

Curso 2012/13  
**CIENCIAS Y TECNOLOGÍAS/19**  
I.S.B.N.: 978-84-15910-82-4

**ANTONIO MUÑOZ MATEO**

**Defectos topológicos en condensados  
de Bose-Einstein de gases atómicos  
confinados en trampas magneto-ópticas**

**Director**  
**VICENTE DELGADO BORGES**



**SOPORTES AUDIOVISUALES E INFORMÁTICOS**  
**Serie Tesis Doctorales**

*Quiero agradecer a Maite y a Vicente  
su paciencia con este trabajo*

# Índice general

<b>Listado de publicaciones</b>	<b>ix</b>
<b>1. Introducción</b>	<b>1</b>
1.1. Contexto de este trabajo . . . . .	1
1.2. Contenido de la Tesis . . . . .	7
<b>2. Evolución dinámica de vórtices cuantizados de carga múltiple</b>	<b>13</b>
2.1. Inestabilidad dinámica en vórtices cuantizados de carga doble .	15
2.2. Resumen . . . . .	25
<b>3. Métodos analíticos para el cálculo de propiedades estacionarias</b>	<b>27</b>
3.1. Límites de la ecuación de Gross-Pitaevskii . . . . .	29
3.2. Métodos analíticos para condensados con un número arbitrario de partículas . . . . .	31
3.3. Condensados alargados . . . . .	33
3.4. Condensados achatados . . . . .	38
3.5. Resumen . . . . .	43
<b>4. Ecuaciones de movimiento efectivas de dimensionalidad reducida</b>	<b>45</b>
4.1. Ecuaciones efectivas para condensados alargados . . . . .	46
4.2. Ecuaciones efectivas para condensados achatados . . . . .	51
4.3. Deducción variacional de la ecuación efectiva unidimensional . .	54
4.4. Forma hidrodinámica de la ecuación efectiva unidimensional. Aplicación a oscilaciones colectivas. . . . .	60
4.5. Resumen . . . . .	63

<b>5. Solitones de gap sobre redes ópticas unidimensionales</b>	<b>65</b>
5.1. Validez de las ecuaciones efectivas para el cálculo de solitones de gap . . . . .	67
5.2. Solitones de gap en geometrías alargadas . . . . .	70
5.3. Caracterización de solitones de gap que contienen estructuras topológicas radiales no triviales . . . . .	79
5.4. Resumen . . . . .	85
<b>6. Discusión y conclusiones</b>	<b>87</b>
6.1. Conclusiones . . . . .	93
6.2. Continuación de la investigación . . . . .	97
<b>A. Publicaciones asociadas a esta Tesis</b>	<b>99</b>
A.1. Dynamical evolution of a doubly quantized vortex imprinted in a Bose-Einstein condensate . . . . .	100
A.2. Extension of the Thomas-Fermi approximation for trapped Bose-Einstein condensates with an arbitrary number of atoms . . . . .	105
A.3. Ground-state properties of trapped Bose-Einstein condensates: Extension of the Thomas-Fermi approximation . . . . .	110
A.4. Effective mean-field equations for cigar-shaped and disk-shaped Bose-Einstein condensates . . . . .	120
A.5. Effective one-dimensional dynamics of elongated Bose-Einstein condensates . . . . .	131
A.6. Three-dimensional gap solitons in Bose-Einstein condensates supported by one-dimensional optical lattices . . . . .	148
A.7. Gap solitons in elongated geometries: The one-dimensional Gross-Pitaevskii equation and beyond . . . . .	154
<b>Bibliografía</b>	<b>169</b>



## Listado de publicaciones

Esta Tesis, presentada en la modalidad de compendio de publicaciones, contiene los principales resultados de nuestra investigación sobre los defectos topológicos en condensados de Bose-Einstein de gases atómicos, junto a las publicaciones científicas (incluidas en el **Apéndice A**) que este trabajo ha generado:

- [A.1] *Evolution of a doubly quantized vortex imprinted in a Bose-Einstein condensate*, A. Muñoz Mateo and V. Delgado, Physical Review Letters **97**, 180409 (2006).
- [A.2] *Extension of the Thomas-Fermi approximation for trapped Bose-Einstein condensates with an arbitrary number of atoms*, A. Muñoz Mateo and V. Delgado, Physical Review A **74**, 065602 (2006).
- [A.3] *Ground-state properties of trapped Bose-Einstein condensates: Extension of the Thomas-Fermi approximation*, A. Muñoz Mateo and V. Delgado, Physical Review A **75**, 063610 (2007).
- [A.4] *Effective mean-field equations for cigar-shaped and disk-shaped Bose-Einstein condensates*, A. Muñoz Mateo and V. Delgado, Physical Review A **77**, 013617 (2008).
- [A.5] *Effective one-dimensional dynamics of elongated Bose-Einstein condensates*, A. Muñoz Mateo and V. Delgado, Annals of Physics (New York) **324**, 709 (2009).
- [A.6] *Three-dimensional gap solitons in Bose-Einstein condensates supported by one-dimensional optical lattices*, A. Muñoz Mateo, V. Delgado, and B. A. Malomed, Physical Review A **82**, 053606 (2010).
- [A.7] *Gap solitons in elongated geometries: The one-dimensional Gross-Pitaevskii equation and beyond*, A. Muñoz Mateo, V. Delgado, and B. A. Malomed, Physical Review A **83**, 053610 (2011).

# Capítulo 1

## Introducción

### 1.1 Contexto de este trabajo

Un sistema físico puede dar lugar a un condensado de Bose-Einstein cuando un número apreciable de las partículas que lo componen se encuentra en el mismo estado cuántico. Normalmente, en un sistema macroscópico, compuesto por numerosas partículas, hay una gran cantidad de estados cuánticos por partícula, disponibles para su ocupación. De hecho, en esta propiedad general reside la hipótesis fundamental de la física estadística, según la cual el elevado número de partículas y de microestados (o estados concretos de partícula) permite calcular magnitudes macroscópicas como promedios estadísticos sobre el conjunto. Sin embargo, en los condensados de Bose-Einstein el estado del sistema completo puede describirse de manera exacta por idénticas magnitudes que el estado cuántico de una sola de sus partículas componentes, y por ello es posible observar propiedades cuánticas coherentes, propiamente microscópicas, a escala macroscópica. Este fenómeno está presente en múltiples campos de la Física y su estudio se extiende a sistemas cuyas escalas o temperaturas pueden ser prácticamente cualesquiera, desde magnitudes subatómicas hasta escalas cosmológicas, tanto cerca del cero absoluto (en sistemas diluidos) como a muy altas temperaturas (en sistemas con altas densidades) [1, 2]. Algunos ejemplos característicos son la superfluidez en los fluidos y plasmas, la superconductividad en la física del estado sólido, el láser en óptica, los condensados diluidos de la física atómica y molecular, la condensación en el interior de los núcleos pesados o los (posibles) condensados formados por partículas elementales. Los condensados de Bose-Einstein también aparecen en el campo de la astrofísica, configurando la estructura interna de las estrellas de neutrones, y en cosmología se han postulado como responsables de la materia y energía oscuras.

Las partículas que pueden condensar en un mismo estado cuántico son bosones, o lo que es lo mismo, partículas con número cuántico de espín entero; ya que los fermiones, que poseen espín semientero, no pueden compartir los mismos microestados (aunque formando pares de Cooper, como ocurre en la superconductividad, los fermiones también pueden llegar a condensar). En el caso de condensados integrados por átomos, cuyos constituyentes (protones, neutrones y electrones) poseen espín semientero, el número total de partículas subatómicas debe ser par a fin de componer un espín global entero. Son bosones, por ejemplo, los átomos neutros de Hidrógeno-1 ( ${}^1_1\text{H}$ ), Helio-4 ( ${}^4_2\text{He}$ ), Litio-7 ( ${}^7_3\text{Li}$ ), Sodio-23 ( ${}^{23}_{11}\text{Na}$ ) o Rubidio-87 ( ${}^{87}_{37}\text{Rb}$ ). En particular, los gases de átomos de metales alcalinos (Li, Na, Rb, Cs) presentan condiciones especialmente adecuadas para generar condensados de Bose-Einstein a temperaturas muy bajas, y es en este tipo de sistemas en los que se centra esta Tesis. En ellos, y a diferencia del hidrógeno atómico con espín polarizado, que fue el primer candidato gaseoso estudiado (pero el último conseguido [3]), las interacciones entre los átomos alcalinos son en su mayoría binarias y elásticas, es decir, inefectivas para dar lugar a agregados de partículas que aparten al sistema del estado de gas atómico. Estas deseables características de la interacción pueden mantenerse siempre que el sistema sea lo suficientemente diluido, si bien la densidad no puede ser tan baja como se desee. Hay en consecuencia un rango adecuado de densidad y temperatura, en torno a  $10^{14} \text{ cm}^{-3}$  e inferior al microkelvin respectivamente, que posibilita la condensación del gas atómico en el estado fundamental del sistema, o estado de más baja energía para un confinamiento dado [4–6]. Sin embargo, tan extremas condiciones de densidad y temperatura son más propias del estado sólido, de tal forma que éste es el verdadero estado de menor energía, mientras que la condensación de Bose-Einstein corresponde a un estado metaestable cuya vida media puede llegar a ser del orden de segundos o incluso minutos.

Como se ha mencionado, la temperatura de un gas atómico diluido juega un papel importante en el número de estados cuánticos accesibles. Con el fin de reducir este número, y facilitar así la ocupación macroscópica de los microestados, hay que recurrir a bajar la temperatura  $T$ . Ya que ésta es un promedio sobre las energías cinéticas de las partículas que forman el gas,  $k_B T \sim mv^2/2$ , donde  $k_B$  es la constante de Boltzmann y  $m$  la masa, lograr temperaturas bajas conlleva disminuir la velocidad  $v$  de los átomos. A su vez, una velocidad menor implica una mayor longitud de onda asociada  $\lambda$ , es decir, una mayor desloca-

lización, pues  $\lambda = \frac{h}{mv} \sim \frac{h}{\sqrt{mk_B T}}$ . Por tanto, para conseguir un condensado de Bose-Einstein en estos sistemas hay que llegar hasta temperaturas próximas al cero absoluto (habitualmente unos pocos nanokelvin) y en consecuencia es necesario “frenar” los átomos, prácticamente pararlos, hasta que sus longitudes de onda lleguen a ser del orden del espaciado  $d$  entre partículas, es decir,  $\lambda/d \sim 1$ . Ya que este espaciado puede estimarse a partir de la densidad media  $n$  como  $d \sim n^{-\frac{1}{3}}$ , el estado límite en el que las longitudes de onda de partícula comienzan a solapar se alcanza cuando  $\lambda n^{\frac{1}{3}} \sim 1$ , o en términos de temperatura y densidad, cuando  $\frac{h}{\sqrt{mk_B T}} n^{\frac{1}{3}} \sim 1$ . Es en tales condiciones cuando el sistema puede ser descrito mediante una sola onda de materia.

Los métodos tradicionales de enfriamiento (criogenia) se valieron de contenedores de paredes sólidas y volúmenes variables para observar el comportamiento superfluido del Helio líquido a temperaturas en torno a 2 K. Mucho después, con los mismos procedimientos, se consiguieron temperaturas del orden de una milésima de Kelvin, pero los problemas de interacción entre el sistema a enfriar y las paredes del contenedor impidieron progresar con estos métodos. En los últimos treinta años del siglo anterior se desarrollaron técnicas de atrapamiento y enfriamiento de átomos en estado gaseoso mediante campos magnéticos y láser que permitieron alcanzar temperaturas menores que una millonésima de grado por encima del cero absoluto,  $10^{-6}$  K [7]. Pero el camino hasta los condensados de Bose-Einstein exigió no sólo continuar enfriando hasta temperaturas del orden del nanokelvin,  $10^{-9}$  K, sino también superar problemas adicionales ocasionados por la recombinación de las partículas. A tales temperaturas los átomos se mueven a velocidades inferiores a 1 mm/s y no pueden escapar ahora tan fácilmente de las fuerzas de interacción mutuas. Esto puede conducirlos primero a agrupamientos en forma de moléculas y finalmente al estado sólido, lo cual significa un alejamiento del objetivo, pues los grados de libertad añadidos por los agregados de partículas generan una multitud de nuevos estados accesibles. Finalmente, el método que resultó exitoso para obtener condensados en gases diluidos consiste en una combinación de enfriamiento láser, atrapamiento magnético y enfriamiento evaporativo en la trampa [8]. El enfriamiento mediante un haz láser, sintonizado a una frecuencia de transición atómica convenientemente desplazada por el efecto Doppler debido al movimiento de los átomos, consigue frenarlos (hasta velocidades de algunos metros por segundo) en un proceso de absorción de fotones sobre la dirección de propagación y emisión espontánea en direccio-

nes aleatorias. Con este principio se configura una etapa previa, mediante un atrapamiento magneto-óptico (MOT), que resulta eficiente para la reducción de velocidad en todas las direcciones espaciales. En ella se somete a los átomos, débilmente confinados por un campo magnético cuadrupolar, a ondas estacionarias de haces láser contrapuestos en las tres coordenadas espaciales, consiguiendo una “melaza” atómica cuya temperatura es inferior a 1 K. A estas temperaturas la nube atómica puede ser ya comprimida y atrapada por un campo magnético inhomogéneo más potente cuyo mínimo tiene habitualmente forma parabólica (trampa de Ioffe-Pritchard). En la etapa final, cuando la nube atómica adquiere la densidad apropiada para que haya suficientes colisiones elásticas, el enfriamiento evaporativo, producido al bajar la profundidad del confinamiento o inducido por radiofrecuencia, deja escapar a los átomos con mayor energía para reducir en varios órdenes de magnitud la temperatura de los que permanecen en la trampa.

Los potenciales tridimensionales inhomogéneos de confinamiento constituyen otra particularidad de los condensados de Bose-Einstein de gases atómicos diluidos. Esta circunstancia hace posible la detección del condensado como un agrupamiento de partículas en el espacio ordinario, de manera simultánea a la condensación de microestados en el espacio de fases, mientras que en los sistemas homogéneos la condensación se produce únicamente en este último espacio. Como se ha dicho anteriormente, el gas se encuentra confinado por medios ópticos o magnéticos en regiones espaciales con longitudes características de varias micras. Por ejemplo, en un trampa magnética de Ioffe-Pritchard, habitual en los experimentos, el campo magnético tiene la siguiente configuración

$$\mathbf{B} = B_0 \mathbf{1}_z + B'(\mathbf{1}_x - \mathbf{1}_y) + \frac{B''}{2} \left( (z^2 - \frac{1}{2}(x^2 + y^2)) \mathbf{1}_z - xz \mathbf{1}_x - yz \mathbf{1}_y \right), \quad (1.1)$$

donde  $B_0$  es el mínimo del campo magnético axial,  $B' = \frac{\partial B_x}{\partial x} = -\frac{\partial B_y}{\partial y}$  es el gradiente radial y  $B'' = \frac{\partial^2 B_z}{\partial z^2}$  la curvatura axial. Los valores típicos de estos parámetros son  $B_0 \simeq 1$  G,  $B' \simeq 10^2$  G/cm y  $B'' \simeq 10^2$  G/cm<sup>2</sup>. En esta trampa magnética, el potencial  $V = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}$  que experimenta un átomo del condensado, en el estado hiperfino  $|F, m_F\rangle$  y momento magnético  $\mu = g_F \mu_B m_F$ , puede aproximarse de forma muy precisa por un potencial armónico con simetría cilíndrica

$$V = g_F \mu_B m_F |\mathbf{B}| \simeq \frac{g_F \mu_B m_F}{2} \left( \left( \frac{B'^2}{B_0} - \frac{B''}{2} \right) (x^2 + y^2) + B'' z^2 \right), \quad (1.2)$$

donde  $g_F$  es el factor de desdoblamiento atómico y  $\mu_B$  es el magnetón de Bohr. Para los átomos alcalinos, las frecuencias de oscilador armónico generadas por el potencial anterior varían típicamente en el rango de  $10^{-1}$  hasta  $10^3$  Hz.

Entre las trampas ópticas cabe destacar a las redes periódicas generadas mediante ondas láser estacionarias [9]. El campo eléctrico oscilante del láser  $\boldsymbol{\varepsilon}(z, t)$ , generado por dos haces que se propagan con sentidos contrarios en la misma dirección,

$$\boldsymbol{\varepsilon}(z, t) = \varepsilon_0 (\cos(\omega t - kz) + \cos(\omega t + kz)) \mathbf{1}_x, \quad (1.3)$$

induce en los átomos un momento dipolar eléctrico  $\mathbf{D} = \alpha(\omega)\boldsymbol{\varepsilon}$  que da lugar a un potencial proporcional a la intensidad de la radiación  $\langle |\boldsymbol{\varepsilon}(z, t)|^2 \rangle_t$  y a la polarizabilidad dinámica atómica  $\alpha(\omega)$ :

$$V(z) = -\frac{1}{2}\alpha(\omega)\langle |\boldsymbol{\varepsilon}(z, t)|^2 \rangle_t = V_0 \cos^2(kz). \quad (1.4)$$

El espaciado de la red  $d = \pi/k$  toma valores en torno a  $1 \mu\text{m}$ , y la profundidad  $V_0 = sE_R$  típicamente varía dentro del rango  $0 < s \leq 20$ , medido en unidades de la energía característica de la red (*energía de retroceso*)  $E_R = (\hbar k)^2/2m$ . Cuando se ajusta la frecuencia del láser apropiadamente desplazada al rojo respecto a la resonancia con los niveles atómicos, se consigue que la fuerza dipolar resultante impulse a los átomos hacia los valores crecientes del campo eléctrico y que éste los atrape en el interior del haz. En estos potenciales puede estudiarse la dinámica de los condensados sobre las redes ópticas de forma similar a como se estudia la propagación de pulsos de luz láser en medios no lineales o el tránsito de los electrones por las redes cristalinas atómicas. Esta similitud entre sistemas, y el elevado control de los parámetros experimentales en los gases a baja temperatura, abre una vía para la investigación de fenómenos aún no suficientemente aclarados en el terreno de la superconductividad en términos de condensados de pares de fermiones.

Conviene señalar también la gran diversidad de estados del condensado que se consigue utilizando estos potenciales junto con rayos láser que permiten deformar localmente la nube de densidad. Pueden generarse sistemas con elevadas relaciones de aspecto o estados excitados que incorporan algún tipo de singularidad en su topología. Entre estos últimos, son especialmente relevantes en el terreno experimental los vórtices, núcleos de vorticidad cuantizada que caracterizan el comportamiento superfluido del condensado, y los solitones, ondas solitarias atómicas que aparecen en los potenciales periódicos o que conforman

las excitaciones fundamentales en el caso general. El análisis experimental de todos estos estados se realiza normalmente fuera de la trampa, tras liberar al condensado de su confinamiento y dejarlo evolucionar libremente durante unos pocos milisegundos. Al final de este proceso, denominado expansión balística, el sistema adquiere el tamaño suficiente para poder ser visualizado a través de imágenes de absorción de pulsos de luz.

Si los comparamos con los sistemas formados por  $^4\text{He}$  líquido superfluido (donde se detectó la condensación de Bose-Einstein por primera vez), los condensados de gases diluidos presentan interacciones interatómicas débiles, o de baja energía, entre átomos. Sin embargo, esto no significa que la energía de interacción total del sistema sea en general despreciable o pequeña frente a las energías cinética o potencial. En muchos casos, debido al elevado número de átomos presente (no son raros valores superiores a  $10^6$ ), la contribución a la energía total procedente de la interacción entre partículas es mucho mayor que la energía cinética. Estos sistemas “débilmente interactuantes”, como se los denomina, presentan la ventaja adicional de que la interacción, que en general es un fenómeno de largo alcance, puede describirse en buena aproximación en términos de una interacción de contacto efectivo entre átomos caracterizada por la longitud de dispersión de onda- $s$ ,  $a$  (que se determina experimentalmente). Por ejemplo, para el  $^{23}\text{Na}$  en el estado hiperfino  $|F = 1, m_F = 1\rangle$ ,  $a = 2.75$  nm; y para el  $^{87}\text{Rb}$  en el estado hiperfino  $|F = 2, m_F = 2\rangle$ ,  $a = 5.79$  nm. Para algunos átomos la longitud de dispersión de onda- $s$  puede tomar valores negativos, como por ejemplo para el  $^7\text{Li}$  en el estado hiperfino  $|F = 2, m_F = 2\rangle$ , donde  $a = -1.46$  nm. Hay que interpretar  $a < 0$  en el sentido de una interacción atractiva frente a la repulsiva producida por  $a > 0$ . En todos los casos, el valor absoluto de la longitud de dispersión determina un volumen de referencia, del orden de  $|a|^3$ , que permite medir el grado de dilución del condensado. Cuando el número adimensional  $|a|^3 n$ , producto de dicho volumen por la densidad media, toma valores pequeños, se deduce que la separación efectiva entre partículas es grande frente al “tamaño” de las mismas. Dado que para los valores apuntados antes esta condición de dilución se cumple holgadamente,  $|a|^3 n \sim 10^{-4}$ , es posible tratar la interacción interatómica dentro de la aproximación de campo medio, en la cual puede suponerse que cada partícula está inmersa en la nube de densidad (el campo medio) creada por las demás. En el caso de que todas las partículas estén en el condensado (límite de temperatura cero) esta aproximación conduce a la conocida Ecuación

ción de Gross-Pitaevskii para la función de onda (denominada parámetro de orden) del sistema [10].

## 1.2 Contenido de la Tesis

En este trabajo abordamos el estudio teórico de estados caracterizados por la presencia de defectos topológicos, tales como vórtices o solitones, en condensados de Bose-Einstein de gases atómicos diluidos. El análisis de las propiedades dinámicas y de estabilidad de este tipo de estructuras no lineales tiene gran interés tanto por su relevancia fundamental como por las potenciales aplicaciones que el control de estas ondas de materia puede permitir. En esta Tesis consideraremos condensados confinados por potenciales magnéticos y ópticos con interacciones repulsivas entre partículas ( $a > 0$ ), que constituyen el caso más representativo. Nuestro estudio se ceñirá al régimen de campo medio donde se ha demostrado que la ecuación de Gross-Pitaevskii proporciona una excelente descripción cuantitativa de los resultados experimentales [11–13].

Los defectos topológicos no lineales son estructuras localizadas sobre el estado de fondo del condensado que aumentan la complejidad de su dinámica. Esto es debido, por un lado, a la incorporación de nuevas escalas de longitud y tiempo propias del defecto en concreto, y por otro, a la habitual geometría altamente anisótropa del condensado que lo soporta. En estas condiciones un tratamiento tridimensional completo del sistema puede resultar muy exigente, por lo que es habitual simplificar el problema reduciendo su dimensionalidad para poder usar herramientas 1D ó 2D. No obstante, en muchas ocasiones sólo un análisis estrictamente tridimensional puede proporcionar toda la información que se necesita. En nuestro trabajo hemos abordado problemas diversos para los que hemos tenido que desarrollar tanto métodos tridimensionales como de dimensionalidad reducida. Pero incluso estos últimos requieren para su validación la confrontación con los resultados de la ecuación de Gross-Pitaevskii 3D. Para la resolución de esta ecuación hemos diseñado programas de cálculo numérico que permiten el análisis realista de condensados con variadas características propias de los montajes experimentales. Como se verá a lo largo de esta Tesis, la validez de estos programas ha sido corroborada por su buen acuerdo con múltiples resultados empíricos extraídos de las publicaciones científicas.

