

**UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE FÍSICA DE SÃO CARLOS**

João Octavio Kül

O método variacional de Monte Carlo aplicado a bósons interagentes aprisionados em uma armadilha harmônica

São Carlos
2023

João Octavio Kül

O método variacional de Monte Carlo aplicado a bósons interagentes aprisionados em uma armadilha harmônica

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado ao programa de graduação do Bacharelado em Física com Habilitação Teórico-Experimental do Instituto de Física de São Carlos da Universidade de São Paulo como requisito parcial para obtenção do grau de Bacharel.

Orientador: Lucas Madeira

São Carlos
2023

AUTORIZO A REPRODUÇÃO E DIVULGAÇÃO TOTAL OU PARCIAL DESTE TRABALHO, POR QUALQUER MEIO CONVENCIONAL OU ELETRÔNICO PARA FINS DE ESTUDO E PESQUISA, DESDE QUE CITADA A FONTE.

Kül, João Octavio

O método variacional de Monte Carlo aplicado a bósons interagentes aprisionados em uma armadilha harmônica /
João Octavio Kül; orientador Lucas Madeira -- São Carlos, 2023.
27 p.

Trabalho de Conclusão de Curso (Bacharel em Física) --
Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, 2023.

1. Átomos frios. 2. Bósons interagentes. 3. Monte Carlo variacional. I. Madeira, Lucas, orient. II. Título.

Resumo

Nesta monografia, foram calculadas propriedades de bósons interagentes e aprisionados em uma armadilha harmônica utilizando o método variacional de Monte Carlo. O algoritmo é baseado no princípio variacional, o qual fornece um limite superior para a energia do estado fundamental, e o método de Monte Carlo está relacionado com o cálculo das integrais multidimensionais necessárias. Foram propostas funções de onda variacionais dadas pelo produtório de funções de um corpo, as quais capturam o efeito da armadilha, e funções de pares que reproduzem o espalhamento de esferas duras no limite de baixas energias da equação de Schrödinger. Tais funções capturam as propriedades físicas do estado fundamental desse sistema de muitos-corpos, e foram usadas para determinar propriedades de interesse, como a energia por partícula e as distribuições espaciais para diferentes números de bósons e comprimentos de espalhamento (que coincidem com o diâmetro de esfera dura dos átomos, pois as interações são repulsivas). Os resultados puderam ser comparados com a teoria de campo médio nos limites forte e fracamente interagentes, de onde foi possível observar que o método de Monte Carlo variacional permite estudar regimes além dos empregados na teoria de Gross-Pitaevskii.

Palavras-chave: Átomos frios. Bósons interagentes. Monte Carlo variacional.

Sumário

1	INTRODUÇÃO	7
1.1	Condensação de Bose-Einstein	7
2	METODOLOGIA	9
2.1	O método do encontro	9
2.2	O método variacional de Monte Carlo (VMC)	10
2.2.1	O método variacional	10
2.2.2	O algoritmo de Metropolis	10
2.3	O Hamiltoniano do problema	12
2.4	Equação de Gross-Pitaevskii e as interações entre os átomos	13
3	RESULTADOS	17
3.1	Oscilador harmônico unidimensional - Método do encontro	17
3.2	Oscilador harmônico tridimensional - VMC	18
3.3	Sistema de bósons interagentes	19
3.4	Aspectos computacionais	22
4	CONCLUSÃO	25
	REFERÊNCIAS	27

1 Introdução

1.1 Condensação de Bose-Einstein

As primeiras realizações experimentais de um condensado de Bose-Einstein em 1995 com gases atômicos diluídos deram início a um grande desenvolvimento dos estudos na área de gases quânticos. Tais experimentos foram feitos inicialmente com vapores de ^{87}Rb , ^{11}Na e ^3Li (1) (2).

Os gases quânticos diluídos diferem dos gases clássicos, dos líquidos e dos sólidos em diversos aspectos. A densidade de partículas no centro de um condensado de Bose-Einstein é tipicamente da ordem de $10^{13} - 10^{15} \text{ cm}^{-3}$. Por outro lado, a densidade de moléculas no ar à temperatura ambiente é 10^{19} cm^{-3} . Em líquidos e sólidos, a densidade de átomos é da ordem de 10^{22} cm^{-3} , enquanto a densidade de núcleons no núcleo atômico é 10^{38} cm^{-3} . Para observar fenômenos quânticos nesses sistemas de baixa densidade, as temperaturas devem ser da ordem de 10^{-5} K ou menores. Em contrapartida, nos sólidos, os efeitos quânticos são mais fortes para elétrons em metais abaixo da temperatura de Fermi, que é tipicamente $10^4 - 10^5 \text{ K}$, e para fôtons abaixo da temperatura de Debye que, em geral, é da ordem de 10^2 K . Para o ^4He líquido, os fenômenos quânticos são observados a temperaturas da ordem de 1 K. Nos núcleos atômicos, devido à alta densidade de partículas, a temperatura de degenerescência do sistema é da ordem de 10^{11} K .

Nuvens de gases frios possuem muitas vantagens na investigação de fenômenos quânticos. Em um condensado de Bose-Einstein fracamente interagente, essencialmente todos os átomos ocupam o mesmo estado quântico, e o sistema pode ser descrito pela teoria de campo médio. Isso marca um contraste significativo com o ^4He líquido, que é um sistema fortemente interagente, e então não é bem descrito pela mesma aproximação de campo médio. Apesar dos gases serem diluídos, as interações desempenham um papel importante a baixas temperaturas, dando origem a fenômenos coletivos relacionados aos que observamos em sólidos, líquidos quânticos e núcleos.

Experimentalmente, os gases quânticos são sistemas interessantes de se medir pois podem ser manipulados através de lasers e campos magnéticos. Além disso, as interações entre os átomos podem ser mudadas adicionando diferentes espécies atômicas ou, para algumas espécies, mudando a magnitude do campo magnético ou elétrico aplicado. Outra vantagem de estudar esses sistemas é que, por conta das baixas densidades, as escalas de comprimento são grandes e a estrutura da função de onda do condensado pode ser investigada diretamente por técnicas ópticas, tornando possível analisar fenômenos de interferência, por exemplo.

A previsão teórica da condensação de Bose-Einstein ocorreu cerca de 100 anos atrás. Depois de Bose descrever a estatística quântica do gás de fôtons e deduzir a lei da radiação de Planck sem nenhuma referência à física clássica, Einstein considerou um gás de bósons massivos não-interagentes e concluiu que, abaixo de uma certa temperatura, uma fração não nula das partículas

ocuparia o estado de menor energia do sistema.

Em 1938, Fritz London sugeriu uma conexão entre a superfluidez do ${}^4\text{He}$ líquido e a condensação de Bose-Einstein. Tal sistema teve um papel importante no desenvolvimento de conceitos físicos da área e é considerado um protótipo de condensado de Bose-Einstein. Contudo, como citado anteriormente, por se tratar de um sistema fortemente interagente, mesmo em $T = 0\text{K}$ os átomos de ${}^4\text{He}$ líquido não se encontram todos no estado de menor energia. Isso dificultou as medições dos estados de menor energia diretamente e marcou uma busca por gases de Bose fracamente interagentes com maiores frações condensadas. Como consequência dos grandes avanços feitos no resfriamento a laser de metais alcalinos, tais átomos se tornaram fortes candidatos a condensados de Bose-Einstein e foram usados nos primeiros experimentos de sucesso que produziram átomos frios em laboratório.

Dado um sistema de N bôsons confinados em um volume V , uma forma de relacionar a temperatura de transição de um condensado de Bose-Einstein com a densidade de partículas é comparando o espaçamento médio entre as partículas (que é da ordem de $n^{-1/3}$, onde $n \equiv N/V$) e o comprimento de onda térmico de de Broglie, definido como

$$\lambda_T = \left(\frac{2\pi\hbar^2}{mk_B T} \right)^{1/2}. \quad (1.1)$$

Para altas temperaturas, λ_T é pequeno e o gás se comporta classicamente. A condensação de Bose-Einstein em um gás ocorre quando a temperatura diminui até que λ_T fique da ordem de $n^{-1/3}$. Para átomos alcalinos, como mencionado anteriormente, as densidades são da ordem de $10^{13} - 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ e as temperaturas de transição ficam entre 100 nK até a ordem de μK (3).

