha externa que depende de  $\mathbf{x}$  mas pode também depender de  $t$  de acordo com a situação física. O exemplo típico de potencial  $V$  é a armadilha harmônica (ou quadrática).

$$V(\mathbf{x}) = \frac{m}{2} (\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2), \quad (3.3)$$

onde  $\omega_x$ ,  $\omega_y$  e  $\omega_z$  são as frequências armadilha nas direções  $x, y$  e  $z$ , respectivamente. A quantidade  $U_0$ , definido por

$$U_0 = \frac{4\pi\hbar^2 a_s}{m} \quad (3.4)$$

descreve a interação entre os átomos do condensado, sendo  $a_s$  o comprimento de espalhamento, que é positivo para uma interação repulsiva e negativo para uma interação atrativa. O operador  $L_z$  é tal que

$$L_z = xp_y - yp_x = -i\hbar(x\partial_y - y\partial_x). \quad (3.5)$$

Esta é a componente  $z$  do momento angular  $L = \mathbf{x} \times \mathbf{P}$ , em que o operador de momento é  $P = -i\hbar\nabla = (p_x, p_y, p_z)^T$ . A energia da função é definido por

$$E(\psi) = \int_{R^3} \left[ \frac{\hbar^2}{2m} |\nabla\psi|^2 + V|\psi|^2 + \frac{(N-1)U_0}{2} |\psi|^4 - \Omega\psi^* L_z \psi \right] d\mathbf{x}. \quad (3.6)$$

A função de onda é normalizada

$$\|\psi\|_0^2 := \int_{R^3} |\psi(t, \mathbf{x})| d\mathbf{x} = 1, \quad (3.7)$$

que corresponde à restrição de conservação da massa.

### 3.1.1 A dimensão da GPE

Vamos apresentar as seguintes mudanças de variáveis (DALFOVO; STRINGARI, 1996)

$$t \rightarrow \frac{t}{\omega_m}, \quad \omega_m = \min(\omega_x, \omega_y, \omega_z), \quad \mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}a_0, \quad a_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_m}},$$

$$\psi \rightarrow \frac{\Psi}{a_0^{3/2}}, \quad \Omega \rightarrow \omega_m, \quad E(\cdot) \rightarrow \hbar\omega_m E_{\beta, \Omega(\cdot)}.$$

Isto conduz à seguinte GPE adimensional

$$i\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \left( -\frac{1}{2}\Delta + V + \beta|\Psi|^2 - \Omega L_z \right) \Psi, \quad (3.8)$$

$$\beta = \frac{U_0 N}{a_0^3 \hbar \omega_m} = \frac{4\pi a_s N}{a_0}, \quad (3.9)$$

e  $L_z = -i(x\partial_y - y\partial_x)$ . O potencial é

$$V(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}(\gamma_x^2 x^2 + \gamma_y^2 y^2 + \gamma_z^2 z^2), \quad (3.10)$$

sendo  $\gamma_{x,y,z} = \omega_{x,y,z}/\omega_m$ , com  $\omega_m = \min_{x,y,z} \omega_{x,y,z}$ .

No caso especial de uma condensação em forma de disco (2d), consideramos que  $\omega_x \approx \omega_y$  e  $\omega_z \gg \omega_x$ . Isto conduz a:  $\gamma_x = 1$ ,  $\gamma_y \approx 1$  e  $\gamma_z \gg 1$ , com  $\omega = \omega_x$ . Isto significa que excitações ao longo dos eixos  $x$  e  $y$  requerem menos energia do que ao longo do eixo  $z$ .

Portanto, a dinâmica BEC é principalmente nas direções  $x$  e  $y$  considerando que na direção  $z$  é estacionária. Se considerarmos a seguinte decomposição da função de onda :  $\psi(t, \mathbf{x}) = \psi_2(t, x, y)\psi_3(z)$ , onde

$$\psi_3(z) = \left( \int_{\mathbb{R}^2} |\psi_0(x, y, z)|^2 dx dy \right)^{1/2}, \quad (3.11)$$

com  $\psi_0$  o estado fundamental do BEC. Então, a GPE 3d é reduzida a uma GPE 2d dada pela equação

$$i \frac{\partial \psi_2}{\partial t} = \left( -\frac{1}{2} \Delta + V_2 + \sigma + \beta_2 |\psi_2|^2 - \Omega L_z \right) \psi_2, \quad (3.12)$$

onde

$$\sigma = \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}} (\gamma_z z^2 |\psi_3(z)|^2 + |\partial_z \psi_3(z)|^2) dz, \quad (3.13)$$

$$\beta_2 = \beta \int_{\mathbb{R}} |\psi_3(z)|^4 dz, \quad (3.14)$$

$$V_2(x, y) = \frac{1}{2} (\gamma_x^2 x^2 + \gamma_y^2 y^2). \quad (3.15)$$

Usando a transformação  $\psi_2(t, x, y) \rightarrow \psi_2(t, x, y) e^{-\frac{i\sigma}{2}t}$ , podemos eliminar  $\sigma$  da Equação (3.12). Como conclusão, pode-se escrever o GPE na dimensão  $d$  como

$$i \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left( -\frac{1}{2} \Delta + V_d + \beta_d |\psi|^2 - \Omega L_z \right) \psi, \quad (3.16)$$

Para  $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^d$ ,  $t > 0$ ,  $\beta_3 = \beta$  e  $V_3(x, y, z) = V(x, y, z)$ .

### 3.1.2 A GPE dependente do tempo

O nosso objectivo é resolver o Gross-Pitaevskii Equação (GPE). Escrevendo a GPE em duas dimensões, temos:

$$i \partial_t \psi(t, \mathbf{x}) = -\frac{1}{2} \Delta \psi(t, \mathbf{x}) + V(t, \mathbf{x}) \psi(t, \mathbf{x}) + \beta f(|\psi(t, \mathbf{x})|) \psi(t, \mathbf{x}) - \Omega L_z \psi(t, \mathbf{x}), (t, \mathbf{x}) \in \mathbb{R}^{*+} \times \mathbb{R}^2 \quad (3.17)$$

onde  $\psi$  é a função de onda do condensado e  $\mathbb{R}^{*+} := ]0; +\infty[$ .

O operador de Laplace é definido como:  $\Delta = \nabla^2$ . A função  $V$  é o potencial externo. O parâmetro  $\beta$  é a força não-linearidade que descreve a interação entre átomos no condensado que está relacionado com o comprimento dispersão ( $a_s$ ). É positivo para uma interação repulsiva

e negativo para interações atrativas. A função  $f$  descreve a não-linearidade que surge no problema, que é geralmente cúbica:  $f(|\psi|) = |\psi|^2$ . Para a criação de vórtices, um termo rotativo é adicionado. O operador  $L_z$  é definido como o componente  $z$  do momento angular  $\mathbf{L} = (p_x, p_y, p_z)^t = \mathbf{x} \wedge \mathbf{P}$ , com o operador impulso  $\mathbf{P} = -i\nabla$ . No caso bidimensional e após algumas manipulações, a sua expressão é

$$L_z = -i(x\partial_y - y\partial_x). \quad (3.18)$$

a massa deve ser conservada

$$N(\psi) = \int_{\mathbb{R}^2} |\psi(t, \mathbf{x})|^2 d\mathbf{x} = \int_{\mathbb{R}^2} |\psi(0, \mathbf{x})|^2 d\mathbf{x} = \|\psi\|_0^2 = 1, t > 0, \quad (3.19)$$

onde  $\|\psi\|^2$  é a norma  $L^2(\mathbb{R})$  de  $\psi$ .

Outra quantidade que deve ser conservada é a energia  $E_{\beta,0}$  que é dada por ( não-linear cúbica e um potencial independente do tempo)

A energia  $E_{\beta,\Omega}$  é definida, por (BAO; WANG, 2007)

$$E_{\beta,\Omega}(\psi) = \int_{\mathbb{R}^3} \left[ \frac{1}{2} |\nabla\psi|^2 + V|\psi|^2 + \frac{\beta}{2} |\psi|^4 - \Omega\psi^* L_z \psi \right] d\mathbf{x}. \quad (3.20)$$

### 3.1.3 Estados Estacionários

Uma questão importante na solução numérica de GPES é o cálculo de estados estacionários. O problema consiste em encontrar uma solução (LEBOEUF; PAVLOFF, 2001)(BAO; TANG, 2003)

$$\psi(t, \mathbf{x}) = e^{-i\mu t} \phi(\mathbf{x}) \quad (3.21)$$

em que  $\mu$  é o potencial químico do condensado e  $\phi$  é uma função independente do tempo. Esta solução é dada como a solução para a equação elíptica não linear

$$\mu\phi(\mathbf{x}) = -\frac{1}{2}\Delta\phi(\mathbf{x}) + V(\mathbf{x})\phi(\mathbf{x}) + \beta|\phi(\mathbf{x})|^2\phi(\mathbf{x}) - \Omega L_z\phi(\mathbf{x}), \quad (3.22)$$

sob a normalização

$$\|\phi\|_0^2 = \int_{\mathbb{R}^2} |\phi(\mathbf{x})|^2 d\mathbf{x} = 1. \quad (3.23)$$

Este problema de autovalores não-linear pode ser resolvido pelo cálculo do potencial químico

$$\mu_{\beta,\Omega}(\phi) = E_{\beta,\Omega}(\phi) + \frac{\beta}{4} \int_{\mathbb{R}^2} |\phi(\mathbf{x})|^4 d\mathbf{x}, \quad (3.24)$$

com

$$E_{\beta,\Omega}(\phi) = \int_{\mathbb{R}^2} \left[ \frac{1}{2} |\nabla\phi|^2 + V|\phi|^2 + \frac{\beta}{2} |\phi|^4 - \Omega\phi^* L_z \phi \right] d\mathbf{x}. \quad (3.25)$$

Calculando as soluções de mínimo global ou as soluções  $\phi_g$  para a energia funcional (3.25) sob a restrição normalização

$$\phi_g = \min E_{\beta,\Omega}(\phi) \quad (3.26)$$

fornece uma solução de estado fundamental, enquanto mínimos locais são estados excitados (metaestáveis).

### 3.1.4 Formulação e discretização do Gradiente (para um componente CEB)

Uma solução clássica da equação (3.25) é através do método do gradiente projectado que também é chamado método do tempo imaginário (AMARA; HSU; STRAUB, 1993). Esse é um método básico para implementar soluções estacionárias da equação de Gross-Pitaevskii. O método consiste em i) computar um passo do método de gradiente e, em seguida, ii) projetar a solução sobre a unidade esfera  $S$ . Vamos denotar por  $t_0 < \dots < t_n < \dots$  Os tempos discretos e pela  $\delta t_n = t_{n+1} - t_n$  o passo de tempo local. O Gradiente Fluxo Contínuo Normalizado (CNGF) é dado por (BAO; DU, 2004)

$$\begin{cases} \partial_t \phi = -\nabla_{\phi^*} E_{\beta,\Omega}(\phi) = \frac{1}{2} \Delta \phi - V\phi - \beta |\phi|^2 \phi + \Omega L_z \phi, t_n < t < t_{n+1}, \\ \phi(\mathbf{x}, t_{n+1}) = \phi(\mathbf{x}, t_{n+1}^+) = \frac{\phi(\mathbf{x}, t_{n+1}^+)}{\|\phi(\mathbf{x}, t_{n+1}^+)\|_0}, \\ \phi(\mathbf{x}, 0) = \phi_0(\mathbf{x}), \mathbf{x} \in \mathbb{R}^2, \text{ com } \|\phi\|_0 = 1. \end{cases} \quad (3.27)$$

Nas equações acima, definimos:  $\phi(\mathbf{x}, t_{n+1}^\pm) := \lim_{t \rightarrow t_n^\pm} \phi(\mathbf{x}, t)$ . Assim, iterações em tempos correspondem a iterações no gradiente projectado. Está provado em (BAO; DU, 2004) que o CNGF conserva a normalização e diminui a energia, se  $\beta = 0$  e, se o potencial for positivo. Quando  $t$  tende para o infinito,  $\phi$  dá uma aproximação da solução de estado estacionário que é um ponto crítico da função energia quando  $V \geq 0$ . Finalmente, escrevemos  $\phi(\mathbf{x}, t)$  e não  $\phi(t, \mathbf{x})$  isso se deve ao fato de que  $t$  não é um tempo real, mas sim um parâmetro de continuação (tempo imaginário).

## 3.2 Método Das Diferenças Finitas

O método numérico é o processo de discretização, que reduz o problema contínuo, com um número infinito de variáveis, em um problema discreto com um número finito de variáveis, podendo ser resolvido computacionalmente.

O método numérico das diferenças finitas é usado como uma abordagem alternativa para obter a aproximação da solução de uma equação diferencial parcial. A ideia básica desse método é transformar a resolução de uma equação diferencial em um sistema de equações algébricas, substituindo as derivadas por diferenças. Esse método é simples de ser implementado, consiste na discretização do domínio e na substituição das derivadas presentes na equação diferencial por aproximações utilizando apenas os valores numéricos da função. A ferramenta básica no cálculo das aproximações das derivadas é a fórmula de Taylor.