En el **Capítulo 2** de esta Tesis presentamos el estudio de un experimento de Ketterle y colaboradores sobre la estabilidad de vórtices de carga doble en



condensados alargados [14]. Este experimento había dejado abiertas interesantes cuestiones sobre el proceso de decaimiento de los vórtices. En particular, los resultados experimentales parecían contradecir las predicciones teóricas que se derivan de una aproximación de *densidad local* y no permitían identificar con certeza el origen de la inestabilidad de los vórtices múltiples. Nuestros programas de cálculo nos permitieron resolver numéricamente la ecuación de Gross-Pitaevskii tridimensional dependiente del tiempo en las condiciones del experimento. Cuando estos sistemas evolucionan en el tiempo desarrollan una estructura fina que sólo puede resolverse adecuadamente utilizando bases muy numerosas o mallas de puntos muy grandes. Aunque se trata de un problema numérico de dificultad considerable, nuestras simulaciones mostraron muy buen acuerdo cuantitativo con el experimento, y de esta manera pudimos demostrar que el decaimiento del vórtice era principalmente una consecuencia de un proceso no disipativo producido por una inestabilidad de tipo dinámico [A.1]. Nuestros resultados numéricos también evidenciaron que cuando el proceso dinámico se considera localmente, a lo largo de toda la longitud del vórtice, la aproximación de densidad local es consistente con los resultados experimentales.

Para un tratamiento numérico eficiente de problemas tan complejos como el anterior resulta esencial disponer de una estimación precisa de propiedades estacionarias del sistema tales como el potencial químico, el tamaño del condensado o su densidad. En principio, esto sólo es posible en los casos límite perturbativo y de Thomas-Fermi, mientras que los parámetros experimentales no se encuentran en general dentro de estos regímenes. En el **Capítulo 3** de esta Tesis proponemos métodos analíticos que conducen a fórmulas sencillas para buena parte de las propiedades estáticas de los condensados en potenciales armónicos. Estos métodos fueron presentados en un primer trabajo que abordó sistemas de dimensionalidad reducida [A.2] (condensados esféricos, alargados o achatados), y después fueron generalizados para condensados atrapados en potenciales armónicos de geometría arbitraria que podían incluir un vórtice centrado de carga múltiple [A.3]. En nuestra propuesta utilizamos como referencia la aproximación de Thomas-Fermi habitual y la modificamos convenientemente con objeto de considerar, de una manera sencilla, la contribución de la energía de punto cero del sistema. Esto nos permite derivar extensiones simples de las expresiones de Thomas-Fermi que son válidas para un número arbitrario de partículas en el régimen de campo medio. Las expre-

siones que obtenemos para las propiedades del estado fundamental se reducen a las fórmulas analíticas correctas tanto en el límite de Thomas-Fermi como en el perturbativo, y permanecen válidas y exactas entre ambos casos extremos. De esta manera podemos determinar con suma facilidad, y una precisión típica del 1 %, magnitudes como el potencial químico, la energía media, la energía de interacción, las longitudes características o las densidades axial y radial, entre otras. Un ejemplo representativo de la aplicación de nuestras fórmulas es el experimento analizado en el segundo capítulo, donde los condensados utilizados son muy alargados y pertenecen en su mayoría a la zona intermedia entre el régimen 3D y el cuasi-1D. La estabilidad de los vórtices, concretamente el comienzo de su desdoblamiento, viene determinada por la densidad axial del sistema,  $an_z$ , que puede obtenerse de forma inmediata en toda la longitud del condensado a partir de nuestras fórmulas, sin necesidad de un complejo cálculo numérico 3D.

En el **Capítulo 4** proponemos ecuaciones efectivas de campo medio, unidimensionales y bidimensionales, que gobiernan la dinámica axial o radial, respectivamente, de condensados alargados o achatados con interacciones repulsivas, incluso en presencia de un vórtice axisimétrico de carga múltiple [A.4]. Estas ecuaciones, que incorporan adecuadamente la contribución de los grados de libertad “rápidos” mediante un término no polinómico procedente del potencial químico local, toman la forma correcta en los casos límite de la interacción. Además, debido a su simplicidad, nos han permitido derivar expresiones analíticas para las propiedades relevantes del estado estacionario.

Los métodos analíticos presentados en el tercer capítulo resultaron ser de gran utilidad en la determinación de las ecuaciones efectivas que gobiernan la dinámica de los condensados de dimensionalidad reducida. Estos sistemas tienen gran interés tanto desde un punto de vista experimental como teórico. Por ejemplo, estructuras topológicas como los solitones aparecen únicamente como soluciones matemáticas de sistemas unidimensionales. En los experimentos estas estructuras se generan utilizando potenciales fuertemente anisótropos (normalmente con simetría cilíndrica) en los que el condensado desarrolla una dinámica gobernada por dos escalas de tiempo muy diferentes. El tiempo de evolución característico en la dirección de fuerte confinamiento será muy pequeño en comparación con la escala de tiempo del movimiento en la dirección de confinamiento débil. En consecuencia, puede suponerse que en cada instante de tiempo los grados de libertad “rápidos” se ajustan instantáneamente al

estado de menor energía compatible con la configuración establecida por los grados de libertad “lentos”. Ésta es la denominada *hipótesis adiabática* que, al considerar despreciables las correlaciones entre los movimientos con diferentes escalas temporales, y siempre que los potenciales de las trampas sean separables en sus coordenadas, posibilita la factorización del parámetro de orden del condensado como el producto de dos funciones de onda, axial y radial. Cuando la dirección axial corresponde al movimiento lento, y por tanto al confinamiento débil, la configuración radial local queda prefijada por el potencial químico local transverso, solución de una ecuación estacionaria bidimensional. Por el contrario, cuando la dirección radial es la lenta, el potencial químico local axial caracteriza la configuración longitudinal del condensado. Las expresiones analíticas para los potenciales químicos locales obtenidos en el tercer capítulo son, por tanto, determinantes en la derivación de las ecuaciones efectivas que hemos propuesto. Y el hecho de que éstas últimas resulten más simples y exactas que las existentes en la literatura es una consecuencia directa de la sencillez y precisión de aquéllas.

En la Sección 3 del Capítulo 4 hemos rederivado las ecuaciones efectivas unidimensionales anteriores utilizando un método variacional basado en el funcional del potencial químico local. Dado que en los condensados con interacciones repulsivas esta magnitud posee una cota inferior, es posible obtener una estimación de su valor mínimo mediante la búsqueda de los puntos críticos de dicho funcional [A.5]. En el caso general, cuando la búsqueda de soluciones estacionarias del sistema se realiza en el espacio completo de funciones admisibles, es el funcional de la energía quien siempre aporta el resultado correcto. Sin embargo, demostraremos que cuando la búsqueda de soluciones se restringe a un subespacio de funciones de prueba (como es el caso siempre en la práctica), un método variacional basado en la minimización del funcional para el potencial químico local puede proporcionar mejores resultados que el método variacional estándar. Las expresiones así derivadas conducen a ecuaciones de movimiento que coinciden, para condensados sin vorticidad o con vórtices de carga unidad, con las ecuaciones efectivas unidimensionales obtenidas en el marco de nuestra extensión de la aproximación de Thomas-Fermi. De nuevo, la sencillez de las expresiones encontradas permite predecir valores de magnitudes relevantes como la densidad por unidad de longitud, la velocidad del sonido, las frecuencias de oscilación para los modos de vibración longitudinal, o la longitud de coherencia axial.

Las ecuaciones efectivas que hemos propuesto resultan de especial utilidad en la transición entre el régimen puramente tridimensional y el unidimensional, es decir, en aquellos sistemas asimétricos donde la ecuación de Gross-Pitaevskii 3D presenta grandes complicaciones numéricas para su resolución debido a su elevada anisotropía, pero donde aún no es posible aplicar la versión estrictamente unidimensional de dicha ecuación. En particular, nuestras ecuaciones han demostrado un gran acuerdo cuantitativo con las observaciones experimentales, tal como han puesto de manifiesto otros autores en trabajos que estudian defectos topológicos no lineales en el seno de condensados de Bose-Einstein [15–17].

En el **Capítulo 5** demostramos cómo los denominados solitones de *gap*, solitones brillantes atrapados en los pozos de una red óptica periódica, pueden también ser obtenidos y analizados con gran fiabilidad mediante nuestras ecuaciones efectivas unidimensionales. Para ello, identificamos los parámetros que caracterizan la dinámica de estos estados no lineales sobre las redes ópticas unidimensionales y analizamos los diferentes regímenes que dichos parámetros determinan: confinamientos transversos *fuertes*, *intermedios* o *débiles* en presencia de potenciales ópticos *profundos* o *superficiales*. Aunque la herramienta más utilizada en el análisis teórico de los solitones de *gap*, incluso en la zona de transición entre el régimen cuasi-1D y el 3D, ha sido la ecuación de Gross-Pitaevskii unidimensional estándar, demostraremos que ésta no es en general adecuada ya que su rango de validez es muy pequeño. En cambio, veremos que en los regímenes de interés práctico, nuestras ecuaciones efectivas unidimensionales son capaces de reproducir correctamente los resultados de la ecuación de Gross-Pitaevskii tridimensional, exigiendo, sin embargo, mucho menos esfuerzo computacional.

Las ondas de materia estables tipo solitones de *gap* son soluciones correspondientes a la ecuación de Schrödinger no lineal unidimensional en presencia de un potencial periódico (ilimitado). Estos estados localizados, resultado del equilibrio entre la energía de interacción y la energía cinética del sistema, aparecen en los espacios entre las bandas de energía permitidas por el potencial periódico. Aunque estas estructuras se han encontrado con frecuencia en el ámbito de la óptica no lineal, en los condensados de Bose-Einstein su hallazgo experimental ha sido posterior [18]. La presencia en los montajes experimentales de potenciales de atrapamiento superpuestos al potencial periódico de la red, origina serias dificultades para la generación de los solitones de *gap*.

Además conforme se debilita el confinamiento transversal, se hace más patente la estructura tridimensional del sistema y las dimensiones adicionales proporcionan nuevos canales de desestabilización del solitón. De hecho, los solitones producidos en el experimento de Oberthaler y colaboradores [18] aparecen como estructuras localizadas metaestables sobre un estado de fondo deslocalizado. Sin embargo, nuestros resultados numéricos muestran que, en ausencia de atrapamiento axial adicional a la red óptica, los solitones de gap fundamentales sin estructura radial son en general estables, incluso en los casos más tridimensionales, excepto en una pequeña región próxima al borde superior del gap. Por el contrario, los solitones múltiples, combinación de varios fundamentales, sólo son estables cuando los potenciales ópticos son suficientemente profundos [A.7].

En la Sección 3 del Capítulo 5 analizamos con mayor profundidad los solitones de gap que surgen en presencia de una red óptica unidimensional en el régimen de débil confinamiento radial y mostramos por primera vez la diversa topología tridimensional que pueden presentar estos estados [A.6]. En este régimen de atrapamiento, especialmente interesante por su correspondencia con condiciones experimentales realistas, los solitones de gap sólo pueden ser analizados con métodos estrictamente tridimensionales. Por este motivo, para buscar los estados estacionarios no lineales, hemos resuelto la ecuación de Gross-Pitaevskii tridimensional empleando una estrategia de continuación que parte de los estados sin interacción. Nuestros resultados muestran que los solitones de gap pueden agruparse en diferentes familias que están asociadas a las bandas de energía del problema lineal subyacente y poseen una topología radial similar a la de los estados lineales ubicados en dichas bandas. A pesar de que en estos sistemas no lineales se excitan múltiples modos transversos, demostramos que muchos de los solitones de gap hallados son especialmente robustos frente a perturbaciones, lo cual resulta de gran interés dado que abre la posibilidad de su generación experimental.

Por último, en el **Capítulo 6** se presenta una discusión de la investigación desarrollada en esta Tesis y cuyos resultados principales han sido publicados en las referencias incluidas en el **Apéndice A** [A.1, A.2, A.3, A.4, A.5, A.6, A.7]. Asimismo se añade un apartado de conclusiones a modo de sumario de los resultados obtenidos, y al final del capítulo se exponen brevemente las líneas de continuación de nuestra investigación.

## Capítulo 2

# Evolución dinámica de vórtices cuantizados de carga múltiple

Los superfluidos son sistemas cuánticos macroscópicos gobernados por una función de onda  $\Psi$ , que ofrecen una oportunidad inigualable para obtener intuiciones acerca del mundo cuántico. De hecho, observando un superfluido se observa directamente el comportamiento de una función de onda cuántica a escala macroscópica. Una característica de la superfluidez, que permite identificarla, es la necesaria cuantización de la vorticidad. Los superfluidos sólo pueden adquirir momento angular, y por tanto rotar, incorporando vórtices, que son defectos topológicos asociados a una singularidad localizada en la fase  $\theta$  de la función de onda del sistema donde se concentra toda la vorticidad. Dado que la velocidad mesoscópica del condensado deriva de su fase  $\theta$  a través de la expresión  $\mathbf{v} = (\hbar/m) \nabla\theta$ , se sigue que el carácter necesariamente univaluado de  $\Psi$  implica que la circulación del campo de velocidades alrededor de la línea del vórtice debe estar cuantizada en múltiplos enteros  $q$  de  $h/m$ , siendo  $q$  la carga topológica del vórtice.

Con la generación de los primeros condensados de Bose-Einstein de gases atómicos diluidos [4–6] surgió un gran interés en caracterizar sus propiedades superfluidas, lo que ha motivado la aparición de numerosos trabajos tanto teóricos como experimentales centrados en el estudio de las propiedades rotacionales de estos sistemas [19] y, en particular, en la nucleación y estabilidad de los vórtices asociados [20–26]. Muchos experimentos han conseguido generar vórtices en el seno de condensados de Bose-Einstein [27–31]. Sin embargo, en prácticamente todos los casos la vorticidad resultante aparece concentrada inevitablemente en una serie de vórtices de carga unidad. Esto es debido a que los vórtices cuantizados de carga múltiple son energéticamente inestables

y decaen en una red de igual vorticidad total formada por vórtices con carga unitaria [32]. En principio este tipo de inestabilidad sería fácilmente controlable: bastaría con aislar energéticamente el condensado eliminando los procesos disipativos, con lo que el sistema, obligado a mantener constante su energía, no podría decaer. Sin embargo los vórtices de carga múltiple son también dinámicamente inestables, lo que implica que su decaimiento se produce inevitablemente incluso en el límite de temperatura cero, en ausencia de mecanismos disipativos [33].

En experimentos realizados en el MIT (Massachusetts Institute of Technology) [34] se consiguieron por primera vez vórtices de carga múltiple en condensados gaseosos utilizando una técnica topológica de impresión de fase propuesta por Nakahara y colaboradores [35]. Para ello, partieron de condensados de  $^{23}\text{Na}$  en los estados hiperfinos  $|1, -1\rangle$  y  $|2, +2\rangle$ , e invirtiendo de forma adiabática el campo magnético axial, transformaron los estados iniciales en vórtices de momento angular por partícula  $2\hbar$  y  $-4\hbar$  respectivamente. Esta técnica permitió el estudio experimental de la estabilidad de los vórtices de carga múltiple y sirvió de estímulo para nuevos trabajos teóricos. A este respecto, Möttönen y colaboradores [36] estudiaron mediante análisis numérico la estabilidad de los vórtices de carga doble en sistemas bidimensionales, los cuales pueden ser considerados como secciones transversales de condensados cilíndricos homogéneos con un vórtice recto a lo largo del eje. Los autores mencionados encontraron que este tipo de vórtices posee diversas regiones de inestabilidad [33] que siguen una serie cuasiperiódica al variar el valor de la densidad axial adimensional,  $an_z = aN \int |\Psi(\mathbf{r})|^2 dx dy$ , donde  $a$  es la longitud de dispersión de onda- $s$  y  $n_z(z)$  es la densidad atómica por unidad de longitud a lo largo del eje del condensado.

En un experimento posterior realizado en el MIT [14] se estudió el decaimiento de vórtices cuantizados de carga doble en condensados de  $^{23}\text{Na}$  que habían sido generados mediante la mencionada técnica de impresión de fase. Los autores del experimento generaron sistemas alargados confinados por potenciales armónicos axisimétricos, y mediante imágenes de absorción determinaron los tiempos de vida de los vórtices en función del valor de la densidad axial en el centro del condensado  $an_{z=0}$ . El experimento mostró que, incluso a temperaturas tan bajas como unos pocos nanokelvin, los vórtices dobles decaían en dos vórtices cuantizados de carga unidad, pero resultó controvertido porque puso de manifiesto que el tiempo de vida de los vórtices aumenta-

ba monótonamente con la densidad atómica, en aparente contradicción con el comportamiento cuasiperiódico predicho por el modelo teórico de densidad local [36].

En este capítulo, cuyos resultados han sido publicados en la Referencia [A.1], analizamos el experimento anterior resolviendo numéricamente la ecuación de Gross-Pitaevskii tridimensional sin ningún tipo de aproximaciones. Nuestros resultados, que están en buen acuerdo cuantitativo con el experimento, demuestran que el decaimiento del vórtice doble es principalmente consecuencia de una inestabilidad dinámica. También demuestran que, a pesar de las aparentes contradicciones, la aproximación de densidad local correctamente interpretada es consistente con los resultados experimentales.

## 2.1 Inestabilidad dinámica en vórtices cuantizados de carga doble

El experimento de Ketterle y colaboradores [14] estudió el decaimiento de los vórtices doblemente cuantizados utilizando condensados atrapados por potenciales armónicos con una única frecuencia radial  $\omega_r/2\pi = 220$  Hz y, en cambio, tres frecuencias diferentes de atrapamiento axial  $\omega_z/2\pi = 2.7, 3.7,$  y  $12.1$  Hz. Como único parámetro de referencia para agrupar los datos provenientes de diferentes confinamientos, fue utilizada la intensidad de la interacción por unidad de longitud (es decir, la densidad axial), particularizada para el centro del eje longitudinal de los condensados,  $an_{z=0}$ . Los resultados experimentales se extrajeron a partir de imágenes de absorción a lo largo del eje del condensado tras 15 ms de expansión balística. Un dato que conviene resaltar fue el hecho de que, con el fin de incrementar la visibilidad de los núcleos de los vórtices, las imágenes de absorción se restringieron a una sección central del sistema de  $30 \mu\text{m}$  de grosor. La Figura 2.1 muestra los resultados del experimento junto con las regiones de inestabilidad que predice el modelo de densidad local. Los puntos negros corresponden a condensados en los que se ha podido determinar la presencia de dos vórtices separados, mientras que los puntos blancos están asociados a condensados en los que el vórtice inicial aún no ha decaído. Los puntos grises son los casos dudosos. En la parte superior de la figura, las curvas de trazo rojo representan la existencia de modos inestables para determinados valores de  $an_{z=0}$ . Estos modos corresponden a excitaciones elementales (con frecuencias imaginarias) del estado transversal  $\varphi(\mathbf{r}_\perp)$  del condensado, que sa-



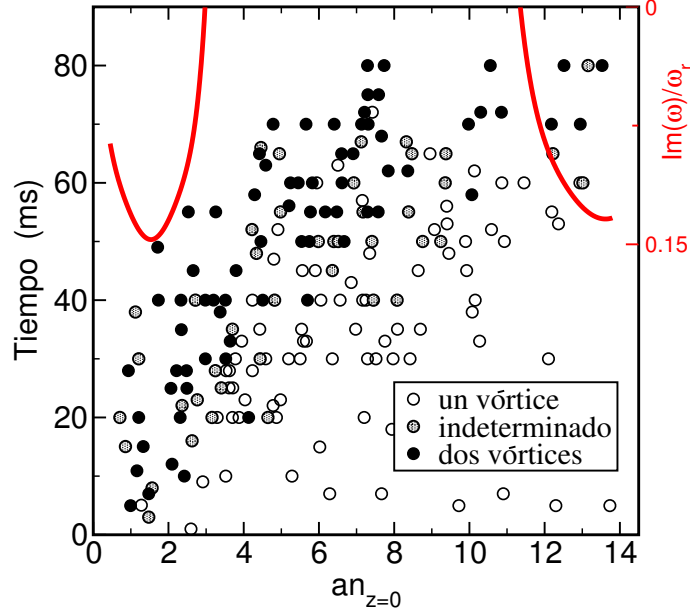


Figura 2.1: Comparación entre los resultados obtenidos en el experimento de Ketterle y colaboradores [14] para el tiempo de vida de los vórtices dobles (puntos), y las frecuencias imaginarias (curvas rojas) correspondientes a modos inestables hallados en un análisis lineal de estabilidad, mediante las Ecuaciones (2.1). Los puntos negros corresponden a condensados con dos vórtices separados, los puntos blancos a condensados con un sólo vórtice, y los puntos grises son casos indeterminados.

tisfacen las ecuaciones estacionarias de Bogoliubov-de Gennes [33, 36]:

$$\left( -\frac{\hbar^2 \nabla_{\perp}^2}{2m} + V_{\perp} - \mu_{\perp} + \frac{8\pi \hbar^2 a n_z}{m} |\varphi|^2 \right) u_{\omega} + \frac{4\pi \hbar^2 a n_z}{m} \varphi^2 v_{\omega} = \hbar \omega u_{\omega}, \quad (2.1a)$$

$$\left( -\frac{\hbar^2 \nabla_{\perp}^2}{2m} + V_{\perp} - \mu_{\perp} + \frac{8\pi \hbar^2 a n_z}{m} |\varphi|^2 \right) v_{\omega} + \frac{4\pi \hbar^2 a n_z}{m} \varphi^{*2} u_{\omega} = -\hbar \omega v_{\omega}, \quad (2.1b)$$

donde  $V_{\perp} = \frac{1}{2} m \omega_r^2 (x^2 + y^2)$  es el potencial radial de confinamiento y  $a = 2.75$  nm para los condensados de  $^{23}\text{Na}$  empleados en el experimento. Las soluciones  $(u_{\omega}(\mathbf{r}_{\perp}), v_{\omega}(\mathbf{r}_{\perp}))$  de estas ecuaciones son las excitaciones elementales con energía  $\hbar \omega$  del estado estacionario transversal  $\varphi(\mathbf{r}_{\perp})$  (cuyo potencial químico asociado es  $\mu_{\perp}$ ), de modo que la solución general de dicho estado que incluye pequeñas oscilaciones en torno a la configuración de equilibrio es  $\Phi(\mathbf{r}_{\perp}) = e^{-i\mu_{\perp}t/\hbar} [\varphi + \sum_{\omega} (u_{\omega} e^{-i\omega t} + v_{\omega}^* e^{i\omega t})]$ . Por tanto, cuanto mayor sea la parte imaginaria de la frecuencia  $\omega$  más rápidamente se producirá el desdoblamiento del vórtice doble y, por tanto, más corto será su tiempo de vida.

Como puede comprobarse en la Figura 2.1, dentro del rango de valores de la interacción barrido por el experimento sólo aparecen las dos primeras regiones

inestables, correspondientes a  $an_z < 3$  y  $11.4 \lesssim an_z \lesssim 16$ . El tiempo de vida observado para los vórtices dobles, determinado por la frontera inferior de la región de puntos negros, se incrementa de forma monótona con  $an_{z=0}$  y no muestra comportamiento cuasiperiódico alguno. Estos resultados experimentales dejaron una serie de cuestiones abiertas. Por un lado, el comportamiento monótono observado parecía no ser consistente con la aproximación de densidad local propuesta en la Referencia [36]. De acuerdo con la hipótesis que esta referencia plantea, conforme la densidad atómica aumenta, para  $an_{z=0} \sim 12$ , la segunda región de inestabilidad mencionada anteriormente aparece dentro de la rodaja central del condensado. Por tanto, es de esperar que este hecho se manifieste en un descenso del tiempo de vida observado, lo cual no ocurre. Esto planteó dudas sobre la validez de la aproximación de densidad local y motivó la aparición de trabajos numéricos que trataron de explicar el experimento sugiriendo que el decaimiento del vórtice era una consecuencia de fluctuaciones térmicas [37]. Según esta hipótesis alternativa, la inestabilidad que originaba el decaimiento no era de tipo dinámico sino energético, debida a la diferencia de energía entre estados estacionarios.