A proposta deste trabalho é a criação de uma simulação numérica de autoria própria que calcula a energia total de um sistema de bôsons interagentes pelo método variacional de Monte Carlo. Discutiremos como os resultados se relacionam com os temas físicos abordados neste capítulo. No capítulo 2, são discutidos os métodos numéricos e teóricos utilizados no trabalho, apresentando as principais ideias do cálculo do sistema de bôsons interagentes e uma comparação com a aproximação de campo médio no limite fracamente interagente. No capítulo 3, são feitas discussões sobre o significado físico dos resultados obtidos e considerações sobre o custo computacional das simulações. No capítulo 4, são feitas as conclusões finais sobre o trabalho, incluindo perspectivas de possíveis aplicações interessantes para o estudo de sistemas fortemente interagentes na área de gases e líquidos quânticos.

2 Metodologia

2.1 O método do encontro

Para lidar com os problemas unidimensionais de apenas uma partícula da Mecânica Quântica, uma abordagem numérica eficiente é o método do encontro (4). Trata-se de um método iterativo para encontrar a energia do sistema a partir da equação de Schrödinger com a derivada segunda discretizada,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} \approx -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{\psi_{i+1} - 2\psi_i + \psi_{i-1}}{(\Delta x)^2} \right] \approx (E - V(x_i))\psi_i, \quad (2.1)$$

onde ψ_i é o valor da função de onda no ponto $x_i = i\Delta x$, com i inteiro. Usando uma escala de comprimento natural L do sistema, podemos redefinir as unidades do problema tais que $\bar{x} \equiv x/L$, $\bar{\psi}(\bar{x}) = \psi(x)/L^{-1/2}$, $\bar{E} \equiv EmL^2/\hbar^2$ e $\bar{V}(\bar{x}) = V(x)mL^2/\hbar^2$. Então, obtemos

$$\bar{\psi}_{i+1} = 2\bar{\psi}_i - \bar{\psi}_{i-1} - 2(\Delta\bar{x})^2(\bar{E} - \bar{V}(\bar{x}_i))\bar{\psi}_i \quad (2.2)$$

Dados dois pontos iniciais, o potencial $V(x)$ e uma energia E^1 , a equação 2.2 calcula os valores de $\psi(x)$ em todos os pontos. Como, em geral, o potencial do problema não é simétrico e queremos impor que a função de onda se anula nas duas extremidades, ela é separada em duas partes: uma à esquerda, $\psi_L(x)$, e uma à direita, $\psi_R(x)$. Nesse caso, ψ_L é integrada no intervalo $[x_L, x_M]$ e ψ_R é integrada em $[x_M, x_R]$, onde x_M é o ponto de encontro das duas funções.

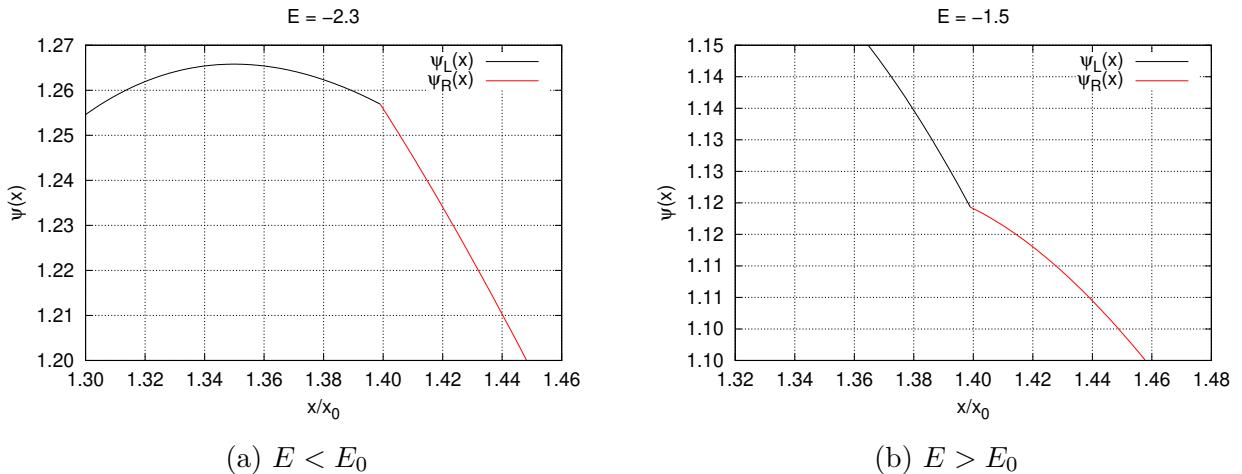


Figura 1 – Encontro das funções de onda ψ_L e ψ_R para $E \neq E_0$. Fonte: Elaborado pelo autor.

No entanto, sabemos que as soluções fisicamente aceitas são contínuas, e além disso as suas derivadas devem ser contínuas (pois, em geral, vamos lidar com potenciais contínuos). Para lidar com esse problema, reescalamos uma das funções de modo que $\tilde{\psi}_L(x) = \frac{\psi_R(x_M)}{\psi_L(x_M)}\psi_L(x)$ para todo x no intervalo $[x_L, x_M]$, o que garante a continuidade. O próximo passo é analisar como as derivadas se comportam em x_M de acordo com o chute para o valor de E .

¹ Por simplicidade, uma vez discutida a redefinição de unidades para que as grandezas fiquem adimensionais, vamos denotar $\bar{x} \rightarrow x$, $\bar{\psi} \rightarrow \psi$, $\bar{E} \rightarrow E$ e assim por diante.

Na Figura 1, vemos que as funções de onda não são suaves em x_M . Nesse exemplo, foi considerado o potencial de Lennard-Jones, $V(x) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{x}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{x}\right)^6 \right]$, com $\varepsilon = 10$, $\sigma = 1$ e energia do estado fundamental $E_0 \approx -1.89$. No método do encontro, vemos que, a cada nova iteração, a energia é variada em torno de E_0 para que as derivadas coincidam no ponto de encontro entre ψ_L e ψ_R dentro de uma tolerância pré-estabelecida.

2.2 O método variacional de Monte Carlo (VMC)

Na seção anterior, discutimos como obter a função de onda para problemas unidimensionais de uma partícula em potenciais contínuos e assimétricos. Através da abordagem variacional, podemos nos aproximar do estado fundamental de sistemas mais gerais usando o *ansatz* de propor uma função de onda que captura o máximo de informações físicas do problema, denotada por ψ_T .

2.2.1 O método variacional

Vamos considerar um sistema quântico descrito por um Hamiltoniano H e uma função de onda qualquer $\psi_T(\mathbf{r})$ que respeita as condições de contorno do sistema. Se $\phi_n(\mathbf{r})$ forem os autoestados de H , ou seja, $H\phi_n(\mathbf{r}) = E_n\phi_n(\mathbf{r})$, sabemos que eles formam um conjunto completo e portanto $\psi_T(\mathbf{r})$ pode ser escrita como

$$\psi_T(\mathbf{r}) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \phi_n(\mathbf{r}). \quad (2.3)$$

O valor esperado de H , denotado por E_T , é dado por

$$E_T = \frac{\int \psi_T^* H \psi_T d^3\mathbf{r}}{\int |\psi_T|^2 d^3\mathbf{r}}. \quad (2.4)$$

Pela ortogonalidade das autofunções de operadores hermitianos,

$$\int \phi_n^*(\mathbf{r}) \phi_m(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} = \delta_{n,m}, \quad (2.5)$$

temos que

$$E_T = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} E_n |c_n|^2}{\sum_{n=0}^{\infty} |c_n|^2} = E_0 + \frac{\sum_{n=1}^{\infty} (E_n - E_0) |c_n|^2}{\sum_{n=0}^{\infty} |c_n|^2} \geq E_0. \quad (2.6)$$

Ou seja, a energia E_T é limitada superiormente por E_0 . Esse fato nos permite propor funções de onda ψ_T com parâmetros livres e minimizá-la com relação a esse conjunto de parâmetros para nos aproximarmos do estado fundamental (5).

