

Isabel Friedmann Flöther

**A equação de Schrödinger não-linear com
hopping a segundos vizinhos e desordem de
Aubry-André**

Porto Alegre, Brasil

2018

Isabel Friedmann Flöther

A equação de Schrödinger não-linear com hopping a segundos vizinhos e desordem de Aubry-André

Trabalho de conclusão de curso apresentado como requisito parcial para a obtenção do título de Bacharel em Física pelo Instituto de Física da Universidade Federal do Rio Grande do Sul

Universidade Federal do Rio Grande do Sul – UFRGS

Instituto de Física

Orientador: Prof. Dr. Gerardo G. Martínez

Porto Alegre, Brasil

2018

Isabel Friedmann Flöther

A equação de Schrödinger não-linear com hopping a segundos vizinhos e desordem de Aubry-André

Trabalho de conclusão de curso apresentado como requisito parcial para a obtenção do título de Bacharel em Física pelo Instituto de Física da Universidade Federal do Rio Grande do Sul

Trabalho aprovado. Porto Alegre, Brasil, 29 de novembro de 2018:

Prof. Dr. Gerardo G. Martínez
Orientador

Profa. Dra. Ângela Foerster

Profa. Dra. Sandra Denise Prado

Porto Alegre, Brasil
2018

Para meu pai e meu avô, por me mostrarem a alegria da descoberta.

Agradecimentos

Muitas pessoas me ajudaram ao longo de minha trajetória acadêmica, tantas que não posso listar todas aqui. Em primeiro lugar, gostaria de agradecer à minha família pelo apoio incondicional e por todo o carinho, além do incentivo que deram desde pequena ao meu interesse pela ciência. Eu não teria chegado aqui sem vocês.

Obrigada também aos amigos que fiz ao longo da faculdade, minha família fora de casa. Esses quatro anos foram muito mais felizes e divertidos pela presença de vocês.

Meus amigos do colégio me deram suporte, mesmo depois de escolhermos caminhos diferentes. Em especial, quero agradecer à Isabella por sempre estar do meu lado nas horas difíceis e pela sua compreensão.

Agradeço ao Marcos por sua ajuda inestimável na execução desse projeto, especialmente com a implementação dos algoritmos. Sua paciência ao ensinar e motivação foram essenciais.

Por fim, obrigada a meu orientador Gerardo, por seu entusiasmo contagiante, e por tudo que me ensinou, tanto sobre física quanto sobre a vida.

Resumo

O estudo da evolução temporal de sistemas desordenados autointeragentes nos permite descobrir e descrever uma variedade de fenômenos interessantes de localização em condensados de Bose-Einstein. Neste trabalho, utilizamos a equação de Schrödinger não-linear para modelar a evolução de diferentes distribuições de probabilidade iniciais de um sistema de bósons interagentes em uma rede discreta quando sujeitos a vários graus de desordem aperiódica, não-linearidade e campos elétricos externos. O efeito desses parâmetros foi estudado de forma a descrever os limites de localização do sistema. Os resultados foram então comparados com a literatura existente, primeiro para verificar sua precisão e depois para modelar sistemas relacionados. Atenção especial foi dada às oscilações de Bloch causadas por um potencial elétrico inclinado, e à sua fragmentação quando submetidas a desordem. Expandimos também nossa análise para incluir um termo de hopping a segundos vizinhos, que produz modulação da amplitude de tais oscilações. Esse efeito foi estudado sozinho e em conjunto com os parâmetros já discutidos.

Palavras-chaves: Equação de Schrödinger não-linear. Condensação de Bose-Einstein. Desordem aperiódica. Hopping a 2^{os} vizinhos.

Abstract

The study of time evolution of disordered, self-interacting systems allows us to uncover and describe a variety of interesting localization phenomena in Bose-Einstein condensates. In this work we use a non-linear Schrödinger equation to model the evolution of different initial probability distributions of a system of interacting bosons in a discrete lattice when subjected to various degrees of aperiodic disorder, non-linearity and external electric fields. The effect of those parameters was studied in order to describe the localization thresholds of the system. The results produced were then compared to previous literature, first to verify their accuracy and later to model related phenomena. Special attention was given to Bloch oscillations caused by a tilted electric potential, and to their fragmentation when encountering disorder. We have also expanded our analysis to include next-nearest neighbor hopping, which produces modulation of the amplitude of such oscillations. This effect was studied alone and in conjunction to the previously discussed parameters.

Key-words: Non-linear Schrödinger equation. Bose-Einstein condensation. Aperiodic disorder. Next-nearest neighbors hopping.

Lista de ilustrações

Figura 1 – Soluções livres da ESNL ao longo do tempo para condições iniciais delta (esquerda) e gaussiana (direita).	15
Figura 2 – Representação da rampa de potencial ao longo de uma rede de sítios (modelo tight-binding). Retirada de [1].	16
Figura 3 – Definições para os vetores auxiliares do método de diagonalização para matrizes pentadiagonais.	19
Figura 4 – Evolução temporal do condensado e de seu desvio quadrático médio com $\epsilon_0 = 1$ para uma gaussiana inicial.	22
Figura 5 – Evolução temporal do condensado e de seu desvio quadrático médio com $\epsilon_0 = 2$ para uma gaussiana inicial.	23
Figura 6 – Evolução temporal do condensado e de seu desvio quadrático médio com $\epsilon_0 = 3$ para uma gaussiana inicial.	23
Figura 7 – Evolução temporal do condensado e de seu desvio quadrático médio para a condição inicial delta com $\epsilon_0 = 2$	24
Figura 8 – Oscilações de Bloch para as condições iniciais delta (acima) e gaussiana (abaixo), com $F_0 = 0, 1$	25
Figura 9 – Evolução temporal e do INP para a condição inicial delta e $U = 1$	26
Figura 10 – Evolução temporal e do INP para a condição inicial delta e $U = 3$	27
Figura 11 – Evolução temporal e do INP para a condição inicial delta e $U = 4$	27
Figura 12 – Evolução temporal e do INP para a condição inicial gaussiana e $U = 10$	27
Figura 13 – Oscilações de Bloch fragmentadas com condição inicial gaussiana, $F_0 = 0, 1$ e $\epsilon_0 = 0, 3$ (esquerda) ou $\epsilon_0 = 0, 6$ (direita).	28
Figura 14 – Oscilações de Bloch fragmentadas com condição inicial delta, $F_0 = 0, 1$ e $\epsilon_0 = 0, 3$ (acima) ou $\epsilon_0 = 0, 6$ (abaixo).	29
Figura 15 – Evolução da gaussiana inicial para $U = 2$ e $\epsilon_0 = 0, 3$	30
Figura 16 – Evolução da gaussiana inicial para $U = 2$ e $\epsilon_0 = 2$	31
Figura 17 – Evolução da gaussiana inicial para $U = 2$ e $\epsilon_0 = 4$	31
Figura 18 – Evolução da gaussiana inicial para $U = 5$ e $\epsilon_0 = 1$	32
Figura 19 – Evolução da delta inicial para $U = 2 = \epsilon_0$	32
Figura 20 – Evolução da gaussiana para $F_0 = 0, 1$ e $U = 1$ (acima) ou $U = 3$ (abaixo).	33
Figura 21 – Evolução da delta para $U = 3$ e $F_0 = 0, 1$	34
Figura 22 – Modulação das oscilações de Bloch causadas por um campo com $F_0 = 0, 1$ para $\lambda = 0$, $\lambda = 0, 3$ e $\lambda = 1$ e condição inicial gaussiana.	36
Figura 23 – Oscilações de Bloch fragmentadas para $F_0 = 0, 1$ e $\epsilon_0 = 0, 5$, sem hopping a segundos vizinhos, para a gaussiana.	37

Figura 24 – Oscilações de Bloch fragmentadas para $F_0 = 0,1$ e $\epsilon_0 = 0,5$, com hopping a segundos vizinhos de intensidade $\lambda = 0,3$, para a gaussiana.	38
Figura 25 – Evolução da gaussiana para $F_0 = 0,1$ e $U = 1$, sem hopping a segundos vizinhos.	39
Figura 26 – Oscilações de Bloch para a gaussiana com não-linearidade para $F_0 = 0,1$ e $U = 1$, com hopping a segundos vizinhos de intensidade $\lambda = 0,3$	39

Lista de símbolos

ψ_i	Função de onda conjunta do condensado no sítio i da rede
t	Hopping
λ	Parâmetro de intensidade da interação a segundos vizinhos
U	Intensidade da autointeração
ϵ_i	Potencial de desordem do sítio i
F_i	Potencial elétrico aplicado
H	Operador hamiltoniano
Δt	Intervalo de tempo de integração
a	Distância entre sítios da rede

Sumário

	Introdução	11
1	EMBASAMENTO TEÓRICO	13
1.1	A equação de Schrödinger não-linear	13
1.2	Transporte balístico e difusivo	13
1.3	Soluções livres	14
1.4	O modelo de Aubry-André	15
1.5	Oscilações de Bloch	16
2	METODOLOGIA	17
2.1	O método de Crank-Nicolson	17
2.2	Algoritmos de diagonalização	19
2.2.1	Algoritmo de Thomas	19
2.2.2	Matrizes pentadiagonais	19
2.3	Parâmetros de localização	20
2.4	Aspectos práticos da implementação	20
3	RESULTADOS - HOPPING A PRIMEIROS VIZINHOS	22
3.1	Desordem	22
3.2	Campo elétrico	24
3.3	Autointeração	26
3.4	Efeitos conjuntos	28
3.4.1	Fragmentação de Bloch	28
3.4.2	Autointeração com desordem	30
3.4.3	Autointeração com campo elétrico	33
4	RESULTADOS - HOPPING A SEGUNDOS VIZINHOS	35
4.1	Modulação das oscilações de Bloch	35
4.2	Adição de desordem e não-linearidade	37
4.2.1	Desordem	37
4.2.2	Não-linearidade	38
	Conclusão	40
	REFERÊNCIAS	41
	APÊNDICE A – MÉTODO DE DIAGONALIZAÇÃO	43

Introdução

A condensação de Bose-Einstein é um fenômeno de natureza quântica teorizado inicialmente em 1924 por Bose e Einstein ([2],[3]), que verificaram que, em um gás de bósons abaixo de uma temperatura crítica, uma fração significativa das partículas se encontra no estado fundamental do sistema. Nesse caso, efeitos quânticos podem ser observados em escala macroscópica, o que permite a observação de diversas propriedades interessantes, como a superfluidez. Com a produção do primeiro gás condensado de bósons em 1995, esse se tornou um tema de destaque na comunidade científica ([4]).

O objetivo deste trabalho foi estudar a evolução temporal de um condensado de bósons sem spin ao longo de uma rede unidimensional. Para tanto, usamos métodos numéricos para integrar uma equação de Schrödinger não-linear (ESNL) discreta incluindo termos de desordem e campo elétrico. A ESNL é usada para modelar sistemas em diversas áreas incluindo, além do estudo de condensados de Bose-Einstein (BECs), problemas de biologia, estado sólido e ótica não-linear [5]. Para o nosso caso, ela permite incluir o efeito das interações entre as partículas do BEC em nossa análise, que é essencial para uma descrição precisa das propriedades do nosso sistema. Um exemplo de sistema que apresenta autointeração é luz laser em guias de onda, caso em que a alta intensidade do laser permite que os fótons interajam entre si, produzindo localização do feixe para altas potências ([6]).

Além de observar o comportamento geral da função de onda do condensado, buscamos em especial descrever como a presença dessa autointeração, de uma desordem quasi-periódica do tipo Aubry-André e de um campo elétrico aplicado mudam as características do transporte do BEC ao longo da rede, causando transições de fase entre estados localizados e delocalizados. A desordem causa localização de Anderson, um efeito que pode ser verificado em uma grande variedade de sistemas físicos, incluindo sistemas quânticos caóticos, ondas de matéria em potenciais óticos, luz em meios óticos aleatórios e som em meios elásticos. O modelo de Aubry-André para desordem possui uma transição conhecida [7], assim como o termo não-linear ([8],[9]). Buscamos estudar essas transições de fase com a aplicação conjunta dos vários parâmetros descritos acima.

Em experimentos envolvendo sistemas como o que estamos estudando, a interação entre sítios da rede não diretamente adjacentes, apesar de pequena, tem efeitos significativos sobre a evolução da função de onda. Além disso, em guias de onda, as equações de Maxwell apresentam naturalmente um termo de interação a segundos vizinhos. Por essas razões, a inclusão de um termo de hopping a segundos vizinhos é de grande interesse para obtermos um modelo mais completo ([10],[11]). Apesar de os efeitos desse hopping sobre oscilações causadas pelo campo elétrico externo e sobre sistemas desordenados já terem

sido investigados, um estudo do efeito simultâneo desses e de um termo de autointeração não havia sido feito. Foi nisso que focamos nossa análise.

O primeiro capítulo apresenta os conceitos teóricos nos quais o modelo escolhido se baseia. Nele são discutidos os termos que compõem o hamiltoniano utilizado, além de seus significados físicos. É feita uma introdução aos transportes balístico e difusivo e à importância da transição de um para outro para o comportamento do condensado. Discutem-se também casos particulares da ESNL para os quais existem soluções analíticas [7].

No segundo capítulo, estão detalhados os métodos numéricos utilizados para a realização das simulações, incluindo os algoritmos utilizados para integração e diagonalização do sistema de equações resultante nos casos com hopping a 1^{os} e 2^{os} vizinhos (cada um usa um algoritmo de diagonalização diferente para otimização do tempo de execução). Aqui é também descrito como foi feita a análise dos resultados no que toca à localização e transporte do condensado, explicando que parâmetros foram calculados para quantificar essas características e definir limites de transição.