### 3.2.1 Série de Taylor

Para calcular o estado de um sistema em um momento posterior dado por uma função  $f(t + \Delta t)$  a partir de um momento atual  $f(t)$ , pode ser estimado através de uma expansão de Taylor

$$f(t + \Delta t) = f(t) + \Delta t \frac{\partial f(t)}{\partial t} + \frac{(\Delta t)^2}{2!} \frac{\partial^2 f(t)}{\partial t^2} + \frac{(\Delta t)^3}{3!} \frac{\partial^3 f(t)}{\partial t^3} + \dots + \frac{(\Delta t)^n}{n!} \frac{d^n f(t)}{dt^n} \quad (3.28)$$

para um  $\Delta t$  muito pequeno, a equação 3.36 pode ser aproximada em primeira ordem

$$f(t + \Delta t) \approx f(t) + \Delta \frac{\partial f(t)}{\partial t} \quad (3.29)$$

reformulando para  $\partial f(t)/\partial t$

$$\frac{\partial f(t)}{\partial t} \approx \frac{f(t + \Delta t) - f(t)}{\Delta t} \quad (3.30)$$

Observe que calculamos a aproximação da derivada a partir de um momento posterior  $f(t + \Delta t)$ , assim obtivemos um operador progressivo, se tivemos calculado a aproximação a partir de um momento anterior teríamos um operador regressivo, como segue abaixo:

Temos três tipos de operadores nesse método:

- **Operador Progressivo**

É quando calculamos o estado do sistema em um momento posterior dado por uma função  $f(t + \Delta t)$  a partir de um momento atual  $f(t)$ :

$$f'(t) = \frac{f(t + \Delta t) - f(t)}{\Delta t} + O(\Delta t) \quad (3.31)$$

- **Operador Regressivo**

Quando utilizamos o momento anterior para calcular o atual:

$$f'(t) = \frac{f(t) - f(t - \Delta t)}{\Delta t} + O(\Delta t) \quad (3.32)$$

- **Operador Central**

Quando utilizamos o momento anterior para calcular o posterior:

$$f'(t) = \frac{f(t + \Delta t) - f(t - \Delta t)}{2\Delta t} + O(\Delta t^2) \quad (3.33)$$

Outra forma de obter a aproximação da derivada de primeira ordem de  $f(t)$  é pelo operador central que obtemos juntando o operador progressivo e o operador regressivo.

$$\frac{\partial f(t)}{\partial t} \approx \frac{f(t + \Delta t) - f(t - \Delta t)}{2\Delta t} \quad (3.34)$$

### 3.2.2 Método de Euler Explícito

Vamos iniciar com uma equação diferencial simples:

$$\frac{dy(t)}{dt} = F(t, y) \quad (3.35)$$

em que  $F(t, y)$  é uma função conhecida, sendo  $y(t)$  a função que precisamos conhecer. Usando o operador progressivo

$$\frac{y(t + \Delta t) - y(t)}{\Delta t} = F(t, y) \quad (3.36)$$

Discretizar a equação significa não mais tomarmos o limite, mas ao invés disso, mantermos  $\Delta x$  constante. Você pode notar que escrevemos o sinal de igualdade ao invés do aproximado apenas por questão de conveniência.

Fazendo algumas manipulações na equação 3.36, obtemos:

$$y(t + \Delta t) = F(t, y)\Delta t + y(t) \quad (3.37)$$

Esse é o chamado método de Euler na forma explícita, e ele relaciona um certo valor da função  $y(t)$  com o próximo valor, que é  $y(t + \Delta t)$ . É claro que também é necessário conhecer  $F(t, y)$  e  $\Delta t$ , mas esses dois últimos são conhecidos pois  $F(t, y)$  é uma função de  $t$  conhecida e  $\Delta t$  é o passo do método, que deve ser um número suficientemente pequeno. Escrevendo a equação:

$$y(t_0 + \Delta t) = F(t_0, y_0)\Delta t + y(t_0) \quad (3.38)$$

$y(t_0)$  é um valor conhecido inicialmente, ou seja, é uma condição inicial do problema. Portanto, conhecendo  $t_0$  e  $y(t_0)$ , calculamos  $y(t_0 + \Delta y)$  da seguinte forma:

$$y_1 = F_0\Delta t + y_0 \quad (3.39)$$

de posse de  $f_1$ , calculamos  $f_2$  através do mesmo procedimento:

$$y(t_1 + \Delta t) = F(t_1)\Delta t + y(t_1) \quad (3.40)$$

em que  $t_1$  é simplesmente  $t_0 + \Delta t$ .

Usando um passo muito pequeno  $\Delta t$  temos um método que aproxima muito da solução analítica.

$$\frac{y_{n+1} - y_n}{\Delta t} = F(t_n, y_n) \quad (3.41)$$

### 3.2.3 Método de Euler Implícito

Métodos explícitos são fáceis de implementar, no entanto tem limitações sobre o tamanho do passo que precisa ser pequeno para assegurar a estabilidade numérica, assim esse método tem como desvantagem a chamada estabilidade condicional, ou seja uma estabilidade que depende do passo. Métodos implícitos pode ser usado para substituir os explícitos nos casos em que os requisitos de estabilidade deste último impor condições rigorosas sobre o tamanho do passo do tempo. No entanto, os métodos implícitos tem um custo computacional maior para os problemas de não-lineares desde  $y(t_1 + \Delta t)$  é dada apenas em termos de uma equação implícita. O análogo implícito do método de Euler explícito é o método backward Euler (BE). Este é baseado no operador regressivo. Temos:

$$\frac{dy(t)}{dt} = F(t, y) \quad (3.42)$$

$$\frac{y_{n+1} - y_n}{\Delta t} = F(t_{n+1}, y_{n+1}) \quad (3.43)$$

Uma vez que  $F(t_{n+1}, y_{n+1})$  não é conhecida, temos uma equação implícita para o cálculo de  $y_{n+1}$ . Isto significa que para obter  $y_{n+1}$ , precisamos resolver a equação não-linear  $y_n = y_{n+1} - F(t_{n+1}, y_{n+1})\Delta t$ . Apesar do alto custo computacional essa técnica é usada por ser estável.

### 3.2.4 Método de Euler melhorado

O método de Euler perde precisão, em parte por causa de uma falta de simetria. Lembre-se que substituímos a derivada exata com um termo discreto.

$$\frac{dy}{dt} \rightarrow \frac{y_{n+1} - y_n}{\Delta t} \quad (3.44)$$

O termo discreto,  $\frac{y_{n+1} - y_n}{\Delta t}$  é uma aproximação de  $y'$  em  $n\Delta t$ , mas toda a informação contida nesse termo foi pego apenas da direita de  $n\Delta t$ . Se ao invés disso, usarmos a aproximação  $y'$  em  $(n + \frac{1}{2})\Delta t$ , esse termo passaria a ser simétrico - as informações seriam distribuídas igualmente ao redor do ponto de interesse. Um esquema simétrico é mais preciso porque alguns termos de erro podem ser cancelado devido à simetria. Assim teremos:

$$\frac{y_{n+1} - y_n}{\Delta t} = \frac{1}{2} (F(t_n, y_n) + F(t_{n+1}, y_{n+1})) \quad (3.45)$$

para ser mais exato.

Observe que a equação contém termos implícitos,  $F(t_{n+1}, y_{n+1})$ , Para torná-lo explícito, nos aproximamos  $y_{n+1}$  dentro de  $F(t, y)$  usando o método de Euler explícito. Esse novo método é chamado de um método de Euler melhorado. É dada por

$$\frac{y_{n+1} - y_n}{\Delta t} = \frac{1}{2} (F(t_n, y_n) + F(t_{n+1}, y_n) + \Delta t F(t_n, y_n)) \quad (3.46)$$

Observe que para implementar esse método o termo não-linear deve ser computada duas vezes, adicionando um custo ao método.

### 3.2.5 Aplicação do Método Euler Melhorado

No que respeita a discretização do tempo (3.27), a aplicação do método de Euler melhorado (semi-implícito) (BAO; DU, 2004)(ANTOINE; DUBOSCQ, 2014)

$$\begin{cases} \frac{\tilde{\phi} - \phi^n}{\delta t} = \frac{1}{2} \Delta \tilde{\phi} - V(\mathbf{x}) \tilde{\phi} - \beta |\phi^n|^2 \tilde{\phi} + \Omega L_z \tilde{\phi}, 1 \leq n \leq N, \mathbf{x} \in \mathbb{R}^2, \\ \phi^{n+1} = \frac{\tilde{\phi}}{\|\tilde{\phi}\|_0}, \mathbf{x} \in \mathbb{R}^2. \end{cases} \quad (3.47)$$

Definindo  $M\delta t = T_{CVG}$ , onde  $T_{CVG}$  é o tempo máximo de execução e  $N$  é o número de intervalos de tempo. Vamos observação aqui que  $T_{CVG}$  não se sabe a priori, mas temos um critério de parada fixo para verificar a convergência do método iterativo para a solução do estado fundamental. O critério (forte) de parada que é usado é o seguinte

$$\|\phi^{n+1} - \phi^n\|_\infty < \varepsilon \delta t, \quad (3.48)$$

onde  $\|\cdot\|_\infty$  é a norma uniforme. Há também um critério de parada (fraco) associados com a evolução da energia que é dada pela

$$|E_{\beta,\Omega}(\phi^{n+1}) - E_{\beta,\Omega}(\phi^n)| < \varepsilon \delta t. \quad (3.49)$$

O método (3.27) ainda precisa ser discretizado no espaço. Para este fim, usamos uma discretização diferenças finitas de segunda ordem. Uma vez que o domínio está em  $\mathbb{R}^2$ , temos que definir as condições de contorno adequadas em um limite fictício para obter um domínio computacional finito. Nós impomos a condição de contorno Dirichlet homogêneas:  $\tilde{\phi}(\mathbf{x}) = 0$  para  $\mathbf{x}$  dentro de um intervalo suficientemente grande:  $O := ]-a_x; a_x[x - a_y; a_y[$ , vamos apresentar os pontos  $(x_j, y_k)$ , Para  $(j, k) \in D_{J,K}$ , configuração:  $D_{J,K} = \{(j, k) \in \mathbb{N}^2; 1 \leq j \leq J-1 \text{ e } 1 \leq k \leq K-1\}$ , com  $J, K \geq 3$ , e um passo de discretização uniforme  $h_x$  e  $h_y$  nas direções  $x$  e  $y$ , respectivamente. Portanto, para  $1 < j \leq J-1$ ,  $h_x = (x_j - x_{j-1}) = 2a_x/J$ , e, para  $1 < k \leq K-1$ ,  $h_y = (y_k - y_{k-1}) = 2a_y/K$ , a rotação termo  $L_z$  é discretizado por dois-pontos pelo método centrado de segunda ordem

$$[L_z]\phi_{j,k}^n := -i(x_j \delta_x \phi_{j,k}^n). \quad (3.50)$$

Nós associamos uma matriz  $[L_z]$  para este operador discreto e o expressamos por  $\phi := (\phi_{I(j,k)}^n)_{(j,k) \in D_{J,K}}$  o vetor que não conhecemos, supomos que a numeração global é feita por um local global reordenamos o procedimento baseado em  $I(j, k) = J + (J-1)(k-1)$  (o que corresponde a utilizar a função Matlab reshape quando a codificação). Cada  $X$  discreto e

Y derivado usamos o método de dois pontos adaptado para a condição de contorno de Dirichlet homogéneas

$$\delta_x \phi_{j,k}^n = \frac{\phi_{j+1,k}^n - \phi_{j-1,k}^n}{2h_x}, \delta_y \phi_{j,k}^n = \frac{\phi_{j+1,k}^n - \phi_{j-1,k}^n}{2h_y}. \quad (3.51)$$

O Laplaciano é discretizado graças ao método de cinco pontos com condições de contorno de Dirichlet homogéneas. O interior do método é baseado em

$$\delta_x^2 \phi_{j,k}^n = \frac{\phi_{j+1,k}^n - 2\phi_{j,k}^n + \phi_{j-1,k}^n}{h_x^2}, \delta_y^2 \phi_{j,k}^n = \frac{\phi_{j+1,k}^n - 2\phi_{j,k}^n + \phi_{j-1,k}^n}{h_y^2} \quad (3.52)$$

$$[\Delta] \phi_{j,k}^n = \delta_x^2 \phi_{j,k}^n + \delta_y^2 \phi_{j,k}^n, (j,k) \in D_{J,K}. \quad (3.53)$$

isto fornece a matriz  $[\Delta] \in M_{MD}$  o qual deve ser aplicada a um vetor (global)  $\phi^n := (\phi_{I(j,k)}^n)_{(j,k) \in D_{J,K}}$  de tamanho  $M_D$ , em que  $M_D = (J-1)(K-1)$ . Finalmente, o potencial é considerado apenas nos pontos de discretização interiores que conduzem a uma matriz diagonal  $[V](C)$ , com elementos da diagonal  $[V]I(j,k)$ . A discretização espacial de (4.30) consiste em resolver o sistema linear  $M_D \times M_D$  com etapa de normalização

$$[A] \tilde{\phi} = b^n, \phi^{n+1} = \frac{\tilde{\phi}}{\|\tilde{\phi}\|_0}, \quad (3.54)$$

onde

$$[A] := \frac{1}{\delta t} [I] - \frac{1}{2} [\Delta] + [V] + \beta [|\phi^n|^2] - \Omega [L_z], b^n := \frac{\phi^n}{\delta t}. \quad (3.55)$$