2.2.2 O algoritmo de Metropolis

O método de Monte Carlo possibilita o cálculo de diversas grandezas de interesse em sistemas físicos, entre elas, a sua energia total. Para realizar esse cálculo, são usadas diversas

configurações do sistema (posições das partículas no espaço), onde cada uma delas tem associada uma probabilidade de ocorrência. Assim, a energia total do sistema é dada pela média das energias de cada configuração, ponderada por uma densidade de probabilidade de ocorrência.

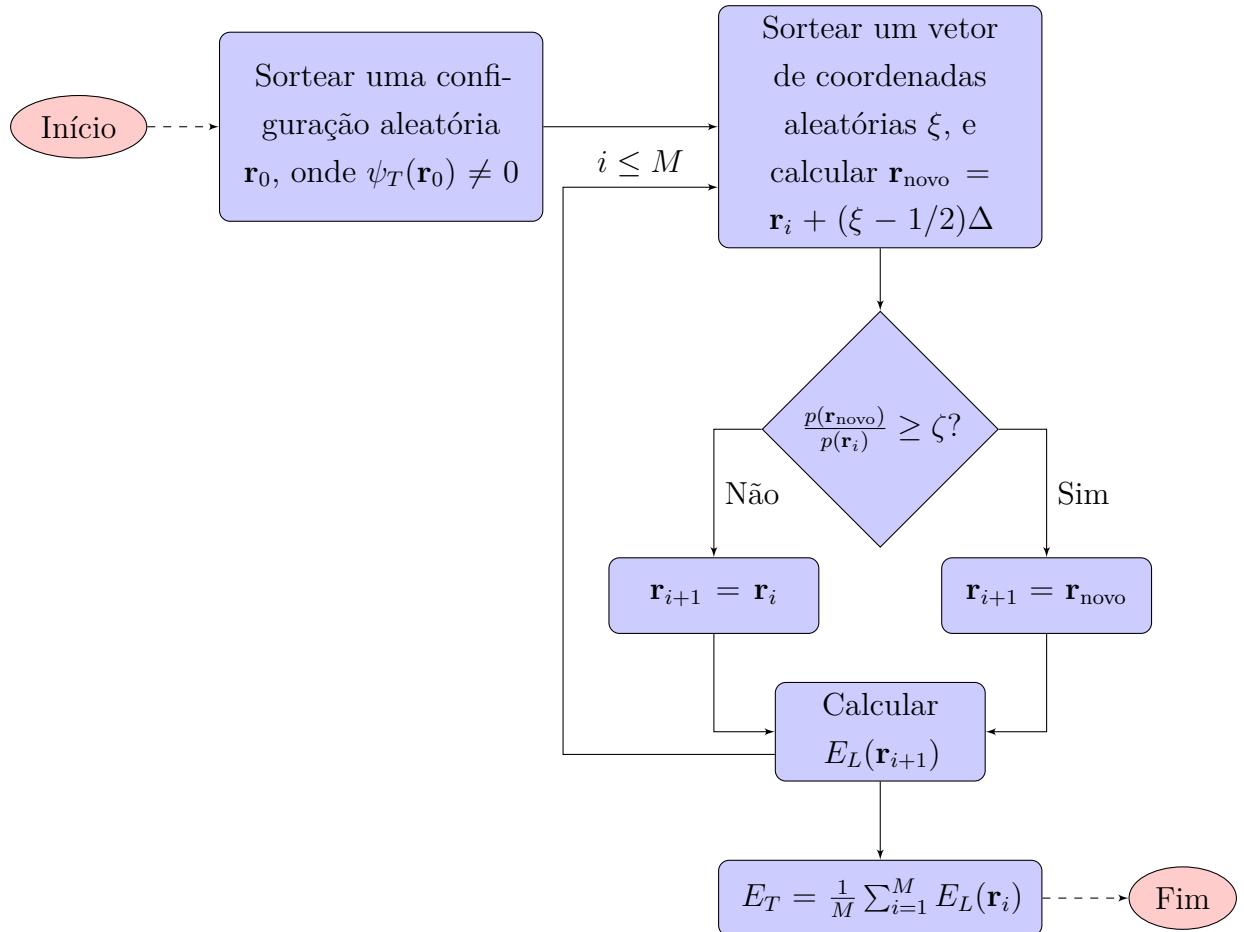
Um dos algoritmos que permite essa amostragem é o algoritmo de Metropolis, que obtém, a cada passo, uma nova configuração a partir da anterior, utilizando uma densidade de probabilidade dada por $|\psi_T|^2$. Isso garante que configurações mais prováveis ocorram com mais chance na média das grandezas de interesse (6). Vamos considerar a seguinte expressão:

$$E_T = \frac{\int \psi_T^* H \psi_T d^3\mathbf{r}}{\int |\psi_T|^2 d^3\mathbf{r}} = \frac{\int |\psi_T|^2 \left(\frac{H\psi_T}{\psi_T} \right) d^3\mathbf{r}}{\int |\psi_T|^2 d^3\mathbf{r}} = \int p(\mathbf{r}) E_L(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r}, \quad (2.7)$$

onde

$$p(\mathbf{r}) = \frac{|\psi_T(\mathbf{r})|^2}{\int |\psi_T|^2 d^3\mathbf{r}} \quad \text{e} \quad E_L(\mathbf{r}) = \frac{H\psi_T(\mathbf{r})}{\psi_T(\mathbf{r})} \quad (2.8)$$

são, respectivamente, a densidade de probabilidade de encontrar a partícula em uma posição \mathbf{r} qualquer e a energia local da partícula. O algoritmo de Metropolis tem a seguinte forma:



Nesse fluxograma, o parâmetro Δ determina a amplitude do deslocamento de cada partícula, ζ é um número aleatório distribuído uniformemente no intervalo $0 \leq \zeta \leq 1$ e M é o número de iterações. Note que no algoritmo de Metropolis não é necessário sabermos o valor da constante

de normalização $\int |\psi_T|^2 d^3\mathbf{r}$, pois ela não depende da posição \mathbf{r} e portanto é cancelada na razão $p(\mathbf{r}_{\text{novo}})/p(\mathbf{r}_i)$. Esse algoritmo é consideravelmente útil em diversas aplicações na física, pois permite a amostragem de qualquer distribuição de probabilidade.

2.3 O Hamiltoniano do problema

Neste trabalho, consideramos um sistema de N bôsons de massa m confinados em um potencial externo, $V_{\text{ext}}(\mathbf{r})$, e interagindo via um potencial de dois corpos, $V_{\text{int}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$. O Hamiltoniano do problema é dado por (7)

$$H = \sum_{i=1}^N \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + V_{\text{ext}}(\mathbf{r}_i) \right) + \sum_{i < j} V_{\text{int}}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j), \quad (2.9)$$

onde o potencial externo é dado por uma armadilha harmônica elíptica,

$$V_{\text{ext}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2}m [\omega_{\text{ho}}^2(x^2 + y^2) + \omega_z^2 z^2] \quad (2.10)$$

Nessa expressão, ω_{ho}^2 define a magnitude do potencial confinante. O deslocamento quadrático médio de um único bôson a $T = 0K$ é $\langle x^2 \rangle = \hbar^2/(2m\omega_{\text{ho}})$, e então $a_{\text{ho}} = (\hbar/m\omega_{\text{ho}})^{1/2}$ define o comprimento característico da armadilha. A razão entre as frequências é denotada por $\lambda = \omega_z/\omega_{\text{ho}}$, e portanto a razão entre os comprimentos da armadilha é dada por $a_{\text{ho}}/a_z = (\omega_z/\omega_{\text{ho}})^{1/2} = \sqrt{\lambda}$.