O terceiro capítulo apresenta os resultados encontrados. A parte inicial inclui apenas interações a 1^{os} vizinhos e foca na reprodução de resultados encontrados em [1] e [12]. São estudados primeiro os efeitos que a desordem, a autointeração e o campo elétrico causam isoladamente no condensado. Depois, verificamos como eles agem em conjunto, e como isso afeta a evolução.

O capítulo 4 introduz o hopping a 2^{os} vizinhos e discute alguns efeitos interessantes relacionados a ele publicados recentemente ([10], [11]). Depois, extendemos esses resultados ao incluir efeitos não-lineares e de desordem, algo que não havia sido feito anteriormente.

1 Embasamento teórico

1.1 A equação de Schrödinger não-linear

A equação de Schrödinger não linear unidimensional dependente do tempo que utilizaremos é:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = H\Psi(x, t) \quad (1.1)$$

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + F_0 x + \epsilon_0 \cos(2\pi\beta x) + U|\Psi(x, t)|^2 \quad (1.2)$$

Ela pode ser discretizada ([13]) para permitir a integração numérica ao longo da rede, considerando uma aproximação de tight-binding com termos de 1^{os} e 2^{os} vizinhos. Usando t para o hopping, encontramos:

$$i\hbar \frac{\partial \psi_i}{\partial t} = -t(\psi_{i+1} + \psi_{i-1}) - \lambda t(\psi_{i+2} + \psi_{i-2}) + (F_0 i + \epsilon_0 \cos(2\pi\beta i) + U|\psi_i|^2)\psi_i \quad (1.3)$$

O fator λ dá a intensidade do hopping a segundos vizinhos. Por simplificação, ao longo da implementação numérica usamos a normalização $\hbar = 1$ com $t = 1$, e tratamos F_0 , ϵ_0 e U em unidades do hopping.

Além do termo cinético do hamiltoniano, temos três termos: F_0 é um potencial elétrico em forma de rampa, correspondendo a um campo elétrico aplicado constante; $\epsilon_0 \cos(2\pi\beta i)$ é uma desordem do tipo Aubry-André, que quando aplicada a uma rede se torna aperiódica ($\beta = (1 + \sqrt{5})/2$ é um número irracional); e $U|\psi_i|^2$ é a não-linearidade. Essa última é o que torna a equação não integrável analiticamente.

A não-linearidade introduz um potencial relacionado à densidade de probabilidade em cada ponto. No contexto de um condensado de Bose-Einstein, ela pode representar uma interação entre as partículas que formam o BEC, que pode ser atrativa ou repulsiva, dependendo do sinal de U . Em geral, em sistemas experimentais como gases diluídos de átomos bosônicos, essa interação é repulsiva. Em ambos os casos, pode ocorrer localização da função de onda conjunta do condensado devida à autointeração. Para o caso repulsivo, em particular, isso se dá para $U > 3,5$, aproximadamente.

1.2 Transporte balístico e difusivo

Os termos transporte balístico e difusivo vêm da física do estado sólido e geralmente são aplicados ao movimento de elétrons dentro de um material. Nesse caso, o movimento

balístico ocorre quando as dimensões do meio são menores que o livre caminho médio, e os elétrons praticamente não sofrem colisões, se comportando como partículas livres. No caso difusivo, colisões com o meio limitam o espalhamento.

Uma das principais diferenças entre esses dois regimes é o comportamento do desvio quadrático médio (DQM) σ da função de onda ao longo do tempo. No caso balístico, temos $\sigma \propto t^2$, enquanto o difusivo apresenta a conhecida relação de difusão $\sigma \propto t$. Podemos usar essas características para verificar em qual situação o condensado se enquadra para cada conjunto de parâmetros F_0 , ϵ_0 e U .

No nosso sistema, o regime de transporte está relacionado com o grau de interação do condensado com o meio que compõe a rede e com sua dispersão ao longo desta ([14]). Para estudarmos efeitos de localização e delocalização, portanto, é importante tê-lo em mente. Por essa razão, o desvio quadrático médio é uma das quantidades cuja evolução é acompanhada ao longo das simulações, e é um dos critérios de localização utilizados.

1.3 Soluções livres

É possível encontrar soluções analíticas para o caso $F_0 = \epsilon_0 = U = 0$ se considerarmos uma ψ inicial em formato de delta ou gaussiana. Por essa razão, essas são as condições iniciais utilizadas em nossa análise, por tornar mais fácil a testagem do código e a determinação do erro numérico dos resultados. A dedução das expressões exatas se encontra em [1], no capítulo 2, e não será repetida aqui por brevidade. Para o caso delta, temos:

$$\psi_j(t) = J_{j-j_0}(-2t)e^{-ij\pi/2} \quad (1.4)$$

Em que j_0 é o sítio central da rede e J_{j-j_0} a função de Bessel de primeira espécie da ordem correspondente. O caso de uma gaussiana normalizada da forma $\psi_j(0) = C \exp(-j^2 a^2 / 4\sigma^2)$ (com a sendo a distância entre sítios e σ o desvio padrão) resulta em:

$$\psi_j(t) = \frac{C\sigma}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ijx} \exp(2i \cos(x) t) \exp(-x^2 \sigma^2 / a^2) dx \quad (1.5)$$

Quando plotadas, essas soluções mostram que, como esperado, o condensado simplesmente se difunde ao longo da rede. Podemos observar esse comportamento na figura 1. Esse espalhamento é do tipo balístico, uma vez que não há termo interação entre o BEC e a rede. No caso da delta, ainda há a formação de dois sólitons (ondas solitárias que mantêm sua forma e velocidade de propagação) nas bordas do pacote de onda ([15],[16]).

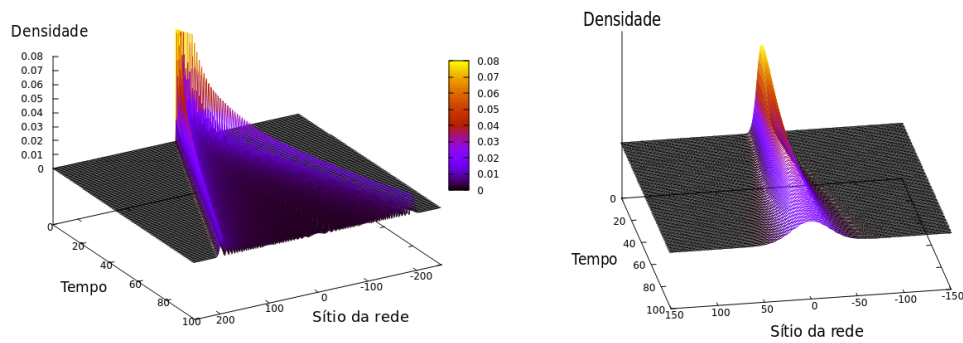


Figura 1 – Soluções livres da ESNL ao longo do tempo para condições iniciais delta (esquerda) e gaussiana (direita).

1.4 O modelo de Aubry-André

Em sistemas reais, é impossível garantir a perfeita uniformidade dos materiais utilizados. Portanto, a desordem é um fator importante a se considerar na modelagem de alguns fenômenos. A localização, em especial, é grandemente afetada por irregularidades na rede.

Em 1958, Anderson sugeriu que a presença de desordem (impurezas ou defeitos, por exemplo) poderia afetar a localização de elétrons em sistemas semicondutores [17]. Usando um modelo aleatório para a desordem, foi mostrado que havia os pacotes de onda localizavam para qualquer grau de desordem aplicado. Podemos visualizar esse efeito imaginando que o potencial ao longo da rede forma poços que confinam os elétrons a certos canais, de forma que sistemas que inicialmente estavam localizados continuavam dessa forma. Esse comportamento, denominado localização de Anderson, foi verificado em diversas áreas, incluindo em guias de ondas óticas e em condensados.

O potencial de Aubry-André tem algumas peculiaridades que modificam o limite de localização. Ele é dado por um cosseno aperiódico na rede, sendo uma desordem determinística e não aleatória. Uma característica interessante é que este é um modelo auto-dual: o termo do potencial é dado por um cosseno tanto no espaço de posição quanto no de momento, afora uma constante multiplicativa que depende da intensidade da desordem e do hopping.

O potencial é perfeitamente simétrico quando $\epsilon_0 = 2$ (em unidades do hopping). Esse valor marca o limite para uma transição de fase do sistema: para $\epsilon_0 < 2$ temos todos os estados estendidos, enquanto para $\epsilon_0 > 2$ a função de onda localiza no espaço de posição. O contrário ocorre no espaço de momento. Apesar do mesmo mecanismo (localização de Anderson) estar por trás dessa transição, o modelo de Aubry-André se diferencia do de Anderson por permitir estados delocalizados mesmo com a presença de desordem. Um dos

objetivos do nosso estudo foi determinar se a adição de outras interações modifica esse limiar de transição.

1.5 Oscilações de Bloch

Uma partícula carregada em uma rede unidimensional com potencial periódico, quando submetida a um campo elétrico externo (representado aqui por um potencial linear inclinado, que foi esquematizado na figura 2), realiza oscilações com período conhecido ([1],[18]). Isso ocorre devido à simetria translacional entre os sítios, que diferem apenas por uma variação de energia ΔE . O período T_B é dado (em nossas unidades) por:

$$T_B = \frac{2\pi}{F_0 a} \quad (1.6)$$

Em que a é a distância entre sítios e F_0 é a intensidade do campo. Esse período é válido para qualquer condição inicial. O formato específico da oscilação, entretanto, é altamente dependente de $\psi_i(t=0)$. Como veremos no capítulo 3, a delta e a gaussiana se comportam de formas muito diferentes quando submetidas a campos externos.

As oscilações de Bloch causam uma localização imediata da função de onda. Entretanto, o comportamento descrito acima só é válido em redes com potencial periódico. Se adicionarmos desordem ou autointeração, a simetria de translação é quebrada. Estudaremos mais adiante como isso afeta a evolução do sistema. A desordem de Aubry-André, que é quasi-periódica, é de especial interesse.

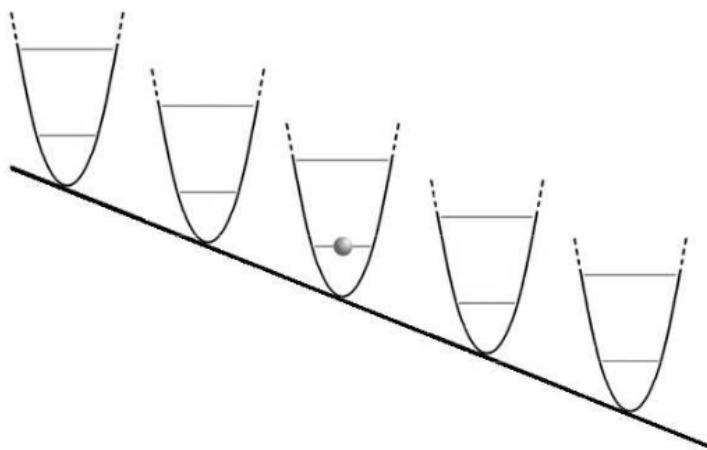


Figura 2 – Representação da rampa de potencial ao longo de uma rede de sítios (modelo tight-binding). Retirada de [1].

2 Metodologia

2.1 O método de Crank-Nicolson

A equação que estamos tentando integrar numericamente, em unidades de $\hbar = 1$ com o hopping sendo $t = 1$, é dada por:

$$i \frac{\partial \Psi(t)}{\partial t} = H \Psi(t) \quad (2.1)$$

Podemos discretizar $\Psi(t)$ ao longo do tempo e do espaço denominando ψ_i^n o valor da função de onda no sítio i da rede após n passos de integração. O hamiltoniano tight-binding do sistema é dado a cada instante por um conjunto de equações diferenciais:

$$i \frac{\partial \psi_i^n}{\partial t} = -(\psi_{i+1}^n + \psi_{i-1}^n) - \lambda (\psi_{i+2}^n + \psi_{i-2}^n) + V_i^n \psi_i^n \quad (2.2)$$

$$V_i^n = F_0 i + \epsilon_0 \cos(2\pi\beta i) + U |\psi_i^n|^2 \quad (2.3)$$

Isso significa que, na forma matricial, o hamiltoniano discretizado depende do tempo e é da forma:

$$H^n = \begin{bmatrix} V_1^n & -1 & -\lambda & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & 0 & 0 \\ -1 & V_2^n & -1 & -\lambda & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & 0 \\ -\lambda & -1 & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & -\lambda & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & -\lambda & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & -1 & -\lambda \\ 0 & \cdot & \cdot & \cdot & 0 & -\lambda & -1 & V_{N-1}^n & -1 \\ 0 & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & 0 & -\lambda & -1 & V_N^n \end{bmatrix} \quad (2.4)$$

Em que λ é a intensidade da interação a segundos vizinhos, V_i é o potencial efetivo no sítio i e N é o total de sítios da rede. Aqui entra a condição de contorno que escolhemos: nossa rede é aberta, então os sítios das pontas só interagem com ela por um lado. Por essa razão, temos que escolher um número de sítios tal que a função de onda não atinja a borda ao longo do período total de integração. Caso isso ocorresse, haveria reflexão da função de onda que interferiria no resultado.