En nuestro estudio consideramos que el comportamiento dinámico del vórtice debía ser analizado en toda la extensión del eje  $z$  del condensado, no únicamente en la sección central que monitorizaban las imágenes de absorción del experimento. En sistemas tan alargados como éstos, regiones alejadas a lo largo del eje  $z$  podrían exhibir comportamientos locales dispares, lo cual podría ser relevante para entender el proceso de desdoblamiento del vórtice. Ya que los resultados experimentales no proporcionaron esta clase de información, era deseable complementarlos con un análisis numérico que siguiera con detalle el estado de los condensados en toda su longitud.

En el límite de temperatura cero, la dinámica de los condensados de Bose-Einstein de gases diluidos es descrita de manera exacta por la ecuación de Gross-Pitaevskii dependiente del tiempo, que proporciona la evolución temporal de la función de onda del condensado [10]:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) + gN |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 \right) \Psi, \quad (2.2)$$

donde  $N$  es el número de átomos,  $g = 4\pi\hbar^2 a/m$  es la intensidad de la interacción, y  $V(\mathbf{r}) = \frac{1}{2}m(\omega_r^2 r^2 + \omega_z^2 z^2)$  el potencial externo de confinamiento. La integración numérica tridimensional de la ecuación de Gross-Pitaevskii para estos sistemas tan elongados es una tarea computacional muy exigente. Cuando

los condensados evolucionan en el tiempo, desarrollan una estructura fina que sólo puede resolverse adecuadamente utilizando bases muy numerosas o mallas de puntos muy grandes. Con el fin de verificar la convergencia y exactitud de nuestros resultados numéricos, seguimos dos métodos pseudoespectrales diferentes para la integración espacial, uno con bases de Laguerre-Fourier y otro con bases de Laguerre-Hermite y Fourier. La evolución temporal se llevó a cabo en ambos casos con un método de tercer orden de Adams-Bashforth, partiendo de la solución estacionaria de menor energía compatible con el vórtice de carga doble, calculada previamente mediante una evolución en tiempo imaginario puro. Los resultados obtenidos con los dos métodos de integración, usando diferentes conjuntos de funciones de base y distintos pasos de tiempo, fueron idénticos.

Un estado cuántico es dinámicamente inestable cuando se transforma en otro sustancialmente diferente al ser sometido a perturbaciones arbitrariamente pequeñas. Para determinar si el decaimiento del vórtice puede ser atribuido sin ambigüedad a una inestabilidad dinámica, hemos introducido en  $t = 0$  una pequeña perturbación en el potencial de atrapamiento, lo suficientemente pequeña como para no modificar apreciablemente la energía del sistema. Específicamente, utilizamos una perturbación cuadrupolar del 4% durante un corto intervalo de 0.3 ms. Esta fluctuación del potencial produjo un cambio casi indetectable tanto en la energía como en el momento angular por partícula ( $\Delta E/E, \Delta L_z/L_z < 10^{-5}$ ) y desencadenó el desdoblamiento del vórtice. A fin de comparar con el experimento, hemos usado el mismo procedimiento seguido en el MIT. Generamos condensados con valores diferentes de  $an_{z=0}$  variando  $N$ , y a partir de ellos fueron obtenidas imágenes de absorción de una rodaja central de  $30 \mu\text{m}$  a tiempos diferentes. En todos los casos, el vórtice inicial decayó en un par de vórtices de carga unidad. También consideramos el efecto potencial de procesos disipativos introduciendo de forma fenomenológica un factor de tiempo imaginario, pero para valores consistentes con los datos experimentales su efecto resultó despreciable. Además, con el fin de reproducir el experimento con la mayor fidelidad, en las evoluciones numéricas consideramos también el posible efecto de la expansión balística sobre los tiempos de vida observados. A modo de ejemplo, la Figura 2.2 muestra imágenes de absorción correspondientes a una sección central de  $30 \mu\text{m}$  para un condensado con  $an_{z=0} = 1.48$  en la trampa armónica, Figura 2.2(a), y tras 15 ms adicionales de expansión balística, Figura 2.2(b). Al comparar las imágenes a diferentes

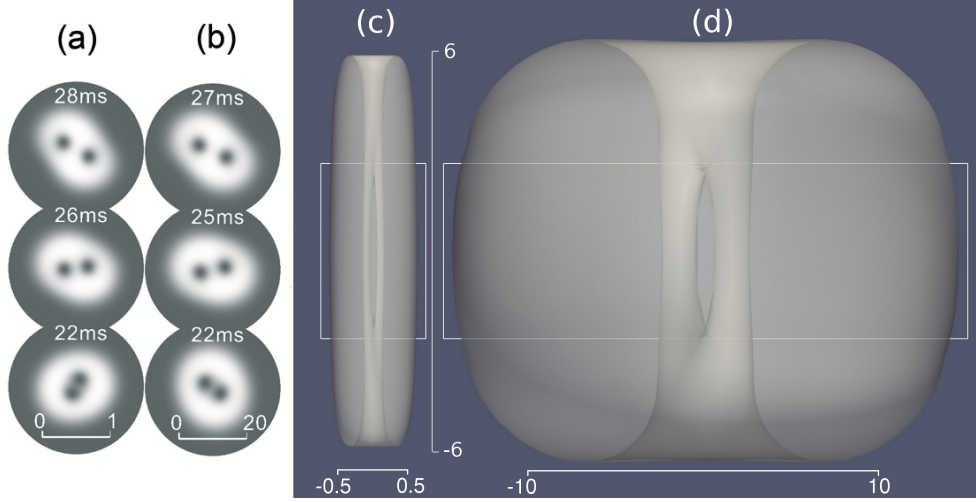


Figura 2.2: Imágenes de absorción de una sección central de  $30\mu\text{m}$  a diferentes tiempos para un condensado con  $an_{z=0} = 1.48$  en la trampa armónica (a) y tras 15 ms de expansión balística (b). A la derecha se representan isosuperficies de densidad (correspondientes al 10 % de su valor máximo) para el mismo condensado a 22 ms en la trampa (c) y tras la expansión balística (d), donde las secciones delimitadas por los rectángulos blancos indican las zonas monitorizadas en las imágenes de absorción. Las longitudes axial y radial de las figuras (c) y (d) están dibujadas a escalas diferentes, conforme a las barras graduadas que acompañan a cada caso. Todas las escalas vienen dadas en unidades de oscilador armónico axial,  $a_z = 6.05 \mu\text{m}$ .

tiempos, puede apreciarse que en este caso el efecto de la expansión balística sólo introduce una modificación del orden de 1 ms en el tiempo de decaimiento del vórtice. Como se comprueba en las isosuperficies de densidad para el mismo condensado (a 22 ms) en la trampa y tras la expansión balística (Figuras 2.2(c) y (d) respectivamente), ésta provoca una inversión en la relación de aspecto del condensado: al liberarlo de la trampa armónica su longitud axial crece en una ligera proporción, mientras que sus dimensiones transversales se ven multiplicadas por aproximadamente un factor 20. Para conseguir una mejor visualización de los núcleos de los vórtices, las longitudes transversales se han multiplicado por dos en la Figura 2.2(c) y dividido entre dos en la Figura 2.2(d), pero la escala axial es la misma en ambos casos. Después de seguir la expansión para un número representativo de casos, concluimos que su efecto puede modificar el resultado sólo ligeramente, en tiempos siempre del orden de 1 ms. Esto se debe básicamente a que la mayor parte de la expansión balística constituye una simple transformación de escala de la estructura del condensado en la trampa [38, 39]. Dado que estas correcciones son del mismo orden

que las incertidumbres del proceso experimental, no fue necesario considerar la expansión balística en los análisis posteriores.

Nuestras simulaciones numéricas indicaron que, cuando era interpretado correctamente, el modelo de densidad local propuesto en la Referencia [36] proporcionaba los ingredientes clave para describir de manera adecuada el proceso de desdoblamiento del vórtice doble. En este sentido es importante notar que en el experimento no se discriminó entre los datos correspondientes a valores diferentes de la frecuencia de confinamiento axial. Sin embargo, en nuestras simulaciones observamos que para el mismo valor del parámetro  $an_{z=0}$ , los tiempos de vida de los vórtices eran diferentes para cada valor de las tres frecuencias axiales consideradas en el experimento. Las diferentes frecuencias se traducían en longitudes distintas para los condensados, determinadas por las correspondientes relaciones de aspecto de la trampa armónica. Para los condensados más alargados (con  $an_{z=0} \gtrsim 3$ ), el tiempo de vida observado incorpora el tiempo de propagación de la perturbación desde la localización de inicio del desdoblamiento hasta la posición final de detección en la sección central. Por tanto, a diferencia de lo considerado en el experimento, el valor de  $an_{z=0}$  por sí solo es insuficiente para interpretar correctamente el decaimiento. Sólo cuando el proceso se considera localmente es posible caracterizarlo por el parámetro que determina la intensidad de la interacción por unidad de longitud,  $an_z$ . Así, el desdoblamiento siempre se inicia en aquellas regiones a lo largo del eje  $z$  donde  $an_z \simeq 1.5$  ó  $an_z \simeq 13.75$ , en una escala temporal que es en todos los casos del orden de 15 ms. La Figura 2.3 es un ejemplo representativo de esta dinámica para un condensado con  $an_z \simeq 13.75$  y frecuencia armónica axial  $\omega_z/2\pi = 12.1$  Hz. En la Figura 2.3(a) se han coloreado las regiones del condensado cuya densidad axial  $an_z$  pertenece a las dos primeras zonas de inestabilidad que determina el modelo de densidad local. Como muestra claramente esta figura, a 25 ms del inicio de la evolución el proceso de división del vórtice ya ha comenzado tanto en la zona central como en los extremos del condensado. Sin embargo, los núcleos de los vórtices están muy próximos y no pueden ser resueltos experimentalmente hasta tiempos mucho mayores. Sólo a partir de aproximadamente 75 ms de evolución, Figura 2.3(d), los dos vórtices de carga unidad aparecen nítidamente separados en las imágenes de absorción. En tiempos intermedios, Figuras 2.3(b)–(c), puede apreciarse como aumenta la separación entre los núcleos de los vórtices de carga unidad entrelazados, lo cual produce deformaciones cuadrupolares en la superficie del condensado.

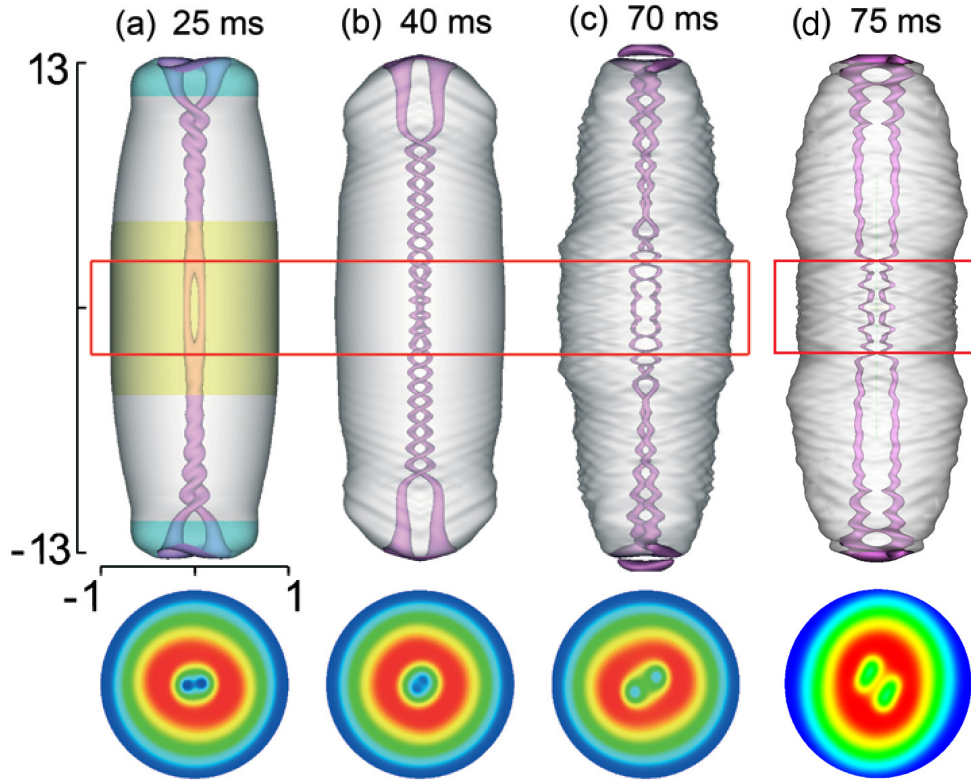


Figura 2.3: Contornos de densidad constante (arriba) e imágenes de absorción (abajo) en un condensado con  $an_{z=0} = 13.75$ . Las zonas enmarcadas por los rectángulos rojos corresponden a la sección que se monitoriza en el experimento mediante las imágenes de absorción, coloreadas de menor (azul) a mayor densidad (rojo). La sucesión de figuras para diferentes tiempos muestra las fases del proceso de división del vórtice doble. En la figura (a) se han coloreado las regiones inestables en las que se inicia el desdoblamiento. La figura (d) determina el tiempo final de desdoblamiento del vórtice para este valor de la interacción. Las longitudes están dadas en unidades de  $a_z = 6.05 \mu\text{m}$ .

Este proceso no local de transmisión de la perturbación inicial explica el incremento monótono en el tiempo de vida observado del vórtice y hace compatible el modelo de densidad local con los resultados experimentales.

Finalmente, la Figura 2.4 muestra nuestra curva teórica junto con los datos experimentales del MIT. La curva de datos numéricos representada se obtuvo considerando únicamente un atrapamiento axial de frecuencia  $\omega_z/2\pi = 12.1$  Hz. Ésta es la mayor frecuencia axial utilizada en el experimento y es en consecuencia la que proporciona los condensados menos elongados y los tiempos de vida más cortos. Es por tanto la única que hay que considerar para expli-

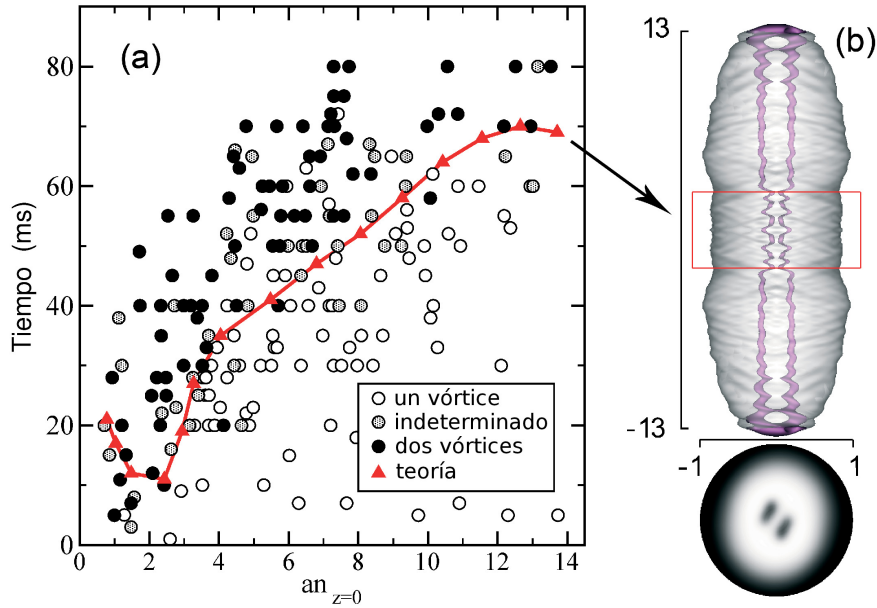


Figura 2.4: (a) Predicción teórica de tiempos de decaimiento (curva roja) de un vórtice doble, en función de  $an_{z=0}$  para una perturbación cuadrupolar del 4% actuando durante 0.3 ms, junto a los datos experimentales del MIT [14]. (b) Isosuperficie de densidad de un condensado con  $an_{z=0} = 13.75$ , a  $t = 75$  ms. También se muestra debajo la correspondiente imagen de absorción axial de la rodaja central (señalada por el rectángulo de la figura). Las longitudes están dadas en unidades de  $a_z = 6.05 \mu\text{m}$ .

car los resultados experimentales: los puntos negros, correspondientes a dos vórtices separados, deben caer por encima de la curva teórica. Es importante notar que esto no significa que no puedan aparecer puntos blancos (asociados a un único vórtice doble que aún no ha decaído) por encima de dicha curva. De hecho, esto es lo que cabe esperar para aquellos datos experimentales obtenidos a partir de condensados con frecuencia axial  $\omega_z/2\pi = 2.7$  ó  $3.7$  Hz, que al ser más alargados muestran un tiempo de decaimiento aparente considerablemente mayor en la rodaja central. Para dar cuenta adecuadamente del tiempo de generación del vórtice doble durante la inversión adiabática del campo magnético axial, que es del orden de unos 6 ms, la curva teórica de la Figura 2.4(a) ha sido desplazada convenientemente en esa cantidad hacia abajo en el eje vertical. Tal como muestra esta figura los datos experimentales correspondientes a dos núcleos distinguibles (círculos negros), indicando que los vórtices se desdoblaron, están efectivamente en su mayoría por encima de

la curva teórica. El buen acuerdo entre teoría y experimento demuestra que el decaimiento está principalmente guiado por una inestabilidad dinámica.

La curva teórica de la Figura 2.4 presenta un mínimo claro alrededor de  $an_{z=0} \simeq 1.5$ . Es clarificador poner este mínimo en relación con el espectro de excitación (frecuencias imaginarias) de los modos inestables (curvas rojas de la Figura 2.1) [33,36]. Para condensados pequeños, con  $an_{z=0} < 1.5$ , todo el eje  $z$  permanece dentro de la primera región de inestabilidad. Para tales condensados, sólo es accesible un subconjunto limitado de los modos inestables asociados a esta región. Cuanto menor es el condensado, más pequeña es la frecuencia inestable máxima y, en consecuencia, mayor es el tiempo de vida observado. Para condensados con  $an_{z=0} \geq 1.5$  todas las frecuencias inestables son accesibles. En estos condensados, cuando se incrementa el número de partículas, la primera región de inestabilidad (correspondiente a aquellos valores a lo largo del eje  $z$  donde  $an_z < 3$ ) se aleja progresivamente de la rodaja central, hacia los extremos del condensado, ocupando posiciones simétricas alrededor de  $z = 0$ . Por este motivo, el desdoblamiento del núcleo del vórtice tiene que propagarse desde las regiones donde se inició hasta la zona central antes de que pueda ser detectado. Este proceso no local es responsable del incremento monótono de los tiempos de vida para  $an_{z=0} \gtrsim 3$  y explica el mínimo predicho en las proximidades de  $an_{z=0} \simeq 1.5$ . De acuerdo con el modelo de densidad local, en principio podríamos esperar un segundo mínimo local próximo a  $an_{z=0} \simeq 13.75$ . Aunque tal mínimo no es manifiesto, puede identificarse un cambio claro en la pendiente de la curva predicha cuando  $an_{z=0}$  entra en la segunda región de inestabilidad, mostrando un comportamiento físico diferente.

En la Figura 2.5 hemos calculado la densidad local (no integrada) sobre el eje  $z$  para cada condensado (caracterizado por el valor de  $an_{z=0}$ ), en el mismo instante de tiempo ( $t = 15$  ms). Esta densidad axial ha sido renormalizada en cada plano  $z$  a fin de que la densidad máxima en dicho plano sea la unidad. Por tanto, para un  $an_{z=0}$  dado, las zonas oscuras del gráfico señalan las regiones del eje donde el desdoblamiento del vórtice ya ha comenzado, ya que de no ser así la densidad en el núcleo del vórtice ha de ser estrictamente cero. Como resulta evidente de la Figura 2.5, cuando es considerado como un proceso local, el desdoblamiento se produce aproximadamente al mismo tiempo (del orden de 15 ms) en todos los condensados, con independencia de su tamaño, y siempre comienza en las regiones de inestabilidad predichas por el modelo de densidad local. En los condensados pequeños, con  $an_{z=0} < 3$ , el desdoblamiento ocurre



casi simultáneamente en toda la extensión del eje  $z$ , lo cual es consecuencia de que en estos condensados todo el eje  $z$  se encuentra en el interior de la primera región de inestabilidad. Como resultado, el vórtice inicial decae en un par de vórtices de carga unidad prácticamente rectos (como puede verse en la Figura 2.2(c)). No obstante, hay que tener en cuenta que, para  $an_{z=0} < 1.5$ , el desdoblamiento se produce en tiempos algo mayores, tal como se espera de las frecuencias inestables de menor valor encontradas en este rango de densidad. Conforme la longitud del condensado aumenta, el decaimiento del vórtice tiende a ser un fenómeno localizado que se propaga a lo largo del eje  $z$ , produciendo en este caso un par de vórtices entrelazados de carga unidad (ver Figura 2.3), lo que refleja un desfase temporal entre planos con diferente valor de la coordenada  $z$ . Para  $an_{z=0} > 12$ , una nueva región de inestabilidad aparece en la sección central del condensado, provocando otra zona de decaimiento del vórtice. Sin embargo, el desdoblamiento del mismo comienza en los extremos del condensado y es seguida unos pocos milisegundos después en la sección central, donde la frecuencia inestable máxima tiene valores menores.

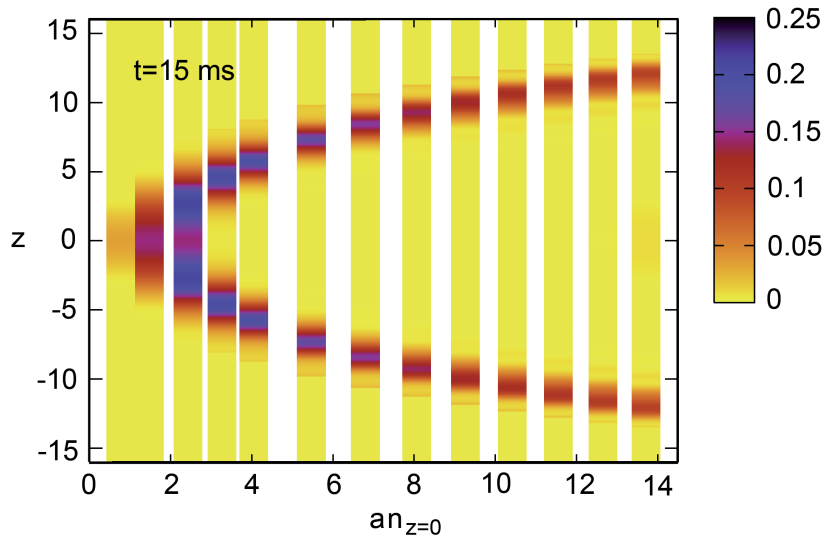


Figura 2.5: Densidad a lo largo del eje  $z$ , para una serie de condensados con diferentes valores de  $an_{z=0}$ , en el instante de tiempo  $t = 15$  ms desde el inicio de la evolución temporal. Para cada valor de la coordenada  $z$ , la densidad axial representada se mide como una fracción del valor máximo en su plano. Las zonas oscuras corresponden a densidades no nulas y señalan regiones de decaimiento del vórtice doble. Las longitudes están en unidades de  $a_z = 6.05 \mu\text{m}$ .