Definimos:  $[I] \in M_{MD} \mathbb{C}$  como a matriz identidade e  $[|\phi^n|^2] \in M_{MD}(\mathbb{C})$ , como a matriz diagonal ("potencial não linear") com os termos diagonais  $[|\phi^n|^2]_{I(j,k)} := |\phi^n|_{I(j,k)}^2$ . No contexto de diferenças finitas, a norma de um vetor  $\phi$  é simplesmente definida por

$$\|\phi\|_0 := h_x^{1/2} h_y^{1/2} \left( \sum_{(j,k) \in D_{J,K}} |\phi_{j,k}|^2 \right)^{1/2}. \quad (3.56)$$

com a norma discreta uniforme definida por:  $\forall \phi \in \mathbb{C}^{MD}, \|\phi\|_\infty = \max_{(j,k) \in D_{J,K}} |\phi_{I(j,k)}|$  e o critério de parada (fraca) como

$$|E_{\beta, \Omega}(\phi^{n+1}) - E_{\beta, \Omega}(\phi^n)| < \varepsilon \delta t, \quad (3.57)$$

com energia discreta

$$E_{\beta,\Omega}(\phi) = h_x^{1/2} h_y^{1/2} \sum_{(j,k) \in D_{J,K}} \Re \left\{ \phi_{I(j,k)}^* \left( -\frac{1}{2}[\Delta] + [V] + \beta [|\phi_{I(j,k)}|^2] - \Omega [L_z] \right) \phi_{I(j,k)} \right\} \quad (3.58)$$

### 3.2.6 Método de Crank-Nicolson

Outro método implícito, ou seja, estável, amplamente usado para resolução da equação de Gross-Pitaevskii é o método de Crank-Nicolson, esse secção terá como referência (BARROS, 2007). Tomemos a equação de difusão em uma dimensão:

$$\frac{\partial u(x,t)}{\partial t} = \sigma \frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2} \quad (3.59)$$

Resolvemos a equação 3.59 para as seguintes condições de contorno:

$$u(x,0) = \phi(x), 0 \leq x \leq 1 \quad (3.60)$$

$$u(0,t) = u(1,t) = 0, t \geq 0 \quad (3.61)$$

A região do espaço de soluções,  $\Omega = (0,1) \times (0,t)$ , correspondente às condições iniciais, será discretizada em  $n$  passos na direção temporal e  $m$  passos na direção espacial.

A equação 3.59 pode ser representada por:

$$u'(x,t) = f(u(x,t)) \quad (3.62)$$

integrando-a em um intervalo de tempo  $k$ , teremos:

$$u(x,t+k) - u(x,t) = \int_t^{t+k} f(u(x,t)) dt \quad (3.63)$$

para um intervalo  $k$  suficientemente pequeno, pode-se resolver a integral pela regra do trapézio:

$$u(x,t+k) - u(x,t) = k \frac{f(u(x,t+k)) + f(u(x,t))}{2} \quad (3.64)$$

fazendo a discretização da malha muito pequena, trocamos  $u(mh,nk)$  por  $U_m^n$ :

$$U_m^{n+1} - U_m^n = \frac{k\sigma}{2} [D_{xx}U_m^{n+1} + D_{xx}U_m^n] \quad (3.65)$$

onde  $D_{xx}U_m^n$  representa o operador  $\partial^2 u(x,t)/\partial x^2$  já discretizado.  $\partial^2 u(x,t)/\partial x^2$  pode ser substituído por  $[u(x+h,t)-2u(x,t)+u(x-h,t)]/h^2$ . Utilizando a discretização da malha neste último, tomando  $r = k\sigma/h^2$  e introduzindo na equação 3.65, temos:

$$U_m^{n+1} - U_m^n = \frac{r}{2} [(U_{m+1}^{n+1} - 2U_m^{n+1} + U_{m-1}^{n+1}) + (U_{m+1}^n - 2U_m^n + U_{m-1}^n)] \quad (3.66)$$

passando os termos de tempo  $(n+1)$  para o lado esquerdo e os termos  $(n)$  do lado direito, temos:

$$U_m^{n+1} - 0.5r [(U_{m+1}^{n+1} - 2U_m^{n+1} + U_{m-1}^{n+1})] = U_m^{n+1} + 0.5r [(U_{m+1}^n - 2U_m^n + U_{m-1}^n)] \quad (3.67)$$

para  $m = 1, 2, 3, \dots, M-1, M > 0$  e  $n > 0$ .

pelas condições de contorno, temos  $U_0^n = U_M^n = 0$  e  $U_0^{n+1} = U_M^{n+1} = 0$ . Precisamos então resolver o sistema de equações:

$$\begin{bmatrix} 1+r & -\frac{r}{2} & 0 & \cdot & \cdot & 0 \\ -\frac{r}{2} & 1+r & -\frac{r}{2} & 0 & \cdot & 0 \\ 0 & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & 0 & -\frac{r}{2} & 1+r & -\frac{r}{2} \\ 0 & \cdot & \cdot & \cdot & -\frac{r}{2} & 1+r \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U_1^{n+1} \\ U_2^{n+1} \\ \cdot \\ \cdot \\ U_{M-1}^{n+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1-r & +\frac{r}{2} & 0 & \cdot & \cdot & 0 \\ +\frac{r}{2} & 1-r & +\frac{r}{2} & 0 & \cdot & 0 \\ 0 & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & 0 & +\frac{r}{2} & 1-r & +\frac{r}{2} \\ 0 & \cdot & \cdot & \cdot & +\frac{r}{2} & 1-r \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U_1^{n+1} \\ U_2^{n+1} \\ \cdot \\ \cdot \\ U_{M-1}^{n+1} \end{bmatrix}$$

Como as matrizes são tridiagonais, é possível encontrar a solução do sistema pelo método de decomposição de matrizes LU (QUINNEY, 1985) que consiste em reescrever a matriz tridiagonal no produto da matriz triangular inferior (L) e da matriz triangular superior (U). Temos então o seguinte sistema representando a equação 3.67:

$$\mathbf{A}.U_{M-1}^{n+1} = \mathbf{B}.U_m^n \quad (3.68)$$

As matrizes  $\mathbf{A}$  e  $\mathbf{B}$  são fornecidas pelo método de Crank-Nicolson e dependem apenas de  $r$ . A matriz coluna  $U_m^n$  no instante de tempo  $n$  é conhecida para todos os valores de



quais se refere apenas ao operador de impulso e o outro apenas à posição do operador. A função de onda então evoluiu alternadamente no espaço de momentos e no espaço real. A dimensão a equação de Schrödinger sujeita a um potencial  $V(x)$ :

$$i\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x)\psi(x,t) = [T + V]\psi(x,t) \quad (3.70)$$

onde,  $T \equiv -\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2}$  e  $V \equiv V(x)$

por conveniência, a massa e a constante  $\hbar$  foram consideradas com a mesma unidade. para um passo de tempo de  $t$  para  $t + \Delta t$ , temos a seguinte solução:

$$\psi(x, t + \Delta t) = e^{-i\Delta t(T+V)}\psi(x, t) \quad (3.71)$$

contudo os operadores  $T$  e  $V$  não comutam, logo:

$$e^{-i\Delta t(T+V)} \neq e^{-i\Delta t T} e^{-i\Delta t V} \quad (3.72)$$

sendo assim, temos que fazer a seguinte aproximação:

$$e^{A+B} = 1 + (A+B) + \frac{\lambda^2}{2!}(A+B)^2 + \frac{\lambda^3}{3!}(A+B)^3 + \dots \quad (3.73)$$

$$e^{\lambda A/2} e^{\lambda B} e^{\lambda A/2} = \left[ 1 + \lambda \left(\frac{A}{2}\right) + \frac{\lambda^2}{2!} \left(\frac{A}{2}\right)^2 + \dots \right] \left[ 1 + \lambda B + \frac{\lambda^2}{2!} B^2 + \dots \right] \left[ 1 + \lambda \left(\frac{A}{2}\right) + \frac{\lambda^2}{2!} \left(\frac{A}{2}\right)^2 + \dots \right] \quad (3.74)$$

substituindo a exponencial da equação 3.73 pelo produto das exponenciais na equação 3.74, temos:

$$e^{\lambda(A+B)} = e^{\lambda A/2} e^{\lambda B} e^{\lambda A/2} + O(\lambda^3) \quad (3.75)$$

fazendo  $A = V$ ,  $B = T$  e  $\lambda = i\hbar$ , temos:

$$e^{-i\Delta t(T+V)} = e^{-i\Delta t V/2} e^{-i\Delta t T} e^{-i\Delta t V/2} + O(\Delta t^3) \quad (3.76)$$

o que dá um erro pequeno. Assim a solução da equação de Schrödinger para o potencial  $V(x)$ :

$$\psi(x, t + \Delta t) = e^{-i\Delta t V/2} e^{-i\Delta t T} e^{-i\Delta t V/2} \psi(x, t) \quad (3.77)$$

O método é chamado de "Split-Step" pois o potencial é resolvido em dois passos separados, antes e depois de se aplicar o operador correspondente ao método de Crank-Nicolson.

Dessa forma conhecendo-se um estado inicial podemos resolver a equação 3.70 pela aproximação apresentada em 3.77.

Usando esse método para a equação de Gross-Pitaevski no dá a discretização:

$$\begin{cases} A^{CN,n} \tilde{\phi} = b^{CN,n}, \\ \phi^{n+1} = \frac{\tilde{\phi}}{\|\tilde{\phi}\|_0}, \end{cases} \quad (3.78)$$

onde  $A^{CN,n}$  e  $b^{CN,n}$  tem os seguintes valores:

$$\begin{cases} A^{CN,n} = \left( \frac{I}{\Delta t} - \frac{1}{4}\Delta + \frac{1}{2}V + \frac{1}{2}\beta |\phi^n|^2 - \frac{1}{2}\Omega L_z \right), \\ b^{CN,n} = \left( \frac{I}{\Delta t} + \frac{1}{4}\Delta - \frac{1}{2}V - \frac{1}{2}\beta |\phi^n|^2 + \frac{1}{2}\Omega L_z \right) \phi^n. \end{cases} \quad (3.79)$$

assim:

$$\begin{cases} \Psi = A^{CN,n} \psi = A_{TF}^{CN,n} \psi + A_{\Delta,\Omega}^{CN,n} \psi, \\ A_{TF}^{CN,n} \psi = \left( \frac{[[I]]}{\Delta t} + \frac{1}{2}[[V]] + \frac{1}{2}\beta [[|\phi^n|^2]] \right), \\ A_{\Delta,\Omega}^{CN,n} \psi = \left( -\frac{1}{4}[[\Delta]] - \frac{1}{2}\Omega [[L_z]] \right) \psi, b^{CN,n} = \left( \frac{[[I]]}{\Delta t} + \frac{1}{4}[[\Delta]] - \frac{1}{2}[[V]] - \frac{1}{2}\beta [[|\phi^n|^2]] + \frac{1}{2}\Omega [[L_z]] \right) \psi. \end{cases} \quad (3.80)$$

$$b^{CN,n} = \left( \frac{[[I]]}{\Delta t} + \frac{1}{4}[[\Delta]] - \frac{1}{2}[[V]] - \frac{1}{2}\beta [[|\phi^n|^2]] + \frac{1}{2}\Omega [[L_z]] \right) \quad (3.81)$$

## 4 CONCEITOS FUNDAMENTAIS DE COMPUTAÇÃO QUÂNTICA

Neste capítulo vamos apresentar alguns conceitos de computação quântica, iniciaremos nossa discussão definindo o bit quântico (q-bit), após isso discutiremos sobre as portas quânticas. Este capítulo tem como referência geral (LUIZ, 2010)(MENDONÇA, 2004).