Precisamos agora encontrar uma expressão para a derivada temporal numérica. Sabe-se que para deslocamentos no tempo Δt pequenos, o operador evolução temporal pode ser aproximado da seguinte forma, considerando Ψ^n um vetor formado pelos ψ_i^n de cada sítio:

$$\Psi^{n+1} = (I - i\Delta t H^n)\Psi^n \quad (2.5)$$

Essa forma é a explícita no tempo. Se assumirmos que $H^n \approx H^{n+1}$ (algo razoável apenas para Δt pequeno), podemos ainda escrever a forma implícita, que corresponde a partir de Ψ^{n+1} e fazer uma transformação para trás no tempo.

$$\Psi^{n+1} = (I + i\Delta t H^n)^{-1}\Psi^n \quad (2.6)$$

O método de Crank-Nicolson para integração numérica de equações diferenciais consiste em usar uma combinação das expressões explícita e implícita para melhorar a precisão do resultado [19]. Ele dá a seguinte fórmula para a evolução temporal da função de onda:

$$\Psi^{n+1} = (I + i\Delta t H^n/2)^{-1}(I - i\Delta t H^n/2)\Psi^n \quad (2.7)$$

Ela pode ser ainda rearranjada para facilitar a implementação do método:

$$\Psi^{n+1} = (I + i\Delta t H^n/2)^{-1}(2I - (I + i\Delta t H^n/2))\Psi^n \quad (2.8)$$

$$= (2(I + i\Delta t H^n/2)^{-1} - I)\Psi^n = Q^{-1}\Psi^n - \Psi^n \quad (2.9)$$

$$Q = \frac{1}{2} \left[I + \frac{i\Delta t H^n}{2} \right] \quad (2.10)$$

Portanto, para integrar a ESNL no tempo, temos que resolver uma equação matricial para encontrar χ tal que:

$$Q\chi = \Psi^n \quad (2.11)$$

$$\Psi^{n+1} = \chi - \Psi^n \quad (2.12)$$

Para tanto, temos que diagonalizar a matriz Q . Existem diversos métodos de diagonalização exata disponíveis. Vamos tirar proveito do fato de H^n (e, por consequência, Q) ter elementos não nulos apenas nas diagonais centrais para otimizar o tempo de cálculo.

2.2 Algoritmos de diagonalização

2.2.1 Algoritmo de Thomas

Para o caso com $\lambda = 0$ (hopping apenas com vizinhos diretos), a matriz Q é tridiagonal, ou seja, apenas a diagonal central e as duas adjacentes a ela contêm elementos não nulos. O algoritmo mais eficiente para diagonalização exata de matrizes desse tipo é o algoritmo de Thomas [19]. Ele envolve uma sequência de eliminações e substituições.

Assumindo um problema do tipo $Ax = b$, podemos denotar α_i , β_i e γ_i ($i = 1, \dots, N$) os elementos das diagonais inferior, central e superior, respectivamente. A primeira "passada" do algoritmo modifica os β_i , partindo de $i = 2$ e $\beta'_1 = \beta_1$.

$$\beta'_i = \beta_i - \frac{\alpha_{i-1}\gamma_{i-1}}{\beta_{i-1}} \quad (2.13)$$

A segunda passada então utiliza a matriz modificada para calcular o vetor solução x , partindo de $i = N - 1$ e usando como valor inicial $x_N = b_N/\beta'_N$.

$$x_i = \frac{b_i - \gamma_i x_{i+1}}{\beta'_i} \quad (2.14)$$

2.2.2 Matrizes pentadiagonais

A diagonalização de matrizes pentadiagonais é significativamente mais complexa que a de tridiagonais. O algoritmo que escolhemos é o apresentado por [20], que foi o mais eficiente em termos de tempo que encontramos. A ideia geral é a mesma do algoritmo de Thomas: efetuar substituições em sequência até isolarmos a solução.

De forma similar ao que foi feito anteriormente, definimos cinco vetores que representam as diagonais de Q . Estes são denotados e , c , d , a e b , indo da diagonal inferior até a superior. Definimos também vetores auxiliares μ , α , β , γ e z , como visto na figura 3.

$$\alpha_i = \begin{cases} \frac{a_1}{\mu_1} & i = 1 \\ \frac{a_i - \beta_{i-1}\gamma_i}{\mu_i} & i = 2, 3, \dots, n-1, \end{cases}$$

$$\beta_i = \frac{b_i}{\mu_i}, \quad i = 2, 3, \dots, n-1, \quad \gamma_i = \begin{cases} c_2 & i = 2 \\ c_i - \alpha_{i-2}e_i & i = 3, 4, \dots, n, \end{cases}$$

$$z_i = \begin{cases} \frac{y_1}{\mu_1} & i = 1 \\ \frac{y_2 - z_1\gamma_2}{\mu_2} & i = 2 \\ \frac{y_i - z_{i-2}e_i - z_{i-1}\gamma_i}{\mu_i} & i = 3, 4, \dots, n, \end{cases} \quad \mu_i = \begin{cases} d_1 & i = 1 \\ d_2 - \alpha_1\gamma_2 & i = 2 \\ d_i - \beta_{i-2}e_i - \alpha_{i-1}\gamma_i & i = 3, 4, \dots, n. \end{cases}$$

Figura 3 – Definições para os vetores auxiliares do método de diagonalização para matrizes pentadiagonais.

O vetor solução pode então ser calculado a partir de uma eliminação "backwards", indo dos elementos de índice N até os iniciais. Os detalhes desse procedimento podem ser vistos no Apêndice, aonde se encontra o código que desenvolvemos em Python para a implementação desse método.

2.3 Parâmetros de localização

Além da própria evolução temporal, são calculadas algumas quantidades físicas que ajudam a melhor definir quando ocorrem as transições entre comportamento localizado e delocalizado, além de proverem informação sobre propriedades globais do sistema que não é facilmente retirada dos gráficos da evolução temporal da densidade de probabilidade. Esses parâmetros são:

1. Desvio quadrático médio (DQM): $\sigma^2(t) = \sum_i i^2 |\psi_i(t)|^2$
2. Entropia de Shannon: $S(t) = - \sum_i |\psi_i(t)|^2 \ln |\psi_i(t)|^2$
3. Inverso do número de participação: $1/P(t) = \sum_i |\psi_i(t)|^4$
4. Perfil do sítio central da rede: $|\psi(i_{central}, t)|^2$

O desvio quadrático médio, como discutido anteriormente, além de fornecer uma ideia geral sobre o espalhamento da função de onda, também permite identificar se o condensado se encontra em um regime de transporte balístico ou difusivo. Ele é, portanto, muito importante para nossa análise. A entropia de Shannon ([21]) é um tipo de entropia de informação, e pode ser vista como uma medida da uniformidade da função de onda. Ela tende a aumentar com o espalhamento de Ψ . O inverso do número de participação é uma medida do número de sítios contribuindo de fato para um dado estado [22]. Ele decresce rapidamente à medida em que Ψ se espalha. Por fim, o perfil do sítio central da rede (de onde o pacote de onda é lançado e geralmente o ponto de maior densidade inicial), além de mostrar o grau de localização do sistema, permite visualizar facilmente oscilações e seus períodos.

2.4 Aspectos práticos da implementação

Os métodos numéricos foram implementados em Python, e a biblioteca matplotlib foi usada para plotar os gráficos. Todas as simulações foram realizadas com um perfil inicial da função de onda na forma de delta ou de gaussiana, pois nestes casos existem soluções analíticas disponíveis para comparação. Estas soluções foram utilizadas para calcular o erro decorrente do método numérico. Verificou-se que esse erro é da ordem de 10^{-15} , e pode ser desprezado em nossa análise.

O valor escolhido para Δt foi de 0,0001; testes da conservação da norma mostraram que esse era o maior valor para o qual o método de Crank-Nicholson seria aplicável. A evolução foi simulada para um tempo total de 100 unidades, o que corresponde a 10^6 passos de integração. Desses, 100 foram armazenados e usados para a análise e os gráficos.

Foi utilizada uma rede de 401 sítios. Esse tamanho garante que a função de onda não atinja as pontas da rede (onde ela seria rebatida por conta das condições de contorno abertas).

No cálculo da entropia de Shannon, foram feitas aproximações. Isso foi necessário para evitar que o logaritmo divergisse cada vez que a densidade de probabilidade em um sítio fosse zero. Sítios com $|\psi_i|^2$ abaixo de um certo limite de tolerância tiveram suas contribuições descartadas.

Inicialmente, estudamos os efeitos de F_0 , ϵ_0 e U em isolamento, apenas para o hopping a primeiros vizinhos, buscando confirmar que o código produzia bons resultados a partir de comparações com resultados anteriores ([1], [12]). Depois, verificamos como se manifestavam os efeitos desses parâmetros quando aplicados em conjunto. A introdução do hopping a segundos vizinhos foi a última etapa deste trabalho, já que exigiu a implementação de um algoritmo de diagonalização mais complexo.

3 Resultados - Hopping a primeiros vizinhos

Neste capítulo, apresentamos os resultados encontrados para a evolução temporal da ESNL com hopping apenas a primeiros vizinhos. Primeiro descrevemos o efeito isolado de cada parâmetro ϵ_0 , F_0 e U ; depois, verificamos como eles agem em conjunto aos pares e como isso afeta a localização do sistema. Essa etapa do trabalho busca principalmente reproduzir os resultados de [1], e estudar melhor a fragmentação das oscilações de Bloch descritas em [18].

3.1 Desordem

Como discutido no capítulo 1, o modelo de Aubry-André que utilizamos tem uma transição de fase de delocalização para localização quando a intensidade da desordem é $\epsilon_0 = 2$. Podemos observar isso nas figuras 4, 5 e 6, em que vemos a evolução de um pacote de onda do tipo gaussiano antes, depois e no próprio ponto de transição, respectivamente.

Para $\epsilon_0 = 1$, vemos que o condensado se espalha pela rede praticamente da mesma forma que a solução livre, apenas com a formação adicional de cristas causadas pela irregularidade do potencial. O movimento está claramente no regime balístico, como podemos observar no gráfico do desvio quadrático médio ao longo do tempo na figura 4.

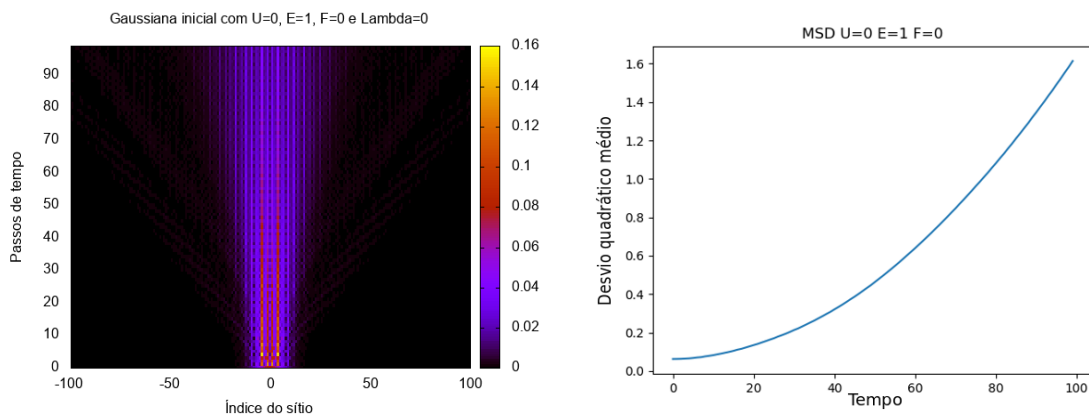


Figura 4 – Evolução temporal do condensado e de seu desvio quadrático médio com $\epsilon_0 = 1$ para uma gaussiana inicial.

No ponto de transição $\epsilon_0 = 2$, a função de onda do BEC quase não se espalha pela rede. O DQM cresce de forma irregular e muito mais lenta que antes, tendo um comportamento quase difusivo. Ainda há uma dispersão remanescente nas bordas do pacote de onda.

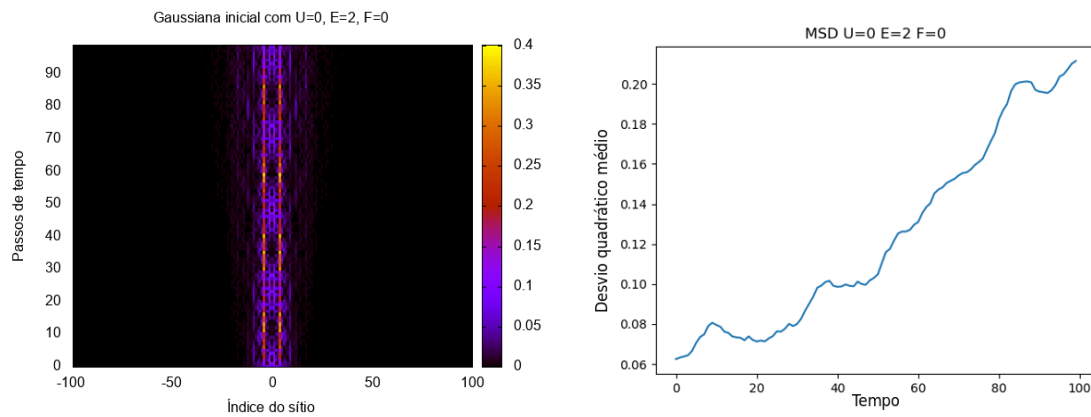


Figura 5 – Evolução temporal do condensado e de seu desvio quadrático médio com $\epsilon_0 = 2$ para uma gaussiana inicial.

Por fim, após a transição para a fase localizada, o condensado efetivamente não se difunde pela rede, permanecendo em torno de sua posição inicial. O DQM oscila em um intervalo pequeno de valores, mas não cresce além disso no tempo estudado. Em um sistema eletrônico como o a que Aubry e André inicialmente aplicaram seu modelo, isso marcaria a passagem de um sistema metálico para um isolante.