A interação entre os bôsons é dada por um potencial de pares de esferas duras:

$$V_{\text{int}}(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|) = \begin{cases} 0, & \text{se } |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j| \geq a \\ \infty, & \text{se } |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j| < a \end{cases} \quad (2.11)$$

onde a é o diâmetro de esfera dura dos bôsons. Neste potencial, vemos que os bôsons ficam livres uns dos outros se estão separados de uma distância maior que a e sentem uma barreira de potencial infinita se tentarem se aproximar de uma distância menor que a . Introduzindo comprimentos em unidades de a_{ho} , $r' = r/a_{\text{ho}}$, e energias em unidades de $\hbar\omega_{\text{ho}}$, o Hamiltoniano é escrito como

$$H = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \left(-\nabla_i^2 + x_i^2 + y_i^2 + \lambda^2 z_i^2 \right) + \sum_{i < j} V_{\text{int}}(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|). \quad (2.12)$$

Para descrever o estado fundamental do sistema, vamos propor uma função de onda variacional dada pelo produtório de funções de uma partícula $g(\mathbf{r})$ e funções de pares $f(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|)$,

$$\Psi_T(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, \alpha, \beta) = \prod_{i=1}^N g(\alpha, \beta, \mathbf{r}_i) \prod_{i < j} f(a, |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|), \quad (2.13)$$

onde α e β são os parâmetros variacionais. Como resultado conhecido do oscilador harmônico tridimensional, a função de um corpo é dada por uma gaussiana com anisotropia no eixo z ,

$$g(\alpha, \beta, \mathbf{r}_i) = \exp \left[-\alpha(x_i^2 + y_i^2 + \beta z_i^2) \right] \quad (2.14)$$

Para $\beta = 1$, vemos que o caso isotrópico é recuperado, e para bôsons não-interagentes ($a = 0$), temos novamente que $\alpha = 1/2a_{\text{ho}}$. A função de pares usada é a solução exata da equação de Schrödinger para duas partículas interagindo via potencial de esfera dura no limite de baixas energias $k \rightarrow 0$,

$$f(a, r) = \begin{cases} \left(1 - \frac{a}{r}\right), & \text{se } r > a \\ 0, & \text{se } r \leq a \end{cases} \quad (2.15)$$

onde $r \equiv |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$. Vemos que a função de onda variacional Ψ_T tem a forma correta quando $r \leq a$ e se aproxima de um produtório de gaussianas quando $r \gg a$ e $a_{\text{ho}} \gg a$, que é o limite fracamente interagente. No caso mais geral, os parâmetros α e β descrevem o afastamento dos bôsons ao longo da armadilha quando o diâmetro a é aumentado.

Mais precisamente, o limite fracamente interagente é dado por $a \ll a_{\text{ho}}$ e $a \ll n^{-1/3}$, onde $n \equiv N/V$ é a densidade de número. Isso significa que nesta situação temos um caroço de esfera dura muito menor que as dimensões da armadilha e o espaçamento entre as partículas, $l \equiv (V/N)^{1/3}$. Para átomos de metais alcalinos aprisionados, temos tipicamente $na^3 \leq 10^{-5}$.

Como no nosso caso de estudo há condensação de Bose-Einstein, $n\lambda_T^3 \geq 2.616$, e então $\lambda_T \gg a$ ou $ka \ll 1$, onde $k = 2\pi/\lambda_T$. Nesse limite, a interação de duas esferas duras é bem descrita pelo espalhamento de ondas- s a baixas energias, cujo comprimento de espalhamento é a . Essa interação pode ser aproximada por um potencial de contato no regime $a \ll \lambda_T$, de onde obtemos a equação de Gross-Pitaevskii na próxima seção. A partir dela, podemos comparar os seus resultados com os obtidos pelo método de Monte Carlo. Como discutido acima, é esperado que essa comparação seja interessante no limite $na^3 \ll 1$, e para altas densidades ($na^3 \geq 0.1$), é esperado que aconteçam correlações de pares de curto alcance, que não são bem descritas pela aproximação de GP.

2.4 Equação de Gross-Pitaevskii e as interações entre os átomos

A equação de Gross-Pitaevskii descreve as propriedades de um gás de Bose não uniforme a $T = 0\text{K}$ quando o comprimento de espalhamento a é muito menor que o espaçamento entre os átomos e as dimensões do confinamento do sistema $\sim a_{\text{ho}}$.

Na representação de momento, a interação efetiva entre duas partículas a baixas energias é uma constante, $U_0 = 4\pi\hbar^2 a/m$ (8). No espaço de coordenadas, isso corresponde a uma interação de contato $U_0\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$, onde \mathbf{r} e \mathbf{r}' são as posições das duas partículas. Para calcular a energia dos estados de muitos-corpos, usamos o método de Hartree ou de campo médio, assumindo que a função de onda do sistema é um produtório simetrizado de funções de onda de uma partícula, e todos os N bôsons estão no mesmo estado denotado por $\phi(\mathbf{r})$:

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) = \prod_{i=1}^N \phi(\mathbf{r}_i), \quad (2.16)$$

onde as funções de uma partícula são normalizadas na forma

$$\int d^3\mathbf{r} |\phi(\mathbf{r})|^2 = 1. \quad (2.17)$$

Essa função de onda não contém as correlações entre os átomos devido à interação quando eles estão próximos uns dos outros. Esses efeitos são levados em conta usando o potencial efetivo $U_0\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$. O Hamiltoniano efetivo do problema é escrito como

$$H = \sum_{i=1}^N \left[\frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + V(\mathbf{r}_i) \right] + U_0 \sum_{i < j} \delta(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j), \quad (2.18)$$

onde $V(\mathbf{r})$ é o potencial externo e $\mathbf{p}_i \rightarrow -i\hbar\nabla_i$. A energia do estado Ψ é o valor esperado do operador H ,

$$\begin{aligned} E &= \int d^3\mathbf{r}_1 d^3\mathbf{r}_2 \cdots d^3\mathbf{r}_N \Psi^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) H \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) \\ &= N \int d^3\mathbf{r} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \phi^*(\mathbf{r}) \nabla^2 \phi(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r}) |\phi(\mathbf{r})|^2 \right] + \int d^3\mathbf{r}_1 \cdots d^3\mathbf{r}_N \left[U_0 \sum_{i < j} \delta(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \prod_{k=1}^N |\phi(\mathbf{r}_k)|^2 \right] \\ &= N \int d^3\mathbf{r} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \phi^*(\mathbf{r}) \nabla^2 \phi(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r}) |\phi(\mathbf{r})|^2 \right] + \frac{N(N-1)}{2} \int d^3\mathbf{r} U_0 |\phi(\mathbf{r})|^4 \\ &= N \int d^3\mathbf{r} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \phi^*(\mathbf{r}) \nabla^2 \phi(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r}) |\phi(\mathbf{r})|^2 + \frac{(N-1)}{2} U_0 |\phi(\mathbf{r})|^4 \right] \end{aligned} \quad (2.19)$$

Vamos agora apenas redefinir a função de onda do estado condensado:

$$\psi(\mathbf{r}) = N^{1/2} \phi(\mathbf{r}) \implies \int d^3\mathbf{r} |\psi(\mathbf{r})|^2 = N, \quad (2.20)$$

de modo que a densidade de partículas é dada por $n(\mathbf{r}) = |\psi(\mathbf{r})|^2 = N|\phi(\mathbf{r})|^2$. Em termos de $\psi^*(\mathbf{r})$, a energia é escrita como

$$E[\psi^*] = \int d^3\mathbf{r} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \psi^* \nabla^2 \psi + V(\mathbf{r}) |\psi|^2 + \frac{(1-1/N)}{2} U_0 |\psi|^4 \right]. \quad (2.21)$$

Para $N \gg 1$, obtemos

$$E[\psi^*] = \int d^3\mathbf{r} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \psi^* \nabla^2 \psi + V(\mathbf{r}) |\psi|^2 + \frac{U_0}{2} |\psi|^4 \right]. \quad (2.22)$$