### 4.1 O Bit Quântico

Em computação clássica, a unidade básica da informação é o bit, uma abreviação do inglês "binary digit"(dígito binário), definido como a menor unidade de informação que pode ser armazenada ou transmitida, podendo ter dois estados possíveis, 0 e 1, um exemplo clássico desses dois estados é se passa ou não corrente por um fio. É natural que em computação quântica, computação que tem como base as leis da mecânica quântica, também tenhamos um sistema com dois estados básicos, definidos como *bit quânticos* ou *q-bit*, representados por  $|0\rangle$  e  $|1\rangle$  um sistema com dois níveis, alguns exemplos são: as duas polarizações diferentes de um fóton; o alinhamento de um spin em um campo magnético uniforme; os dois estados de um elétron, "estado fundamental" e "estado excitado". Essa notação  $|\cdot\rangle$  é geralmente utilizada em mecânica quântica para representar os estados quânticos é a *notação de Dirac*.

A principal propriedade de um q-bit é, que diferente do bit clássico que só pode assumir os valores 0 e 1, ele pode assumir valores de sobreposição dos estados  $|0\rangle$  e  $|1\rangle$

$$|\Psi\rangle = \alpha |0\rangle + \beta |1\rangle \quad (4.1)$$

onde  $\alpha$  e  $\beta$  são coeficientes complexos, definidos como amplitude de probabilidade sendo que  $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$ .

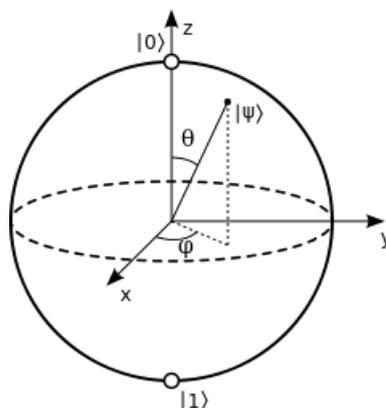
Uma maneira de representar um q-bit é através da esfera de Bloch, ilustrado na figura 13 como um vetor de raio unitário. Os estados  $|0\rangle$  e  $|1\rangle$  são, respectivamente os pólos norte e sul. De maneira geral o q-bit é representado na esfera de Bloch como

$$|\Psi\rangle = \cos\frac{\theta}{2} |0\rangle + e^{i\phi} \sin\frac{\theta}{2} |1\rangle \quad (4.2)$$

onde  $\theta$  é o ângulo polar e  $\phi$  é o azimutal.

Como o q-bit pode tomar qualquer valor na esfera de Bloch, podemos assim armazenar um número infinito de informação em um q-bit, porém não podemos acessá-las, pois de acordo com um postulado fundamental da mecânica quântica ao medirmos um estado quântico

Figura 13 – Esfera de Bloch



Fonte: (NIELSEN, 2005)

mudamos o seu estado, colapsando a superposição para o estado  $|0\rangle$  ou  $|1\rangle$ , ou seja quando medimos um q-bit, encontramos o estado 0 com probabilidade  $|\alpha|^2$  e o estado 1 com probabilidade  $|\beta|^2$ , enfatizando que quando um q-bit é medido o resultado sempre será 0 ou 1, por exemplo, um q-bit pode está no estado :

$$\frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle \quad (4.3)$$

quando medimos teremos resultado 0 em 50% das vezes e o resultado 1 em 50% das vezes. Se não medirmos, o q-bit pode processar dois bits de informação simultaneamente ( $|0\rangle$  e  $|1\rangle$ ) essa é uma interessante característica da computação quântica chamada de paralelismo quântico.

Houve muita discussão quanto ao significado dos estados superpostos e da natureza probabilística aos sistemas quânticos, "ao que nos parece, Deus além de jogar dados com o universo, algumas vezes ele ainda joga em lugares onde não podemos ver"(Stephen Hawking). Essas questões foge do cerne dessa dissertação.

## 4.2 Portas Lógicas

Após a definição do q-bit (a unidade básica de informação quântica) devemos ser capazes de manipular essa informação, ou seja realizar operações no q-bit que é denominada de porta lógica. Nesta seção discutiremos sobre as principais portas lógicas quânticas.

### 4.2.1 Portas Quânticas

#### 4.2.1.1 Portas Lógicas de 1 q-bit

Essas portas admitem apenas um q-bit na entrada, tendo como saída também um q-bit. Enquanto que nas portas clássicas tem apenas duas portas de um bit que é a Identidade

e a NOT, já nas portas quânticas temos muitas portas, pois um q-bit é um vetor no espaço de Hilbert de duas dimensões, assim o número de portas é a quantidade de matrizes unitárias  $2 \times 2$ . Destacamos as matrizes de Pauli como as mais relevantes, pois usamos-as como base computacional, a representação matricial da primeira matriz:

$$\sigma_x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$$

perceba que essa matriz é análoga a porta NOT clássica:

$$\sigma_x |0\rangle = |1\rangle,$$

$$\sigma_x |1\rangle = |0\rangle.$$

contudo especificar a ação da porta sobre os estados  $|0\rangle$  e  $|1\rangle$  não nos diz o que acontece com superposições desses estados é preciso saber o que ocorre com as amplitudes de probabilidade, a porta NOT é linear ou seja, ela inverte as amplitudes, levando o estado

$$\alpha |0\rangle + \beta |1\rangle \tag{4.4}$$

para o estado

$$\beta |0\rangle + \alpha |1\rangle \tag{4.5}$$

escrevendo o estado  $\alpha |0\rangle + \beta |1\rangle$  sob a forma matricial

$$\begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix}$$

o NOT quântico é:

$$X \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \beta \\ \alpha \end{bmatrix}$$

a representação da segunda matriz de Pauli é dada por:

$$\sigma_y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}$$

onde  $i = \sqrt{-1}$ . Assim como a matriz  $\sigma_x$ , a matriz  $\sigma_y$  inverte as amplitudes de probabilidade e além disso, acrescenta uma fase relativa de  $\pi$  e uma fase global de  $\pi/2$  (que não tem efeito físico observável).

A terceira matriz de Pauli é dada por:

$$\sigma_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$$

essa matriz não inverte as amplitudes de probabilidade como as outras duas, ela apenas insere uma fase relativa de  $\pi$  no estado  $|1\rangle$ .

Outra três portas importantes são a porta T ou  $\pi/8$ , a porta Z e a Hadamard. A porta T introduz uma fase relativa de  $\pi/4$  e é representada matricialmente por

$$T = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\pi/4} \end{bmatrix}$$

A porta Z é representada matricialmente por:

$$Z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$$

ela não altera o estado  $|0\rangle$  e muda o sinal de  $|1\rangle$  para  $-|1\rangle$ .

A porta Hadamard é definida como segue

$$H = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\pi/4} \end{bmatrix}$$

ela não é uma porta trivial, pois transforma estados ordinários em estados de superposição o que faz essa porta ter vasta aplicação em algoritmos quânticos, ela funciona como segue:

$$\begin{aligned} H|0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle), \\ H|1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle). \end{aligned} \tag{4.6}$$

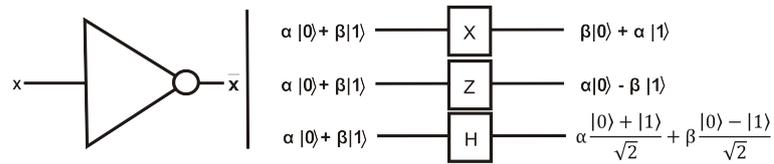
e leva os estados de superposição em estados ordinários:

$$\begin{aligned} H \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle) &= |0\rangle, \\ H \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle) &= |1\rangle. \end{aligned} \tag{4.7}$$

Essa porta transforma os estados  $|0\rangle$  e  $|1\rangle$  no "meio caminho" entre eles, assim aplicando H duas vezes temos a Identidade, ou seja os estados não se alteram.

Na figura 14 temos um resumo das portas clássicas de um bit (esquerda) e quânticas de um q-bit (direita).

Figura 14 – portas clássicas de um bit (a esquerda) e quânticas de um q-bit.



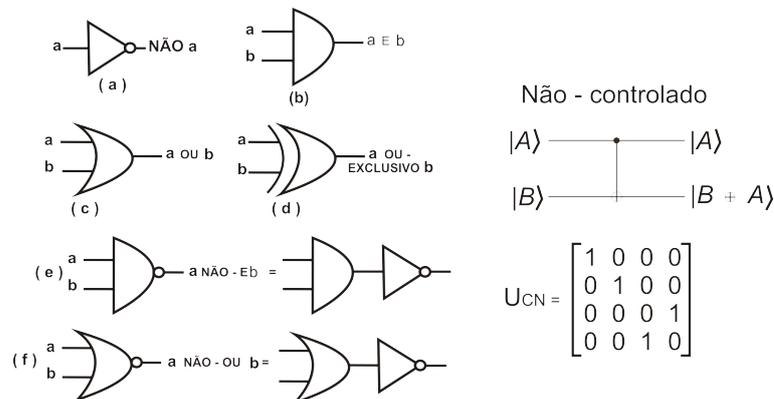
Fonte: (NIELSEN, 2005)

4.2.1.2 Portas Lógicas de 2 q-bit

Assim como nas portas de 1 q-bit se constitui do conjunto de matrizes unitárias  $2 \times 2$ , as portas de 2 q-bit se constitui do conjuntos de matrizes unitárias  $4 \times 4$ . As portas de 2 q-bit controladas, funciona de modo que um dos q-bits é usado como controle enquanto que o outro é usado como alvo, controlando assim se a operação será ou não realizada, um exemplo clássico dessa porta é a porta CNOT (Controlled-NOT) que é a porta NOT controlada, o q-bit a mais serve para controlar se o q-bit alvo executará a porta NOT ou não, ou seja, se o primeiro q-bit (q-bit de controle) for 0, nada acontece com o segundo q-bit (q-bit alvo), mas se o primeiro q-bit for 1, o segundo q-bit troca seu estado. Na figura 15 tem o circuito e a matriz que representa essa porta. Em símbolos ela é representada por:

$$|00\rangle \rightarrow |00\rangle; |01\rangle \rightarrow |01\rangle; |10\rangle \rightarrow |11\rangle; |11\rangle \rightarrow |10\rangle \tag{4.8}$$

Figura 15 – Portas clássicas de um ou mais bits (esquerda) e à direita a porta quântica CNOT ou não-controlado



Fonte: (NIELSEN, 2005)

## 5 SIMULAÇÃO DOS Q-BITS E DAS PORTAS LÓGICAS

### 5.1 condensado no estado fundamental

Apresentamos agora como calcular o estado fundamental de uma equação de um componente Gross-Pitaevskii com potencial quadrático, com não-linearidade cúbica em 2D. O programa utilizado para simular os condensados é o MATLAB 2015 com o pacote GPESLab (ANTOINE; DUBOSCQ, 2014). A primeira parte do script consiste na construção de duas estruturas chamado Método e Geometry2D que vai conter todas as informações relacionadas com o método e a geometria, respectivamente.

Estrutura Método: nessa estrutura temos as seguintes variáveis:

- (*Computation = Ground*) é uma variável que calcula um estado fundamental usando o método de tempo imaginário.
- (*Ncomponentes = 1*) é o número de condensados.
- (*Type = CNFD*) o método utilizado foi o Crank-Nilckson.
- (*Deltat = 10<sup>-2</sup>*) é uma variável que corresponde ao intervalo de tempo do método.
- (*Stop<sub>crit</sub> = 'MaxNorm', 1e - 5*) é o critério de parada.

E a estrutura geometria: nessa estrutura temos as seguintes variáveis:

- (*xmin = -10 e xmax = 10; ymin = -10 e ymax = 10*) são variáveis, correspondente à extremidade esquerda e direita, respectivamente, do domínio computacional na direção x e y.
- (*Nx = 2<sup>8</sup> + 1 e Ny = 2<sup>8</sup> + 1;*) são variáveis que correspondem ao número de pontos na direção x e y.

A codificação dessas estruturas está no apêndice 6.1.

O próximo passo é definir o problema físico. No nosso caso, queremos calcular o estado fundamental da equação Gross-Pitaevskii

$$i\partial_t \psi(x,y,t) = \delta \Delta \psi(x,y,t) + \frac{1}{2}(|x|^2 + |y|^2) \psi(x,y,t) + \beta |\psi(x,y,t)|^2 \psi(x,y,t) + i\Omega(y\partial_x - x\partial_y) \psi(x,y,t) \quad (5.1)$$

A função *Physics2D\_Var2d* constrói a estrutura *Physics2D* que contém as seguintes operadores:  $\delta$ ,  $\beta$  e  $\Omega$  (é uma variável que define a velocidade de rotação).