## 2.2 Resumen

En este capítulo hemos analizado el experimento del MIT [14] sobre el decaimiento de vórtices de carga doble en condensados alargados de  $^{23}\text{Na}$ , con el fin de estudiar las causas de la inestabilidad de los vórtices múltiplemente cuantizados. El experimento mostraba un incremento del tiempo de vida de los vórtices dobles al aumentar el valor de la densidad axial en la sección central del condensado, y aunque se realizó a temperaturas muy bajas, no aclaraba si la causa de la inestabilidad era de tipo dinámico, sin disipación de energía, o de tipo energético. Estos datos experimentales resultaron controvertidos porque parecían no ser consistentes con la predicción teórica realizada mediante la aproximación de densidad local [36]. Según este modelo, la inestabilidad de los vórtices múltiples axisimétricos en condensados cilíndricos homogéneos es de tipo dinámico y sigue una serie cuasiperiódica al variar el valor de la densidad axial adimensional,  $an_z$ , del condensado [33]. En nuestro estudio consideramos que, dado que los condensados del experimento eran muy elongados, era necesario un seguimiento detallado de la evolución de los vórtices en toda su longitud. Para conseguir este objetivo, realizamos simulaciones numéricas intensivas con la ecuación de Gross-Pitaevskii tridimensional y conseguimos reproducir de forma realista las condiciones del experimento. Esto nos ha permitido resolver las aparentes contradicciones entre el modelo de densidad local y los datos experimentales. Nuestros resultados numéricos demostraron que el modelo de densidad local, cuando se interpreta correctamente, es suficiente para determinar la estabilidad de los vórtices cuantizados. Si se considera el valor local de la densidad axial a lo largo del eje del vórtice, es posible predecir las regiones del condensado donde se inicia la inestabilidad y además estimar el tiempo de vida de los vórtices. Basta para ello con comparar dicho valor local con el parámetro de densidad de la aproximación de densidad local. El tiempo de vida es inversamente proporcional al valor de la máxima frecuencia imaginaria calculada en el análisis de estabilidad de los condensados cilíndricos, y para todos los vórtices, con independencia de la longitud o confinamiento del condensado, resulta ser del orden de 15 ms. El incremento monótono en los tiempos de vida observado en el experimento no es más que una consecuencia de que, para los condensados más alargados, este tiempo incorpora la duración de la propagación de la perturbación inicial hasta la sección central. En nuestras simulaciones pudimos comprobar que a pesar de que las fluctuaciones en

las magnitudes energéticas del condensado eran despreciables durante la evolución temporal, los vórtices dobles decaían siempre en dos vórtices de carga unidad. Estas consideraciones nos permiten concluir que, contrariamente a la hipótesis planteada por otros autores [37], la causa de la inestabilidad de los vórtices dobles es de tipo dinámico y no energético. Por último, es importante resaltar el buen acuerdo cuantitativo entre los datos obtenidos en un experimento tan complejo como el considerado aquí y los resultados producidos por la resolución numérica de la ecuación de Gross-Pitaevskii. Esto permite corroborar la validez de dicha ecuación como modelo dinámico para los condensados de Bose-Einstein en el régimen de campo medio.

Los resultados presentados en este capítulo se desarrollan con más detalle en la Referencia [A.1], que se incluye en el Apéndice A.

## Capítulo 3

# Métodos analíticos para el cálculo de propiedades estacionarias

La ecuación de Gross-Pitaevskii independiente del tiempo es la principal herramienta utilizada para el cálculo de estados estacionarios de los condensados de Bose-Einstein en el régimen de campo medio. Esta ecuación no lineal en derivadas parciales no es en general resoluble analíticamente y la búsqueda de sus soluciones ha de realizarse de forma numérica. Como en cualquier otro sistema físico, resulta de gran interés disponer de fórmulas analíticas que describan las características principales de los condensados. Sin embargo, fórmulas de este tipo únicamente pueden deducirse en dos casos extremos, correspondientes a los límites de interacción muy pequeña, donde es aplicable un tratamiento perturbativo, o muy grande, donde puede utilizarse la aproximación de Thomas-Fermi. Muy pocos trabajos teóricos han tratado la cuestión de buscar soluciones analíticas válidas fuera de estos dos regímenes analíticamente resolubles. Las propuestas más relevantes están basadas en funciones de onda variacionales de prueba [40–42] o en el límite semiclásico ( $\hbar \rightarrow 0$ ) de la función de distribución de Wigner del condensado en el espacio de las fases [43]. Estos métodos se han aplicado igualmente al estudio de estados con vortici- dad [32, 44, 45]. Pero la utilidad práctica de estas aproximaciones resulta ser limitada en comparación con la simple aproximación de Thomas-Fermi.

Por otra parte, se ha dedicado una especial atención al estudio de sistemas de baja dimensionalidad: condensados isótropos [46] y fuertemente anisótropos [47], cuasiunidimensionales [48–52] y cuasibidimensionales [53, 54]. La peculiar geometría de estos sistemas permite determinar diferentes regímenes en función del valor de la energía de interacción, si bien los casos analíticos corresponden igualmente a los valores extremos de esta energía. Cuando se emplean

trampas con simetría cilíndrica, un confinamiento radial fuerte se traduce en una nube de densidad alargada, que en condiciones límite puede “congelar” la dinámica del condensado en el estado fundamental radial (caso cuasiunidimensional). Si la energía de interacción es suficientemente grande como para excitar numerosos modos del potencial transversal, nos encontraremos en el régimen de Thomas-Fermi radial. En el otro extremo, el caso de energía de interacción pequeña corresponde al régimen perturbativo. En ambos límites es posible tratar al sistema de forma unidimensional efectiva y derivar fórmulas analíticas que proporcionan las propiedades del estado fundamental. Pero entre estos límites encontramos los estados de transición desde la geometría puramente tridimensional hasta la cuasiunidimensional para los que no se disponía de estimaciones analíticas. Si por el contrario el confinamiento de mayor intensidad es el axial, la nube de densidad adquiere una forma achatada y ahora los casos límite se corresponden con un régimen de Thomas-Fermi axial, para energías de interacción grandes, o el régimen perturbativo en el extremo opuesto. De nuevo estos casos límite permiten un tratamiento analítico en términos de una formulación bidimensional efectiva, mientras que entre ambos se encuentran los estados de tránsito entre los sistemas tridimensionales y los cuasibidimensionales (con la dinámica axial congelada), para los que tampoco se disponía de estimaciones analíticas.

En este capítulo presentamos expresiones analíticas simples y de remarcable exactitud para las propiedades del estado fundamental de condensados escalares de Bose-Einstein alargados y achatados, confinados en trampas armónicas con simetría cilíndrica. Estas expresiones, deducidas para sistemas con interacciones interatómicas repulsivas en el régimen de campo medio, están basadas en la aproximación de Thomas-Fermi habitual e incorporan la contribución de la energía de punto cero de la trampa. Su rango de aplicación se extiende no sólo a los límites extremos de la interacción, donde coinciden con las fórmulas analíticas correctas existentes, sino también a los regímenes intermedios correspondientes a condensados con un número arbitrario de partículas, incluso en presencia de un vórtice axisimétrico de carga  $q$ . Los condensados cuasiunidimensionales y cuasibidimensionales aparecen como casos límite simples de nuestras expresiones. Los resultados que presentamos en este capítulo forman parte del trabajo publicado en las Referencias [A.2, A.3], recogidas en el apéndice final, donde también se generaliza la formulación a condensados en trampas armónicas con cualquier relación de aspecto.

### 3.1 Límites de la ecuación de Gross-Pitaevskii

La ecuación de Gross-Pitaevskii independiente del tiempo, versión estática de la ecuación de movimiento (2.2),

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) + gN |\psi|^2 \right) \psi = \mu \psi, \quad (3.1)$$

describe los estados estacionarios de un sistema diluido ( $n|a|^3 \ll 1$ ) de  $N$  bosones con interacciones débiles, de intensidad  $g = 4\pi\hbar^2 a/m$ , confinados por un potencial externo  $V(\mathbf{r})$ , en el límite de temperatura cero; y como indica el término de interacción (proporcional a la densidad local de partículas  $n(\mathbf{r}) = N |\psi(\mathbf{r})|^2$ ) corresponde a una aproximación de campo medio. Esta ecuación puede derivarse mediante el siguiente funcional de la energía [11]:

$$E[\psi, \psi^*, \nabla\psi, \nabla\psi^*; \mathbf{r}] = \int d^3\mathbf{r} \left( \frac{\hbar^2}{2m} |\nabla\psi|^2 + V |\psi|^2 + \frac{gN}{2} |\psi|^4 \right), \quad (3.2)$$

suma de las energías cinética, potencial y de interacción del sistema. Dado que la función de onda  $\psi$  del condensado ha de cumplir la condición de normalización  $\int d^3\mathbf{r} |\psi(\mathbf{r})|^2 = 1$ , ésta puede ser añadida al funcional anterior mediante un multiplicador de Lagrange,  $\mu$ , que resulta ser el potencial químico:

$$F[\psi, \psi^*, \nabla\psi, \nabla\psi^*; \mathbf{r}] = \int d^3\mathbf{r} \left( \frac{\hbar^2}{2m} |\nabla\psi|^2 + V |\psi|^2 + \frac{gN}{2} |\psi|^4 - \mu |\psi|^2 \right). \quad (3.3)$$

Los puntos críticos del funcional  $F$  pueden obtenerse mediante las ecuaciones de Euler-Lagrange,

$$\frac{\partial F}{\partial \psi^*} - \nabla \frac{\partial F}{\partial \nabla \psi^*} = 0, \quad (3.4)$$

que llevan directamente a la Ecuación (3.1). Con el fin de analizar los límites con resolución analítica de esta ecuación, trataremos el caso habitual de condensados en trampas armónicas con simetría cilíndrica, cuyo potencial viene dado por  $V(\mathbf{r}) = \frac{1}{2}m(\omega_\perp^2 r_\perp^2 + \omega_z^2 z^2)$ , donde  $r_\perp = \sqrt{x^2 + y^2}$  es la coordenada radial y  $z$  la axial. La relación de aspecto de la trampa está dada por  $\lambda = \omega_z/\omega_\perp$ , y las longitudes características de oscilador radial y axial son  $a_\perp = \sqrt{\hbar/m\omega_\perp}$  y  $a_z = \sqrt{\hbar/m\omega_z}$ , respectivamente.

El primer caso con solución analítica es el régimen perturbativo. En él la energía de interacción puede tratarse como una perturbación débil frente a los términos lineales de la ecuación de Gross-Pitaevskii. La función de onda del condensado que minimiza el funcional de la energía es, en primera aproximación, el estado fundamental del gas ideal, es decir, del sistema sin interacción.

En esta situación, la función de onda es separable en las direcciones radial y axial, y corresponde al producto de sendas gaussianas

$$\psi_0(r_\perp, z) = \varphi(r_\perp)\phi(z), \quad (3.5)$$

con

$$\varphi(r_\perp) = (\pi a_\perp^2)^{-\frac{1}{2}} \exp(-r_\perp^2/2a_\perp^2), \quad (3.6)$$

$$\phi(z) = (\pi a_z^2)^{-1/4} \exp(-z^2/2a_z^2), \quad (3.7)$$

cuyas anchuras están determinadas por las respectivas longitudes características de oscilador,  $a_\perp$  y  $a_z$ . La energía del estado  $\psi_0$  para el sistema sin interacción corresponde a la energía del estado fundamental de oscilador armónico  $E_0 = \hbar\omega_\perp + \frac{1}{2}\hbar\omega_z$ , y la energía de interacción en esta aproximación resulta ser

$$E_{int}^0 = \hbar\omega_0 \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{Na}{a_0}, \quad (3.8)$$

donde  $\omega_0 = (\omega_\perp^2 \omega_z)^{\frac{1}{3}}$  y  $a_0 = (a_\perp^2 a_z)^{\frac{1}{3}}$  son la frecuencia y longitud medias del oscilador, respectivamente, y el parámetro adimensional  $\chi_0 = Na/a_0$  caracteriza la intensidad del término de interacción. Por tanto, la energía total en el régimen perturbativo toma el valor  $E = E_0 + E_{int}^0$ , y la relación entre la energía de interacción y la energía del estado fundamental del oscilador determina el rango de aplicación de estas expresiones, válidas sólo cuando  $(\frac{E_{int}^0}{E_0} \simeq \frac{\omega_0}{\frac{1}{2}\omega_z + \omega_\perp} \chi_0) \ll 1$ .

El segundo caso donde la ecuación estacionaria de Gross-Pitaevskii (3.1) puede resolverse analíticamente es el denominado régimen de Thomas-Fermi [12, 40]. Se establece cuando el número de partículas es tan grande que la energía de interacción se hace mucho mayor que la energía cinética, de tal manera que ésta última puede ser despreciada en el funcional de la energía del sistema (3.2), habida cuenta de que el término del potencial armónico es siempre el de mayor contribución energética. Con esta simplificación, la ecuación estacionaria de Gross-Pitaevskii se transforma en una ecuación algebraica cuya solución para  $\psi$  es

$$\psi_{TF}(r_\perp, z) = \sqrt{\mu - \frac{\frac{1}{2}m(\omega_z^2 z^2 + \omega_\perp^2 r_\perp^2)}{gN}}. \quad (3.9)$$

La función de onda de Thomas-Fermi está restringida a un volumen espacial finito (un elipsoide), definido por la condición  $|\psi_{TF}|^2 \geq 0$ , cuyos valores máximos de las coordenadas radial y axial, esto es, el radio  $R$  y la semilongitud

axial  $Z$  respectivamente, vienen dados por

$$R = \sqrt{2\mu/\hbar\omega_{\perp}} a_{\perp}, \quad \text{que se sigue de } |\psi(R, 0)|^2 = 0, \quad (3.10)$$

$$Z = \sqrt{2\mu/\hbar\omega_z} a_z, \quad \text{que se sigue de } |\psi(0, Z)|^2 = 0. \quad (3.11)$$

Utilizando estos valores como los límites de integración en la condición de normalización para la función de onda (3.9), se obtiene el potencial químico en función del número de partículas del condensado  $\mu_{TF} = \frac{1}{2}\hbar\omega_0(15\chi_0)^{2/5}$ . La energía se deriva de sustituir la función de onda (3.9) en el funcional (3.2), y la energía de interacción toma el valor  $E_{int}^{TF} = \frac{2}{7}\mu_{TF}$ . De nuevo, el parámetro  $\chi_0$  determina el rango de aplicación de la aproximación, válida cuando  $(\frac{E_{int}^{TF}}{E_0} \simeq \frac{\omega_0}{\frac{1}{2}\omega_z + \omega_{\perp}} (\chi_0)^{2/5}) \gg 1$ . La aproximación de Thomas-Fermi, sin embargo, no puede reproducir correctamente la caída de la función de onda en los bordes de la nube atómica, una región donde la energía cinética tiene una marcada influencia. A este respecto, se han propuesto correcciones para incluir el adecuado comportamiento de la nube de densidad en la superficie del condensado [55–57].

### 3.2 Métodos analíticos para condensados con un número arbitrario de partículas

Con el objetivo de extender el dominio de soluciones analíticas aproximadas de la ecuación de Gross-Pitaevskii (3.1) fuera de los límites descritos en la sección anterior, proponemos un modelo basado en la incorporación de la energía de punto cero de la trampa armónica al funcional de la energía correspondiente a la aproximación de Thomas-Fermi. Nuestro modelo es aplicable al estado fundamental, compatible con la presencia de un vórtice axisimétrico de carga  $q$ , de condensados con interacciones interatómicas repulsivas ( $a > 0$ ) que contienen un número arbitrario de partículas [A.3].

En primer lugar establecemos dos regiones dentro de la nube de densidad del condensado, diferenciadas por el balance energético que en ellas se produce: la región de Thomas-Fermi, en la que las energías relevantes son la potencial y la de interacción, y una región interior determinada por el vórtice donde la energía cinética no puede despreciarse. Estas regiones pueden representarse en



el funcional de la energía de la manera siguiente

$$E[\psi] \simeq E'[\psi] = \int_{\mathcal{V}_q} d^3\mathbf{r} \left( \frac{\hbar^2}{2m} |\nabla\psi|^2 + V_{ho} |\psi|^2 + \frac{1}{2}gN |\psi|^4 \right) + \int_{\mathcal{V}-\mathcal{V}_q} d^3\mathbf{r} \left( V_{ho} |\psi|^2 + \frac{1}{2}gN |\psi|^4 \right), \quad (3.12)$$

donde  $\mathcal{V}$  es el volumen total ocupado por el condensado, y  $\mathcal{V}_q$  representa la región determinada por el vórtice interior. En el régimen de Thomas-Fermi la integral sobre la región interior tiende a cero y es la integral sobre el resto del condensado,  $\mathcal{V}_{TF} = \mathcal{V} - \mathcal{V}_q$ , la que proporciona una excelente aproximación a  $E[\psi]$ . En cambio, en el límite perturbativo la principal contribución al funcional de la energía proviene de la región  $\mathcal{V}_q$  asociada al vórtice, y la aportación de la segunda integral es despreciable. Nuestra hipótesis para satisfacer estas condiciones asintóticas del funcional consiste en suponer que la energía total de un condensado no podrá ser inferior a la energía del estado fundamental del oscilador armónico  $\varepsilon_q$  compatible con un vórtice cuantizado de carga  $q$ , y que la energía de interacción ha de coincidir con la del régimen perturbativo cuando éste se alcanza. Estas condiciones pueden reflejarse sobre el funcional de la energía aproximándolo por

$$E'[\psi] = \int_{\mathcal{V}_q} d^3\mathbf{r} \left( \varepsilon_q |\psi|^2 + \frac{1}{2}g_q N |\psi|^4 \right) + \int_{\mathcal{V}_{TF}} d^3\mathbf{r} \left( V_{ho} |\psi|^2 + \frac{1}{2}gN |\psi|^4 \right), \quad (3.13)$$

donde  $g_q$  es la intensidad de la interacción renormalizada con la finalidad de igualar en el volumen finito  $\mathcal{V}_q$  la energía de interacción del régimen perturbativo. Al introducir la condición de normalización de la densidad  $\int_{\mathcal{V}} |\psi|^2 = \int_{\mathcal{V}_q} |\psi|^2 + \int_{\mathcal{V}_{TF}} |\psi|^2 = 1$ , el funcional que hemos de minimizar resulta ser

$$F'[\psi] = \int_{\mathcal{V}_q} d^3\mathbf{r} \left( \varepsilon_q |\psi|^2 + \frac{1}{2}g_q N |\psi|^4 - \mu |\psi|^2 \right) + \int_{\mathcal{V}_{TF}} d^3\mathbf{r} \left( V_{ho} |\psi|^2 + \frac{1}{2}gN |\psi|^4 - \mu |\psi|^2 \right), \quad (3.14)$$

cuyos puntos críticos corresponden a

$$V_{ho} + gN |\psi|^2 = \mu, \quad \text{en } \mathcal{V} - \mathcal{V}_q, \quad (3.15)$$

$$\varepsilon_q + g_q N |\psi|^2 = \mu, \quad \text{en } \mathcal{V}_q. \quad (3.16)$$

Estas expresiones son similares a las ecuaciones algebraicas para la densidad obtenidas en la aproximación habitual de Thomas-Fermi. Al igual que en esta aproximación, para delimitar el volumen del condensado utilizamos la Ecuación (3.15) con la condición  $|\psi|^2 \geq 0$ , la cual proporciona el valor del potencial químico en función de los valores máximos de las coordenadas,  $\mu(R)$  o  $\mu(Z)$ . Por otra parte, como se deduce de la Ecuación (3.16), debido a que en la región ocupada por el vórtice nuestra aproximación se reduce a una ecuación de valores medios, no es posible determinar el valor local de la función de onda del condensado. Las dimensiones  $(r_q, z_q)$  de esta región interior son ajustadas mediante la energía de punto cero de la trampa  $\varepsilon_q$ .

La principal hipótesis de la aproximación que proponemos reside en la separación entre regiones hecha en (3.12) y en la estimación de los volúmenes finitos que abarcan. Las expresiones (3.15) y (3.16) conducen a valores para la densidad en ambas regiones, que al ser sustituidos en la condición de normalización proporcionan una ecuación polinómica de fácil resolución para  $R(\mu)$  o  $Z(\mu)$ . Como veremos en los próximos apartados, estas variables nos permiten conocer magnitudes integradas del sistema tales como el potencial químico, la energía media, la energía de interacción o las densidades axial y radial del condensado. El buen acuerdo entre los resultados obtenidos con esta aproximación y los valores exactos calculados con la ecuación tridimensional de Gross-Pitaevskii confirman la hipótesis de partida.

### 3.3 Condensados alargados

El potencial químico se obtiene a partir de la condición de normalización de la función de onda dada por las expresiones (3.15) y (3.16). En el caso particular de condensados alargados ( $\lambda \ll 1$ ) con un vórtice axisimétrico de carga  $q$ , un cálculo sencillo conduce al polinomio quintico

$$\frac{1}{15}(\sqrt{\lambda} \bar{Z})^5 + \frac{1}{3}\beta_q(\sqrt{\lambda} \bar{Z})^3 = \chi_1, \quad (3.17)$$

donde  $\chi_1 \equiv N\lambda a/a_\perp$  es un parámetro adimensional que caracteriza completamente al condensado alargado,  $\bar{Z} \equiv Z/a_z$  es la semilongitud axial en unidades de oscilador armónico axial, y la información del vórtice aparece sólo en  $\beta_q$ , definido por

$$\beta_q = \frac{2^{2|q|}(|q|!)^2}{(2|q|)!}. \quad (3.18)$$

Aquí, un condensado sin vorticidad se caracteriza por  $q = 0$ .

La solución para la variable  $\sqrt{\lambda} \bar{Z}$  de la ecuación polinómica anterior (3.17), que tiene una sola raíz real con significado físico, puede encontrarse de manera exacta y prácticamente instantánea, con cualquier software matemático simbólico, como MATHEMATICA o MATLAB. El potencial químico se obtiene entonces de la expresión

$$\frac{\mu}{\hbar\omega_{\perp}} = (|q| + 1) + \frac{1}{2}(\sqrt{\lambda} \bar{Z})^2, \quad (3.19)$$

resultante de la Ecuación (3.15) cuando  $|\psi|^2 = 0$ . No obstante, hemos propuesto una solución analítica aproximada que satisface la Ecuación (3.17) con un error inferior al 0.75 % para cualquier  $\chi_1 \in [0, \infty)$ , y da lugar a la siguiente expresión para  $\mu$ :

$$\mu = (|q| + 1) + \frac{1}{2} \left( \frac{1}{(15\chi_1)^{\frac{4}{5}} + \frac{1}{3}} + \frac{1}{57\chi_1 + 345} + \frac{1}{(3\chi_1)^{\frac{4}{3}}} \right)^{-\frac{1}{2}}. \quad (3.20)$$

En la Figura 3.1(a) se presentan los valores del potencial químico obtenidos con la Ecuación (3.20) para condensados alargados cualesquiera (esto es, con cualquier  $\lambda \ll 1$ ) y diferentes valores de la vorticidad, comparados con los valores numéricos exactos hallados con la ecuación de Gross-Pitaevskii tridimensional (círculos huecos) en condensados con  $\lambda = 0.1$ . Como puede verse, el valor del potencial químico se incrementa al aumentar la carga del vórtice, debido principalmente a las mayores energías cinética y potencial que éste aporta.