Vamos agora minimizar a energia com o vínculo $N = \int d^3\mathbf{r} |\psi(\mathbf{r})|^2$. Utilizando o método dos multiplicadores de Lagrange, impomos que $\delta E - \mu \delta N = 0$. Então,

$$\int d^3\mathbf{r} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial}{\partial \psi^*} (\psi^* \nabla^2 \psi) + V(\mathbf{r}) \frac{\partial}{\partial \psi^*} (|\psi|^2) + \frac{U_0}{2} \frac{\partial}{\partial \psi^*} (|\psi|^4) - \mu \frac{\partial}{\partial \psi^*} (|\psi|^2) \right) \delta \psi^* = 0 \quad (2.23)$$

Efetuando as derivadas,

$$\int d^3\mathbf{r} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) + U_0|\psi(\mathbf{r})|^2\psi(\mathbf{r}) - \mu\psi(\mathbf{r}) \right) \delta\psi^* = 0 \quad (2.24)$$

Como a igualdade acima deve valer para qualquer variação $\delta\psi^*$, obtemos

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) + U_0|\psi(\mathbf{r})|^2 \right) \psi(\mathbf{r}) = \mu\psi(\mathbf{r}), \quad (2.25)$$

que é a equação de Gross-Pitaevskii independente do tempo. Ela tem o mesmo formato da equação de Schrödinger, onde agora o potencial que atua nas partículas é a soma do potencial externo $V(\mathbf{r})$ com o termo não-linear $U_0|\psi(\mathbf{r})|^2$, que leva em conta o **campo médio** produzido pelos outros bósons. Nessa aproximação, a energia de interação de um átomo em uma posição \mathbf{r} é dada pela densidade dos outros átomos nesse mesmo ponto vezes a interação efetiva. O autovalor desta equação é o potencial químico μ , e não a energia por partícula como na equação de Schrödinger. Para partículas não interagentes no mesmo estado, o potencial químico é igual à energia por partícula, mas para partículas interagentes não.

Essa equação também pode ser resolvida numericamente para armadilhas de diferentes geometrias, de onde obtemos grandezas de interesse do problema, como a energia por partícula e o perfil de densidade do sistema. Neste trabalho, foi feita a comparação entre o método de Monte Carlo e a teoria de campo médio através da simulação numérica da equação de Gross-Pitaevskii dependente do tempo para um potencial harmônico $V(\mathbf{r})$. O algoritmo pronto utilizado para simular essa equação com os mesmos parâmetros do código desenvolvido neste trabalho está disponível em (9).

3 Resultados

3.1 Oscilador harmônico unidimensional - Método do encontro

Com o método do encontro (equação 2.2), foi possível determinar o estado fundamental e os estados excitados de uma partícula em um oscilador harmônico quântico unidimensional,

$$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2x^2 \quad (3.1)$$

Para a equação de Schrödinger desse sistema ser adimensional, tomamos $\bar{x} = x/L$, onde $L \equiv \sqrt{\hbar/m\omega}$ e $\bar{E} = E/\hbar\omega$. Os parâmetros utilizados foram $\Delta x = 5 \times 10^{-4}$, $x_L = -5$, $x_R = 5$ e $x_M = 0.2$. Foi utilizada uma tolerância $\varepsilon = 10^{-3}$ para a determinação dos valores de energia, e a variação da energia foi iniciada com o valor $\Delta E = 0.2$. Quanto às condições de contorno, foi definido para a solução que $\psi_L(x_L) = \psi_R(x_R) = 0$ e $\psi_L(x_L + \Delta x) = \psi_R(x_R - \Delta x) = 0.1\Delta x$.

Na Figura 2, vemos as autofunções normalizadas dos primeiros 3 estados do oscilador harmônico. Vale ressaltar que os gráficos dos estados excitados foram apenas deslocados da origem para melhor visualizar todas as funções em uma única figura, mas todas as funções estão normalizadas.

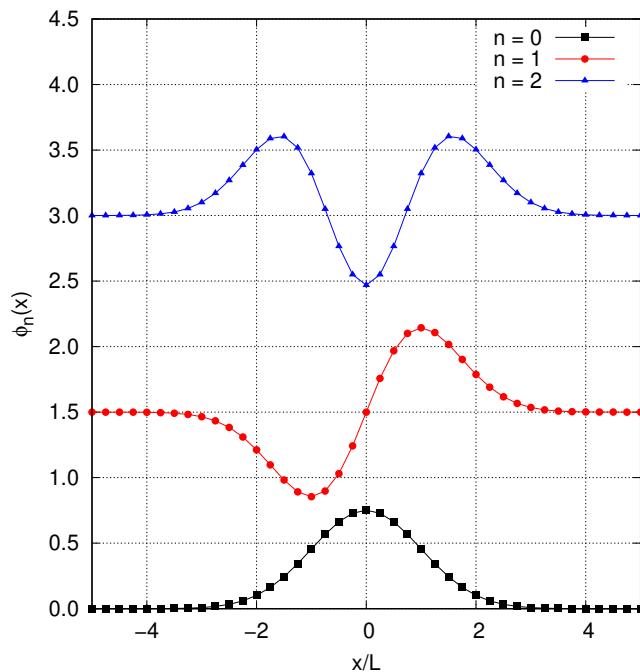


Figura 2 – Autoestados de menor energia do oscilador harmônico quântico. Fonte: Elaborado pelo autor.

Uma propriedade importante que podemos notar para essas funções é que todas elas têm paridade bem definida, o que já era esperado pelo oscilador harmônico se tratar de um potencial par. Na Tabela 1, comparamos as autoenergias obtidas numericamente com as respectivas respostas analíticas, $E_n/\hbar\omega \equiv \bar{E}_n = n + 1/2$.

Tabela 1 – Comparação das energias analíticas com os resultados numéricos. Fonte: Elaborado pelo autor.

n	E_n analítica	E_n numérica	$ \Delta E $
0	0.5000	0.5008	0.0008
1	1.5000	1.5008	0.0008
2	2.5000	2.5008	0.0008
3	3.5000	3.5008	0.0008
4	4.5000	4.5008	0.0008

Vemos que, no intervalo de erro, os resultados do método do encontro estão de acordo com a expressão analítica. O erro obtido já era esperado, pois a precisão da simulação foi definida como sendo $\varepsilon = 10^{-3}$ e o algoritmo integra a função de onda enquanto $|\Delta E| > \varepsilon$.

3.2 Oscilador harmônico tridimensional - VMC

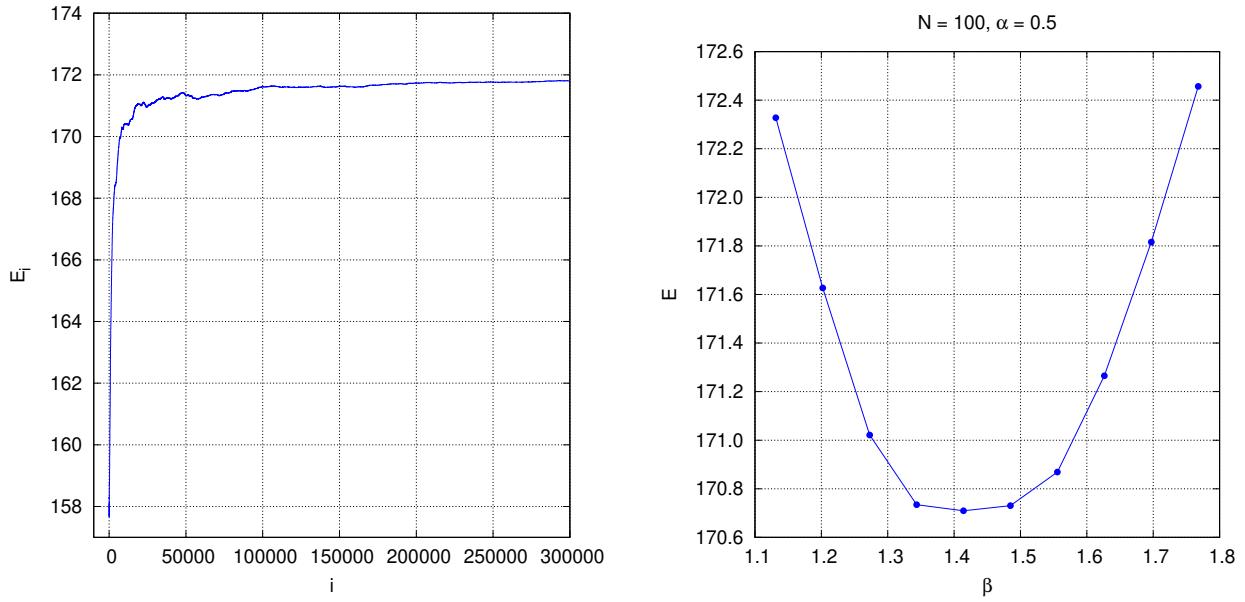
Antes de resolver o Hamiltoniano dos bósons interagentes 2.12, consideramos N bósons não interagentes em um oscilador harmônico tridimensional e anisotrópico,