- Delta é uma variável que corresponde à constante do operador Laplaciano é o  $\delta$  que está na equação 5.1.
- Beta é uma variável que corresponde à constante da não-linearidade é o  $\beta$  que está na equação 5.1.
- Omega é uma variável que define a velocidade de rotação. No caso 2D, o operador gradiente é  $(x\partial_y - y\partial_x)$ , um parâmetro de valor real ( $\Omega \in \mathbb{R}$ ). Definindo o operador gradiente, temos o seguinte operador de rotação:

$$\sum_{j=1}^2 G^j(x)\partial_{x_j} = \begin{bmatrix} \Omega(x\partial_y - y\partial_x) & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \Omega(x\partial_y - y\partial_x) & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \Omega(x\partial_y - y\partial_x) \end{bmatrix} \quad (5.2)$$

Para um CEB não rotativo, temos uma única solução mínima global e fornece um estado fundamental  $\phi_g \geq 0$ . Portanto, nós escolhemos a solução para a equação de Schrödinger linear com potencial harmônico quando estamos sob a frequência crítica:  $\Omega \ll \gamma_{xy}$ , com  $\gamma_{xy} = \min(\gamma_x; \gamma_y)$  para uma armadilha harmônica

$$V(x) = \frac{1}{2}(\gamma_x x^2 + \gamma_y y^2). \quad (5.3)$$

o dado inicial é então dada por:

$$\phi(x) = \frac{(\gamma_x \gamma_y)^{1/4}}{\sqrt{\pi}} e^{-(\gamma_x x^2 + \gamma_y y^2)/2} \quad (5.4)$$

Em GPELab, isso pode ser encontrados na função *GaussianInitialData2d*, onde a versão é codificada:

$$\phi(x) = \frac{(1 - \Omega)\phi_{ho}(x) + \Omega\phi_{ho}^v(x)}{\|(1 - \Omega)\phi_{ho}(x) + \Omega\phi_{ho}^v(x)\|_o}, \quad (5.5)$$

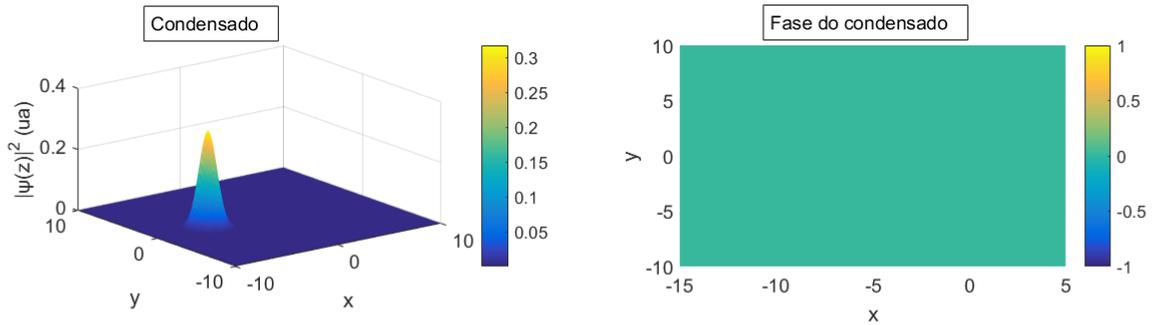
com

$$\phi_{ho}(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-(\gamma_x x^2 + \gamma_y y^2)/2}, \quad (5.6)$$

$$\phi_{ho}^v(x) = \frac{(\gamma_x x + i\gamma_y y)}{\sqrt{\pi}} e^{-(\gamma_x x^2 + \gamma_y y^2)/2}, \quad (5.7)$$

Um exemplo usando os dados iniciais 5.5, 5.6, 5.7,  $\beta = 1000$  e  $\delta = 0.5$  da equação 5.1 está representado na figura 16.

Figura 16 – Condensado no estado fundamental



Fonte: Próprio autor

## 5.2 Condensados Acoplados

O sistema de equações de Gross-Pitaevskii com condensados em estado fundamental acoplados são:

$$\left\{ \begin{array}{l} i\partial_t \psi_1(t, x, y) = \frac{1}{2} \Delta \psi_1(t, x, y) + \left( \frac{1}{2} (|x|^2 + |y|^2) + \beta_1 |\psi_1(t, x, y)|^2 \right. \\ \quad \left. + \beta_{1,2} |\psi_2(t, x, y)|^2 \right) \psi_1(t, x, y) + i\Omega (y\partial_x - x\partial_y) \psi_1(t, x, y) \\ \quad - k(i\partial_x + \partial_y) \psi_2(t, x, y), \\ i\partial_t \psi_2(t, x, y) = \frac{1}{2} \Delta \psi_2(t, x, y) + \left( \frac{1}{2} (|x|^2 + |y|^2) + \beta_2 |\psi_2(t, x, y)|^2 \right. \\ \quad \left. + \beta_{1,2} |\psi_1(t, x, y)|^2 \right) \psi_2(t, x, y) + i\Omega (y\partial_x - x\partial_y) \psi_2(t, x, y) \\ \quad - k(i\partial_x + \partial_y) \psi_1(t, x, y), \end{array} \right. \quad (5.8)$$

O potencial padrão é o potencial quadrático, a não-linearidade cúbica acoplada está definida em 6.2 em anexo.

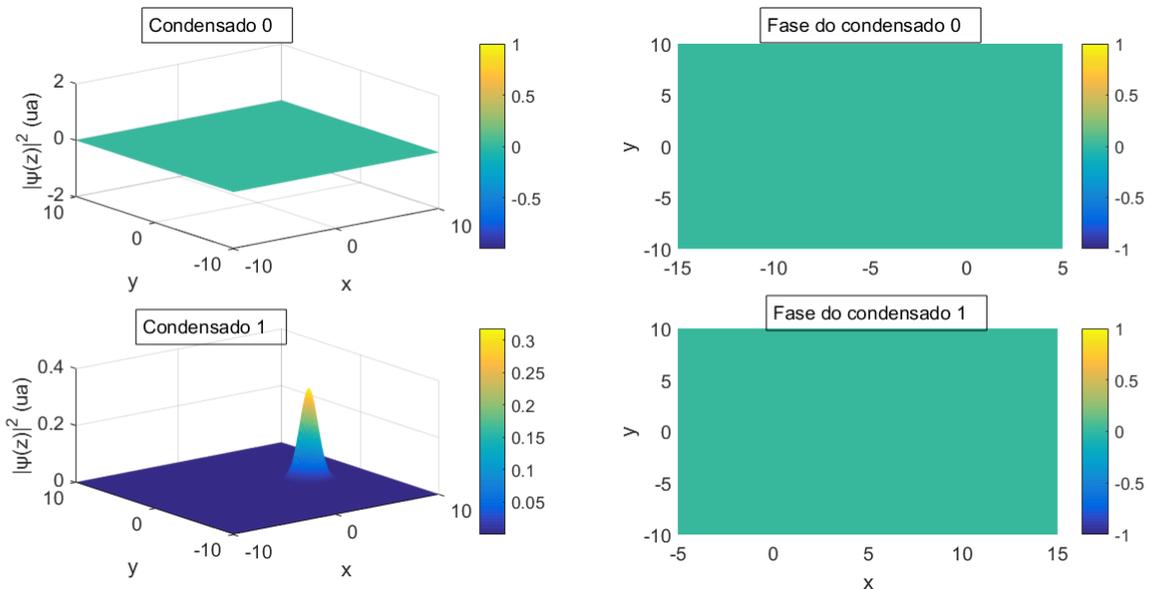
Temos também de impor a energia associada à não-linearidade cúbica acoplada, definida em 6.3 em anexo.

### 5.3 Modulação por posição espacial de pulso

Os q-bits podem estar nos estados  $|0\rangle$ ,  $|1\rangle$  e em superposição  $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$  e  $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle)$ . Para representá-los fizemos as seguintes considerações: acoplamos dois condensados no estado fundamental e o valor de  $|\psi|^2$  deles nos diz o estado dos nossos q-bits da seguinte maneira:

- Se o primeiro condensado tem amplitude igual a 0 (ou seja, sem população) e o segundo condensado tem altura máxima igual a 1 ( $|\psi|^2 = 0.3$  unidade arbitrária), representado pela figura 17 dizemos que esse q-bit está no estado  $|0\rangle$ .

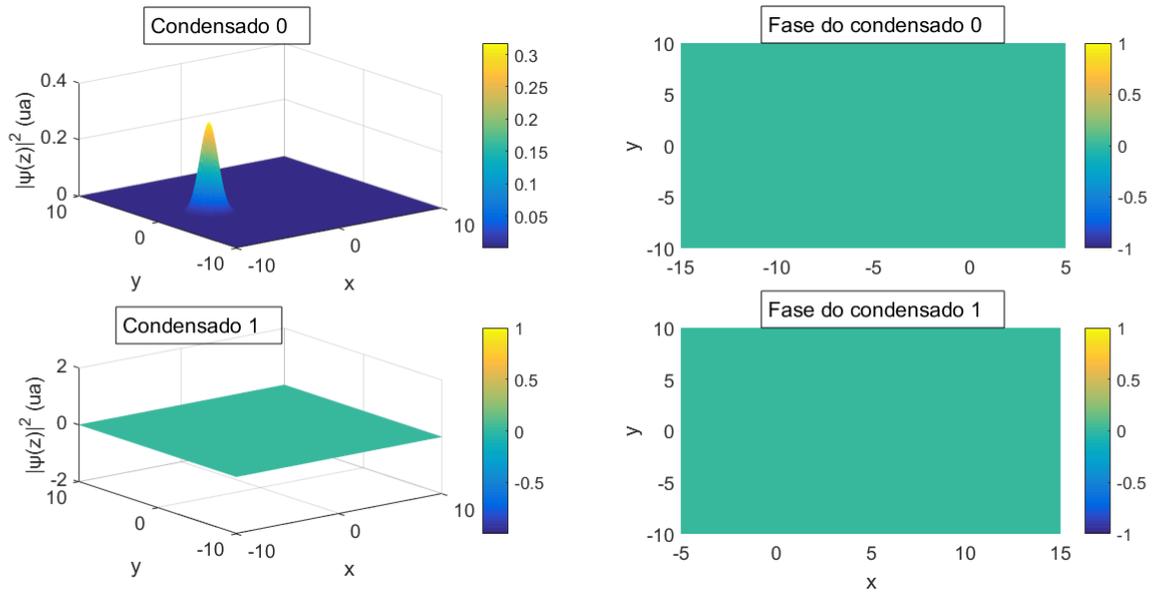
Figura 17 – Iniciamos o primeiro condensado igual a 0 (ou seja, sem população) e o segundo condensado igual a 1.



Fonte: Próprio autor

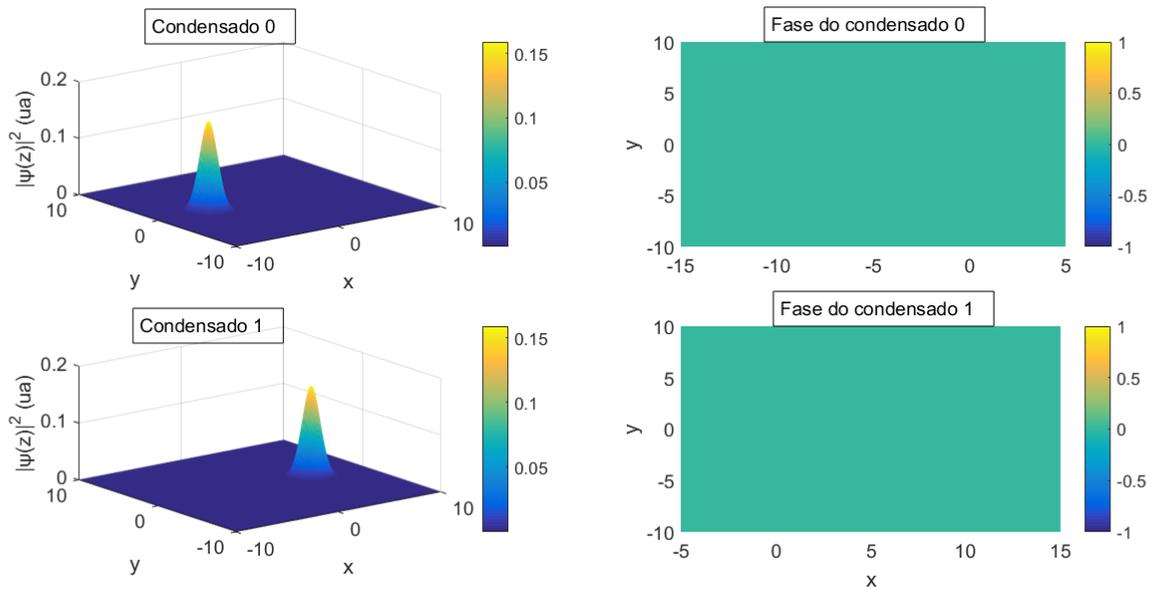
- Se o primeiro condensado tem valor igual a 1 ( $|\psi|^2 = 0.3$  unidade arbitrária) e o segundo condensado igual a 0 (ou seja, sem população), representado pela figura 18 dizemos que esse q-bit está no estado  $|1\rangle$ .
- se os dois condensados estiverem com a mesma altura, ( $|\psi|^2 \cong 0.12$  a  $0.15$  unidade arbitrária), representado pela figura 19 dizemos que esse q-bit está no estado de superposição  $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$ .
- E, se os dois condensados estiverem com a mesma altura, ( $|\psi|^2 \cong 0.12$  a  $0.15$  unidade arbitrária) e com uma fase de  $\pi$ , representado pela figura 20 dizemos que esse q-bit está no estado de superposição  $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle)$ . Note que a diferença desse estado para o anterior está apenas na fase global.