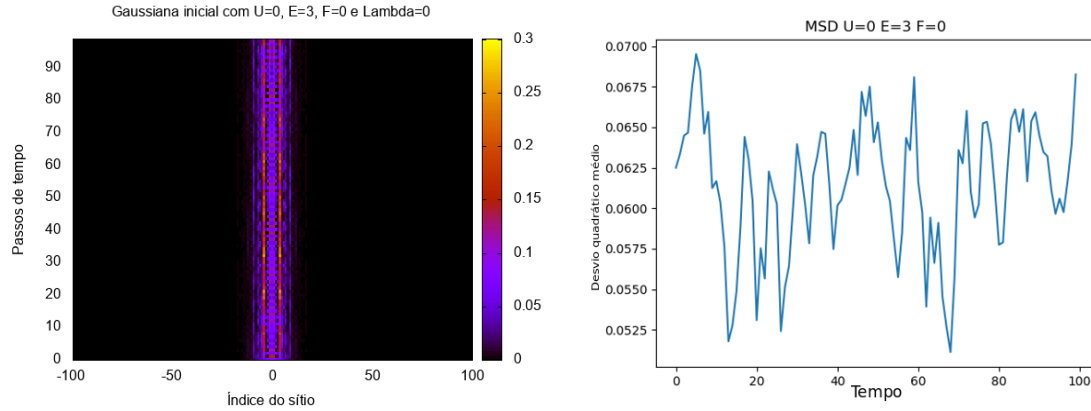


Figura 6 – Evolução temporal do condensado e de seu desvio quadrático médio com $\epsilon_0 = 3$ para uma gaussiana inicial.

O limite de localização do modelo de Aubry-André não depende das condições iniciais do sistema, como podemos ver na figura 7, da transição da delta. Isso não é verdade para todos os parâmetros que estamos estudando, como veremos a seguir.

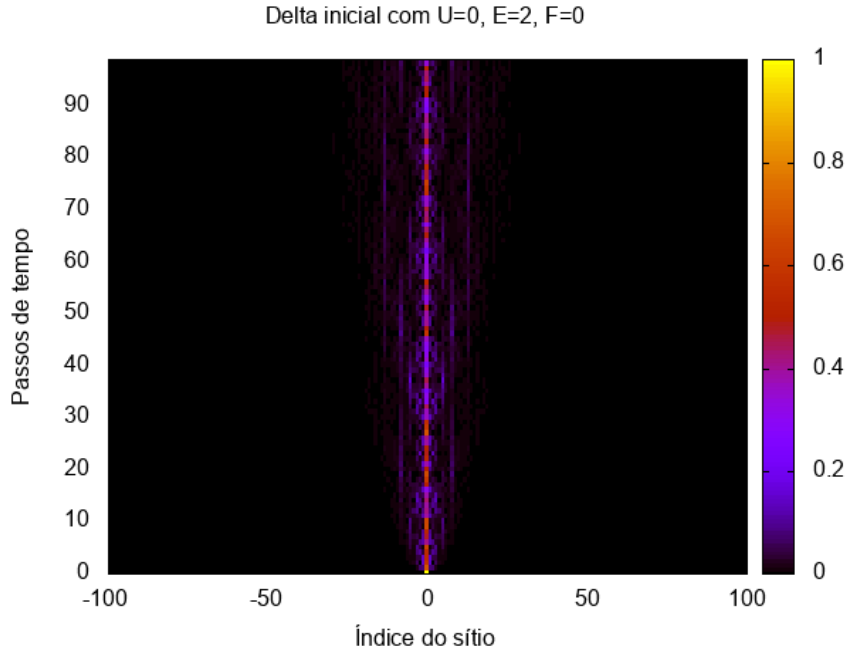


Figura 7 – Evolução temporal do condensado e de seu desvio quadrático médio para a condição inicial delta com $\epsilon_0 = 2$

3.2 Campo elétrico

Vimos anteriormente que a presença de um campo elétrico em forma de rampa sobre uma rede periódica faz com que a função de onda de um condensado carregado oscile com um período e uma amplitude conhecidos. Esse efeito é causado pela simetria translacional do potencial, que difere apenas por um valor fixo de energia entre sítios. Nesse caso, a função de onda é localizada para valores do período pequenos o suficiente para considerarmos que ela não difunde por toda a rede no intervalo de tempo estudado. Os valores do DQM, da entropia de Shannon e do inverso do número de participação oscilam periodicamente junto com a função de onda.

Um aspecto importante das oscilações de Bloch é a dependência de seu comportamento com a condição inicial do sistema. Na figura 8 abaixo, vemos que a delta e a gaussiana reagem de formas muito diferentes sob a ação do campo externo. No caso da delta, as oscilações se apresentam como um espalhamento da função de onda ao longo da amplitude, mantendo o centroide da distribuição sempre na mesma posição. No caso da gaussiana, entretanto, o contrário ocorre: o perfil da distribuição permanece o mesmo ao longo de todo o período, e é o centroide que muda de lugar. Os gráficos da figura 8 foram feitos para $F_0 = 0, 1$, que corresponde a um período de 20π em nossas unidades.

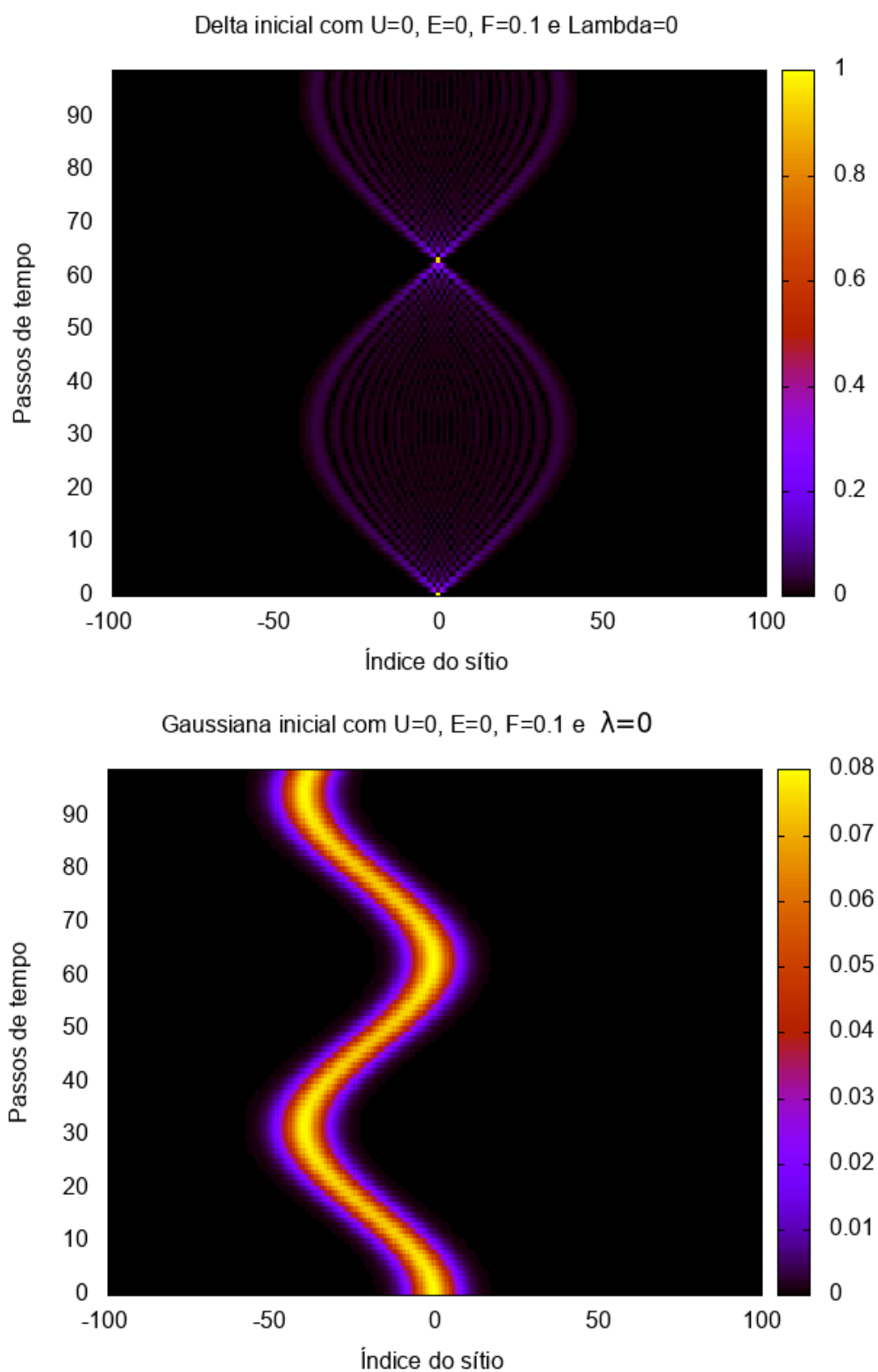


Figura 8 – Oscilações de Bloch para as condições iniciais delta (acima) e gaussiana (abaixo), com $F_0 = 0, 1$.

3.3 Autointeração

O efeito da autointeração tem características interessantes para nosso estudo da localização. Vamos focar aqui no caso de interação repulsiva entre os constituintes do condensado, que é mais comum em sistemas reais. Sabemos que, para a condição delta, o sistema passa por uma transição de fase de delocalização para localização em torno de $U = 3, 5$.

Nas figuras 9, 10 e 11, vemos como a função de onda se comporta para valores maiores ou menores de U para a condição inicial delta. Na fase não localizada, o condensado se espalha rapidamente pela rede, e a autointeração apenas acelera a difusão. O inverso do número de participação (INP) cai rapidamente a zero. Quando passamos para a fase de localização, por outro lado, a função de onda se concentra em torno do sítio inicial. Surgem pequenas oscilações que garantem que o INP não caia abaixo de um certo valor. Há ainda a presença de sólitons nas bordas da distribuição, que continuam se espalhando.

Um fato importante é que a localização por autointeração depende fortemente das condições iniciais do sistema. Na figura 12, vemos que, para uma condição inicial de forma gaussiana, não temos transição para uma fase localizada mesmo com a aplicação de um U muito grande. O condensado parece só poder se manter localizado se o perfil da distribuição inicial for por si só muito localizado.

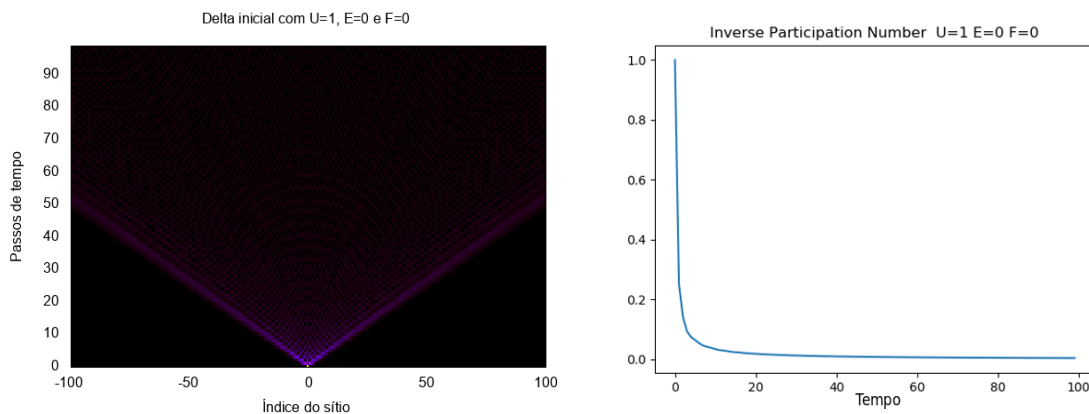


Figura 9 – Evolução temporal e do INP para a condição inicial delta e $U = 1$.

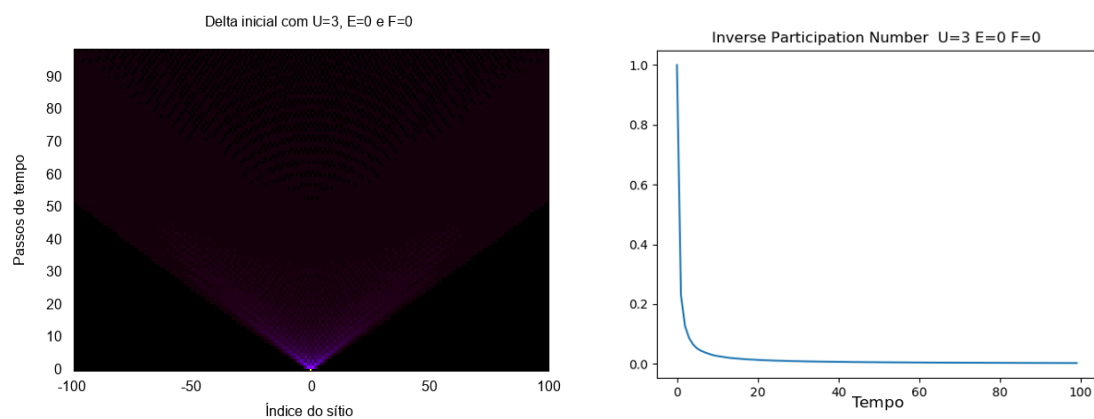


Figura 10 – Evolução temporal e do INP para a condição inicial delta e $U = 3$.