$$H = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \left(-\nabla^2 + x_i^2 + y_i^2 + \lambda^2 z_i^2 \right). \quad (3.2)$$

Considerando o Hamiltoniano 3.2, por se tratar de um sistema bosônico, foi proposta uma função de onda variacional dada pelo produtório simetrizado das autofunções de uma partícula (5),

$$\Psi_T(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) = \prod_{i=1}^N g(\alpha, \beta, \mathbf{r}_i) = \prod_{i=1}^N \exp \left[-\alpha(x_i^2 + y_i^2 + \beta z_i^2) \right], \quad (3.3)$$

onde α e β são os parâmetros variacionais do problema. A ideia do método variacional é variar α e β para determinar a energia mínima do sistema. Para cada conjunto de parâmetros (α, β) , a energia converge para um determinado valor (Figura 3a), que é dado pela amostragem das posições das partículas de acordo com a ponderação definida pela função de onda variacional Ψ_T (10). Na Figura 3, vemos a determinação do estado fundamental do Hamiltoniano 3.2, com $N = 100$ e $\lambda = \sqrt{2}$, usando a função de onda variacional 3.3.



(a) Convergência da energia no método VMC

(b) Dependência com o parâmetro variacional

Figura 3 – Exemplo de resultados para N fixo. Fonte: Elaborado pelo autor.

A consideração desse sistema foi um passo importante na realização deste trabalho pois ele tem solução analítica, cuja função de onda é dada pelo produtório das funções de um corpo, como em 3.3, com $\alpha = 0.5$ e $\beta = \lambda = \sqrt{2}$ para a anisotropia no eixo z . O estado fundamental desse sistema tem autoenergia dada por

$$E_0 = N \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2} + \frac{\lambda}{2} \right) = N \left(1 + \frac{\lambda}{2} \right). \quad (3.4)$$

Na Tabela 2, comparamos essas soluções com o resultado do método variacional.

Tabela 2 – Comparaçāo das autoenergias 3.4 com o método VMC. Fonte: Elaborado pelo autor.

N	E_0 analítica	E_0 numérica	$ \Delta E $
10	17.07106781187	17.07106781189	2×10^{-11}
50	85.35533905933	85.35533905926	7×10^{-11}
100	170.7106781187	170.7106781185	2×10^{-10}
250	426.7766952966	426.7766952964	2×10^{-10}
500	853.5533905933	853.5533905929	4×10^{-10}
1000	1707.106781187	1707.106781185	2×10^{-9}

Nas simulações, foi utilizado um total de passos $M = 5 \times 10^4$. O erro $|\Delta E|$ foi calculado de acordo com o desvio padrão σ da amostra de dados, que mede a dispersão dos dados em relação ao valor médio da amostra. Vemos que os resultados concordam dentro do intervalo de incerteza.

3.3 Sistema de bōsons interagentes

Com os resultados numéricos do caso não-interagente, foi possível estudar o efeito da interação de pares a partir do método de Monte Carlo. Considerando o Hamiltoniano 2.12, onde $\lambda = \sqrt{2}$

e $a = 4 \times 10^{-3}$, inicialmente foram obtidos os resultados da equação de Gross-Pitaevskii a partir da sua simulação numérica (9). Na Figura 4, apresentamos um corte em $y = 0$ e $z = 0$ das funções de onda para diferentes valores de N .

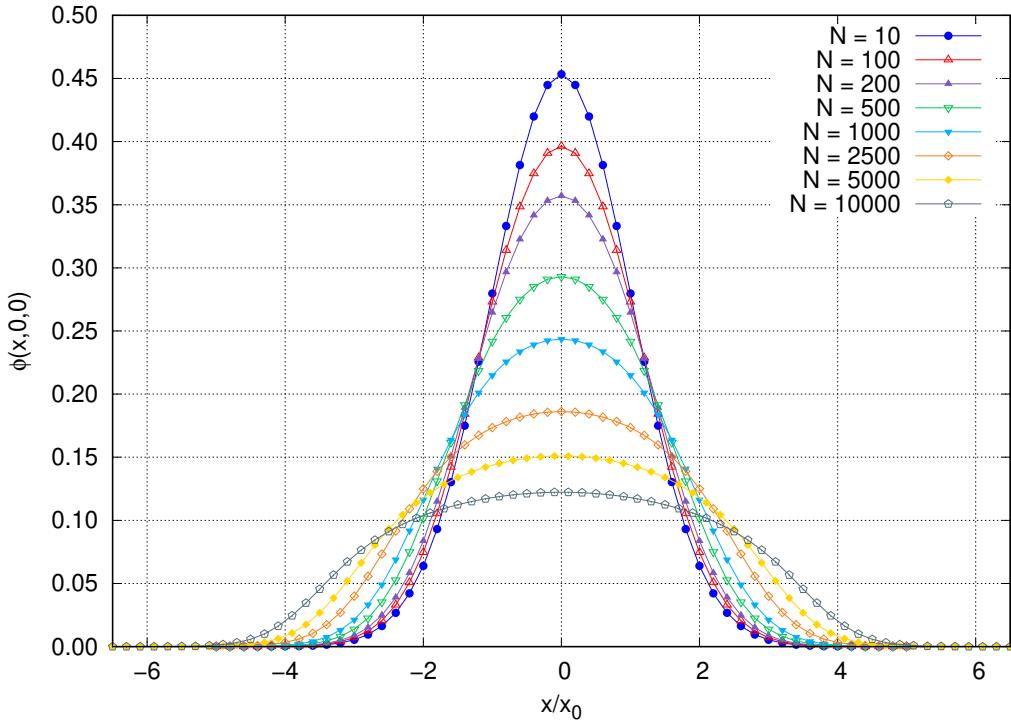


Figura 4 – Autofunções da equação de GP com $a = 4 \times 10^{-3}$. Fonte: Elaborado pelo autor.

Com esse resultado, podemos notar algumas propriedades interessantes do sistema: primeiramente, como esperado, para N muito pequeno, a função de onda do sistema se assemelha a uma gaussiana. Para N grande, vemos que a função de onda tem alcances maiores em x , pois nesse regime o potencial repulsivo passa a competir com o potencial confinante.

No método de Monte Carlo, para que a solução esteja próxima do estado fundamental, sabemos que Ψ_T deve se aproximar da densidade de probabilidade de encontrar os bôsons na armadilha. Então, podemos usar o resultado acima e notar o que deve ser feito com os parâmetros α e β da expressão 2.14: dado que a largura da gaussiana deve aumentar, então α deve diminuir em relação ao caso não-interagente, $\alpha_0 = 0.5$. Além disso, devido à anisotropia $\lambda > 1$ no eixo z , a nova função de onda deve continuar sendo mais estreita nessa direção e portanto β deve aumentar em relação a $\beta_0 = \lambda = \sqrt{2}$.