Figura 18 – Iniciamos o primeiro condensado igual a 1 e o segundo condensado igual a 0.



Fonte: Próprio autor

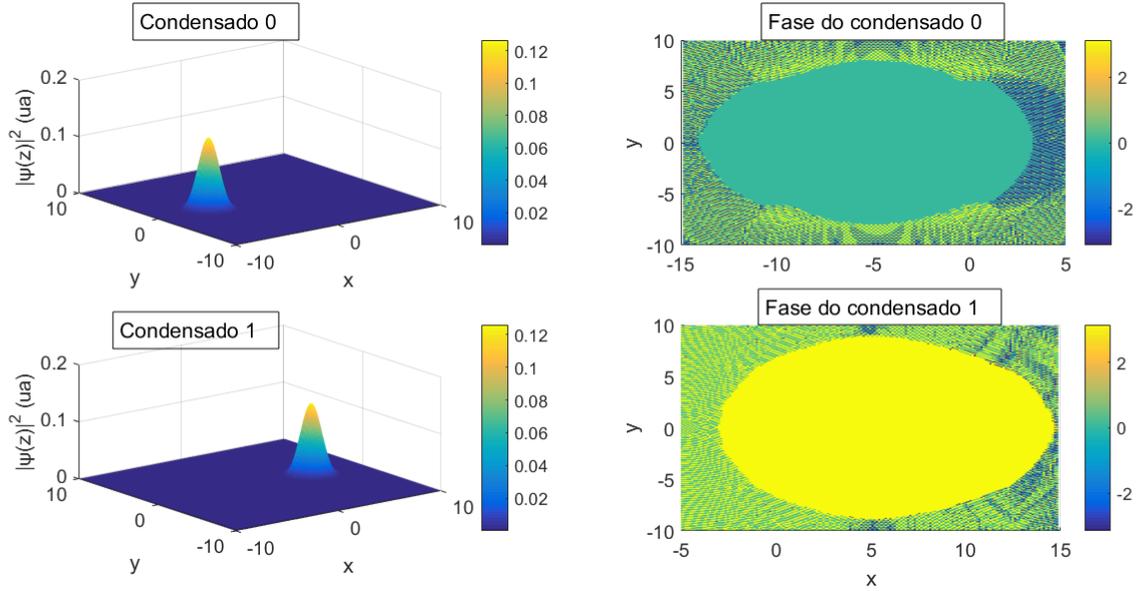
Figura 19 – Iniciamos os condensados com metade da amplitude máxima 50%.



Fonte: Próprio autor

Beta é a variável que acompanha a não-linearidade na equação 5.1. Essa é a variável que é modificada para encontrarmos as porta lógicas.

Figura 20 – Iniciamos os condensados com metade da amplitude máxima 50% e fase  $\pi$



Fonte: Próprio autor

#### 5.4 Porta quântica NOT ou X

- No estado inicial  $|0\rangle$

$$|\Psi_{CBE}(0)\rangle = |0\rangle \rightarrow |\Psi_{CBE}(t_{NOT})\rangle = |1\rangle. \quad (5.9)$$

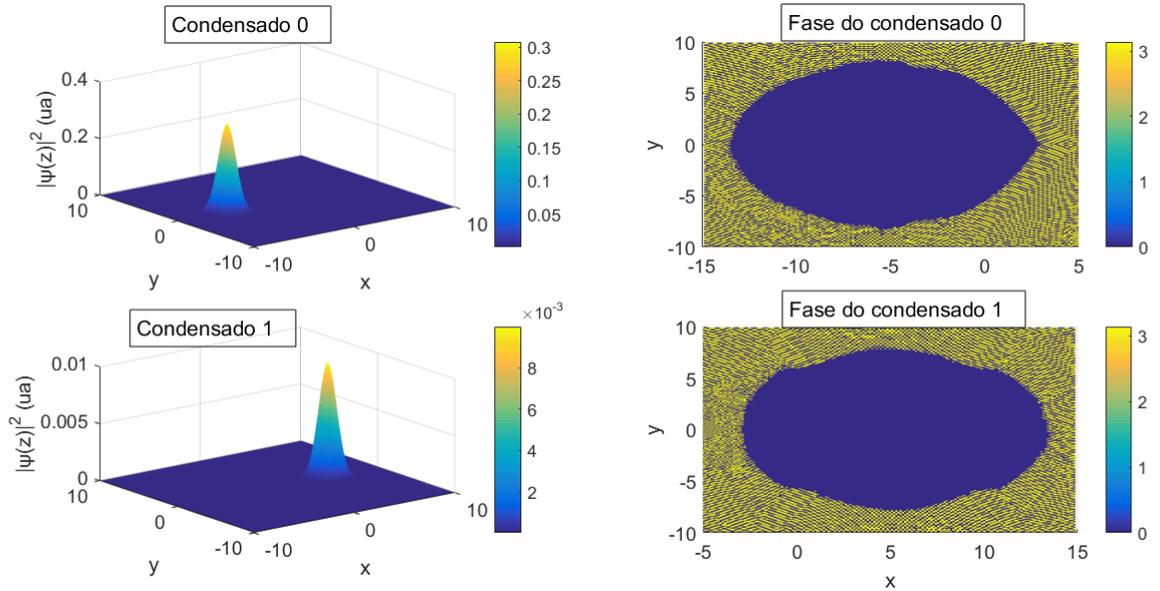
Essa porta inverte o estado  $|0\rangle$  para o estado  $|1\rangle$ . Iniciamos os condensados acoplados no estado  $|0\rangle$  e no final da simulação os condensados trocaram suas populações (ou seja, os bósons passaram do segundo condensado para o primeiro por meio de tunelamento quântico) e mudaram seu estado para  $|1\rangle$ , tendo como constante de acoplamento  $Beta\_coupled = [0, 1; 1, 0.01]$  representado na figura 21.

- No estado inicial  $|1\rangle$

$$|\Psi_{CBE}(0)\rangle = |1\rangle \rightarrow |\Psi_{CBE}(t_{NOT})\rangle = |0\rangle. \quad (5.10)$$

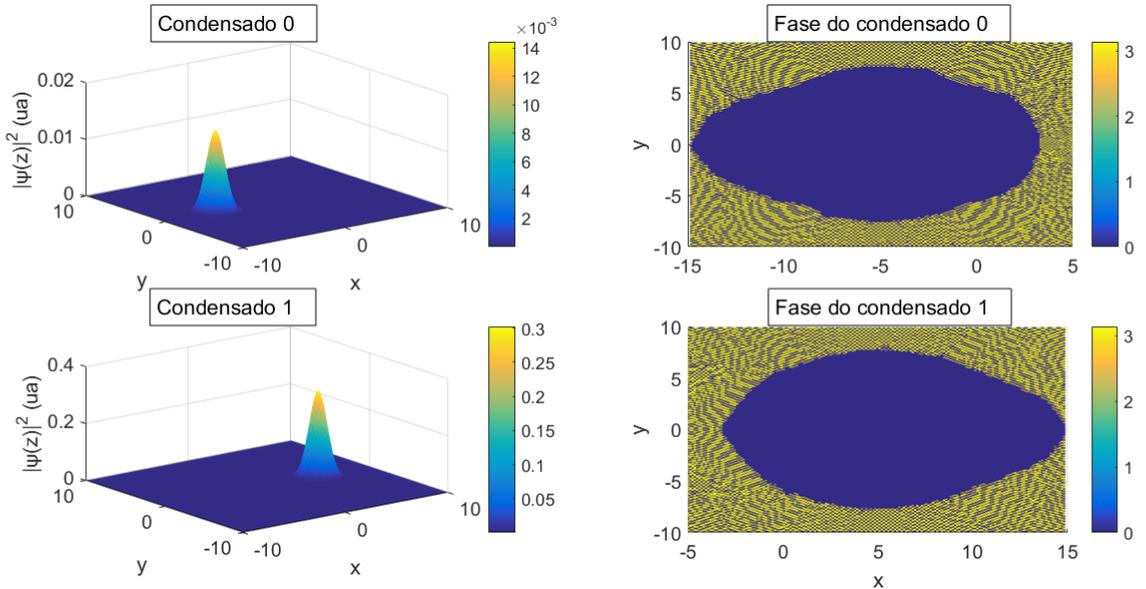
Análogo ao que aconteceu com o estado  $|0\rangle$  que passou para o estado  $|1\rangle$ , quando iniciamos no estado  $|1\rangle$ , no final da simulação os condensados trocaram suas populações (dessa vez passou do primeiro condensado para o segundo) e mudam seu estado para  $|0\rangle$ , tendo como constante de acoplamento  $Beta\_coupled = [0.01, 1; 1, 0]$  representado na figura 22.

Figura 21 – Porta NOT: Iniciamos os condensados no estado  $|0\rangle$  e no final da simulação muda para o estado  $|1\rangle$



Fonte: Próprio autor

Figura 22 – Porta NOT: Iniciamos os condensados no estado  $|1\rangle$  e no final da simulação muda para o estado  $|0\rangle$



Fonte: Próprio autor

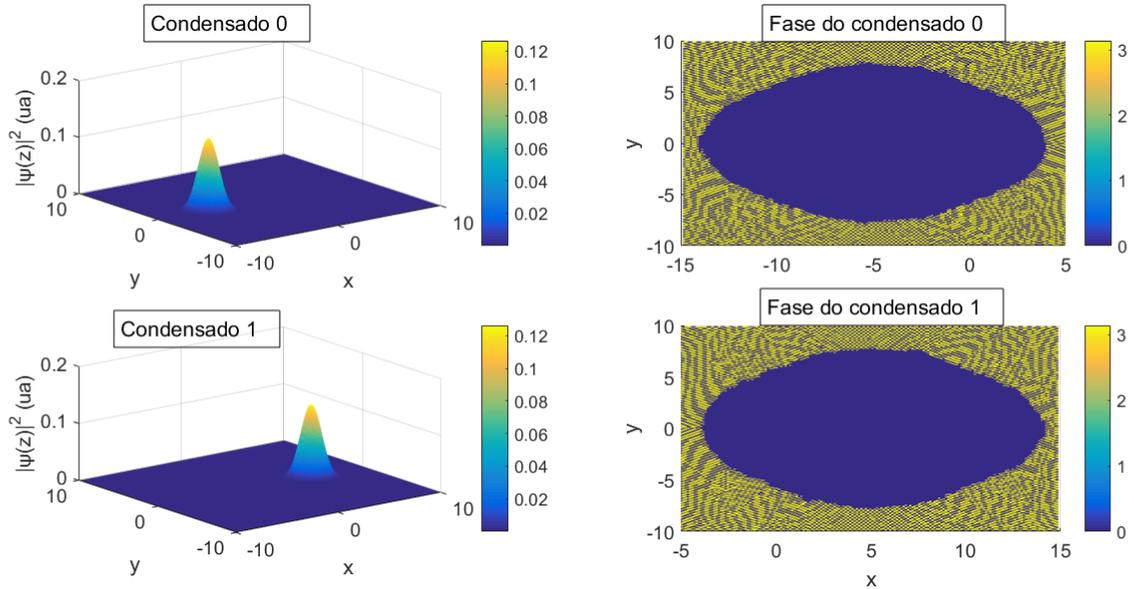
- No estado inicial a superposição  $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$

$$|\Psi_{CBE}(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle) \rightarrow |\Psi_{CBE}(t_{NOT})\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle). \quad (5.11)$$

Observe que no caso de superposição, a porta NOT não altera o estado do sistema, não

havendo mudança de população, tendo como constante de acoplamento  $Beta\_coupled = [0.005, 1; 1, 0.005]$  representado pela figura 23, o estado final da simulação.

Figura 23 – Porta NOT no estado de superposição  $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$



Fonte: Próprio autor

## 5.5 Porta Hadamard (H)

Essa porta transforma estados ordinários em estados de superposição. Iniciamos os condensados acoplados no estado  $|0\rangle$  e constante de acoplamento  $Beta\_coupled = [0.005, 1; 1, 0.005]$ , no final da simulação os condensados dividiram suas populações ( $|\psi|^2 \cong 0.12$  unidade arbitrária), alterando assim seu estado para  $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$ , representado na figura 24.