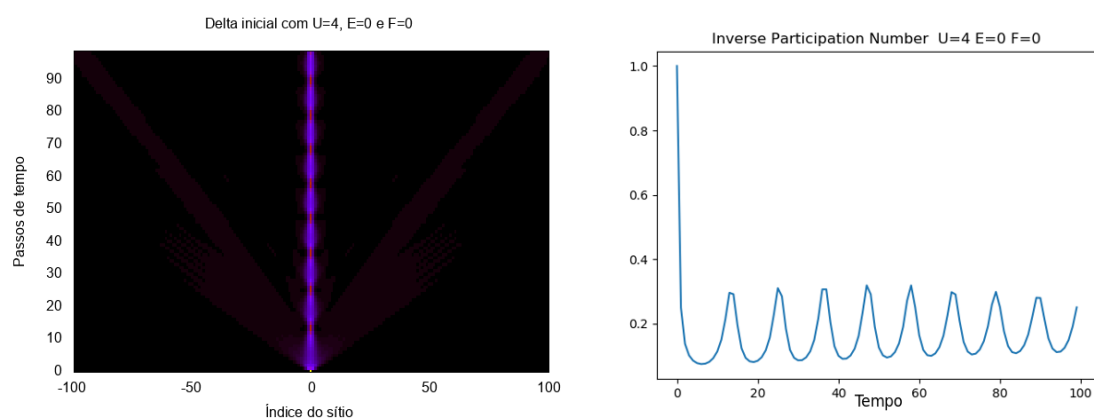


Figura 11 – Evolução temporal e do INP para a condição inicial delta e $U = 4$.

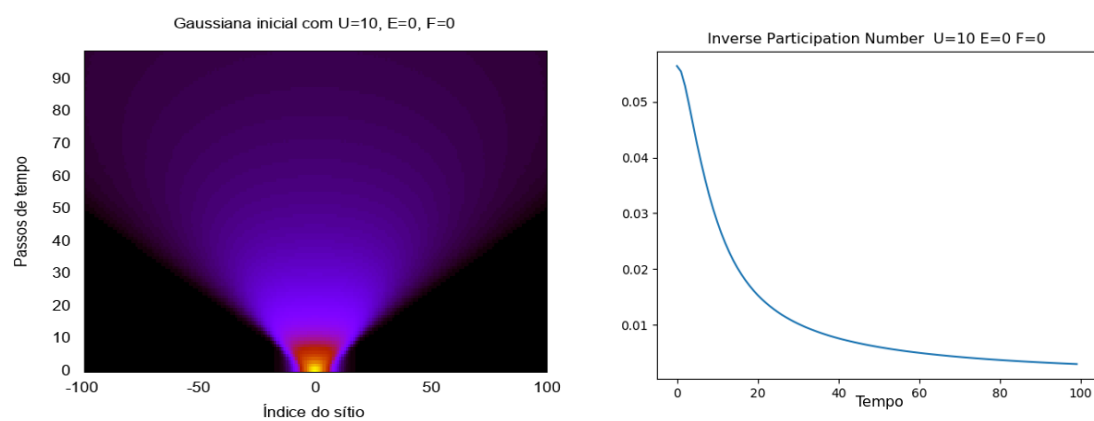


Figura 12 – Evolução temporal e do INP para a condição inicial gaussiana e $U = 10$.

3.4 Efeitos conjuntos

Passamos agora para uma análise de como os parâmetros F_0 , ϵ_0 e U agem quando aplicados em conjunto, dois a dois.

3.4.1 Fragmentação de Bloch

No capítulo 1, vimos que para termos oscilações de Bloch o potencial da rede subjacente deve ser periódico. O que acontece então quando aplicamos uma desordem quase periódica à rede? Combinando o campo elétrico externo com a desordem de Aubry-André, vemos que a presença desta perturba as oscilações, fragmentando a função de onda.

A desordem faz com que novas oscilações sejam iniciadas por partes do condensado, de forma que estejam fora de fase com a oscilação de Bloch inicial, levando a uma descoerência no movimento. Isso se aplica tanto para a condição inicial delta quanto para a gaussiana.

Nas figuras 13 e 14, observamos que com o aumento de ϵ_0 , as oscilações se comportam como se efetivamente tivessem um período e uma amplitude menores do que os esperados para uma dada intensidade do campo F_0 [18]. Elas também perdem as formas características para a delta e a gaussiana, que ao invés de terem ou o centroide ou a largura da distribuição constantes, respectivamente, passam a oscilar perto do sítio central. Eventualmente, a estrutura distinta das oscilações é destruída pela desordem. Para $\epsilon_0 < 2$, ela também possibilita o espalhamento do condensado pela rede, quebrando a localização causada pelo campo.

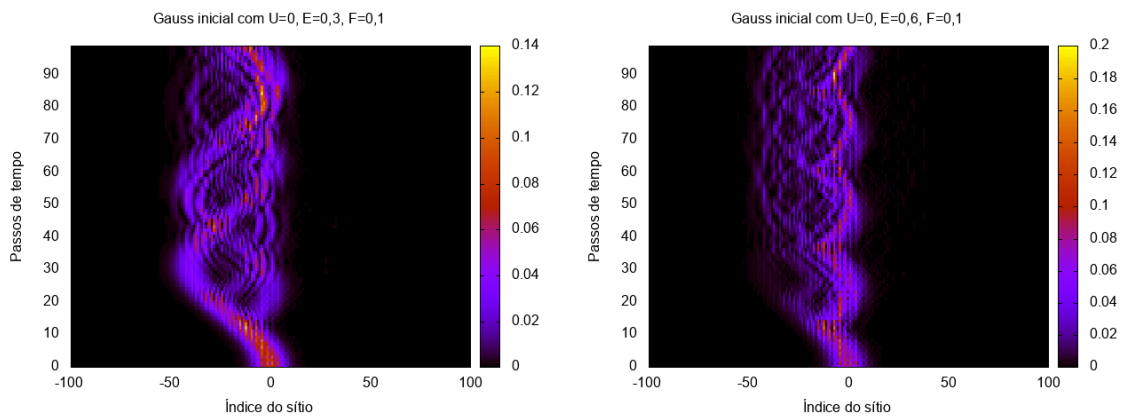


Figura 13 – Oscilações de Bloch fragmentadas com condição inicial gaussiana, $F_0 = 0, 1$ e $\epsilon_0 = 0, 3$ (esquerda) ou $\epsilon_0 = 0, 6$ (direita).

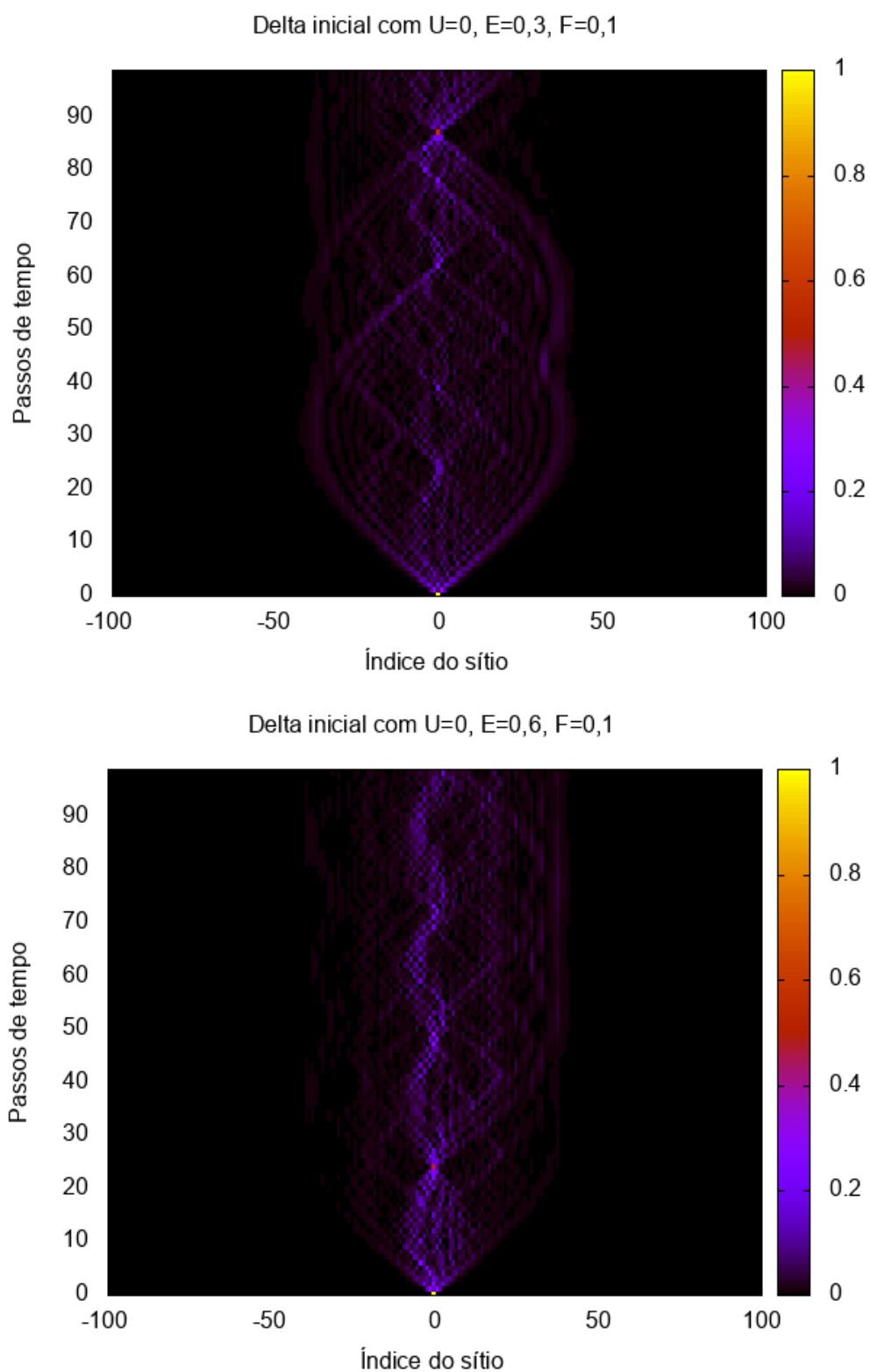


Figura 14 – Oscilações de Bloch fragmentadas com condição inicial delta, $F_0 = 0,1$ e $\epsilon_0 = 0,3$ (acima) ou $\epsilon_0 = 0,6$ (abaixo).

3.4.2 Autointeração com desordem

Os resultados encontrados para a ação conjunta da não-linearidade e da desordem seguem o que era esperado a partir dos limites de localização isolados descritos anteriormente. Nas figuras 15, 16 e 17, vemos que a gaussiana localiza no limiar $\epsilon_0 = 2$. Para valores maiores, a autointeração U apenas aumenta a largura da função de onda localizada em relação ao caso isolado.

Para $\epsilon_0 < 2$, a gaussiana não localiza, mesmo para valores grandes de U . É o que se espera tendo em vista o que observamos sobre a ação isolada da não-linearidade. Nesse caso temos apenas a aceleração do espalhamento dada pela repulsão entre partículas e as irregularidades na função de onda devidas à desordem, como pode ser visto na figura 18.

A delta (apresentada na figura 19) também respeita os limites individuais descritos no capítulo anterior, localizando para $\epsilon_0 > 2$ ou $U > 3,5$. O perfil de onda inicial, portanto, afeta as linhas de transição entre localização e delocalização no retrato de fase para $\epsilon_0 > 2$ e $U > 3,5$. Uma caracterização mais precisa da transição de fase nesse caso é dada por [1].

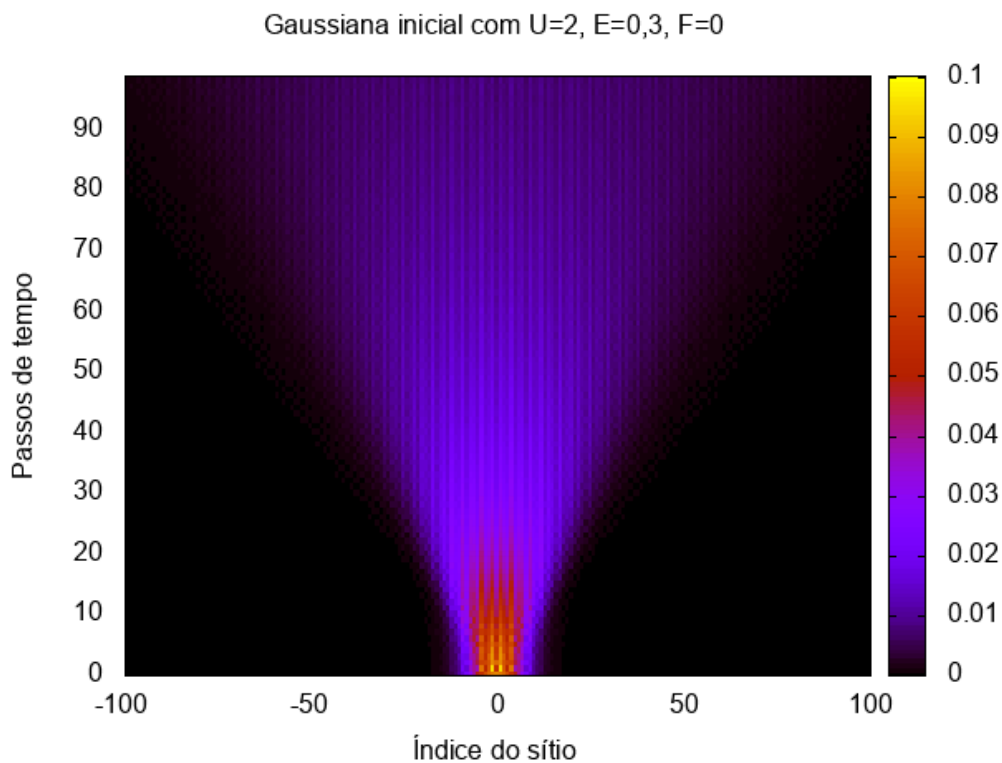


Figura 15 – Evolução da gaussiana inicial para $U = 2$ e $\epsilon_0 = 0,3$.