Então, o primeiro passo foi determinar a dependência da energia com os parâmetros α e β na simulação de Monte Carlo. Na Figura 5, vemos alguns exemplos.

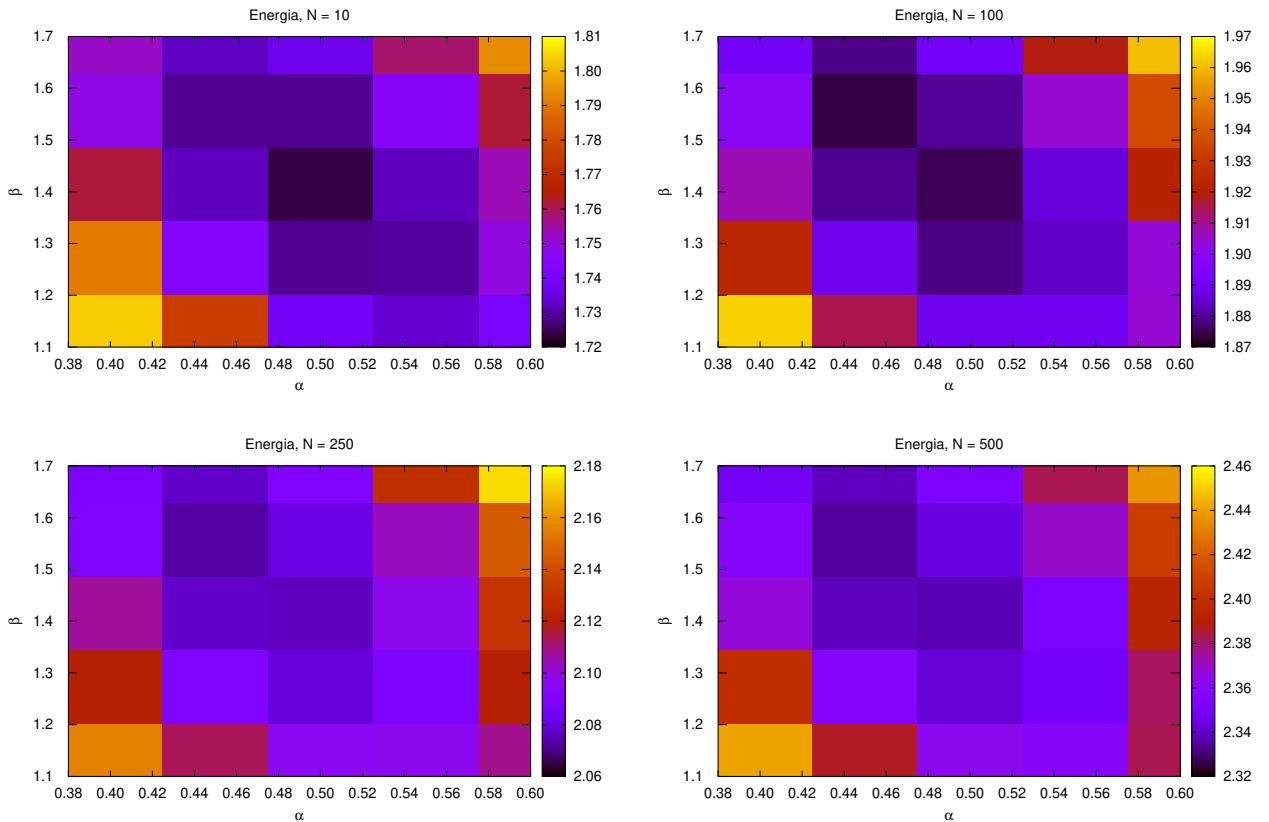


Figura 5 – Dependência da energia com os parâmetros variacionais α e β . Fonte: Elaborado pelo autor.

Como vemos acima, para cada N , foram usados 25 pares de parâmetros variacionais (α, β) , com valores próximos aos do caso não interagente $\alpha = 0.5$ e $\beta = \sqrt{2}$. Esse procedimento foi repetido até $N = 10^4$ bôsons, de onde foi possível avaliar a dependência da energia por partícula.

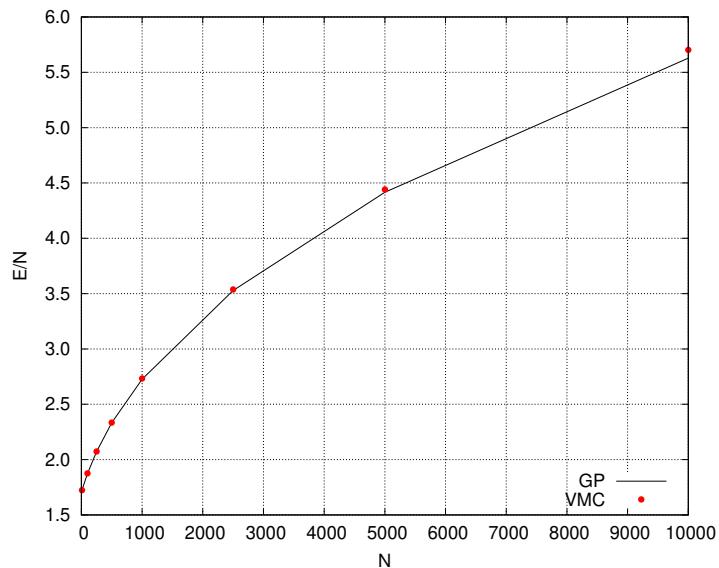


Figura 6 – Energias por partícula calculadas através da equação de Gross-Pitaevskii (GP) e do método variacional de Monte Carlo (MC). Fonte: Elaborado pelo autor.

Na Figura 6, vemos que no caso interagente a energia por partícula não é mais constante. Além disso, pode-se notar que os resultados da teoria de campo médio e do método de Monte Carlo passam a não concordar para N da ordem de $10^3 - 10^4$. Isso ocorre porque nesse caso estamos lidando com o regime fortemente interagente. Como foi mencionado anteriormente, para metais alcalinos aprisionados no limite fracamente interagente, temos $na^3 \leq 10^{-5}$. No nosso estudo, consideramos o comprimento de espalhamento $a/a_{\text{ho}} = 4 \times 10^{-3}$ para simular um gás de ^{87}Rb , e portanto para N da ordem de 10^4 obtemos $na^3 \sim 10^{-4}$.

Através das simulações de Monte Carlo, também foi possível obter o perfil de densidade dos átomos dentro da armadilha harmônica. O procedimento foi feito para $N = 64$ com diferentes comprimentos de espalhamento. Na Figura 7, podemos observar propriedades interessantes do nosso resultado: no limite em que o comprimento de espalhamento é muito maior que a_{Rb} , a densidade dos átomos é aproximadamente homogênea até uma certa distância finita d_0 e tende a zero nas bordas da armadilha. Esse resultado está de acordo com o esperado, pois o potencial harmônico tende a aproximar os bósons da origem, enquanto o potencial repulsivo afasta um em relação ao outro. Além disso, as densidades têm alcances maiores conforme o comprimento de espalhamento aumenta, o que também está de acordo com a competição entre o potencial repulsivo e o confinamento harmônico.