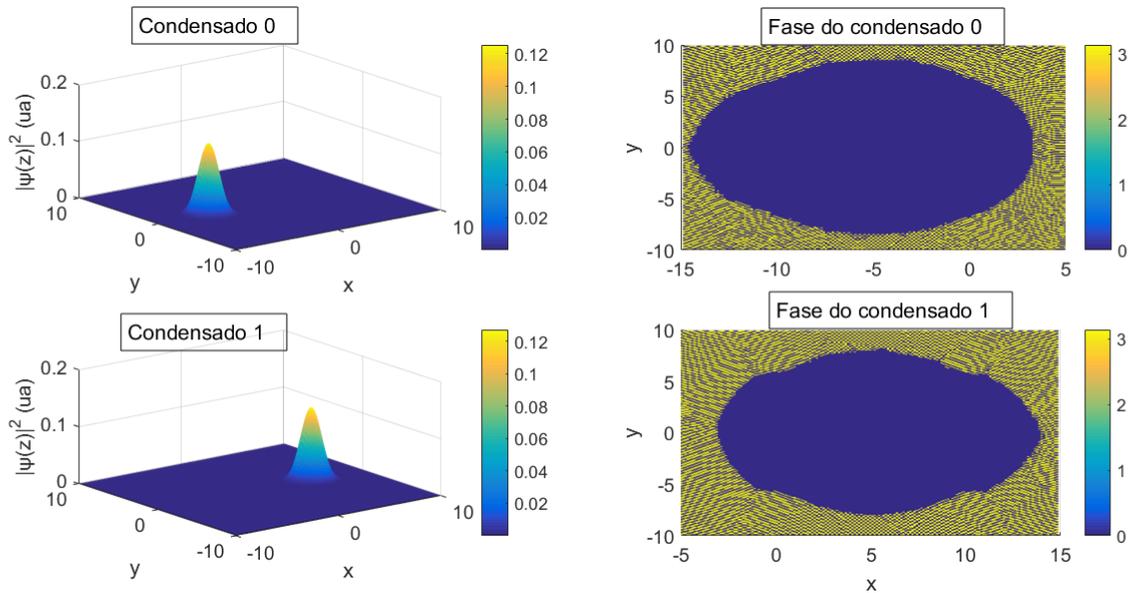
De maneira análoga ao que aconteceu com o estado  $|0\rangle$  que passou para o estado de superposição  $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$ , quando iniciamos no estado  $|1\rangle$  e constante de acoplamento  $Beta\_coupled = [0.005, 1; 1, 0.005]$  no final da simulação os condensados dividiram suas populações ( $|\psi|^2 \cong 0.12$  unidade arbitrária), alterando assim seu estado para  $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle)$ , representado na figura 25.

- No estado inicial  $|1\rangle$

$$|\Psi_{CBE}(1)\rangle = |1\rangle \rightarrow |\Psi_{CBE}(t_H)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle). \quad (5.12)$$

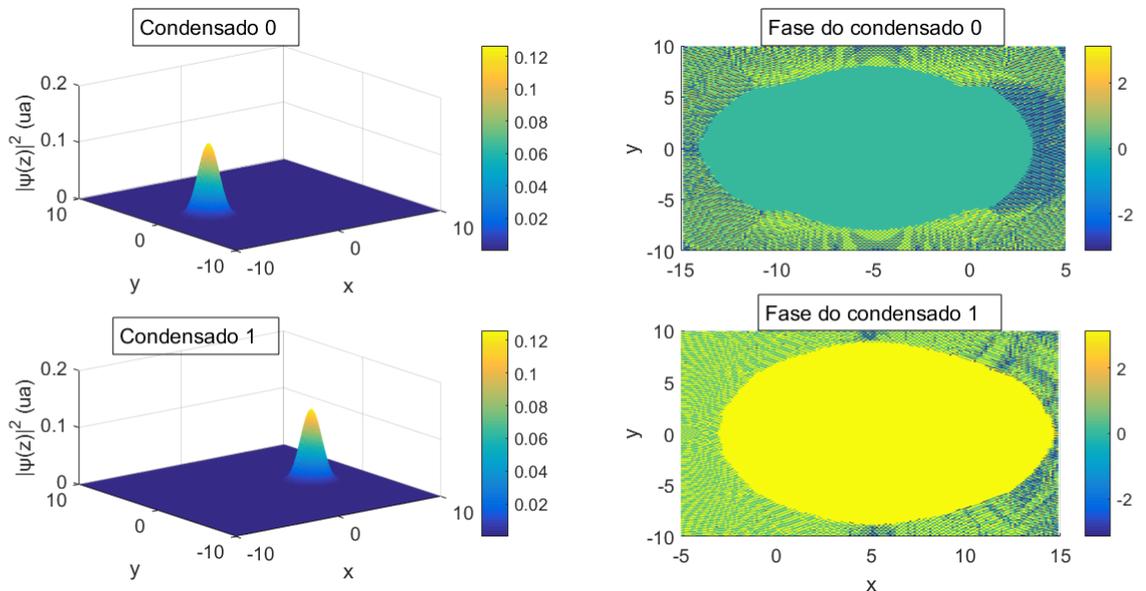
Como essa porta é inversa, ao iniciarmos com os estados de superposição teremos os estados ordinários. Assim, iniciando o estado  $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$  e constante de acoplamento

Figura 24 – Porta Hadamard: Iniciamos os condensados no estado  $|0\rangle$  e no final da simulação muda para o estado  $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$



Fonte: Próprio autor

Figura 25 – Porta hadamard: iniciamos os condensados no estado  $|1\rangle$  e no final da simulação muda para o estado  $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle)$



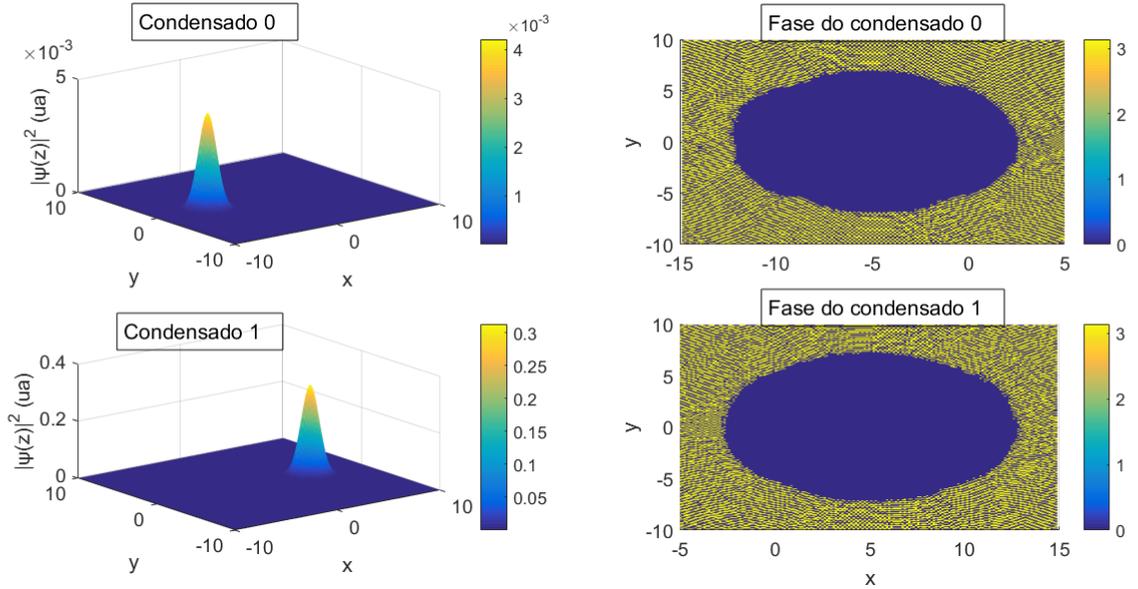
Fonte: Próprio autor

$Beta\_coupled = [0.01, 1, 1, 0]$  no final da simulação temos o estado  $|0\rangle$ , representado na figura 26.

- No estado inicial a superposição  $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$

$$|\Psi_{CBE}(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle) \rightarrow |\Psi_{CBE}(t_H)\rangle = |0\rangle. \quad (5.13)$$

Figura 26 – Porta hadamard: iniciamos os condensados no estado  $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$  e no final da simulação muda para o estado  $|0\rangle$



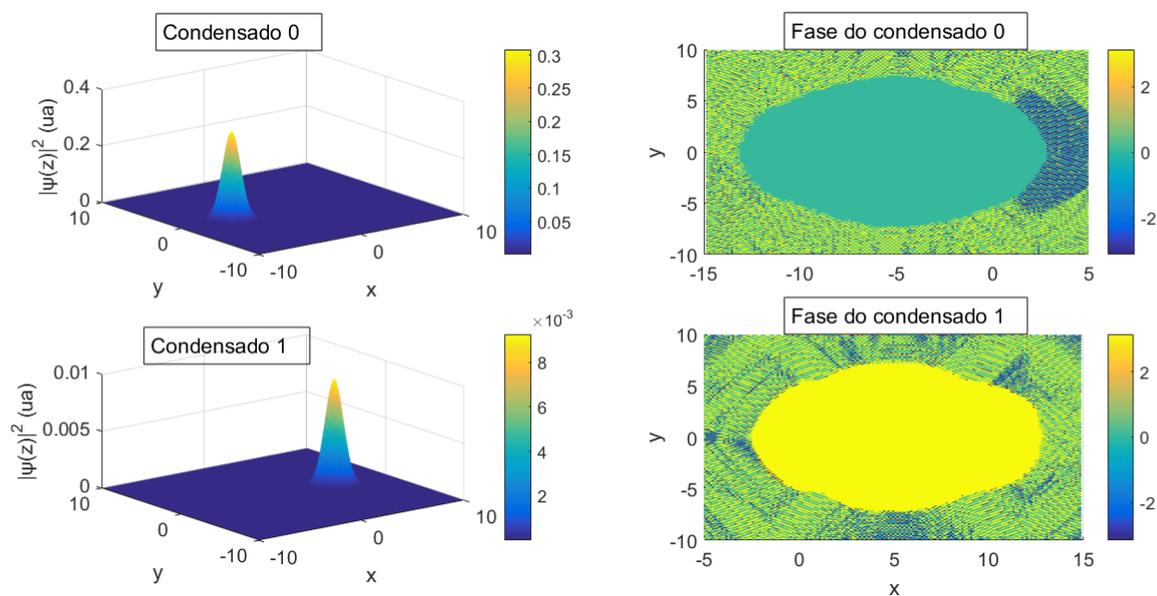
Fonte: Próprio autor

De maneira análoga, ao iniciarmos com o estado de superposição  $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle)$  e constante de acoplamento  $Beta\_coupled = [0, 1; 1, 0.01]$ , no final da simulação temos o estado  $|1\rangle$ , representado na figura 27.

- No estado inicial a superposição  $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle)$

$$|\Psi_{CBE}(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle) \rightarrow |\Psi_{CBE}(t_H)\rangle = |1\rangle. \quad (5.14)$$

Figura 27 – Porta hadamard: iniciamos os condensados no estado  $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle)$  e no final da simulação muda para o estado  $|1\rangle$



Fonte: Próprio autor

## 6 CONCLUSÕES

Neste trabalho, realizamos uma simulação numérica com bósons, formando condensados de Bose-Einstein. Dois condensados de Bose-Einstein são acoplados via tunelamento quântico. Devido a esse acoplamento, há transferência de população entre os modos condensados. O acoplamento é ajustado de maneira que tenhamos probabilidade de ocupação em dois níveis, constituindo assim um sistema de dois níveis.

Definimos o q-bit no nosso sistema de condensados acoplados, associando esses níveis aos estados  $|0\rangle$ ,  $|1\rangle$ . Identificando os átomos que populam cada nível e a fase, temos os estados de superposição  $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$  e  $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle)$  que estão associados a população que ocupa cada nível e a fase global.

De modo geral, conclui-se que variando a constante de não-linearidade é possível controlar a população que ocupa cada nível, conseguimos obter assim as portas quânticas NOT e Hadamard. Como trabalhos futuros uma investigação maior deve ser feita para encontrar outras portas quânticas.