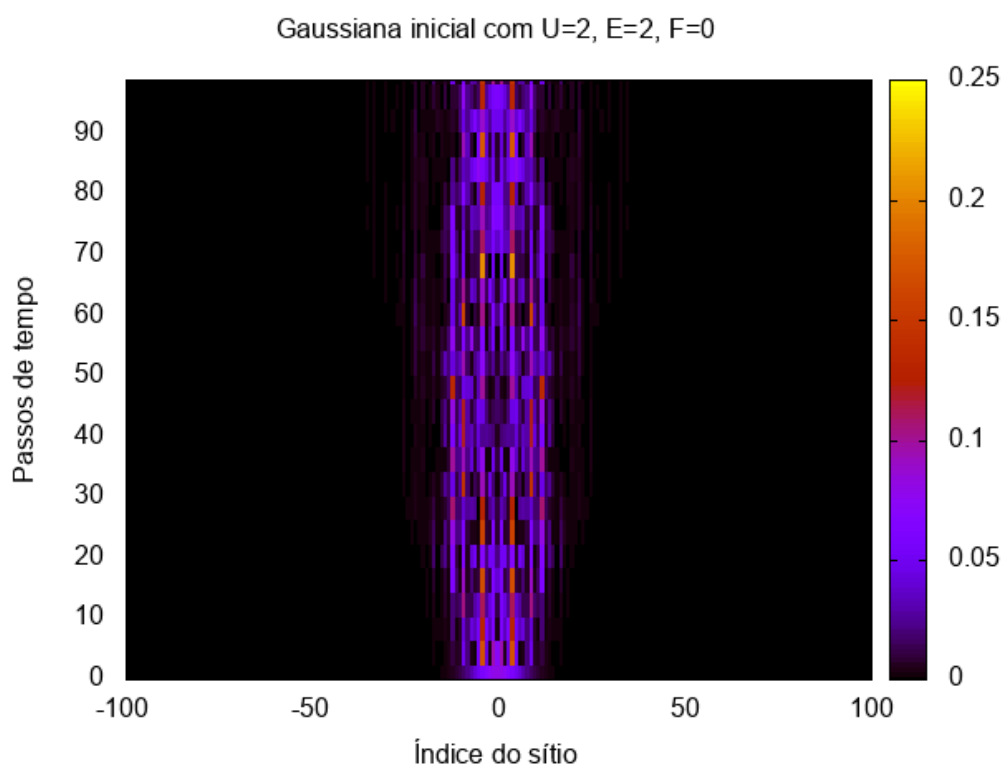


Figura 16 – Evolução da gaussiana inicial para $U = 2$ e $\epsilon_0 = 2$.

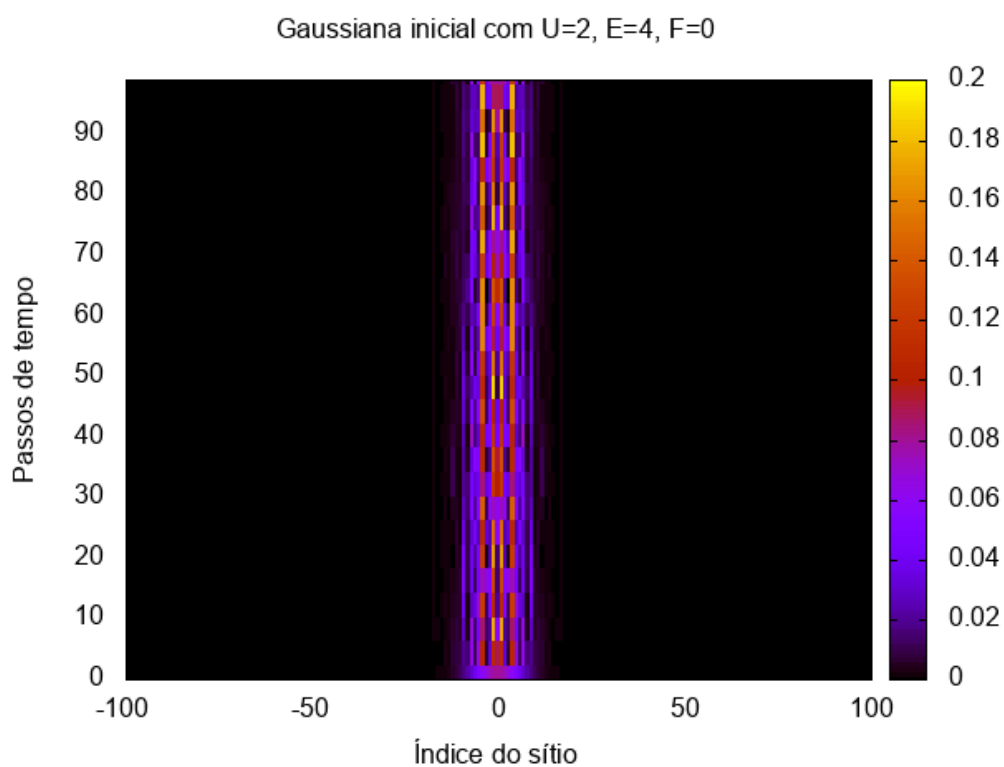


Figura 17 – Evolução da gaussiana inicial para $U = 2$ e $\epsilon_0 = 4$.

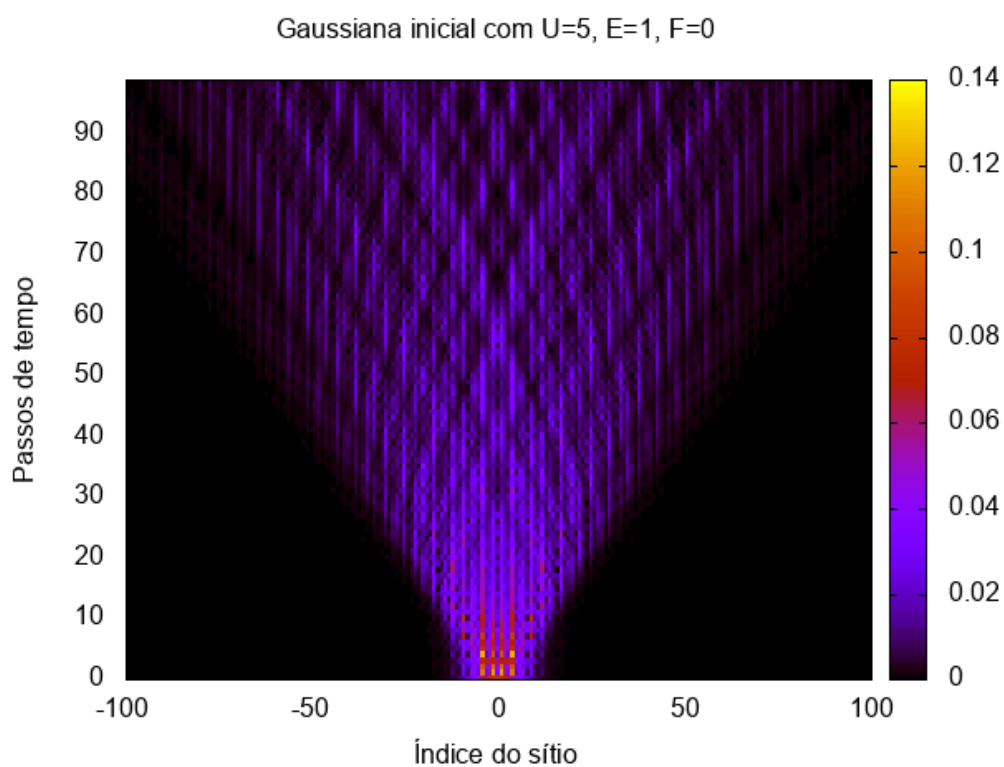


Figura 18 – Evolução da gaussiana inicial para $U = 5$ e $\epsilon_0 = 1$.

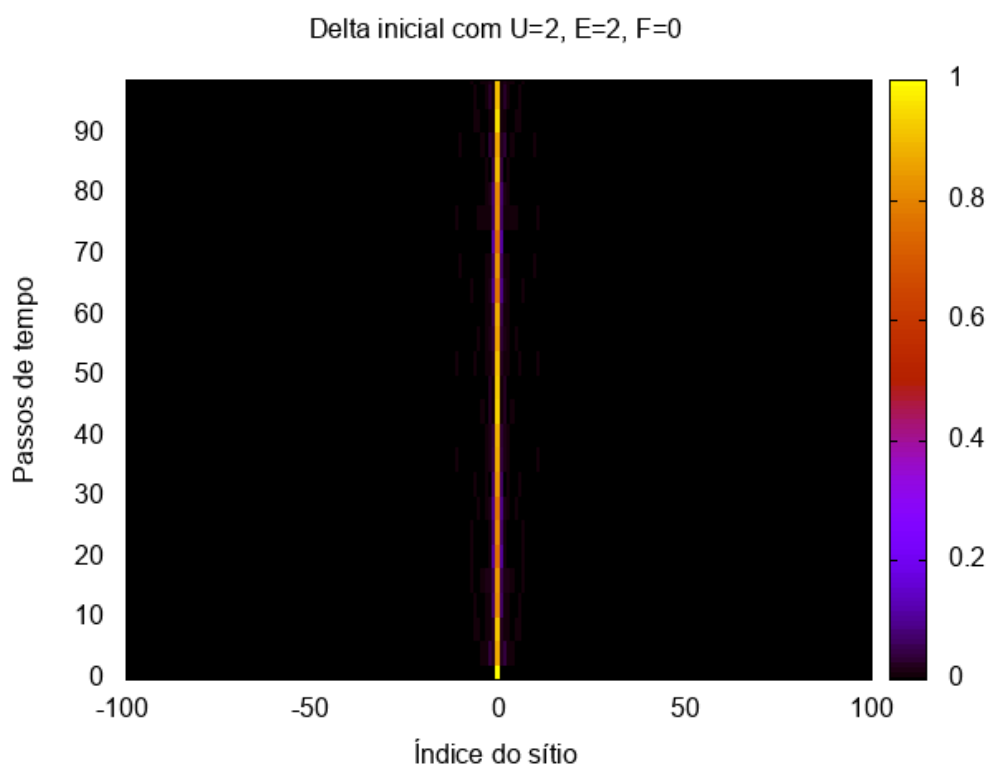


Figura 19 – Evolução da delta inicial para $U = 2 = \epsilon_0$.

3.4.3 Autointeração com campo elétrico

A não-linearidade tem um efeito interessante sobre as oscilações de Bloch, que pode ser observado nas figuras 20 e 21. Quando aplicada, ela faz com que algumas seções da oscilação localizem mais que o normal, enquanto outras se espalham mais. Esse viés torna o perfil da função de onda assimétrico. A interação repulsiva entre os constituintes do condensado também leva à separação da oscilação em faixas distintas.

Além disso, temos que a repulsão aumenta a amplitude da oscilação ao longo do tempo, causando não-localização para grandes intervalos de observação. Os mesmos limites de transição relacionados à autointeração do caso isolado também se aplicam aqui para a gaussiana inicial, que não localiza para grandes valores de U . Segundo [1], entretanto, o limite entre as fases no caso da delta é deslocado com a aplicação do campo elétrico, sendo que esta localiza para $U > 4$, ao invés de 3, 5.

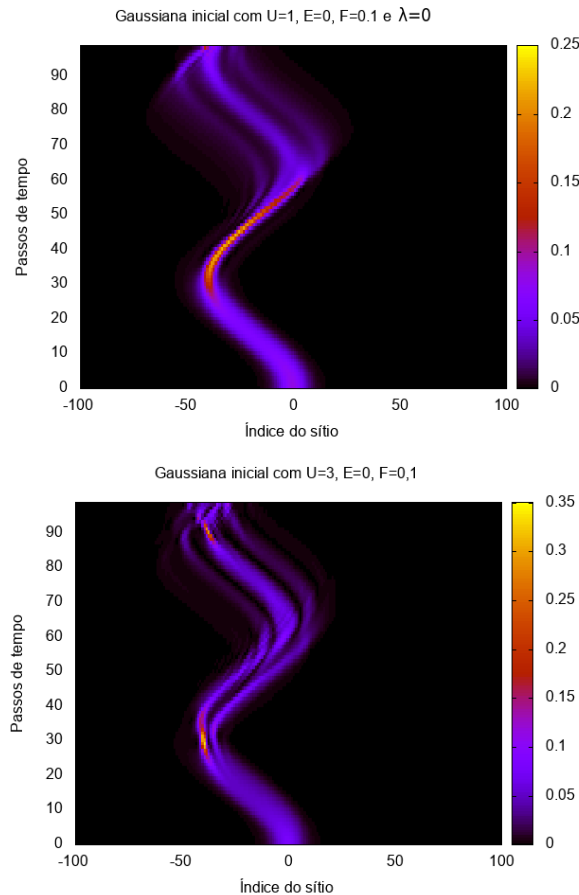


Figura 20 – Evolução da gaussiana para $F_0 = 0, 1$ e $U = 1$ (acima) ou $U = 3$ (abaixo).