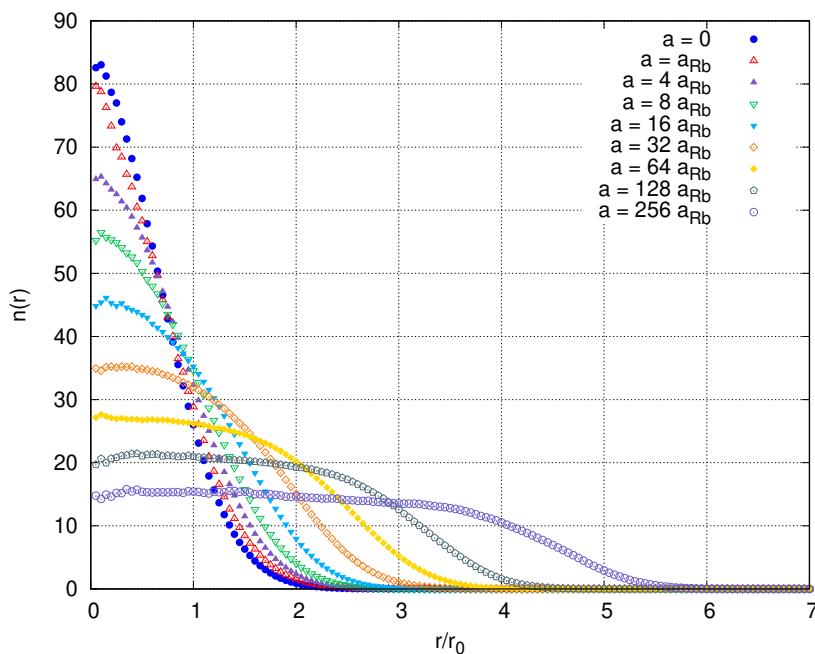


Figura 7 – Perfis de densidade $n(r)$ da armadilha harmônica. Fonte: Elaborado pelo autor.

3.4 Aspectos computacionais

Com os resultados apresentados na seção anterior, foi possível verificar a validade das respostas da simulação numérica desenvolvida neste trabalho, pois as energias por partícula concordam

de maneira satisfatória com a teoria de campo médio no regime fracamente interagente. Vale notar que o custo computacional necessário para resolver a evolução em tempo imaginário na equação de Gross-Pitaevskii é significativamente menor que o do método variacional de Monte Carlo. Então, para resolver sistemas fracamente interagentes, a equação de Gross-Pitaevskii é a alternativa mais adequada.

Quanto ao custo computacional do método variacional de Monte Carlo, a simulação desenvolvida neste trabalho calcula todas as possíveis interações de pares em uma dada configuração do algoritmo de Metropolis, que no total são $N(N - 1)/2$, onde N é o número de bósons. Para N grande, o total de interações é proporcional a N^2 . Portanto, considerando M passos de Monte Carlo, a complexidade do algoritmo escala com $\mathcal{O}(N^2 M)$. Isso foi verificado durante a execução do programa: quando N dobra, por exemplo, o tempo gasto é multiplicado por 4 para o mesmo número M de passos. Além disso, como discutido anteriormente, o método de Monte Carlo converge para a energia do estado fundamental após um certo tempo de equilíbrio. Então, para que o resultado esteja dentro do esperado, é necessário que M seja suficientemente grande.

Esse fator levou ao uso do cluster Heaviside disponibilizado pelo IFSC-USP, de modo que foi possível executar todos os conjuntos de parâmetros variacionais simultaneamente. A execução dos códigos foi feita através do sistema de filas, que distribui as simulações da forma mais eficiente entre os nós do cluster (cada nó possui 2 processadores de 8 núcleos físicos). Para $N \sim 10^4$, o tempo de execução foi da ordem de 1 semana, utilizando $M = 2.5 \times 10^4$.

Contudo, existem caminhos de otimização para esse processo. Um deles, que foi utilizado neste trabalho, é executar a simulação até um número de passos menor que M e salvar as posições dos átomos em um arquivo de **output**, que é posteriormente usado como o **input** da nova simulação. Isso garante que a energia média comece a partir da energia local da última configuração do arquivo **output** e as configurações mais prováveis contribuam mais rapidamente. Outra possível aceleração do processo de convergência ocorre a partir da geração das configurações iniciais \mathbf{r}_0 com números aleatórios que obedecem uma distribuição gaussiana de probabilidades. Isso também foi feito neste trabalho, através da transformação de Box-Müller (11), que converte números aleatórios de distribuições uniformes em distribuições gaussianas. Nesse caso, as configurações iniciais têm formatos mais próximos da distribuição de probabilidade que queremos amostrar (dada por $|\psi_T(\mathbf{r})|^2$) e foi possível a convergência do algoritmo para N grande em tempo hábil.

4 Conclusão

Neste trabalho, produzimos um código que implementa o método variacional de Monte Carlo e o utilizamos para calcular propriedades de um sistema de muitos-corpos formado por bósons interagentes em uma armadilha harmônica, tais como a energia por partícula e o perfil de densidade. Comparamos os resultados obtidos com soluções numéricas da equação de Gross-Pitaevskii utilizando o código disponível em (9). Os resultados concordaram com a teoria de campo médio no limite fracamente interagente, o que validou o algoritmo que foi construído e permitiu a consideração do caso fortemente interagente, o qual não é descrito pela equação de Gross-Pitaevskii.

Com base nos resultados deste trabalho, podemos concluir que o método variacional de Monte Carlo é uma ferramenta poderosa e versátil no cálculo de propriedades de sistemas quânticos. As vantagens da implementação deste método consistem na amostragem de qualquer distribuição de probabilidade $|\psi_T(\mathbf{r})|^2$ e o estudo de sistemas fortemente interagentes, como foi observado no limite de altas densidades.

Esses fatores tornam possível aplicar o algoritmo de Metropolis para calcular observáveis e distribuições espaciais em sistemas de interesse teórico e experimental, como gases bosônicos em outros tipos de armadilhas e ^4He líquido, por exemplo. Como perspectiva futura, vale notar que o código desenvolvido em Fortran90 neste trabalho pode ser diretamente adaptado para estudar esses sistemas, com algumas alterações na função de onda variacional e no Hamiltoniano. Empregamos funções de onda simétricas pela troca de partículas, pois estudamos sistemas bosônicos. No futuro, podemos considerar implementar funções de onda antissimétricas para descrever sistemas fermiônicos de interesse para a física atômica, tais como gases de Fermi degenerados.

Referências

- 1 ANDERSON, M. H. et al. Observation of Bose-Einstein condensation in a dilute atomic vapor. *Science*, v. 269, n. 5221, p. 198–201, 1995.
- 2 DAVIS, K. B. et al. Bose-Einstein condensation in a gas of sodium atoms. *Physical Review Letters*, American Physical Society, v. 75, p. 3969–3973, 1995.
- 3 PETHICK, C. J.; SMITH, H. *Bose-Einstein Condensation in dilute gases*. 2nd. ed. Cambridge: Cambridge University Press, 2008.
- 4 GIORDANO, N.; NAKANISHI, H. *Computational Physics*. New York: Pearson/Prentice Hall, 2006. ISBN 9780131469907.
- 5 SAKURAI, J.; NAPOLITANO, J. *Modern Quantum Mechanics*. Cambridge: Cambridge University Press, 2020. ISBN 9781108473224.
- 6 CANABRAVA, R.; VITIELLO, S. A. Partícula em um poço de potencial infinito e o método variacional de Monte Carlo. *Revista Brasileira de Ensino de Física*, Sociedade Brasileira de Física, v. 25, n. 1, p. 35–39, 2003. ISSN 1806-1117.
- 7 DUBOIS, J. L.; GLYDE, H. R. Bose-Einstein condensation in trapped bosons: a variational Monte Carlo analysis. *Physical Review A*, American Physical Society, v. 63, p. 023602, 2001.
- 8 MACÊDO-LIMA, M.; MADEIRA, L. Scattering length and effective range of microscopic two-body potentials. *Revista Brasileira de Ensino de Física*, FapUNIFESP (SciELO), v. 45, p. e20230079, 2023.
- 9 MURUGANANDAM, P.; ADHIKARI, S. Fortran programs for the time-dependent Gross–Pitaevskii equation in a fully anisotropic trap. *Computer Physics Communications*, v. 180, n. 10, p. 1888–1912, 2009. ISSN 0010-4655.
- 10 REIS, M. A. d.; VITIELLO, S. Método variacional com Monte Carlo aplicado ao oscilador harmônico quântico. *Revista Brasileira de Ensino de Física*, Sociedade Brasileira de Física, v. 28, n. 1, p. 45–50, 2006. ISSN 1806-1117.
- 11 PRESS, W. et al. *Numerical Recipes in FORTRAN 77*: volume 1, volume 1 of Fortran numerical recipes: the art of scientific computing. Cambridge: Cambridge University Press, 1992. ISBN 9780521430647.