A partir del potencial químico (o de la semilongitud axial), puede calcularse también de forma directa el valor medio de la energía de interacción, definida por  $\epsilon_{\text{int}} \equiv \frac{E_{\text{int}}}{N} = (1/2) \int gN |\psi(\mathbf{r})|^4 d^3\mathbf{r}$ , que toma el valor

$$\frac{\epsilon_{\text{int}}}{\hbar\omega_{\perp}} = \frac{1}{15\chi_1} \left[ \frac{1}{7}(\sqrt{\lambda} \bar{Z})^7 + \beta_q(\sqrt{\lambda} \bar{Z})^5 \right]. \quad (3.21)$$

Se comprueba con facilidad que las ecuaciones anteriores conducen a las expresiones correctas conocidas del potencial químico y la energía de interacción, tanto cuando  $\chi_1$  toma valores grandes,  $\chi_1 \gg 1$  (régimen de Thomas-Fermi), como en el límite opuesto, cuando  $\chi_1 \ll 1$  (régimen perturbativo). La Figura 3.1(b) muestra el buen ajuste de la energía de interacción predicha analíticamente con la Ecuación (3.21) para diferentes cargas del vórtice, frente a la solución numérica exacta hallada con la ecuación tridimensional de Gross-Pitaevskii en condensados con  $\lambda = 0.1$ . En la gráfica puede verse cómo para

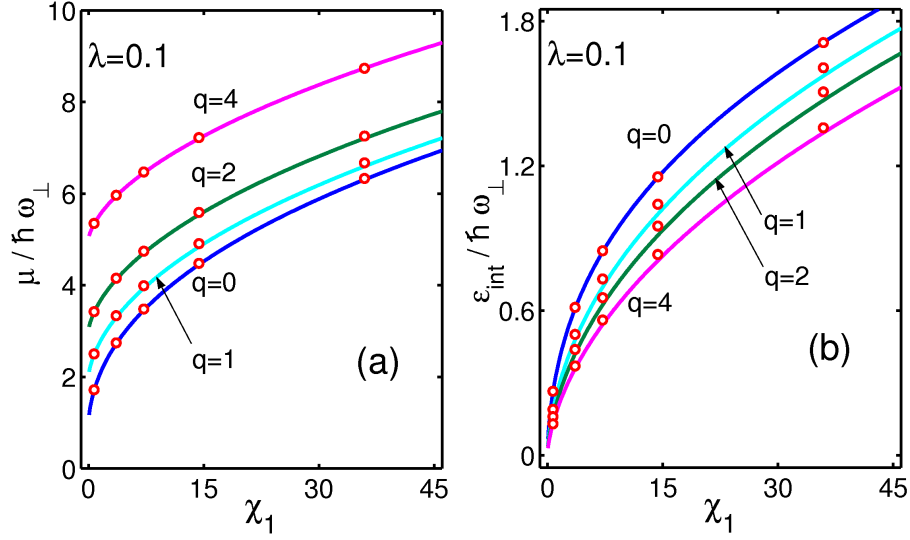


Figura 3.1: Predicción teórica (en línea continua), para el potencial químico (a) y la energía de interacción (b), aplicables a condensados alargados arbitrarios ( $\lambda \ll 1$ ) con diferentes valores de la vorticidad  $q$ . Los símbolos huecos son los resultados exactos obtenidos mediante la resolución numérica de la ecuación de Gross-Pitaevskii en condensados con  $\lambda = 0.1$ .

el mismo número de partículas, al contrario de lo que ocurría con el potencial químico, la energía de interacción disminuye al aumentar  $q$ , a causa de la mayor dilución que introduce la creciente vorticidad.

A partir de los resultados anteriores, las energías cinética y potencial pueden también calcularse analíticamente con las siguientes relaciones exactas que satisfacen los estados estacionarios [11]:

$$\epsilon_{\text{kin}} \equiv E_{\text{kin}}/N = \mu/2 - (7/4)E_{\text{int}}/N, \quad (3.22a)$$

$$\epsilon_{\text{pot}} \equiv E_{\text{pot}}/N = \mu/2 - (1/4)E_{\text{int}}/N. \quad (3.22b)$$

En la Figura 3.2(a) se muestra en líneas continuas la predicción teórica para las magnitudes energéticas anteriores ( $\mu$ ,  $\epsilon_{\text{int}}$ ,  $\epsilon_{\text{kin}}$ , y  $\epsilon_{\text{pot}}$ ) en condensados alargados cualesquiera con  $q = 0$ , obtenidas con las Ecuaciones (3.20), (3.21) y (3.22), y medidas en unidades de energía del oscilador armónico radial  $\hbar\omega_{\perp}$ , junto con los resultados numéricos exactos representados con círculos huecos. Estos últimos han sido calculados a partir de la solución numérica de la ecuación estacionaria de Gross-Pitaevskii tridimensional en condensados con relación de aspecto  $\lambda = 0.2$ .

Otra magnitud analítica relevante derivada con nuestra aproximación es la

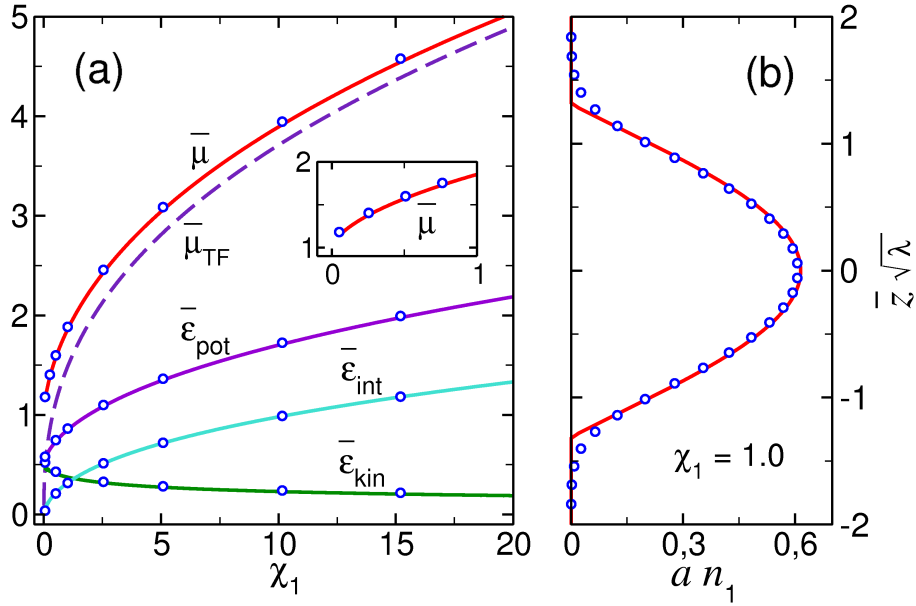


Figura 3.2: Predicción teórica de las propiedades del estado fundamental de condensados alargados arbitrarios con  $\lambda \ll 1$  (líneas continuas) y  $q = 0$ , obtenidas con nuestras Ecuaciones (3.20) a (3.23). Los círculos huecos corresponden a resultados numéricos exactos hallados en condensados con  $\lambda = 0.2$ . La línea de trazos es la predicción de Thomas-Fermi. A la izquierda (a), las magnitudes energéticas con barra están medidas en unidades de energía del oscilador armónico radial  $\hbar\omega_{\perp}$ . A la derecha (b) se representa la densidad axial adimensional  $an_1$  en función de la coordenada  $z$ , con  $\bar{z} = z/a_z$ .

densidad por unidad de longitud,  $n_1(z) \equiv N \int 2\pi r_{\perp} dr_{\perp} |\psi(r_{\perp}, z)|^2$ . Para ella obtenemos la siguiente expresión:

$$n_1(z) = \beta_q \frac{(\sqrt{\lambda} \bar{Z})^2}{4a} \left(1 - \frac{z^2}{Z^2}\right) + \frac{(\sqrt{\lambda} \bar{Z})^4}{16a} \left(1 - \frac{z^2}{Z^2}\right)^2, \quad (3.23)$$

donde hay que tener en cuenta que  $n_1(z) = 0$  para  $|z| > Z$ . La precisión de esta fórmula puede apreciarse en la Figura 3.2(b) para el valor particular de  $\chi_1 = 1$ , donde se muestra la densidad axial de un condensado alargado cualquiera con  $\lambda \ll 1$  proporcionada por (3.23) (línea continua), junto a los resultados numéricos exactos de la ecuación de Gross-Pitaevskii tridimensional para un condensado con  $\lambda = 0.2$  (círculos). Es importante notar que  $\chi_1 = 1$  representa una situación intermedia entre los casos extremos analíticamente resolubles, que corresponden a  $\chi_1 \ll 1$  y  $\chi_1 \gg 1$ .

Mediante las expresiones anteriores para el potencial químico y la densidad por unidad de longitud, llegamos a la siguiente ecuación para el potencial

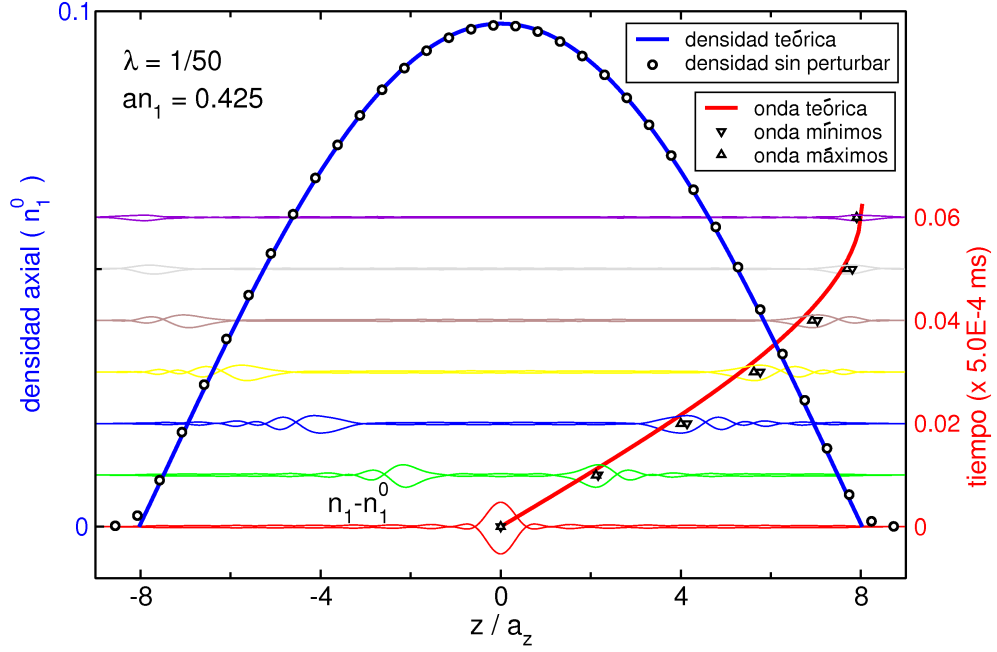


Figura 3.3: Propagación de perturbaciones equivalentes al 2% de la densidad máxima en un condensado alargado. Las curvas de trazo fino en diferentes colores, dispuestas horizontalmente, y los triángulos que señalan la posición de los valles o crestas de la onda, muestran la perturbación calculada con la ecuación de Gross-Pitaevskii tridimensional a diferentes tiempos. La curva roja es la predicción teórica que proporciona la Ecuación (3.25). También se representa la densidad axial del condensado dada por la curva azul, correspondiente a la Ecuación (3.23), comparada con la solución numérica de la ecuación de Gross-Pitaevskii, indicada con círculos negros.

químico local, definido como  $\mu_{\perp}(z) \equiv \mu - \frac{1}{2}m\omega_z^2 z^2$  [58],

$$\frac{\bar{\mu}_{\perp}(z)}{\hbar\omega_{\perp}} = (|q| + 1) + \sqrt{\beta_q^2 + 4an_1(z)} - \beta_q. \quad (3.24)$$

Dado que para un condensado alargado la primera velocidad del sonido (local) axial  $c_{1D}$  está definida por  $c_{1D}^2 = \frac{n_1}{m} \frac{\partial \mu_{\perp}}{\partial n_1}$ , el resultado dado por la Ecuación (3.24) nos permite derivar la siguiente fórmula general para  $c_{1D}$ :

$$c_{1D}^2 = \frac{\hbar\omega_{\perp}}{m} \frac{2an_1(z)}{\sqrt{\beta_q^2 + 4an_1(z)}}. \quad (3.25)$$

En ausencia de vorticidad esta fórmula coincide con el resultado obtenido en la Referencia [59] para un condensado alargado homogéneo. La Figura 3.3 refleja la exactitud de las expresiones anteriores aplicadas a un condensado de  $^{87}\text{Rb}$  con  $N = 10^4$  partículas. Se trata de un caso alejado tanto del régimen

de Thomas-Fermi habitual como del régimen perturbativo. En el gráfico se ha representado la densidad axial que proporciona la Ecuación (3.23) (curva gruesa azul) junto con los valores exactos (círculos negros) calculados con la ecuación estacionaria tridimensional de Gross-Pitaevskii. Como puede apreciarse el acuerdo es muy bueno. En la misma figura se muestra también el desplazamiento temporal de una onda de densidad. Tras introducir pequeñas perturbaciones iniciales en el centro del condensado (indicadas por delgadas líneas rojas en  $t = 0$ ), hemos seguido su evolución resolviendo la ecuación tridimensional de Gross-Pitaevskii dependiente del tiempo. Los triángulos rectos de trazo negro corresponden a los máximos de densidad de la onda para diferentes tiempos cuando la perturbación inicial es una sobredensidad, mientras que los triángulos invertidos están asociados a los mínimos de la onda en el caso de una perturbación que disminuye localmente la densidad. La curva roja de trazo grueso, dibujada sólo para valores positivos de la coordenada  $z$ , es la predicción de nuestras Ecuaciones (3.25) y (3.23). De nuevo, el buen acuerdo es manifiesto.

### 3.4 Condensados achatados

Otro caso particular destacable es el de los condensados achatados en presencia de un vórtice axisimétrico de carga  $q$ , cuya relación de aspecto cumple  $\lambda \gg 2(|q| + 1)$ . Para obtener el potencial químico a través de la condición de normalización de la función de onda (3.15)–(3.16), es necesario resolver el siguiente polinomio de quinto grado en la variable  $\bar{Z} \equiv Z/a_z$ , que representa la semilongitud axial en unidades del oscilador armónico axial,

$$\frac{1}{15}\bar{Z}^5 + \frac{\xi_1}{8}\bar{Z}^4 - \frac{\xi_3}{4}\bar{Z}^2 + \frac{\xi_5}{8} = \chi_2, \quad (3.26)$$

donde  $\chi_2 \equiv Na/\lambda^2 a_z$  es el único parámetro físico de la ecuación y los  $\xi_n$  son factores numéricos que se dan más adelante. El potencial químico viene dado por  $\mu = \frac{1}{2}\hbar\omega_z\bar{Z}^2$ . La elección de  $\bar{Z}$  como variable a determinar en la ecuación anterior se debe únicamente a la forma simple que dicha ecuación adopta. La magnitud relevante, sin embargo, es el radio del condensado,  $\bar{R} = R/a_\perp$ , que viene dado por  $\bar{R}^2 = \lambda(\bar{Z}^2 - 1) + 2(|q| + 1)$ . Utilizando una solución analítica aproximada a la ecuación polinómica (3.26), obtenemos para  $\mu$  la siguiente expresión:

$$\frac{\mu}{\hbar\omega_z} = \frac{1}{2} \left( 1 + \left[ (1/15\chi_2)^{8/5} + (\kappa_2/8\chi_2)^2 \right]^{-1/4} \right), \quad (3.27)$$

en la que  $\kappa_2$  viene dado por

$$\kappa_2^{-1}(\chi_2) \equiv \sqrt{2/\pi} + \Theta(\chi_2 - \frac{1}{10}) \left(1 - \sqrt{2/\pi}\right) \left(1 - \frac{R_{\text{TF}}(\chi_2 = \frac{1}{10})}{R_{\text{TF}}(\chi_2)}\right), \quad (3.28)$$

donde  $\Theta(x)$  es la función de Heaviside,  $R_{\text{TF}}(\chi_2) = (15\chi_2)^{1/5}a_{\perp}$  es el radio de Thomas-Fermi, y los coeficientes numéricos  $\xi_n$  de la Ecuación (3.26) se definen a partir de  $\kappa_2$  como  $\xi_n \equiv (\kappa_2 - 1/n)$ , con  $n = 1, 3, 5, \dots$ . En la Figura 3.4(a) se puede observar la precisión de los resultados predichos por la expresión anterior para el potencial químico (línea continua), al compararlos con los valores exactos obtenidos con la ecuación de Gross-Pitaevskii tridimensional en un condensado con  $\lambda = 100$  (símbolos huecos). Como se aprecia en la figura,

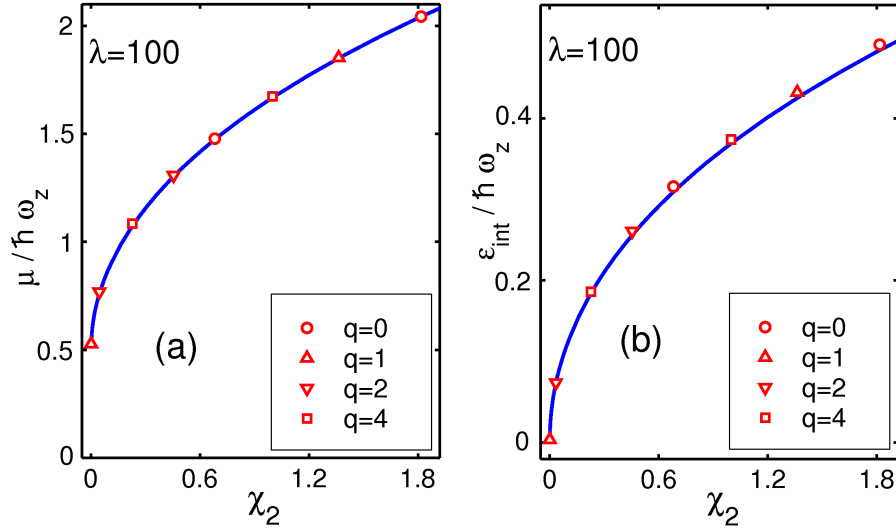


Figura 3.4: Predicción teórica (línea continua) para el potencial químico (a) y la energía de interacción (b), para condensados achatados arbitrarios con  $\lambda \gg 2(|q|+1)$  y diferentes valores de la vorticidad  $q$ . Los símbolos huecos son los resultados numéricos exactos obtenidos con  $\lambda = 100$ .

en estos condensados el potencial químico es independiente del valor de la carga del vórtice, lo cual es válido siempre que se cumpla la condición  $\lambda \gg 2(|q|+1)$ .

De igual manera a como se procedió en los condensados alargados, el valor medio de la energía de interacción se calcula a partir de  $\bar{Z}$ , ahora con la fórmula

$$\frac{\epsilon_{\text{int}}}{\hbar\omega_z} = \frac{1}{8\chi_2} \left( \frac{8}{105} \bar{Z}^7 + \frac{\xi_1}{6} \bar{Z}^6 - \frac{\xi_3}{2} \bar{Z}^4 + \frac{\xi_5}{2} \bar{Z}^2 - \frac{\xi_7}{6} \right). \quad (3.29)$$

De forma gráfica, puede verificarse el correcto ajuste de esta predicción en la Figura 3.4(b), comparándolo con los valores exactos de la energía de interacción



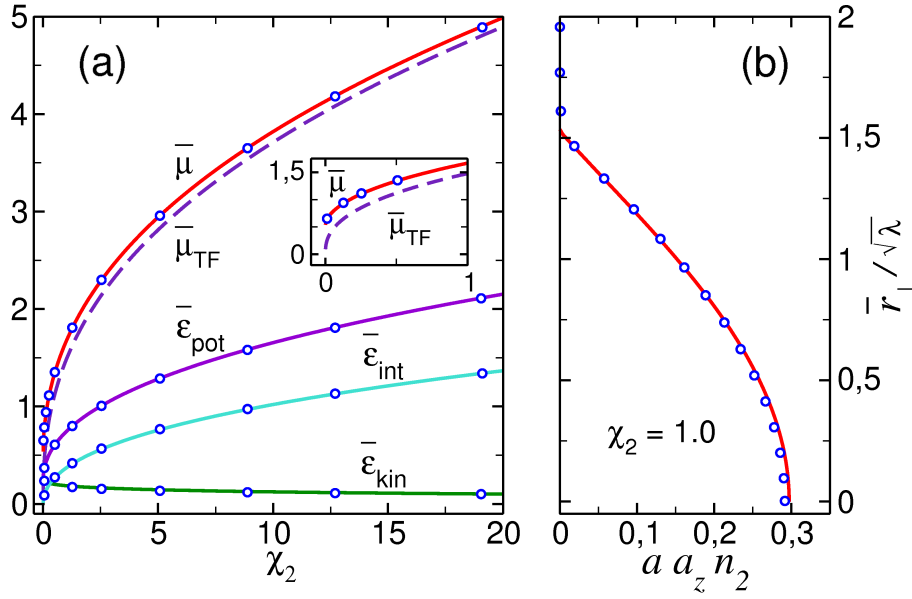


Figura 3.5: Predicción teórica de las propiedades del estado fundamental de condensados achatados arbitrarios con  $\lambda \gg 1$  (líneas continuas) y  $q = 0$ , obtenidas con nuestras Ecuaciones (3.27) a (3.31). Los círculos huecos corresponden a resultados numéricos exactos obtenidos para  $\lambda = 20$ . A la izquierda (a) se comparan las magnitudes energéticas medidas en cuantos de energía de oscilador armónico axial  $\hbar\omega_z$ , y la línea de trazos es la predicción de Thomas-Fermi. A la derecha (b) se muestra el perfil de densidad transversal adimensional  $aa_z n_2$  frente al radio,  $\bar{r}_\perp = r/a_\perp$ .

obtenidos en condensados con  $\lambda = 100$  para diversos valores de la vorticidad. La observación de ambas figuras, 3.4(a)–(b), permite comprobar que cuando la anisotropía de la trampa es suficientemente grande, la presencia de un vórtice es irrelevante para el valor de las magnitudes estacionarias en un condensado achatado.

Las energías cinética y potencial se calculan con las expresiones generales (3.22a) y (3.22b). Los resultados de las fórmulas anteriores para condensados achatados cualesquiera con  $q = 0$  se han representado, medidas en unidades de energía de oscilador armónico axial  $\hbar\omega_z$ , en la Figura 3.5(a). Para corroborar la validez de estos resultados, se muestran mediante símbolos huecos los datos exactos extraídos de la resolución numérica tridimensional de la ecuación estacionaria de Gross-Pitaevskii en condensados de relación de aspecto  $\lambda = 20$ . De nuevo se aprecia muy buen acuerdo entre la predicción teórica y los resultados numéricos.

Otra magnitud característica de los condensados achatados es la densidad

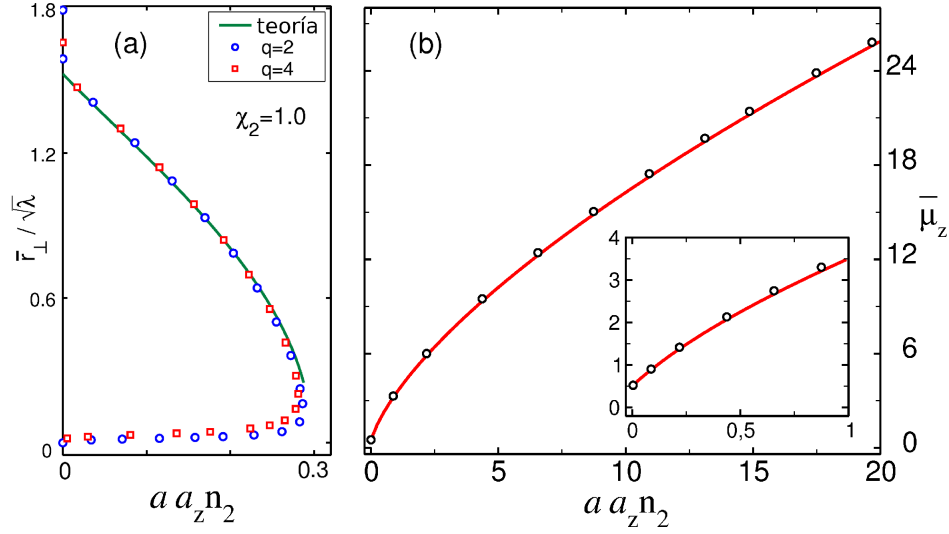


Figura 3.6: (a) Valor adimensional de la densidad radial,  $aa_z n_2(r_\perp)$ , para condensados achatados arbitrarios con  $\chi_2 = 1$  y diferentes cargas  $q$  del vórtice. La línea continua es la predicción de las Ecuación (3.30) y los símbolos huecos son los resultados numéricos exactos obtenidos en condensados con  $\lambda = 100$ . (b) Predicción teórica (líneas continuas) del potencial químico local con la Ecuación (3.32), para condensados achatados arbitrarios ( $\lambda \gg 2(|q| + 1)$ ), en función del parámetro adimensional de interacción  $aa_z n_2$ . Los círculos huecos corresponden a valores obtenidos mediante la ecuación bidimensional de Gross-Pitaevskii con  $q = 0$ .

por unidad de superficie, definida como  $n_2(r_\perp) \equiv N \int dz |\psi(r_\perp, z)|^2$ . Fuera del núcleo del vórtice podemos calcularla mediante la expresión

$$n_2(r_\perp) = \frac{\xi_1 (\bar{R}^2 - \bar{r}_\perp^2)}{4\pi a a_z \lambda} + \frac{\left[1 + (\bar{R}^2 - \bar{r}_\perp^2)/\lambda\right]^{3/2} - 1}{6\pi a a_z}, \quad (3.30)$$

teniendo en cuenta que  $n_2(r_\perp > R) = 0$ . En el caso de condensados sin vorticidad, la Figura 3.5(b) muestra el preciso ajuste del perfil de densidad por unidad de área generado con la Ecuación (3.30), para un condensado achatado arbitrario con  $\chi_2 = 1$ , respecto al perfil exacto de un condensado concreto con  $\lambda = 20$  (círculos huecos). Análogamente, en la Figura 3.6(a), para el mismo valor de la interacción, puede observarse una predicción igualmente buena cuando los condensados incluyen vórtices axisimétricos, si bien ahora la curva dada por nuestra ecuación sólo es válida fuera de los núcleos de vorticidad. En ambas figuras, es importante señalar que  $\chi_2 = 1$  corresponde a una situación alejada de los casos extremos analíticamente resolubles.