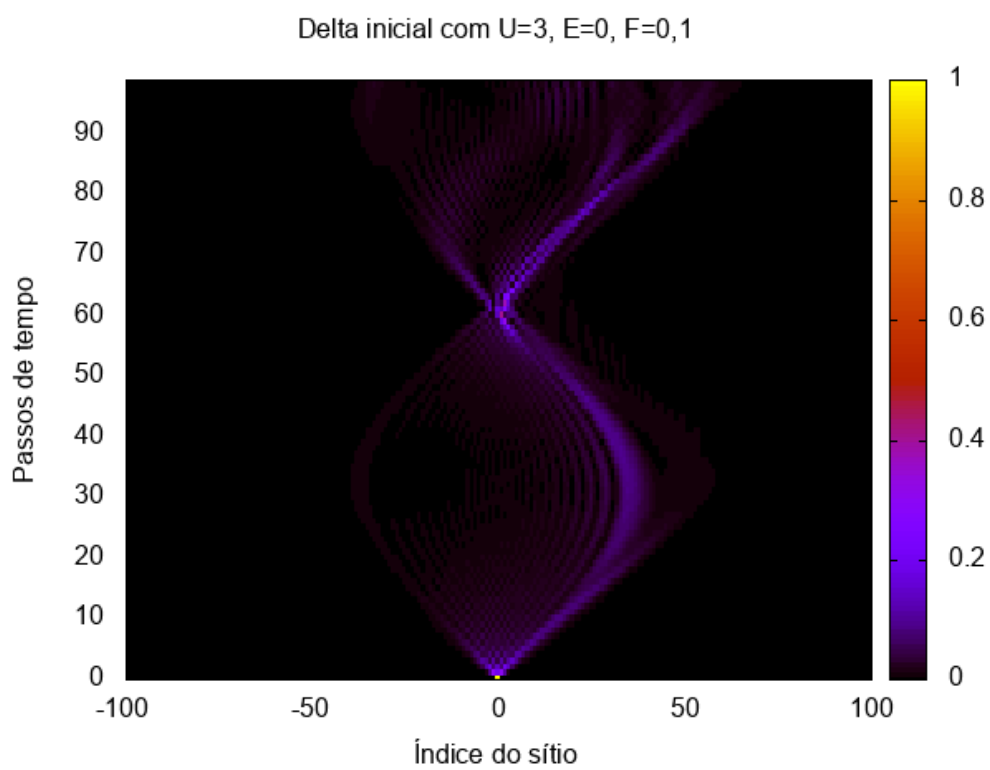


Figura 21 – Evolução da delta para $U = 3$ e $F_0 = 0,1$

4 Resultados - Hopping a segundos vizinhos

Neste capítulo, discutimos o comportamento encontrado para o condensado de Bose-Einstein quando incluímos o termo de hopping a segundos vizinhos no hamiltoniano do sistema. Nesse estudo, focamos em como ele afeta as oscilações de Bloch para que uma comparação com resultados da literatura [10] fosse possível. Para tanto, na figura 22 abaixo, foi fixado um valor de $F_0 = 0,1$ para o campo elétrico externo, e foram variados apenas ϵ_0 , U e λ .

4.1 Modulação das oscilações de Bloch

A presença da interação de longo alcance modifica o formato das oscilações de Bloch causadas pelo campo elétrico. Isso pode ser observado na figura 22, onde vemos que ao aumentar λ há o aparecimento de dois picos em torno do antigo máximo de amplitude da onda. A frequência do movimento não é alterada. O ponto correspondente à amplitude máxima das oscilações de Bloch para $\lambda = 0$ também não é deslocado de sua posição original, em contraste com as dobras que surgem nas suas laterais.

Esse efeito de modulação da amplitude tem sua origem, segundo [10], que fez essa análise para uma rede ótica, na deformação das bandas de energia dos elétrons da rede. Essa deformação leva à formação de um mínimo da banda antes da borda da primeira zona de Brillouin (a banda normalmente decresce monotonicamente).

Os gráficos a seguir foram feitos para λ maior que o que geralmente se encontra em experimentos para ilustrar melhor o efeito. Em situações reais, a intensidade do hopping a segundos vizinhos é baixa, da ordem de $\lambda = 0,1$ no máximo. Ainda assim, ele pode ter um papel importante para uma modelagem precisa de resultados experimentais.

No caso eletrônico, a ação do hopping a segundos vizinhos pode ter aplicações importante na geração de luz de altíssima frequência, uma vez que as ondulações moduladas são combinações de modos harmônicos de várias frequências diferentes. Se for possível construir uma rede ótica de interação a segundos vizinhos controlada, poderíamos gerar altas frequências com um campo aplicado menor.

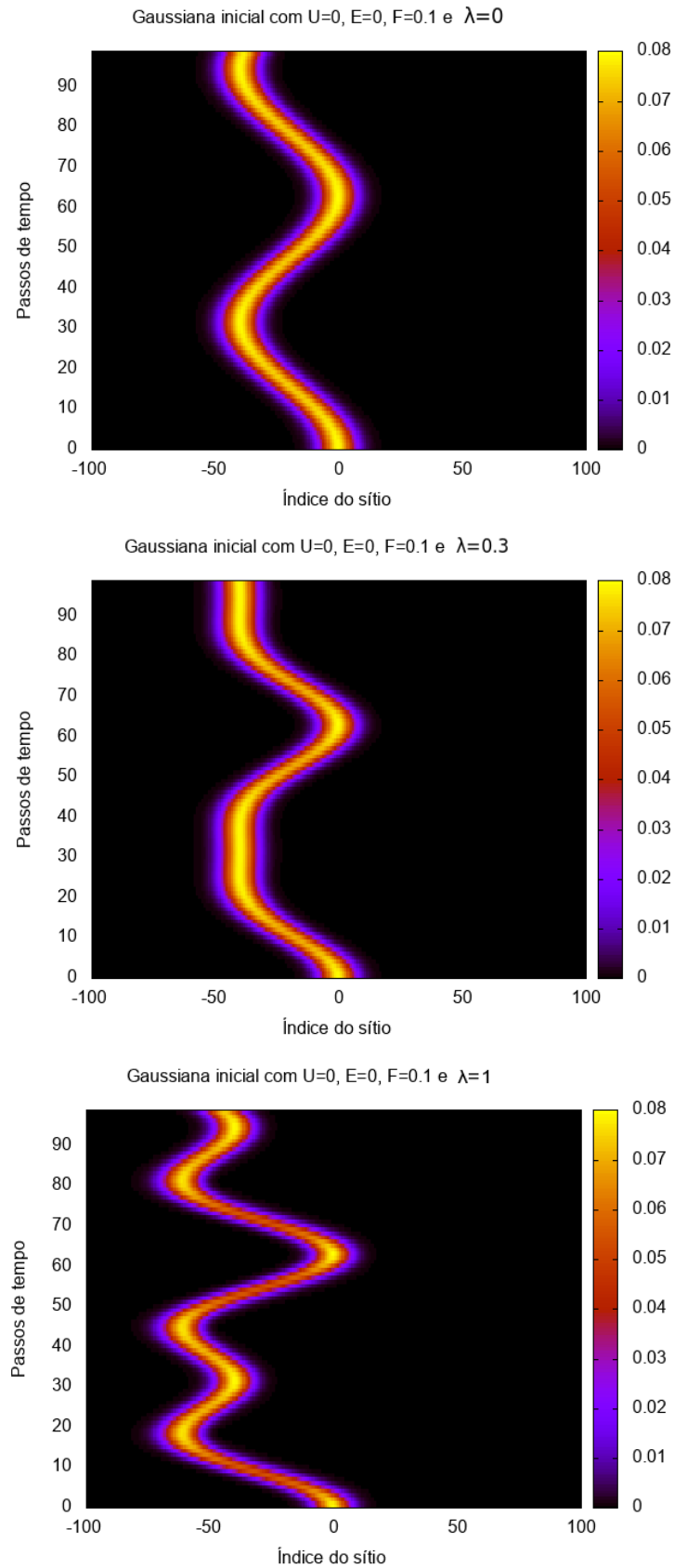


Figura 22 – Modulação das oscilações de Bloch causadas por um campo com $F_0 = 0, 1$ para $\lambda = 0, 3$ e $\lambda = 1$ e condição inicial gaussiana.

4.2 Adição de desordem e não-linearidade

Podemos agora estudar como a adição do termo de hopping de longo alcance modifica a ação conjunta do campo e de desordem ou autointeração. Esses são resultados novos que estendem os encontrados na literatura.

4.2.1 Desordem

Comparando as figuras 23 e 24, vemos que, com a adição de um hopping a segundos vizinhos, a fragmentação das oscilações de Bloch discutida no capítulo anterior ocorre de forma mais acelerada, causando descoerência das oscilações mais rapidamente. Além disso, a função de onda localizada se estende por uma largura maior, correspondente à amplitude dos picos formados.

A aceleração da fragmentação provavelmente se dá ao fato de as oscilações de Bloch moduladas não serem mais um modo de vibração puro, e sim uma combinação de frequências harmônicas resultando no formato modificado. A desordem, como discutido anteriormente, causa o aparecimento de vibrações secundárias de mesmo período em pontos diferentes do normal, e, portanto, fora de fase com a onda original. Como temos mais modos que podem ser fragmentados, a função de onda perde a coerência rapidamente.

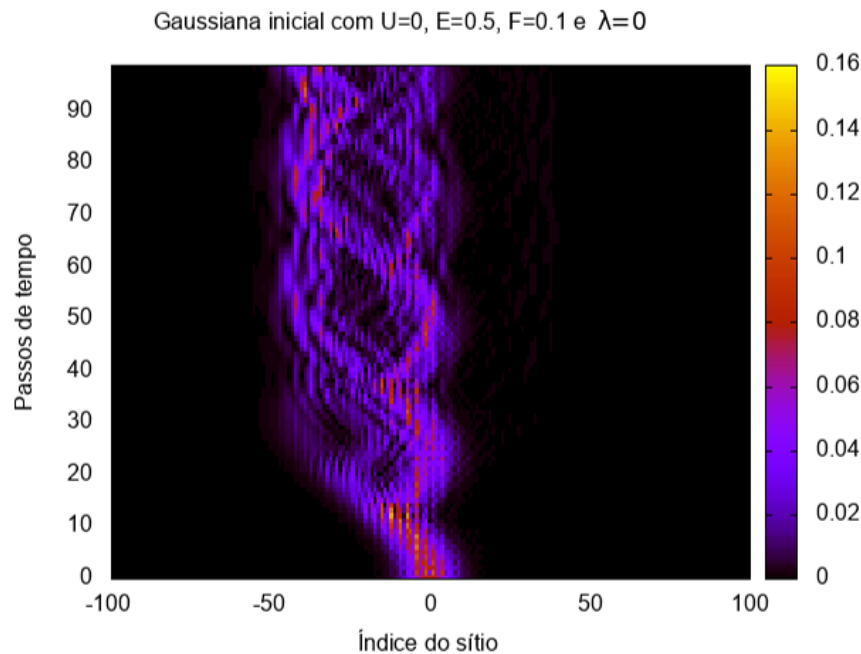


Figura 23 – Oscilações de Bloch fragmentadas para $F_0 = 0, 1$ e $\epsilon_0 = 0, 5$, sem hopping a segundos vizinhos, para a gaussiana.

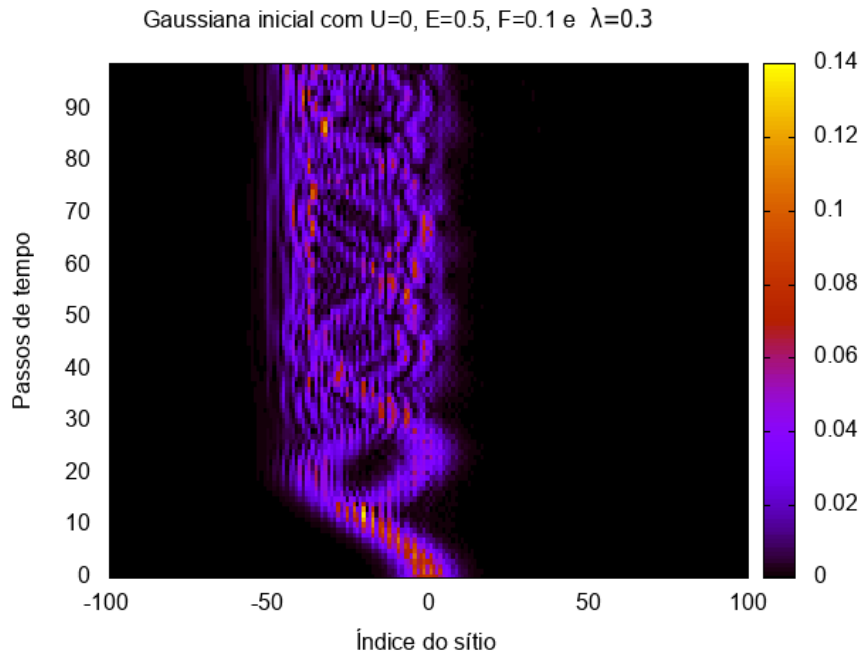


Figura 24 – Oscilações de Bloch fragmentadas para $F_0 = 0,1$ e $\epsilon_0 = 0,5$, com hopping a segundos vizinhos de intensidade $\lambda = 0,3$, para a gaussiana.

4.2.2 Não-linearidade

Aqui, a não-linearidade causa, como vimos no capítulo 3, o aparecimento de seções mais e menos localizadas em cada oscilação, causando uma assimetria na localização da função de onda. Além disso, vemos na figura 25 que há a separação da distribuição em faixas distintas quando ela está menos localizada.

A interação a segundos vizinhos, mostrada na figura 26, distorce as oscilações de forma interessante. Primeiro, vemos que elas são deformadas pela formação das dobras características vistas na figura 22. Além disso, a região de localização é deslocada em relação ao caso com $\lambda = 0$, se aproximando mais da seção de amplitude máxima da oscilação. O período continua o mesmo.

Comparando as larguras das distribuições das figuras 25 e 26 ao longo do tempo, percebe-se que a que apresenta interação a segundos vizinhos se espalha mais devagar, tendo tanto uma amplitude menor de oscilação quando um espalhamento menor quando há a formação das faixas. Estas também são menos distintas e possuem uma separação menor entre si.