## REFERÊNCIAS

- ALBIEZ, M.; GATI, R.; FÖLLING, J.; HUNSMANN, S.; CRISTIANI, M.; OBERTHALER, M. K. Direct observation of tunneling and nonlinear self-trapping in a single bosonic josephson junction. **Phys. Rev. Lett.**, American Physical Society, v. 95, p. 010402, Jun 2005. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.95.010402>>.
- AMARA, P.; HSU, D.; STRAUB, J. E. Global energy minimum searches using an approximate solution of the imaginary time schrödinger equation. **The Journal of Physical Chemistry**, ACS Publications, v. 97, n. 25, p. 6715–6721, 1993.
- ANDERSON, M. H.; ENSHER, J. R.; MATTHEWS, M. R.; WIEMAN, C. E.; CORNELL, E. A. Observation of bose-einstein condensation in a dilute atomic vapor. **Science**, American Association for the Advancement of Science, v. 269, n. 5221, p. 198–201, 1995. ISSN 0036-8075. Disponível em: <<http://science.sciencemag.org/content/269/5221/198>>.
- ANTOINE, X.; DUBOSCQ, R. Gpелab, a matlab toolbox to solve gross–pitaevskii equations i: Computation of stationary solutions. **Computer Physics Communications**, Elsevier, v. 185, n. 11, p. 2969–2991, 2014.
- BAO, W.; DU, Q. Computing the ground state solution of bose–einstein condensates by a normalized gradient flow. **SIAM Journal on Scientific Computing**, SIAM, v. 25, n. 5, p. 1674–1697, 2004.
- BAO, W.; TANG, W. Ground-state solution of bose–einstein condensate by directly minimizing the energy functional. **Journal of Computational Physics**, Elsevier, v. 187, n. 1, p. 230–254, 2003.
- BAO, W.; WANG, H. A mass and magnetization conservative and energy-diminishing numerical method for computing ground state of spin-1 bose-einstein condensates. **SIAM Journal on Numerical Analysis**, SIAM, v. 45, n. 5, p. 2177–2200, 2007.
- BARDEEN, J.; BRATTAIN, W. H. The transistor, a semi-conductor triode. **Phys. Rev.**, American Physical Society, v. 74, p. 230–231, Jul 1948. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.74.230>>.
- BARROS, V. P. de. **Perturbações temporais em condensado de Bose-Einstein diluídos e vórtice em condensado denso**. Tese (Doutorado) — Universidade de São Paulo. Instituto de Física, 2007.
- BOGOLUBOY, N. On the theory of superfluidity. **Journal of Physics**, XI, n. 1, p. 23–32, 1847.
- BÖHI, P.; RIEDEL, M. F.; HOFFFROGGE, J.; REICHEL, J.; HÄNSCH, T. W.; TREUTLEIN, P. Coherent manipulation of bose–einstein condensates with state- dependent microwave potentials on an atom chip. **Nature Physics**, Nature Publishing Group, v. 5, n. 8, p. 592–597, 2009.

BOSE, S. N. Plancks gesetz und lichtquantenhypothese. **Zeitschrift für Physik**, v. 26, n. 1, p. 178–181, 1924. ISSN 0044-3328. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1007/BF01327326>>.

CHU, S. Nobel lecture: The manipulation of neutral particles. **Rev. Mod. Phys.**, American Physical Society, v. 70, p. 685–706, Jul 1998. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.70.685>>.

COHEN-TANNOUDJI, C. N. Nobel lecture: Manipulating atoms with photons. **Rev. Mod. Phys.**, American Physical Society, v. 70, p. 707–719, Jul 1998. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.70.707>>.

CORNELL, E. A.; WIEMAN, C. E. Nobel lecture: Bose-einstein condensation in a dilute gas, the first 70 years and some recent experiments. **Rev. Mod. Phys.**, American Physical Society, v. 74, p. 875–893, Aug 2002. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.74.875>>.

DALFOVO, F.; STRINGARI, S. Bosons in anisotropic traps: Ground state and vortices. **Physical Review A**, APS, v. 53, n. 4, p. 2477, 1996.

DAVIS, K. B.; MEWES, M. O.; ANDREWS, M. R.; DRUTEN, N. J. van; DURFEE, D. S.; KURN, D. M.; KETTERLE, W. Bose-einstein condensation in a gas of sodium atoms. **Phys. Rev. Lett.**, American Physical Society, v. 75, p. 3969–3973, Nov 1995. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.75.3969>>.

DEUTSCH, D. Quantum theory as a universal physical theory. **International Journal of Theoretical Physics**, Springer, v. 24, n. 1, p. 1–41, 1985.

DEVRIES, P. L. **A First Course in Computational Physics**. 1st. ed. New York, NY, USA: John Wiley & Sons, Inc., 1993. ISBN 0471548693.

EIBL, M.; KIESEL, N.; BOURENNANE, M.; KURTSIEFER, C.; WEINFURTER, H. Experimental realization of a three-qubit entangled w state. **Physical review letters**, APS, v. 92, n. 7, p. 077901, 2004.

EINSTEIN, A. Quantentheorie des einatomigen idealen gases. **Sitzungsber. Kgl. Preuss. Akad. Wiss.**, p. 261–267, 1924.

EINSTEIN, A. Quantentheorie des einatomigen idealen gases, 2. abhandlung. **Sitzungsber. Kgl. Preuss. Akad. Wiss.**, v. 18, p. 3–14, 1925.

EINSTEIN, A. Zur quantentheorie des idealen gases. **Sitzungsber. Kgl. Preuss. Akad. Wiss.**, p. 18–25, 1925.

FOOT, C. **Atomic physics**. Oxford University Press, 2005. (Oxford master series in physics). ISBN 9780198506966. Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=kXYpAQAAMAAJ>>.

GREINER, L. N. e. H. S. W. **Thermodynamics and Statistical Mechanics**. [S.l.]: Springer, 1994.

GREINER OLAF MANDEL, T. E. T. W. H. . I. B. M. Quantum phase transition from a superfluid to a mott insulator in a gas of ultracold atoms. **Nature**, 2001.

GROSS, E. P. Structure of a quantized vortex in boson systems. **Il Nuovo Cimento (1955-1965)**, v. 20, n. 3, p. 454–477, 1961. ISSN 1827-6121. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1007/BF02731494>>.

GROVER, L. K. Quantum mechanics helps in searching for a needle in a haystack. **Physical review letters**, APS, v. 79, n. 2, p. 325, 1997.

HALL, D.; MATTHEWS, M.; ENSHER, J.; WIEMAN, C.; CORNELL, E. Dynamics of component separation in a binary mixture of bose-einstein condensates. **Physical Review Letters**, APS, v. 81, n. 8, p. 1539, 1998.

HALL, D.; MATTHEWS, M.; WIEMAN, C.; CORNELL, E. Measurements of relative phase in two-component bose-einstein condensates. **Physical Review Letters**, APS, v. 81, n. 8, p. 1543, 1998.

HÄNSEL, W.; HOMMELHOFF, P.; HÄNSCH, T.; REICHEL, J. Bose–einstein condensation on a microelectronic chip. **Nature**, Nature Publishing Group, v. 413, n. 6855, p. 498–501, 2001.

JOSEPHSON, B. Possible new effects in superconductive tunnelling. **Physics Letters**, v. 1, n. 7, p. 251 – 253, 1962. ISSN 0031-9163. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0031916362913690>>.

KETTERLE, W. Nobel lecture: When atoms behave as waves: Bose-einstein condensation and the atom laser. **Rev. Mod. Phys.**, American Physical Society, v. 74, p. 1131–1151, Nov 2002. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.74.1131>>.

LEBOEUF, P.; PAVLOFF, N. Bose-einstein beams: Coherent propagation through a guide. **Physical Review A**, APS, v. 64, n. 3, p. 033602, 2001.

LUIZ, F. de S. **Implementação de portas lógicas quânticas em condensado de Bose-Einstein acoplados**. Tese (Doutorado) — Universidade Federal de Uberlândia., 2010.

MAJER, J.; CHOW, J.; GAMBETTA, J.; KOCH, J.; JOHNSON, B.; SCHREIER, J.; FRUNZIO, L.; SCHUSTER, D.; HOUCK, A.; WALLRAFF, A. *et al.* Coupling superconducting qubits via a cavity bus. **Nature**, Nature Publishing Group, v. 449, n. 7161, p. 443–447, 2007.

MENDONÇA, P. E. M. F. de. **Estudo de portas lógicas quânticas de dois qubits definidas em um subespaço livre de decoerência para um sistema de quatro qubits acoplados ao resto do universo por um agente degenerado**. Tese (Doutorado) — Universidade Federal de São Paulo. Instituto de Física de São Carlos., 2004.

MOORE, G. E. Cramming more components onto integrated circuits, reprinted from electronics, volume 38, number 8, april 19, 1965, pp. 114 ff. **IEEE Solid-State Circuits Newsletter**, v. 3, n. 20, p. 33–35, 2006.

MUNIZ, S. R. **Desenvolvimento Experimental para Produção e Estudo de Gases Quânticos: Condensação de Bose-Einstein**. Tese (Doutorado) — Instituto de Física de São Carlos da Universidade de São Paulo, 2002.

NIELSEN, I. L. C. M. A. **Computação Quântica e Informação Quântica**. [S.l.: s.n.], 2005.

PAIS, A. **Subtle is the Lord**. [S.l.]: Oxford University Press, EUA, 1982.

PETHICK, C.; SMITH, H. **Bose-Einstein Condensation in Dilute Gases**. [S.l.]: Cambridge University Press, 2001.

PHILLIPS, W. D. Nobel lecture: Laser cooling and trapping of neutral atoms. **Rev. Mod. Phys.**, American Physical Society, v. 70, p. 721–741, Jul 1998. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.70.721>>.

PITAEVSKII, L. Vortex lines in an imperfect bose gas. **Sov. Phys. JETP**, v. 13, n. 2, p. 451–454, 1961.

PITAEVSKII, L.; STRINGARI, S. **Bose-Einstein Condensation**. [S.l.]: Clarendon Press, 2003. (International Series of Monographs on Physics). ISBN 9780198507192.

PITAEVSKII, S. S. L. Bose-einstein condensation. **Oxford University Press, New York**, 2003.

QUINNEY, D. **An introduction to the numerical solution of differential equations**. [S.l.]: Research Studies Press, 1985. (Electronic & electrical engineering research studies: Applied and engineering mathematics series).

ROOS, C. F.; RIEBE, M.; HÄFFNER, H.; ÄNSEL, W. H.; BENHELM, J.; LANCASTER, G. P.; BECHER, C.; SCHMIDT-KALER, F.; BLATT, R. Control and measurement of three-qubit entangled states. **science**, American Association for the Advancement of Science, v. 304, n. 5676, p. 1478–1480, 2004.

SALINAS, S. R. de A. **Introdução à Física Estatística**. [S.l.]: Ed. USP, 1997.

SHOR, P. W. Algorithms for quantum computation: Discrete logarithms and factoring. In: IEEE. **Foundations of Computer Science, 1994 Proceedings., 35th Annual Symposium on**. [S.l.], 1994. p. 124–134.

TOBOCHNIK, H. G. e J. **Statistical and Thermal Physics**. [S.l.]: Princeton University Press, 2010.

TRAUZETTEL, B.; BULAEV, D. V.; LOSS, D.; BURKARD, G. Spin qubits in graphene quantum dots. **Nature Physics**, Nature Publishing Group, v. 3, n. 3, p. 192–196, 2007.

TURING, A. M. On computable numbers, with an application to the entscheidungsproblem. **J. of Math**, v. 58, n. 345-363, p. 5, 1936.

## APÊNDICE A - ALGORITMOS DO MATLAB

Codificação das estruturas método e geometria.

Algoritmo 6.1 – codificação das estruturas método e geometria

```
Computation = 'Ground';
Ncomponents = 1;
Type = 'BESP';
Deltat = 1e-2;
Stop_time = [];
Stop_crit = {'MaxNorm',1e-5};
Method = Method_Var2d(Computation, Ncomponents, Type, Deltat, Stop_time, Stop_crit
    ,200);
xmin = -10;
xmax = 10;
ymin = -10;
ymax = 10;
Nx = 2^8+1;
Ny = 2^8+1;
Geometry2D = Geometry2D_Var2d(xmin,xmax,ymin,ymax,Nx,Ny);
```

Função do acoplamento cúbico.

Algoritmo 6.2 – Função acoplamento cúbico

```
function [CoupledCubicNonlinearity] = Coupled_Cubic2d(Beta)

CoupledCubicNonlinearity = cell(2);
CoupledCubicNonlinearity{1,1} = @(Phi,X,Y)Beta(1,1)*abs(Phi{1}).^2 + Beta(1,2)*abs(
    Phi{2}).^2;
CoupledCubicNonlinearity{2,2} = @(Phi,X,Y)Beta(2,2)*abs(Phi{2}).^2 + Beta(2,1)*abs(
    Phi{1}).^2;
CoupledCubicNonlinearity{1,2} = @(Phi,X,Y) 0;
CoupledCubicNonlinearity{2,1} = @(Phi,X,Y) 0;
```

Função da energia do acoplamento cúbico.

Algoritmo 6.3 – Função da energia do acoplamento cúbico

```
function [CoupledCubicEnergy] = Coupled_Cubic_energy2d(Beta)

CoupledCubicEnergy = cell(2);
```

```

CoupledCubicEnergy{1,1} = @(Phi,X,Y)(1/2)*Beta(1,1)*abs(Phi{1}).^2+(1/2)*Beta(1,2)*
    abs(Phi{2}).^2;
CoupledCubicEnergy{2,2} = @(Phi,X,Y)(1/2)*Beta(2,2)*abs(Phi{2}).^2+abs((1/2)*Beta
    (2,1)*abs(Phi{1}).^2).*exp(1i*pi);
CoupledCubicEnergy{1,2} = @(Phi,X,Y) 0;
CoupledCubicEnergy{2,1} = @(Phi,X,Y) 0;

```