En este punto conviene introducir el potencial químico local  $\mu_z(r_\perp)$  [58],

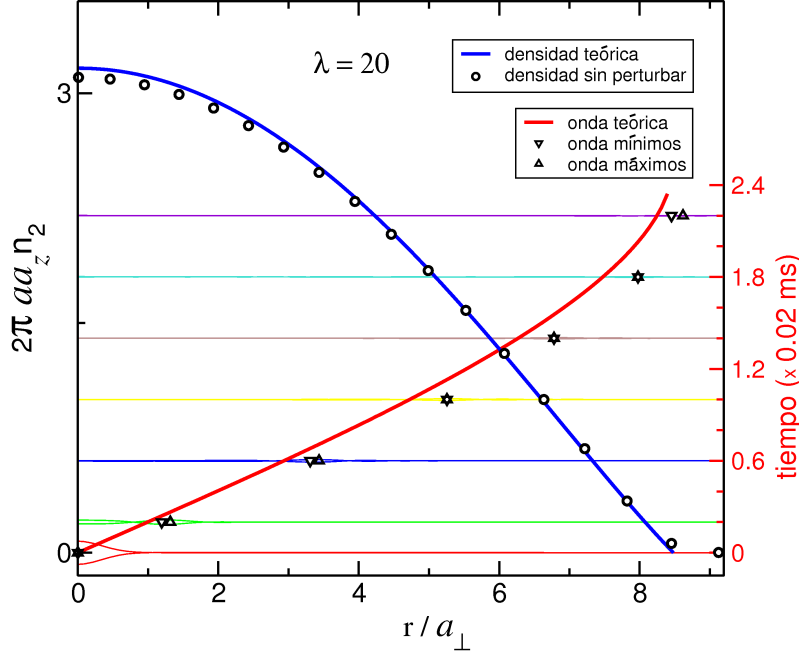


Figura 3.7: Propagación radial de una perturbación central, de un 2.4 % de la densidad máxima, sobre un condensado achatado sin vorticidad, con  $\chi_2 = 2.54$ . Las curvas de trazo fino (en diferentes colores) dispuestas horizontalmente, y los triángulos que señalan la posición de los valles o crestas de la onda, muestran la perturbación calculada con la ecuación de Gross-Pitaevskii tridimensional a diferentes tiempos. La curva roja gruesa es la predicción teórica de la Ecuación (3.34). Como referencia, se representa la densidad radial adimensional del condensado previa a la perturbación obtenida con nuestra Ecuación (3.30) (curva azul de trazo grueso) junto a los valores exactos (círculos negros).

definido por  $\mu_z(r_\perp) = \mu - \frac{1}{2}m\omega_\perp^2 r_\perp^2$ , y que por tanto puede obtenerse a partir del radio del condensado  $\bar{R}$  mediante

$$\bar{\mu}_z(r_\perp) \equiv \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \left( \frac{\bar{R}}{\sqrt{\lambda}} \right)^2 \left( 1 - \frac{r_\perp^2}{\bar{R}^2} \right), \quad (3.31)$$

donde  $\bar{\mu}_z(r_\perp) = \mu_z(r_\perp)/\hbar\omega_z$ . El potencial químico local obtenido con la Ecuación (3.31) puede reescribirse en función de la densidad por unidad de área  $n_2$ , a partir de la Ecuación (3.30):

$$\frac{1}{3} \left[ (2\bar{\mu}_z)^{3/2} - 1 \right] + \frac{\xi_1}{2} (2\bar{\mu}_z - 1) = 2\pi a a_z n_2. \quad (3.32)$$

Esta expresión para  $\bar{\mu}_z$ , que como puede comprobarse en la Figura 3.6(b) posee una gran precisión, permite calcular el valor de la primera velocidad del

sonido (local) radial  $c_{2D}$  en un condensado achatado. Dado que

$$c_{2D}^2 = \frac{n_2}{m} \frac{\partial \mu_z}{\partial n_2}, \quad (3.33)$$

tras derivar, se obtiene

$$c_{2D}^2 = \frac{\hbar \omega_z}{m} \left( \frac{\frac{3}{2} \xi_1 [2\bar{\mu}_z(r_\perp) - 1] + [2\bar{\mu}_z(r_\perp)]^{3/2} - 1}{3\xi_1 + 3 [2\bar{\mu}_z(r_\perp)]^{1/2}} \right). \quad (3.34)$$

La Figura 3.7 muestra los resultados predichos por la expresión anterior (curva roja gruesa) al ser aplicada a un condensado de  $^{23}\text{Na}$  con  $N = 10^6$  partículas. En el gráfico se ha representado el desplazamiento temporal, determinado con la ecuación tridimensional de Gross-Pitaevskii dependiente del tiempo, de las ondas de densidad generadas al introducir pequeñas perturbaciones iniciales en el centro del condensado (indicadas por delgadas líneas rojas en  $t = 0$ ). Los triángulos rectos de trazo negro corresponden a los máximos de densidad de la onda para diferentes tiempos cuando la perturbación inicial es una sobredensidad, mientras que los triángulos invertidos están asociados a los mínimos de la onda en el caso de una perturbación que disminuye localmente la densidad. En la misma figura se muestra también la densidad radial por unidad de área que proporciona la Ecuación (3.30) (curva gruesa azul) junto a los valores exactos (círculos negros) calculados con la ecuación estacionaria tridimensional de Gross-Pitaevskii.

### 3.5 Resumen

En este capítulo hemos derivado expresiones analíticas generales que proporcionan las propiedades estacionarias de condensados escalares de Bose-Einstein con geometrías alargadas o achatadas, confinados por potenciales armónicos con simetría cilíndrica. En estos sistemas, generados habitualmente en los experimentos, únicamente se disponía de soluciones analíticas para el estado fundamental sin vorticidad y sólo en los regímenes límite de la interacción: perturbativo y Thomas-Fermi, que corresponden esencialmente a condensados con un número reducido o elevado de partículas, respectivamente. Nuestra formulación, sin embargo, es válida para condensados con un número arbitrario de partículas y resulta aplicable incluso en presencia de un vórtice axisimétrico múltiplemente cuantizado. Las expresiones analíticas encontradas poseen

los límites correctos tanto en el régimen perturbativo como en el de Thomas-Fermi, y permanecen válidas y precisas en cualquier régimen intermedio entre estos dos casos extremos.

El modelo que proponemos representa una extensión de la aproximación de Thomas-Fermi que incorpora convenientemente y de forma sencilla la contribución de la energía de punto cero del potencial armónico de confinamiento, y es aplicable al caso general de condensados con geometría arbitraria [A.3]. A pesar de que no se ha introducido ningún parámetro libremente ajustable, las fórmulas obtenidas reproducen con notable precisión (típicamente mejor que el 1 %) buena parte de las propiedades estacionarias de condensados con cualquier número de partículas, para lo cual, en el caso general, únicamente se necesita resolver una ecuación polinómica de quinto orden. Si bien la resolución de la ecuación de Gross-Pitaevskii puede suponer una tarea computacionalmente compleja (especialmente para el caso de condensados en trampas muy anisótropas), resolver una ecuación polinómica es una tarea computacional trivial. De hecho, paquetes de software simbólico tales como MATHEMATICA o MATLAB proporcionan la solución de forma instantánea simplemente introduciendo una sola instrucción. No obstante, en el caso de condensados confinados en trampas con geometrías alargadas o achatadas es posible además encontrar soluciones aproximadas de gran exactitud para las ecuaciones polinómicas anteriores, de modo que en estos casos todas las propiedades estacionarias del condensado se pueden obtener a partir de fórmulas analíticas cerradas. De esta manera, hemos podido derivar expresiones analíticas explícitas que proporcionan propiedades tales como la longitud axial, el radio, el potencial químico, la energía media de interacción, las energías cinética y potencial, los perfiles de densidad axial o radial y las velocidades locales del sonido de condensados alargados o achatados con una precisión comparable a la que se obtiene resolviendo numéricamente la correspondiente ecuación de Gross-Pitaevskii.

Los resultados presentados en este capítulo se encuentran desarrollados con mayor detalle en las Referencias [A.2, A.3], incluidas en el Apéndice A.

## Capítulo 4

# Ecuaciones de movimiento efectivas de dimensionalidad reducida

Cuando las trampas con simetría cilíndrica son muy anisótropas, los condensados están tan fuertemente confinados en la dimensión radial o axial que la dinámica correspondiente llega a ser de forma efectiva unidimensional o bidimensional, respectivamente. En el régimen de campo medio, esta dinámica puede reproducirse fielmente con la ecuación de Gross-Pitaevskii tridimensional dependiente del tiempo. Sin embargo, en su resolución numérica, debido a que la evolución temporal de estos sistemas está caracterizada por dos escalas de tiempo muy diferentes, es necesario resolver de forma exacta los irrelevantes grados de libertad “rápidos” aunque normalmente se esté interesado sólo en la evolución de los grados de libertad “lentos”. En general, esto supone una tarea de cálculo no trivial que, para trampas suficientemente anisótropas y con dinámicas que pueden llegar a ser caóticas, representa un desafío computacional [A.1, 60]. Por este motivo es conveniente desarrollar modelos teóricos que permitan estudiar la dinámica del condensado en términos de ecuaciones efectivas de dimensionalidad reducida. En esta línea ha habido varias aproximaciones en años recientes [42, 61–65]. De entre ellas, las ecuaciones efectivas de Schrödinger no polinómicas unidimensionales y bidimensionales propuestas por Salasnich y colaboradores [42] han demostrado ser las más eficientes.

En este capítulo proponemos ecuaciones de onda efectivas unidimensionales y bidimensionales que permiten describir adecuadamente la dinámica de condensados tridimensionales alargados y achatados con interacciones interatómicas repulsivas en el régimen de campo medio. Nuestro modelo se basa en la aproximación adiabática estándar y en el empleo de expresiones analíticas para el potencial químico local, obtenidas en nuestros trabajos previos [A.2, A.3] o

derivadas mediante métodos variacionales. Las ecuaciones resultantes, que son más sencillas y, sin embargo, más precisas que las anteriormente propuestas en la literatura [A.5], pueden aplicarse a sistemas con un número arbitrario de partículas, permiten tratar condensados que contienen un vórtice axisimétrico sin introducir modificaciones adicionales, y poseen los límites correctos en los regímenes de Thomas-Fermi y perturbativo. Los resultados presentados en este capítulo han sido publicados en las Referencias [A.4, A.5], recogidas en el apéndice.

## 4.1 Ecuaciones efectivas para condensados alargados

En los condensados de Bose-Einstein confinados por trampas muy elongadas con simetría cilíndrica se puede suponer que en cada instante de tiempo los grados de libertad transversos se ajustan inmediatamente al estado de menor energía compatible con la configuración axial correspondiente a ese instante. Dicho de otra manera, los grados de libertad transversos son comparativamente tan rápidos que siguen de forma prácticamente instantánea a las variaciones de la configuración axial. Ésta es la hipótesis adiabática, que no tiene en cuenta las correlaciones entre grados de libertad transversos y axiales, y en consecuencia permite que la función de onda del condensado pueda ser factorizada como [61, 66]

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \varphi(\mathbf{r}_\perp; n_1(z, t))\phi(z, t), \quad (4.1)$$

donde  $n_1(z, t)$  es la densidad local por unidad de longitud que caracteriza la configuración axial,

$$n_1(z, t) \equiv N \int d^2\mathbf{r}_\perp |\psi(\mathbf{r}_\perp, z, t)|^2 = N|\phi(z, t)|^2, \quad (4.2)$$

en la que se ha normalizado  $\varphi(\mathbf{r}_\perp)$  a la unidad.

Si, como ocurre normalmente, el potencial de confinamiento puede separarse en la forma  $V(\mathbf{r}) = V_\perp(\mathbf{r}_\perp) + V_z(z)$ , y asumiendo que la densidad axial varía lentamente tanto en el espacio como en el tiempo, al sustituir (4.1) en la ecuación de Gross-Pitaevskii dependiente del tiempo (2.2), se obtiene

$$\left( i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} - V_z(z)\phi \right) \varphi(\mathbf{r}_\perp; n_1) = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_\perp^2 \varphi + V_\perp(\mathbf{r}_\perp)\varphi + gn_1(z, t)|\varphi|^2 \varphi \right) \phi(z, t). \quad (4.3)$$

Multiplicando la ecuación anterior por  $\varphi^*(\mathbf{r}_\perp; n_1)$ , e integrando en la coordenada radial, se llega a la ecuación de movimiento unidimensional

$$i\hbar \frac{\partial \phi(z, t)}{\partial t} = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V_z(z) + \mu_\perp(n_1) \right) \phi(z, t), \quad (4.4)$$

donde  $\mu_\perp(n_1)$  es el potencial químico transverso, que satisface la siguiente ecuación estacionaria de Gross-Pitaevskii:

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_\perp^2 + V_\perp(\mathbf{r}_\perp) + gn_1 |\varphi(\mathbf{r}_\perp)|^2 \right) \varphi(\mathbf{r}_\perp) = \mu_\perp(n_1) \varphi(\mathbf{r}_\perp). \quad (4.5)$$

Esta ecuación independiente del tiempo, que es equivalente a la ecuación obtenida para un condensado axialmente homogéneo cuya densidad por unidad de longitud a lo largo del eje es  $n_1$ , muestra que en cada instante  $t$  y para cada plano  $z$  la función de onda transversa  $\varphi$  viene dada por el estado estacionario compatible con la configuración axial caracterizada por  $n_1(z, t)$ . Como se deduce de las ecuaciones anteriores, la determinación de  $\mu_\perp(n_1)$  es la clave para derivar una ecuación efectiva que gobierne la dinámica axial del condensado.

En la Ecuación (4.5) la densidad axial  $n_1$  entra como un parámetro numérico externo, independiente del estado particular del condensado completo. Es por ello que la búsqueda de soluciones a esta ecuación no precisa del conocimiento detallado de la configuración axial y, en consecuencia, las fórmulas analíticas para el potencial químico local de condensados tridimensionales alargados, propuestas por nosotros en el capítulo anterior, representan una solución aproximada válida de la ecuación transversa (4.5). Tales fórmulas, derivadas dentro de nuestra extensión de la aproximación de Thomas-Fermi, proporcionan el potencial químico local de condensados confinados por un potencial armónico axisimétrico en presencia de un vórtice recto de carga  $q$  en la dirección axial:

$$\mu_\perp(n_1) = \hbar\omega_\perp \left( \sqrt{\beta_q^2 + 4an_1} + (|q| + 1) - \beta_q \right), \quad (4.6)$$

donde el parámetro

$$\beta_q = \frac{2^{2|q|} (|q|!)^2}{(2|q|)!}, \quad (4.7)$$

incorpora de forma simple la información relativa al vórtice. Por ejemplo, para vórtices de carga  $q=0, 1$  y  $2$ ,  $\beta_q=1, 2$  y  $\frac{8}{3}$ , respectivamente.

Como puede comprobarse en la Figura 4.1, los resultados teóricos que proporciona la expresión analítica (4.6) (líneas continuas), representan una excelente aproximación a la solución numérica exacta de la Ecuación (4.5) (símbolos huecos). En esta figura, el potencial químico local, medido en unidades de



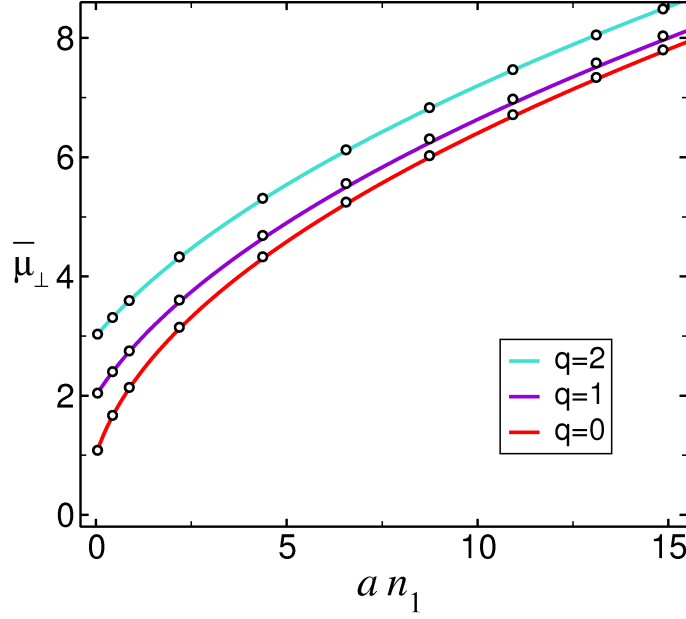


Figura 4.1: Predicción teórica (en líneas continuas), en función del parámetro de interacción adimensional  $an_1$ , de la solución a la Ecuación (4.5) con diferentes valores de la vorticidad  $q$ , proporcionada por la fórmula (4.6) para el potencial químico local  $\bar{\mu}_\perp = \mu_\perp/\hbar\omega_\perp$ . Los símbolos huecos son los resultados numéricos exactos de la Ecuación (4.5).

energía de oscilador armónico radial  $\bar{\mu}_\perp = \mu_\perp/\hbar\omega_\perp$ , se ha calculado en función del parámetro de interacción adimensional  $an_1$ . En los diferentes regímenes determinados por la interacción y para todas las cargas del vórtice, la predicción teórica muestra errores inferiores al 1%.

Al sustituir la fórmula dada por (4.6) en la Ecuación (4.4) llegamos finalmente a la siguiente ecuación de movimiento efectiva unidimensional:

$$i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} + V_z(z)\phi + \hbar\omega_\perp \sqrt{\beta_q^2 + 4aN} |\phi|^2 \phi, \quad (4.8)$$

donde el término constante proporcional a  $(|q| + 1) - \beta_q$  ha sido incluido en la definición del potencial axial  $V_z(z)$ . Esta ecuación describe la dinámica de cualquier condensado alargado con interacciones interatómicas repulsivas en presencia de un vórtice de carga  $q$  dentro del régimen de campo medio, y da cuenta de la contribución de los grados de libertad transversos a través del término no polinómico proporcional a  $\hbar\omega_\perp$ . Además, como se detallará más adelante, en combinación con la aproximación de densidad local la Ecuación (4.8) permite encontrar expresiones analíticas para propiedades del estado fundamental tales como la longitud axial, potencial químico total, perfiles de den-

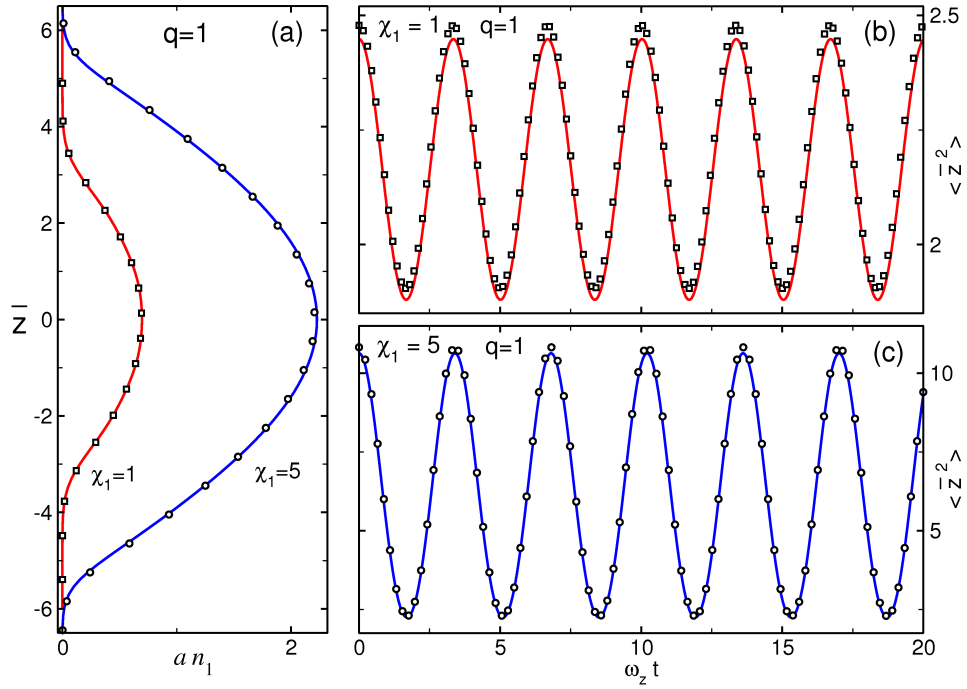


Figura 4.2: Estados estacionarios (a) y evolución temporal (b)–(c) de condensados alargados que contienen un vórtice de carga  $q = 1$  para dos valores de la interacción  $\chi_1 = \lambda N a / a_\perp = 1$  y 5. Las líneas continuas representan los resultados de la ecuación efectiva unidimensional (4.8) y los símbolos huecos corresponden a valores calculados con la ecuación de Gross-Pitaevskii tridimensional

sidad axial y velocidad del sonido, que coinciden con las halladas en el Capítulo anterior.

La Ecuación (4.8) reproduce con gran exactitud tanto los estados estacionarios como la evolución temporal de los condensados alargados. Para ilustrar ambas situaciones hemos calculado la configuración estacionaria de condensados con un vórtice de carga unidad atrapados en potenciales armónicos con relación de aspecto  $\lambda = \omega_z / \omega_\perp = 0.1$ . En la Figura 4.2 se han representado dos casos correspondientes a valores diferentes de la interacción, caracterizados por el parámetro  $\chi_1 = \lambda N a / a_\perp = 1$  y 5. La Figura 4.2(a) muestra con líneas continuas la densidad axial calculada con la versión estacionaria de la Ecuación (4.8), junto a los resultados numéricos exactos de la ecuación de Gross-Pitaevskii tridimensional (en símbolos huecos). A continuación hemos perturbado esta configuración de equilibrio alterando repentinamente la frecuencia de confinamiento axial,  $\omega_z \rightarrow 1.1\omega_z$ . Las Figuras 4.2(b)–(c) muestran la evolución temporal posterior a través de la longitud cuadrática media axial

$\langle \bar{z}^2 \rangle = \int d\bar{z} \bar{z}^2 n_1(\bar{z}, t)$ , donde  $\bar{z} = z/a_z$ . Igual que antes, los resultados de la Ecuación (4.8) son las líneas continuas y los valores numéricos exactos de la ecuación de Gross-Pitaevskii tridimensional son los símbolos huecos. Como puede verse, las aproximaciones dadas por la ecuación efectiva unidimensional están en muy buen acuerdo con los resultados numéricos exactos.