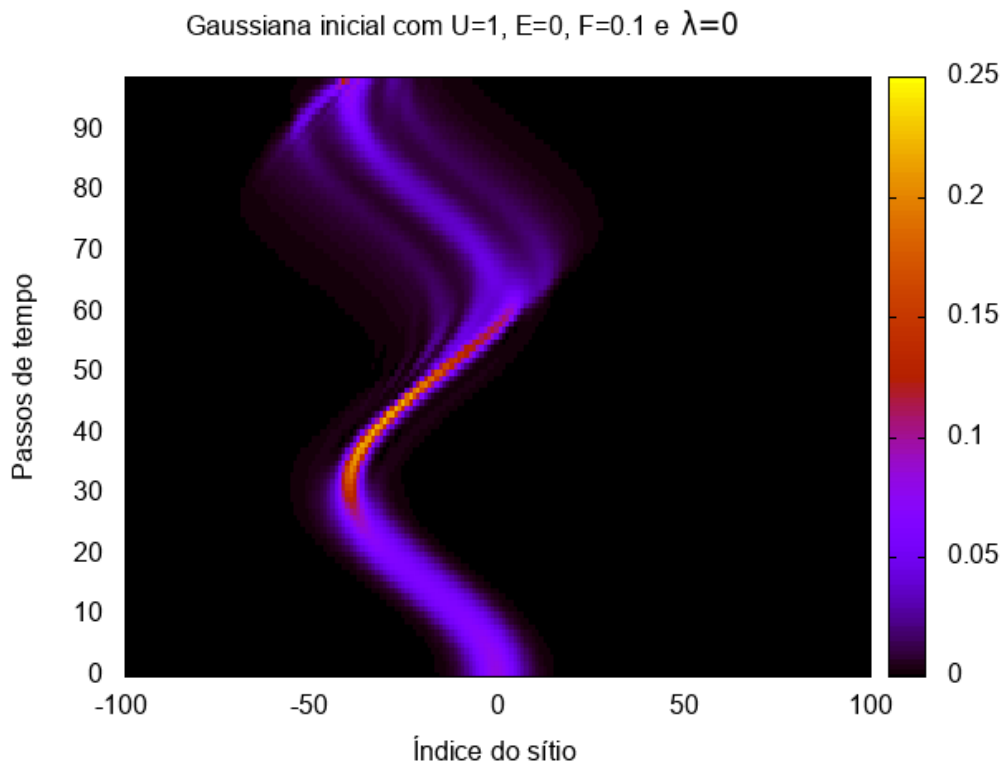


Figura 25 – Evolução da gaussiana para $F_0 = 0,1$ e $U = 1$, sem hopping a segundos vizinhos.

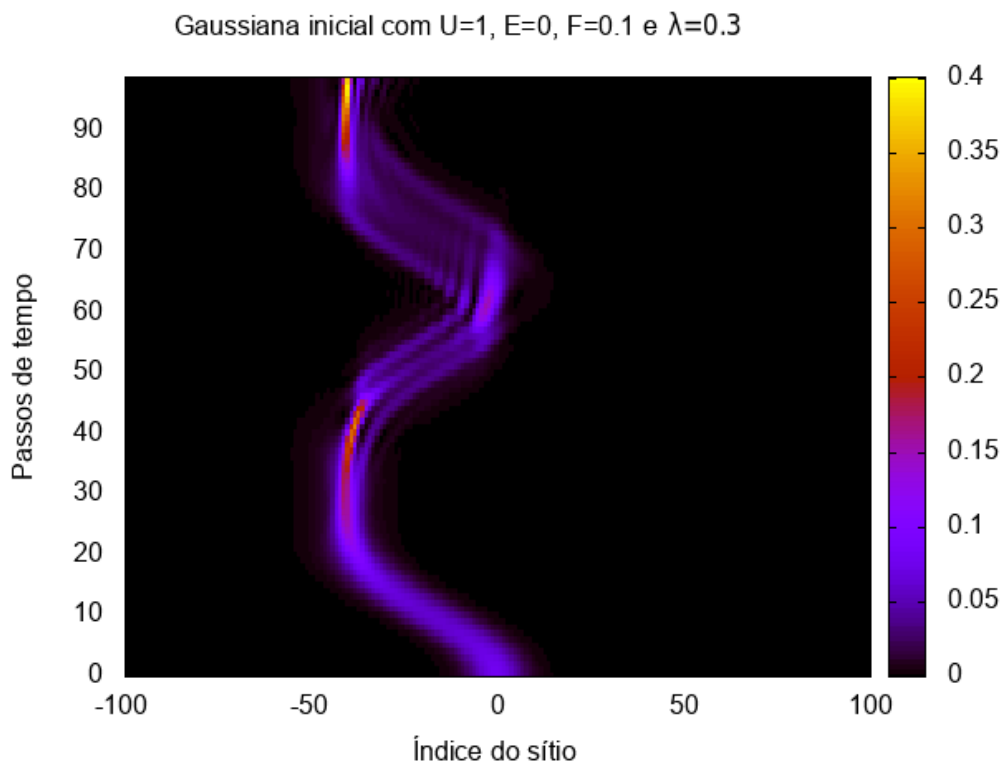


Figura 26 – Oscilações de Bloch para a gaussiana com não-linearidade para $F_0 = 0,1$ e $U = 1$, com hopping a segundos vizinhos de intensidade $\lambda = 0,3$.

Conclusão

Neste trabalho, simulamos a evolução de uma equação de Schrödinger não-linear ao longo do tempo. Buscamos estudar o comportamento de localização de um condensado de Bose-Einstein quando submetido a um campo elétrico externo e à presença de desordem e interações entre os constituintes do BEC. Foi implementado um programa em Python para integrar a equação, o que permitiu reproduzir resultados conhecidos da literatura para os efeitos isolados dessas três interações.

Procuramos então caracterizar os limites para a transição de estados delocalizados a localizados em relação aos parâmetros moduladores F_0 , ϵ_0 e U . Foram encontrados aqui alguns resultados interessantes, entre os quais a fragmentação das oscilações de Bloch na presença de desordem e o aparecimento de oscilações que não se devem a uma simetria translacional dada por um campo elétrico.

Por fim, foi adicionado um hopping a segundos vizinhos. Os resultados em [10] foram reproduzidos e depois estendidos para incluir a desordem de Aubry-André e a autointeração, algo que não havia sido feito anteriormente. Verificamos que o termo de hopping adicional causa uma modulação da amplitude das oscilações de Bloch. Esses foram nossos principais resultados.

Existem várias possibilidades para dar continuidade ao trabalho iniciado aqui. Entre elas, se destaca um estudo mais detalhado das causas por trás da fragmentação de Bloch e da modulação pelo termo de hopping a segundos vizinhos.

Referências

- [1] L. JUNGES. A equação de schrödinger não-linear discreta com desordem de aubry-andré e com campo elétrico dc. *Tese de mestrado - UFRGS*, 2009.
- [2] S. N. BOSE. Plancks gesetz und lichtquantenhypothese. *Zeitschrift für Physik*, 1924.
- [3] A. EINSTEIN. Quantentheorie des einatomigen idealen gases. *Sitzungsberichte der Preussischen Akademie der Wissenschaften*, 1925.
- [4] M. H. ANDERSON, J. R. ENSHER, M. R. MATTHEWS, C. E. WIEMAN, E. A. CORNELL. Observation of bose-einstein condensation in a dilute atomic vapor. *Science*, 1995.
- [5] A. FRATALOCCHI, G. ASSANTO. Universal character of the discrete nonlinear schrödinger equation. *Physics Letters A* 76, 2007.
- [6] H. S. EISENBERG, Y. SILBERBERG, R. MORANDOTTI, A. R. BOYD, J. S. AITCHISON. Discrete spatial optical solitons in waveguide arrays. *Physical Review Letters*, 1998.
- [7] M. L. SUN et al. Localization-delocalization transition in self-dual quasi-periodic lattices. *EPL* 110 57003, 2015.
- [8] M. I. MOLINA. Nonlinearity in materials science. *International Journal of Modern Physics B, Vol. 15, No. 18*, 2001.
- [9] R. DRIBEN, V. V. KONOTOP, T. MEIER e A. V. YULIN. Bloch oscillations sustained by nonlinearity. *Nature Scientific Reports (7:3194)*, 2017.
- [10] G. WANG, J. P. HUANG e K. W. YU. Nontrivial bloch oscillations in waveguide arrays with second-order coupling. *Optics Letters, Vol. 35, No. 11*, 2010.
- [11] L. GONG, Y. FENG e Y. DING. Anderson localization in one-dimensional quasiperiodic lattice models with nearest- and next-nearest-neighbor hopping. *Physics Letters A* 381, 2017.
- [12] P. NALDESI. *Time-dependent simulations of one-dimensional quantum systems: from thermalization to localization*. Tese de doutorado, Università di Bologna, 2016.
- [13] D. N. CHRISTODOULIDES, F. LEDERER e Y. SILBERBERG. Discretizing light behaviour in linear and nonlinear waveguide lattices. *Nature* 424, 2003.

-
- [14] V. ILYIN, I. PROCACCIA, A. ZAGORODNY. Stochastic processes crossing from ballistic to fractional diffusion with memory: exact results. *Condensed Matter Physics*, 2010.
- [15] F. LEDERER, G. I. STEGEMAN, D. N. CHRISTODOULIDES, G. ASSANTO, M. SEGEV, Y. SILBERBERG. Discrete solitons in optics. *Physics Reports* 463, 2008.
- [16] G. ASSANTO, L. A. CISNEROS, A. A. MINZONI, B. D. SKUSE, N. F. SMYTH, e A. L. WORTHY. Soliton steering by longitudinal modulation of the nonlinearity in waveguide arrays. *Physical Review Letters* 104, 2010.
- [17] P. W. ANDERSON. Absence of diffusion in certain random lattices. *Physical Review*, 1958.
- [18] G. WANG. Fragmentation of bloch oscillations in quasiperiodic waveguide arrays. *J. Opt.* 16 015502, 2014.
- [19] W. H. PRESS, S. A. TEUKOLSKY, W. T. VETTERLING e B. P. FLANNERY. *Numerical Recipes: The Art of Scientific Computing*. Cambridge University Press, 2007 (3a ed.).
- [20] A. A. KARAWIA. On solving pentadiagonal linear systems via transformations. *arXiv:1409.4802v3*, 2015.
- [21] C. E. SHANNON. A mathematical theory of information. *Bell System Technical Journal*, 1948.
- [22] T. NAKAYAMA e K. YAKUBO. *Fractal Concepts in Condensed Matter Physics*. Springer, 2003.

APÊNDICE A – Método de diagonalização

Abaixo se encontra a implementação em Python realizada para o algoritmo de diagonalização para matrizes pentadiagonais descrito no capítulo 2. Os vetores a , b , c , d e e são definidos como explicado na seção correspondente, assim como os vetores auxiliares. Aqui f é o vetor de estado anterior do sistema e xc , a solução da equação $Q\chi = f$

```
def PENTAsolver(a, b, c, d, e, f):
    nf = len(f)      # number of equations
    ac = array(a, dtype='c16')
    bc = array(b, dtype='c16')
    cc = array(c, dtype='c16')
    dc = array(d, dtype='c16')
    ec = array(e, dtype='c16')
    fc = array(f, dtype='c16')

    mi=[None]*nf
    alfa=[None]*nf
    beta=[None]*nf
    gama=[None]*nf
    zeta=[None]*nf
    xc=[None]*nf

    mi[0] = dc[0]
    alfa[0] = ac[0]/mi[0]
    beta[0] = bc[0]/mi[0]
    gama[0] = 0
    zeta[0] = fc[0]/mi[0]

    gama[1] = cc[1]
    mi[1] = dc[1] - (alfa[0] * gama[1])
    alfa[1] = (ac[1] - (beta[0] * gama[1]))/mi[1]
    beta[1] = bc[1]/mi[1]
    zeta[1] = (fc[1] - (zeta[0] * gama[1]))/mi[1]

    for i in range(2, nf-2):
        gama[i] = cc[i] - (alfa[i-2] * ec[i])
```

```

mi[i] = dc[i] - (beta[i-2] * ec[i]) - (alfa[i-1] * gama[i])
alfa[i] = (ac[i] - (beta[i-1] * gama[i]))/mi[i]
beta[i] = bc[i]/mi[i]
zeta[i] = {(fc[i] - (zeta[i-2] * ec[i])
- (zeta[i-1] * gama[i]))/mi[i]}

gama[nf-2] = cc[nf-2] - (alfa[nf-4] * ec[nf-2])
mi[nf-2] = {dc[nf-2] - (beta[nf-4] * ec[nf-2])
- (alfa[nf-3] * gama[nf-2])}
alfa[nf-2] = (ac[nf-2] - (beta[nf-3] * gama[nf-2]))/mi[nf-2]
zeta[nf-2] = {(fc[nf-2] - (zeta[nf-4] * ec[nf-2])
- (zeta[nf-3] * gama[nf-2]))}
beta[nf-2] = 0

gama[nf-1] = cc[nf-1] - (alfa[nf-3] * ec[nf-1])
mi[nf-1] = {dc[nf-1] - (beta[nf-3] * ec[nf-1])
- (alfa[nf-2] * gama[nf-1])}
zeta[nf-1] = {(fc[nf-1] - (zeta[nf-3] * ec[nf-1])
- (zeta[nf-2] * gama[nf-1]))}
alfa[nf-1] = 0
beta[nf-1] = 0

xc[nf-1] = zeta[nf-1]
xc[nf-2] = zeta[nf-2] - (alfa[nf-2] * xc[nf-1])
for j in range(nf-3, -1, -1):
    xc[j] = zeta[j] - (alfa[j] * xc[j+1]) - (beta[j] * xc[j+2])
del bc, cc, dc, ec, fc # delete variables from memory
return xc

```