Con el fin de mostrar la validez de la ecuación anterior en otra situación no trivial, hemos calculado la evolución en el tiempo de un solitón oscuro. Para ello hemos determinado primero la configuración de equilibrio de un condensado con  $q = 0$  y  $\chi_1 = 2$  confinado por un potencial armónico con relación de aspecto  $\lambda = 0.1$ , y sometido a un haz láser con frecuencia desplazada hacia el azul respecto a la resonancia. Un láser de estas características produce un efecto repulsivo en la nube de densidad atómica que puede modelarse mediante un potencial gaussiano

$$V(z) = V_0 \exp(-z^2/2z_0^2) . \quad (4.9)$$

En nuestro caso hemos escogido  $V_0 = 12\hbar\omega_z$  y  $z_0 = \sqrt{2\lambda}a_z$ . Una vez alcanzado el estado de equilibrio, en  $\tau = \omega_z t = 0$ , apagamos repentinamente el láser y dejamos al sistema evolucionar en la trampa armónica. La Figura 4.3 muestra la evolución temporal del perfil de densidad axial  $n_1(\bar{z})$  a diferentes tiempos. Las líneas continuas representan los resultados obtenidos con nuestra ecuación efectiva unidimensional (4.8) y los círculos huecos son los resultados exactos calculados con la ecuación de Gross-Pitaevskii tridimensional. En  $\tau = \omega_z t = 1$  puede identificarse en cada semieje axial una estructura característica de solitón oscuro que se desarrolla a partir de la configuración inicial y se propaga hacia el extremo correspondiente del condensado. En  $\tau = 2$  el solitón llega hasta el punto de retorno, donde el mínimo de densidad es cero, y para valores de  $\tau > 2$  retrocede hacia el centro.

La utilidad de la Ecuación (4.8) ha sido puesta de manifiesto por diversos autores [15–17, 67–70]. En particular, esta ecuación ha sido utilizada en la modelización de la estática y dinámica de solitones oscuros aislados o múltiples en condensados cuyas configuraciones estaban en el tránsito desde el régimen 3D al 1D [17, 69], donde además ha servido de referencia para la obtención de ecuaciones efectivas vectoriales [70]. El estudio de los solitones oscuros múltiples es especialmente relevante desde el punto de vista experimental, ya que es posible generarlos mediante interferencia de ondas de materia. Usando la ecuación anterior, los autores de la Referencia [15] fueron capaces de reprodu-

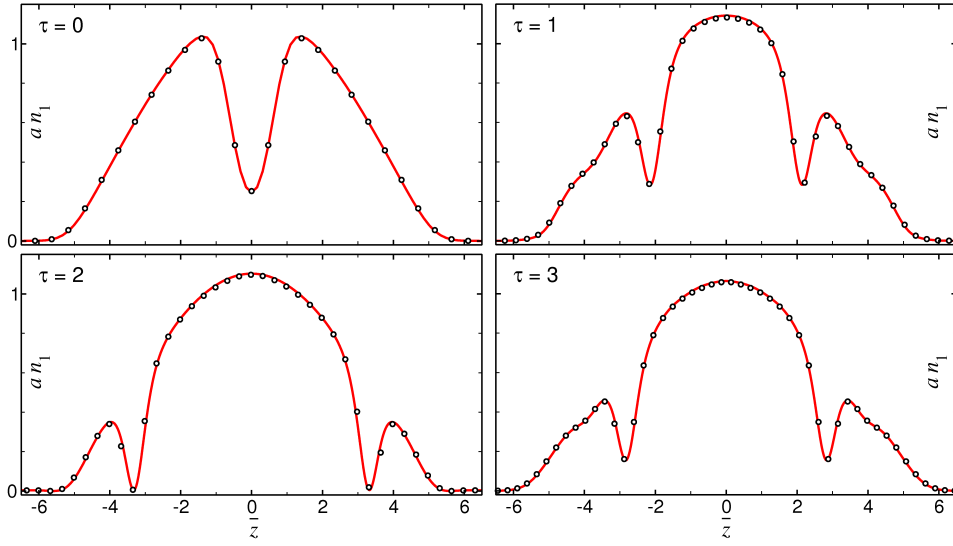


Figura 4.3: Evolución del perfil de densidad axial  $n_1(\bar{z})$  de un condensado alargado sin vorticidad ( $q = 0$ ) y  $\chi_1 = 2$ , que presenta un solitón oscuro, sobre una trampa armónica con relación de aspecto  $\lambda = \omega_z/\omega_\perp = 0.1$ , para diferentes tiempos  $\tau = \omega_z t$ . Las líneas continuas son los resultados obtenidos con nuestra ecuación efectiva unidimensional (4.8) y los círculos huecos son los resultados exactos calculados con la ecuación de Gross-Pitaevskii tridimensional. La longitud del condensado se mide en unidades de oscilador armónico axial,  $\bar{z} = z/a_z$ .

cir fielmente los resultados de un experimento realizado en la Universidad de Heidelberg [71] en el que se estudiaba la interacción de solitones oscuros en un condensado de átomos de  $^{87}\text{Rb}$ , confinado en una trampa armónica de frecuencias  $\omega_\perp/2\pi = 890$  Hz y  $\omega_z/2\pi = 53$  Hz. Tanto en el experimento como en el análisis teórico se reveló que la interferencia entre solitones sigue un patrón similar al de las partículas materiales. Por su parte, en la Referencia [16] se aplicó la Ecuación (4.8) al estudio de la estática y dinámica de solitones oscuros en condensados alargados de  $^{87}\text{Rb}$  atrapados por potenciales de doble pozo formados al combinar un confinamiento armónico con una red óptica. Los autores de este trabajo realizaron además un análisis de estabilidad de los modos no lineales de la Ecuación (4.8) a través de las Ecuaciones de Bogoliubov-de Gennes.

## 4.2 Ecuaciones efectivas para condensados achatados

Mediante un procedimiento paralelo al del caso unidimensional, hemos derivado una ecuación efectiva bidimensional que gobierna la dinámica transversa

de condensados achatados en el régimen de campo medio. Esta ecuación, que reproduce los resultados correctos tanto en el régimen de Thomas-Fermi como en el cuasi-2D, es de nuevo más sencilla y precisa que las propuestas con anterioridad en la literatura [A.3].

En un condensado de Bose-Einstein atrapado por un potencial axial mucho más intenso que el potencial de confinamiento radial, según la hipótesis adiabática puede suponerse que los grados de libertad axiales se ajustan instantáneamente al estado de equilibrio compatible con la configuración radial. Tales condiciones permiten que la función de onda puede factorizarse como

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \varphi(\mathbf{r}_\perp, t)\phi(z; n_2(\mathbf{r}_\perp, t)), \quad (4.10)$$

donde  $\phi(z; n_2(\mathbf{r}_\perp, t))$  está normalizada a la unidad y  $n_2(\mathbf{r}_\perp, t)$  representa la densidad local por unidad de área que caracteriza a la configuración radial,

$$n_2(\mathbf{r}_\perp, t) \equiv N \int dz |\psi(\mathbf{r}_\perp, z, t)|^2 = N |\varphi(\mathbf{r}_\perp, t)|^2. \quad (4.11)$$

De nuevo, cuando el potencial de la trampa es separable en las coordenadas espaciales, la sustitución de la función de onda factorizada en la ecuación de Gross-Pitaevskii dependiente del tiempo (2.2) y la posterior integración de ésta sobre la coordenada axial conducen a la ecuación efectiva bidimensional,

$$i\hbar \frac{\partial \varphi(\mathbf{r}_\perp, t)}{\partial t} = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_\perp^2 + V_\perp(\mathbf{r}_\perp) + \mu_z(n_2) \right) \varphi(\mathbf{r}_\perp, t), \quad (4.12)$$

donde  $\mu_z(n_2)$  es el potencial químico local que satisface la ecuación estacionaria

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V_z(z) + gn_2 |\phi(z)|^2 \right) \phi(z) = \mu_z(n_2) \phi(z). \quad (4.13)$$

En los casos donde el potencial axial de la trampa es armónico puede utilizarse nuestra fórmula analítica para el potencial químico local, solución de la Ecuación (3.32) en función de la densidad por unidad de área, que viene dado por

$$\mu_z(n_2) \equiv \frac{\hbar\omega_z}{8} \left[ \left( \eta + \sqrt{\eta^2 - \xi_1^6} \right)^{\frac{1}{3}} + \left( \eta - \sqrt{\eta^2 - \xi_1^6} \right)^{\frac{1}{3}} - \xi_1 \right]^2, \quad (4.14)$$

donde  $\eta = 4 + 6\xi_1 - \xi_1^3 + 24\pi a a_z n_2$  y  $\xi_1 = \kappa_2 - 1$  es un factor numérico (ver Ecuación (3.28)).

En la Figura 4.4 puede comprobarse la validez de nuestra ecuación efectiva bidimensional en la resolución de problemas estacionarios [gráficas (a) y

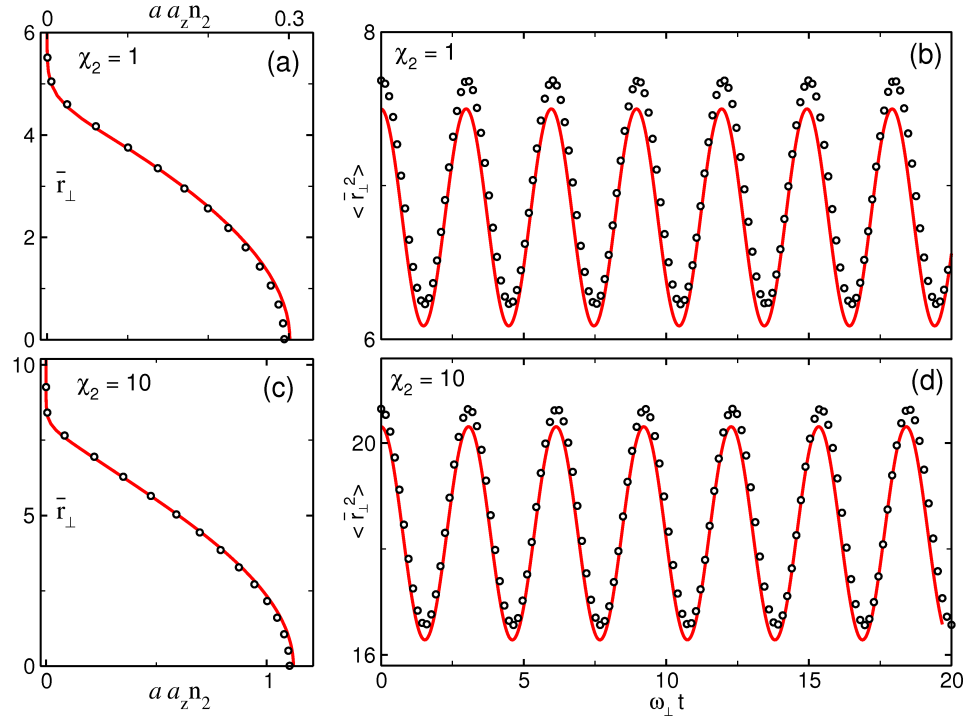


Figura 4.4: Densidad por unidad de superficie  $aa_z n_2$  de la configuración de equilibrio de condensados con  $\lambda = \omega_z/\omega_\perp = 10$  y  $q = 0$ , para valores de la interacción dados por  $\chi_2 = 1$  (a) y  $\chi_2 = 10$  (c). A la derecha se muestran las evoluciones en el tiempo del valor medio cuadrático de la coordenada radial  $\langle \bar{r}_\perp^2 \rangle$  para los condensados anteriores, tras un cambio repentino de la frecuencia de confinamiento radial,  $\omega_\perp \rightarrow 1.1\omega_\perp$ . Las líneas de trazo continuo corresponden a los resultados de nuestra ecuación efectiva bidimensional (4.12) y los círculos huecos son valores calculados con la ecuación de Gross-Pitaevskii 3D. El radio del condensado se mide en unidades de longitud de oscilador armónico radial,  $\bar{r}_\perp = \mathbf{r}_\perp/a_\perp$ .

(c)] y en la evolución temporal [gráficas (b) y (d)] de condensados achatados con  $q = 0$  y atrapados en un potencial armónico con  $\lambda = 10$ . En todos los casos los resultados de la ecuación efectiva (4.12) se comparan con la solución numérica de la ecuación de Gross-Pitaevskii tridimensional (círculos huecos). Los dos sistemas que se muestran poseen valores bien diferenciados de la interacción,  $\chi_2 = 1$  y 10; el primero se encuentra en el tránsito entre los regímenes 2D y 3D, y el segundo está en el régimen de Thomas-Fermi. En ellos se ha calculado la configuración de equilibrio inicial y se ha dibujado la correspondiente densidad adimensional por unidad de superficie  $aa_z n_2$ . A continuación se han perturbado los estados de equilibrio modificando instantáneamente en un 10% las frecuencias de confinamiento radial,  $\omega_\perp \rightarrow 1.1\omega_\perp$ , y se ha seguido

la evolución en el tiempo del valor medio cuadrático del radio del condensado  $\langle \bar{\mathbf{r}}_{\perp}^2 \rangle = \int d^2 \bar{\mathbf{r}}_{\perp} \bar{\mathbf{r}}_{\perp}^2 n_2(\bar{\mathbf{r}}_{\perp}, t)$ , donde  $\bar{\mathbf{r}}_{\perp} = \mathbf{r}_{\perp}/a_{\perp}$ . Los errores cometidos con nuestra aproximación son pequeños, inferiores al 2.5 % para  $\chi_2 = 1$  y al 1.5 % para  $\chi_2 = 10$ .

### 4.3 Deducción variacional de la ecuación efectiva unidimensional

La ecuación efectiva unidimensional dependiente del tiempo (4.4) muestra que los grados de libertad radiales influyen en la dinámica axial únicamente a través del potencial químico local  $\mu_{\perp}(n_1)$ . Éste, a su vez, es el autovalor de la ecuación estacionaria (4.5) para la función de onda transversa, la cual coincide localmente, en cada instante de tiempo, con la función de onda estacionaria de un condensado uniforme en la dirección axial cuya densidad lineal es  $n_1$ . Una solución de gran exactitud para el autovalor de la ecuación (4.5) viene dada por la expresión analítica (4.6), que dedujimos en el Capítulo 3 a partir de una extensión conveniente de la aproximación de Thomas-Fermi. En esta sección demostraremos que es posible derivar nuevas ecuaciones de movimiento efectivas utilizando un procedimiento más sistemático basado en un método variacional. Con este fin, conviene tener en cuenta que las soluciones exactas de la ecuación estacionaria (4.5) coinciden con los puntos críticos del funcional de la energía

$$\frac{E[\varphi]}{N} \equiv \int d^2 \mathbf{r}_{\perp} \left( \frac{\hbar^2}{2m} |\nabla_{\perp} \varphi|^2 + V_{\perp} |\varphi|^2 + \frac{1}{2} g n_1 |\varphi|^4 \right), \quad (4.15)$$

donde  $n_1 = N/L$  es la densidad por unidad de longitud de un condensado uniforme en la dirección axial descrito por la función de onda  $\varphi(\mathbf{r}_{\perp})$ . El potencial químico (local) asociado a la Ecuación (4.15) se calcula como la variación de la energía con el número de partículas:

$$\mu_{\perp}(n_1) = \frac{\partial E[\varphi]}{\partial N}. \quad (4.16)$$

Un valor aproximado para los puntos críticos del funcional (4.15), y en consecuencia para (4.16), puede encontrarse utilizando una función de prueba variacional como estimación de la función de onda  $\varphi$ . Cuando el término de interacción se anula, la solución compatible con la presencia de un vórtice de

carga  $q$  que hace mínima la energía transversa (4.15), viene dada por

$$\varphi_q(r_\perp, \theta; g = 0) = \frac{\exp(iq\theta)}{a_\perp \sqrt{\pi|q|!}} \left( \frac{r_\perp}{a_\perp} \right)^{|q|} \exp\left(-\frac{r_\perp^2}{2(a_\perp)^2}\right). \quad (4.17)$$

Por tanto, es razonable utilizar una función de onda variacional de igual forma que la anterior pero de anchura variable  $\Gamma(n_1)a_\perp$ , es decir,

$$\varphi_q(r_\perp, \theta; n_1) = \frac{\exp(iq\theta)}{\Gamma a_\perp \sqrt{\pi|q|!}} \left( \frac{r_\perp}{\Gamma a_\perp} \right)^{|q|} \exp\left(-\frac{r_\perp^2}{2(\Gamma a_\perp)^2}\right). \quad (4.18)$$

Cuando se sustituye esta función de prueba en el funcional de la energía (4.15) y se minimiza, se obtiene una anchura dada por

$$\Gamma^E(n_1) = \left(1 + \frac{2an_1}{(|q| + 1)\beta_q}\right)^{1/4}, \quad (4.19)$$

que tras sustituir de nuevo en (4.15) y derivar según (4.16), proporciona la siguiente estimación del valor de  $\mu_\perp$ :

$$\mu_\perp^E(n_1) = \hbar\omega_\perp(|q| + 1) \frac{1 + \frac{3an_1}{(|q|+1)\beta_q}}{\sqrt{1 + \frac{2an_1}{(|q|+1)\beta_q}}}. \quad (4.20)$$

Al utilizar esta expresión en la Ecuación (4.4), se llega a la ecuación de Schrödinger no polinómica (NPSE) de Salashnich y colaboradores [42]:

$$i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} + V_z(z)\phi + \hbar\omega_\perp(|q| + 1) \frac{1 + \frac{3aN|\phi|^2}{(|q|+1)\beta_q}}{\sqrt{1 + \frac{2aN|\phi|^2}{(|q|+1)\beta_q}}} \phi. \quad (4.21)$$

El resultado anterior se ha obtenido siguiendo un método variacional estándar basado en el funcional de la energía. Otra alternativa para encontrar una estimación del potencial químico local  $\mu_\perp$  de la Ecuación (4.5), y en consecuencia nuevas ecuaciones efectivas, consiste en utilizar directamente el funcional de esta misma magnitud:

$$\mu_\perp[\varphi] \equiv \int d^2\mathbf{r}_\perp \varphi^* \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_\perp^2 + V_\perp(\mathbf{r}_\perp) + gn_1 |\varphi|^2 \right) \varphi. \quad (4.22)$$

Esta opción es válida en el caso de condensados con interacciones interatómicas repulsivas, ya que en ellos el potencial químico local está acotado inferiormente. Aunque cuando se considera el espacio completo de funciones de onda admisibles el funcional de la energía siempre proporciona el valor correcto tanto para



$\varphi$  como para  $\mu_{\perp}$ , en el caso habitual de restricción a un subespacio de funciones variacionales de prueba el funcional anterior, en general, sólo puede producir una estimación del resultado exacto. En tales circunstancias es posible que la minimización directa del funcional del potencial químico conduzca a mejores resultados. De hecho, esto es lo que ocurre cuando se utiliza la anterior función de onda variacional (4.18) para minimizar directamente el funcional (4.22). La anchura radial del condensado resulta ser ahora

$$\Gamma = \left( 1 + \frac{4an_1}{(|q| + 1)\beta_q} \right)^{1/4}, \quad (4.23)$$

que al ser sustituida en la función de onda (4.18) conduce, tras integrar en (4.22), al potencial químico local

$$\mu_{\perp} = \hbar\omega_{\perp}(|q| + 1) \sqrt{1 + \frac{4an_1}{(|q| + 1)\beta_q}}. \quad (4.24)$$

Esta nueva aproximación para  $\mu_{\perp}$  [72], introducida en la ecuación de movimiento axial (4.4), proporciona la nueva ecuación efectiva

$$i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} + V_z(z)\phi + \hbar\omega_{\perp}(|q| + 1) \sqrt{1 + \frac{4aN|\phi|^2}{(|q| + 1)\beta_q}} \phi. \quad (4.25)$$

Es importante notar que para  $q = 0$  y  $|q| = 1$  la Ecuación (4.25) coincide exactamente con nuestra anterior propuesta (4.5), lo cual es un resultado remarcable dado que ambas ecuaciones han sido derivadas de manera completamente diferente. Estos casos son además los más relevantes, ya que son los únicos dinámicamente estables.

La capacidad de las distintas ecuaciones efectivas unidimensionales para modelar fielmente la dinámica axial de los condensados alargados depende de la exactitud con que reproducen analíticamente el potencial químico local, es decir, el autovalor de menor energía de la ecuación transversa (4.5). A este respecto, la Figura 4.5 compara las tres estimaciones teóricas presentadas aquí para el potencial químico local con los resultados numéricos exactos obtenidos de la integración de la ecuación de Gross-Pitaevskii transversa (4.5). Como puede apreciarse, la Ecuación (4.6), representada en líneas rojas continuas, es la más precisa en todos los casos. La Ecuación (4.24), en líneas verdes de trazos y coincidente para  $q = 0$  y  $q = 1$  con la Ecuación (4.6), da mejores resultados que la Ecuación (4.20), en líneas azules de trazos y puntos. Aunque las tres ecuaciones poseen el límite perturbativo correcto (como se aprecia

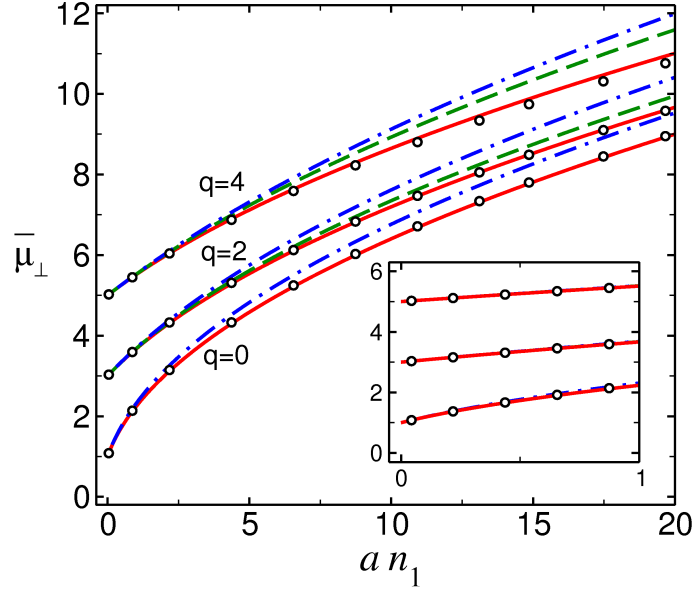


Figura 4.5: Estimaciones teóricas para el potencial químico local  $\bar{\mu}_\perp = \mu_\perp/\hbar\omega_\perp$  en función de  $an_1$ . Las líneas rojas continuas corresponden a la Ecuación (4.6), las líneas verdes de trazos a la Ecuación (4.24), y las azules de trazos y puntos a la Ecuación (4.20). Los círculos huecos son los resultados de la ecuación de Gross-Pitaevskii 3D, sin aproximaciones.

en la gráfica interior) y son prácticamente indistinguibles en este régimen, las diferencias entre ellas son mayores conforme crece el valor de la interacción,  $an_1$ .

Los datos anteriores indican que la Ecuación (4.8) debe describir mejor la dinámica del condensado que las otras propuestas. Para comprobar este hecho, a modo de ejemplo, en la Figura 4.6 se presenta la evolución dinámica de condensados alargados con  $\lambda = 0.1$  en presencia de un vórtice axisimétrico de carga triple, tras una perturbación repentina que cambia sus frecuencias axiales,  $\omega_z \rightarrow 1.1\omega_z$ . Se ha representado el valor cuadrático medio de las coordenadas axiales de los condensados,  $\langle z^2 \rangle = N^{-1} \int dz z^2 n_1(z, t)$ , en función del tiempo, medido en unidades adimensionales  $\omega_z t$ , y para dos valores de la interacción,  $an_1 = 1$  y  $10$ . El primero de ellos,  $an_1 = 1$ , forma parte de la región de tránsito entre el régimen 1D y 3D, mientras que el segundo,  $an_1 = 10$ , es un valor perteneciente al régimen de Thomas-Fermi, claramente 3D. Las líneas rojas continuas de la Figura 4.6 se han obtenido a partir de la Ecuación (4.8), las líneas verdes de trazos a partir de la Ecuación (4.25), y las azules de trazos y puntos a partir de la Ecuación (4.21). Los círculos huecos son los resultados

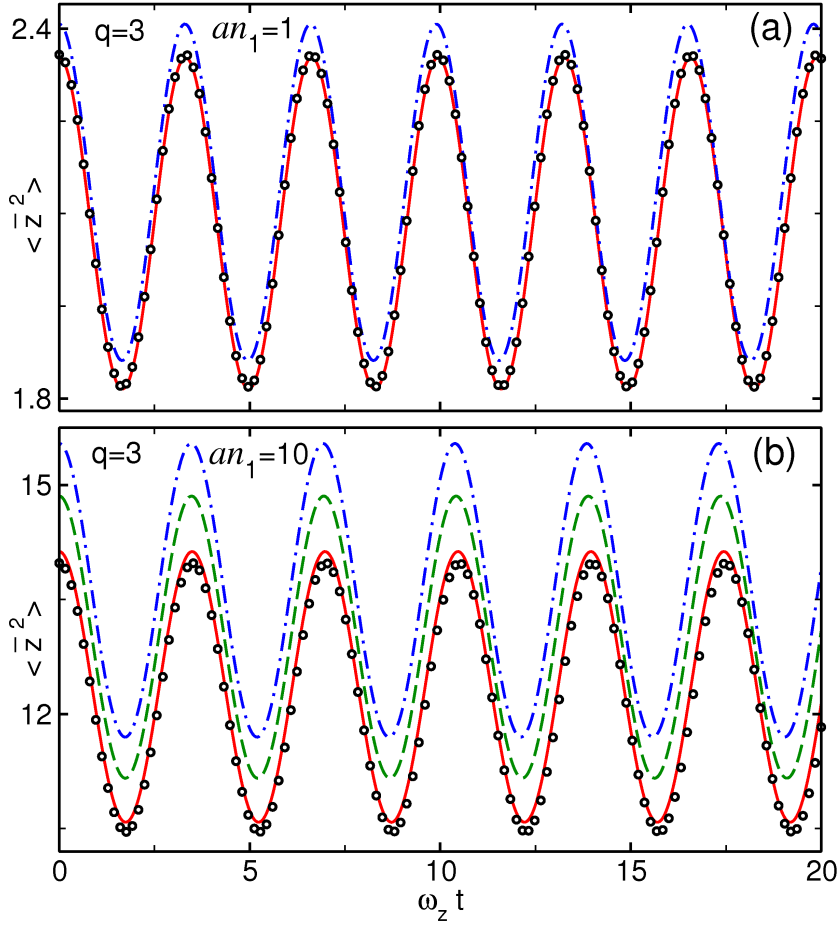


Figura 4.6: Evolución dinámica del valor cuadrático medio de la coordenada axial para dos valores de la interacción,  $an_1 = 1$  y  $an_1 = 10$ , en un condensado con  $\lambda = 0.1$  y  $q = 3$ . Las líneas rojas continuas corresponden a la Ecuación (4.8), las líneas verdes de trazos a la Ecuación (4.25), y las azules de trazos y puntos a la Ecuación (4.21). Los círculos huecos son los resultados de la ecuación de Gross-Pitaevskii 3D, sin aproximaciones.

de la ecuación de Gross-Pitaevskii 3D, sin aproximaciones. Incluso en el caso de interacción débil ( $an_1 = 1$ ), representado en la Figura 4.6(a), los resultados exactos son ligeramente mejor aproximados por la Ecuación (4.8) que por la Ecuación (4.21). Los valores generados mediante la Ecuación (4.25) son intermedios y se han omitido en esta gráfica para mejorar la visibilidad. Cuando el valor de la interacción aumenta, como ocurre en el caso representado en la Figura 4.6(b), donde  $an_1 = 10$ , las diferencias se acentúan a favor de las Ecuaciones (4.8) y (4.25), tal y como apuntaba la comparativa de la Figura 4.5.

Una ventaja adicional de las Ecuaciones (4.8) y (4.25) frente a otras propuestas es su capacidad de producir expresiones analíticas para las propiedades del estado estacionario de los condensados, lo cual es debido principalmente a la simplicidad de sus correspondientes potenciales químicos locales, Ecuaciones (4.6) y (4.24) respectivamente. Cuando la densidad axial varía lentamente puede despreciarse la energía cinética axial y la ecuación estacionaria (4.18) se reduce a la *aproximación de densidad local*:

$$\mu = \mu_{\perp}(n_1) + V_z(z) . \quad (4.26)$$

En el caso de un condensado atrapado por un potencial armónico tridimensional axisimétrico, con una relación de aspecto  $\lambda = \omega_z/\omega_{\perp}$ , la sustitución de la Ecuación (4.6) para el potencial químico local, en la Ecuación (4.26), lleva a

$$4an_1^0(\bar{z}) = \left( \frac{\mu}{\hbar\omega_{\perp}} - (|q| + 1) + \beta_q - \frac{1}{2}(\sqrt{\lambda}\bar{z})^2 \right)^2 - \beta_q^2 , \quad (4.27)$$

donde  $\bar{z} = z/a_z$ . El potencial químico puede calcularse a partir de la semilongitud axial  $\bar{Z} = Z/a_z$ , que se obtiene de la condición  $n_1^0(\bar{Z}) = 0$ :

$$\frac{\mu}{\hbar\omega_{\perp}} = (|q| + 1) + \frac{1}{2}(\sqrt{\lambda}\bar{Z})^2 . \quad (4.28)$$

Sustituyendo esta expresión en la ecuación (4.27) obtenemos

$$n_1^0(z) = \beta_q \frac{(\sqrt{\lambda}\bar{Z})^2}{4a} \left( 1 - \frac{z^2}{Z^2} \right) + \frac{(\sqrt{\lambda}\bar{Z})^4}{16a} \left( 1 - \frac{z^2}{Z^2} \right)^2 , \quad (4.29)$$

con  $n_1^0(z) = 0$  si  $|z| > Z$ . Para poder utilizar estas fórmulas se necesita una expresión para  $\bar{Z}$ , la cual puede obtenerse a partir de la normalización de la densidad axial

$$N = \int_{-Z}^{+Z} dz n_1^0(z) . \quad (4.30)$$

Después de integrar se encuentra que la semilongitud axial satisface el polinomio quintico

$$\frac{1}{15}(\sqrt{\lambda}\bar{Z})^5 + \frac{1}{3}\beta_q(\sqrt{\lambda}\bar{Z})^3 = \chi_1 , \quad (4.31)$$

cuya solución aproximada viene dada por

$$\sqrt{\lambda}\bar{Z} = \left[ \frac{1}{(15\chi_1)^{\frac{4}{5}} + \frac{1}{3}} + \frac{1}{57\chi_1 + 345} + \frac{1}{(3\chi_1/\beta_q)^{\frac{4}{3}}} \right]^{-\frac{1}{4}} , \quad (4.32)$$

donde  $\chi_1 \equiv \lambda Na/a_{\perp}$  y  $\beta_q$  son los parámetros característicos del condensado. Las Ecuaciones (4.28)–(4.32) coinciden con los resultados obtenidos en el

Capítulo anterior, en el marco de nuestra propuesta de extensión de la aproximación de Thomas-Fermi. Sin embargo, hay que tener en cuenta que el método de derivación seguido aquí, basado en la aproximación adiabática y en el modelo de densidad local, es completamente diferente.

Evidentemente, la Ecuación (4.25) permite también derivar expresiones analíticas para las propiedades del estado fundamental. Con  $|q| = 0$  y  $1$  se obtienen la mismas expresiones anteriores, (4.28)–(4.32). Cuando  $|q| \geq 2$ , la única modificación consiste en que el segundo término del lado derecho de la Ecuación (4.29) y el primero del lado izquierdo de la Ecuación (4.31), quedan multiplicados por el factor  $\beta_q/(|q| + 1)$ . Pero como se deduce de la Figura 4.5, estas ecuaciones derivadas con el método variacional resultan ser algo menos precisas que las anteriores. A cambio, el método variacional permite encontrar una expresión analítica para la función de onda del condensado. Para ello, la sustitución de las Ecuaciones (4.2) y (4.18) en la Ecuación (4.1), conduce a la siguiente función de onda variacional para el estado de equilibrio

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{\exp(iq\theta)}{\Gamma a_{\perp} \sqrt{\pi|q|!}} \left( \frac{r_{\perp}}{\Gamma a_{\perp}} \right)^{|q|} \exp\left(-\frac{r_{\perp}^2}{2\Gamma^2 a_{\perp}^2}\right) \sqrt{\frac{n_1^0(z)}{N}}, \quad (4.33)$$

donde  $\Gamma(n_1^0)$  es la anchura de la gaussiana (dependiente de  $z$ ) dada por la Ecuación (4.23) y  $n_1^0(z)$  es el perfil de densidad axial (4.29) (convenientemente modificado cuando  $|q| \geq 2$ ).

La Figura 4.7 muestra una comparación entre la función de onda (4.33) y la función de onda exacta, solución de la ecuación de Gross-Pitaevskii tridimensional, para un condensado con  $\lambda = 0.1$  que contiene un vórtice axisimétrico de carga triple. Se ha representado el perfil de densidad axial obtenido con la Ecuación (4.29), en línea roja continua, junto al correspondiente a la solución exacta de la ecuación efectiva unidimensional, en línea azul de trazos, y a los resultados de la ecuación de Gross-Pitaevskii tridimensional, en símbolos huecos. Como se deduce de la figura, la función de onda (4.33) presenta un buen ajuste general salvo en la caída abrupta de la densidad axial que se produce en los extremos del condensado.

#### 4.4 Forma hidrodinámica de la ecuación efectiva unidimensional. Aplicación a oscilaciones colectivas.

El interés de las fórmulas anteriores reside en su validez para el rango completo del valor de la interacción. Además, debido a su dependencia de un único

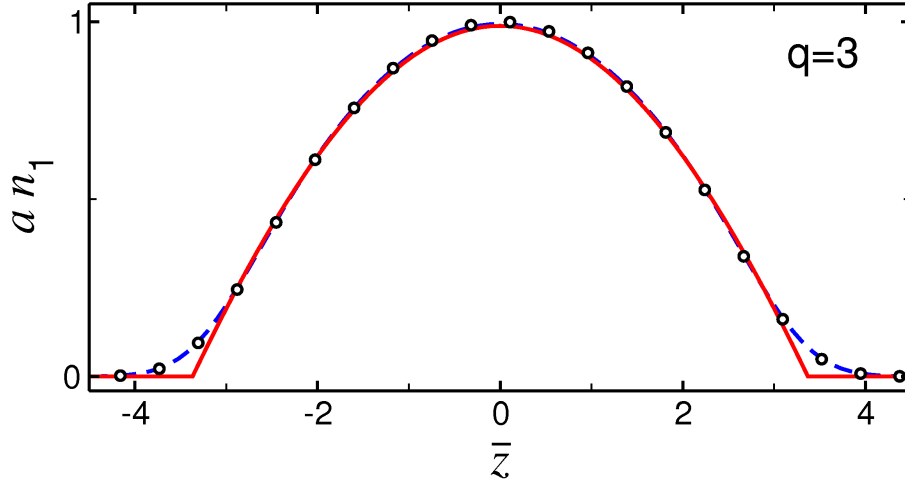


Figura 4.7: Comparación entre la función de onda analítica propuesta en la Ecuación (4.33) y la función de onda exacta para un condensado con  $\lambda = 0.1$  que contiene un vórtice axisimétrico de carga triple. Se muestran los perfiles de densidad axial obtenidos con la Ecuación (4.33), en línea roja continua, y con la solución exacta de la ecuación efectiva unidimensional, en línea azul de trazos, junto a los resultados de la ecuación de Gross-Pitaevskii tridimensional, en símbolos huecos. Las distancias están medidas en unidades de oscilador armónico axial  $\bar{z} = z/a_z$ .

parámetro medible, la semilongitud axial  $\bar{Z}$ , pueden ser usadas en la caracterización experimental de condensados elongados. En particular, las expresiones propuestas permiten derivar una fórmula analítica para las frecuencias de oscilación del denominado modo de respiración axial. Para este fin conviene considerar la forma hidrodinámica de la ecuación efectiva unidimensional (4.8), que proporciona la evolución en el tiempo de la densidad axial,  $n_1$ , y del campo de velocidades,  $v = (\hbar/m)\partial S/\partial z$ , donde  $S$  es la fase de  $\phi(z, t)$ :

$$\frac{\partial n_1}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial z}(n_1 v) = 0, \quad (4.34)$$

$$m \frac{\partial v}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial z} \left( \mu_{\perp}(n_1) + V_z + \frac{1}{2} m v^2 - \frac{\hbar^2}{2m\sqrt{n_1}} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \sqrt{n_1} \right) = 0. \quad (4.35)$$

Si consideramos pequeñas oscilaciones en torno a la posición de equilibrio,  $n_1 = n_1^0 + \delta n_1$  y  $v = \delta v$ , y despreciamos el último término de la Ecuación (4.35) correspondiente a la presión cuántica, en la aproximación lineal las ecuaciones anteriores llevan a

$$m \frac{\partial}{\partial t} \delta v + \frac{\partial}{\partial z} \left( \left. \frac{\partial \mu_{\perp}}{\partial n_1} \right|_0 \delta n_1 \right) = 0. \quad (4.36)$$

Para limitar la búsqueda de soluciones a aquellas con la forma de una dilatación axial [38, 39], introducimos el parámetro de escala  $b(t)$  que cumple las condiciones  $z = b(t)z_0$  y  $v = \dot{b}(t)z_0 = z\dot{b}(t)/b(t)$ . En el caso de oscilaciones lineales  $b(t) = 1 + \delta b(t)$  y  $\delta v = \delta\dot{b}(t)z$ , con  $\delta b(t) = \delta b_0 e^{-i\omega t}$ . Sustituyendo estos valores en las ecuaciones anteriores, se obtiene

$$\frac{\omega^2}{\omega_z^2} = \Omega^2(z) = \left( 3 - \frac{2an_1^0(z)}{\beta_q^2 + 4an_1^0(z)} \right). \quad (4.37)$$

Finalmente, teniendo en cuenta que  $\Omega$  es una función que varía lentamente con la coordenada axial, podemos sustituirla en buena aproximación por su valor medio para obtener la siguiente fórmula analítica:

$$\frac{\omega^2}{\omega_z^2} \approx \frac{5}{2} + \frac{1}{2(\zeta^2 + 2)} + \frac{\tanh^{-1}\left(\zeta/\sqrt{\zeta^2 + 2}\right)}{\zeta(\zeta^2 + 2)^{3/2}}, \quad (4.38)$$

donde  $\zeta \equiv \sqrt{\lambda/\beta_q} \bar{Z}$ . Esta expresión para la frecuencia del modo de respiración axial de un condensado elongado tiene un error del orden del 1 % respecto a los resultados numéricos exactos, y puede calcularse experimentalmente a partir de la sola medida de la semilongitud axial del condensado.

Aún puede derivarse otra estimación analítica independiente para  $\omega^2$  usando la siguiente fórmula obtenida a partir de una aproximación basada en “reglas de suma” [51]:

$$\omega^2 = -2 \frac{\langle z^2 \rangle}{d\langle z^2 \rangle/d\omega_z^2}. \quad (4.39)$$

Esta fórmula proporciona un límite superior para la frecuencia de respiración axial. Sustituyendo la Ecuación (4.29) para la densidad axial en el valor cuadrático medio de la coordenada axial  $\langle z^2 \rangle = N^{-1} \int dz z^2 n_1^0(z)$ , y tras efectuar la derivada en el denominador de (4.39), se obtiene

$$\frac{\omega^2}{\omega_z^2} = \frac{4\beta_q^{5/2}\zeta^3 - 15\chi_1(\zeta^2 + 5)}{3\beta_q^{5/2}\zeta^3 - 6\chi_1(\zeta^2 + 5)}, \quad (4.40)$$

donde de nuevo  $\zeta \equiv \sqrt{\lambda/\beta_q} \bar{Z}$ . Esta ecuación, como la (4.38), permite calcular experimentalmente la frecuencia del modo de respiración axial únicamente a partir de la medida de la semilongitud axial del condensado. Hay que señalar por último que las dos fórmulas (4.38) y (4.40) han sido obtenidas suponiendo que la presión cuántica podía ser despreciada, lo cual es cierto en general para valores suficientemente pequeños de la relación de aspecto ( $\lambda \ll 1$ ).

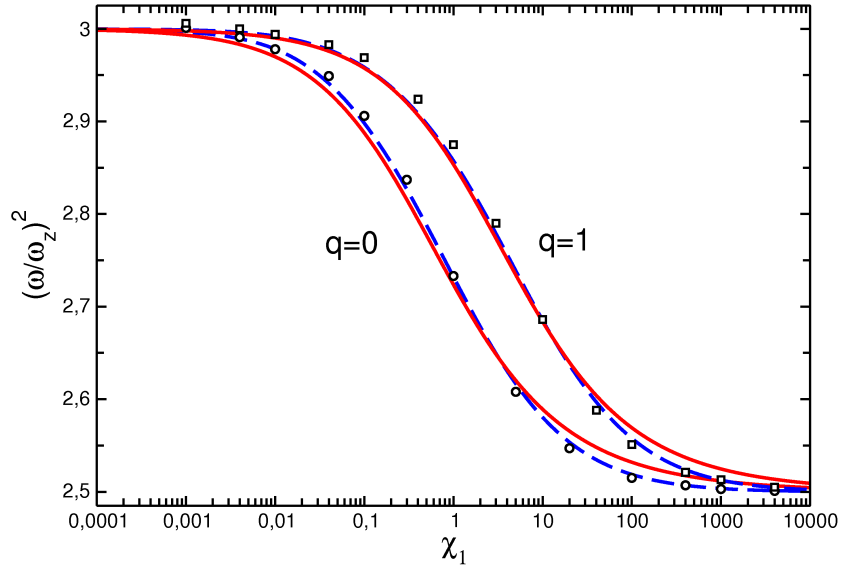


Figura 4.8: Cuadrado de la frecuencia del modo de respiración axial,  $\omega^2/\omega_z^2$  (en unidades de la frecuencia del potencial armónico), en condensados muy elongados con  $q = 1$  y  $q = 0$  en función del valor de la interacción. Las líneas continuas corresponden a la Ecuación (4.38), las líneas de trazos a la Ecuación (4.40), y los símbolos huecos son los resultados de la ecuación de Gross-Pitaevskii tridimensional.

En la Figura 4.8 se han representado las predicciones teóricas de las Ecuaciones (4.38) y (4.40), para condensados elongados con  $q = 1$  y  $q = 0$ , frente a los valores numéricos exactos obtenidos a partir de la ecuación de Gross-Pitaevskii tridimensional (en símbolos huecos). Aunque el ajuste en ambos casos es mejor que el 0.8%, la Ecuación (4.40) proporciona una aproximación ligeramente mejor para ambos valores de  $q$ . Como refleja la figura, en el tránsito entre el régimen de Thomas-Fermi y el régimen cuasi-1D de campo medio, correspondiente a  $\chi_1 = 1$ , la frecuencia de respiración presenta una marcada dependencia con la carga del vórtice  $q$ . Este hecho podría usarse para la detección indirecta de vórtices de carga unidad en el régimen de tránsito. Además, la gran exactitud de las fórmulas anteriores podría conferirles una utilidad añadida en el terreno experimental, ya que podrían utilizarse por ejemplo en la calibración de las frecuencias de atrapamiento del condensado.

## 4.5 Resumen

En este capítulo hemos propuesto ecuaciones de movimiento efectivas de dimensionalidad reducida que describen la evolución dinámica de condensados



tridimensionales alargados o achatados dentro del régimen de campo medio, incluso en presencia de un vórtice axisimétrico cuantizado de carga múltiple. Estas ecuaciones, que han sido derivadas a partir de la aproximación adiabática, incorporan correctamente la contribución de los grados de libertad irrelevantes a través de un término no lineal no polinómico procedente del potencial químico local. La sencillez y gran exactitud de las ecuaciones efectivas encontradas son consecuencia de la bondad de las fórmulas analíticas para el potencial químico local derivadas en el capítulo anterior mediante una extensión conveniente de la aproximación de Thomas-Fermi.

En este capítulo también hemos demostrado que una aproximación variacional basada en el funcional del potencial químico puede proporcionar mejores resultados que la aproximación variacional usual basada en el funcional de la energía. Esto es posible cuando la búsqueda de los puntos críticos no se realiza en el espacio completo de funciones admisibles, sino que, como suele ocurrir necesariamente en la práctica, se restringe a un subespacio de funciones variacionales de prueba. Haciendo uso de este resultado hemos podido rederivar de forma más sistemática la ecuación efectiva unidimensional obtenida anteriormente. De hecho, la minimización directa del funcional del potencial químico conduce a *nuevas* ecuaciones efectivas unidimensionales, que en el caso de condensados con un vórtice de carga  $q = 0$  ó  $|q| = 1$ , que son los únicos dinámicamente estables, coinciden con nuestras propuestas anteriores. Éste es un resultado remarcable, dado que los respectivos métodos de obtención han sido completamente diferentes.

Un aspecto complementario importante es el hecho de que estas ecuaciones de movimiento, debido a su simplicidad, permiten derivar expresiones analíticas de gran precisión para propiedades del estado fundamental tales como el potencial químico, el tamaño del condensado, el perfil de densidad, la velocidad local del sonido o las frecuencias de respiración axial. Las expresiones halladas aquí a partir de la hipótesis adiabática y la aproximación de densidad local, son iguales a las obtenidas en el capítulo anterior con nuestra extensión de la aproximación de Thomas-Fermi.

Los resultados presentados en este capítulo se desarrollan con más detalle en las Referencias [A.4, A.5], que se incluyen en el Apéndice A.

## Capítulo 5

# Solitones de gap tridimensionales sobre redes ópticas unidimensionales

Al igual que los vórtices, los solitones son estructuras topológicas asociadas a una discontinuidad en la fase de la función de onda de los condensados. Estas estructuras se manifiestan en la nube de densidad de materia como mínimos o máximos muy localizados (según se trate de solitones oscuros o brillantes, respectivamente). Los solitones brillantes corresponden al estado fundamental del sistema cuando las interacciones interatómicas son atractivas, mientras que los solitones oscuros aparecen como excitaciones fundamentales en condensados con interacciones repulsivas. Un caso de especial importancia son los solitones que residen en redes ópticas generadas por la interferencia de rayos láser que iluminan el condensado. Las redes ópticas posibilitan la existencia de solitones brillantes incluso en presencia de interacciones repulsivas entre partículas, como consecuencia del equilibrio entre la energía de interacción y la energía cinética. El potencial químico de estos solitones toma valores en las bandas prohibidas (*gaps*) del diagrama de energía del sistema lineal subyacente y por este motivo son denominados solitones de *gap* [9, 73, 74]. El análisis teórico de estas estructuras ha demostrado que pueden aparecer tanto en geometrías unidimensionales [75–80] como multidimensionales [81–84]. En el terreno experimental, se han generado solitones de gap cuasiestables en condensados alargados de  $^{87}\text{Rb}$  [18], y estados extendidos (“trenes de solitones”) que conforman segmentos de ondas de Bloch no lineales [85, 86].

La mayor parte de los trabajos teóricos sobre solitones de gap se ha desarrollado en el régimen cuasi-unidimensional. En este límite es necesario un confinamiento transversal lo suficientemente fuerte como para provocar que la función de onda del condensado correspondiente a los grados de libertad trans-

versos se reduzca al estado fundamental de dicho confinamiento. Sometidos a tales condiciones, los condensados no pueden evolucionar hacia otros estados a través de la excitación de modos radiales. Por este motivo la ecuación de Gross-Pitaevskii unidimensional

$$i\hbar \frac{\partial \phi(z, t)}{\partial t} = \left( -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V_z(z) + g_{1D} N |\phi(z, t)|^2 \right) \phi(z, t), \quad (5.1)$$

donde  $g_{1D} = 2a\hbar\omega_{\perp}$  es la intensidad de la interacción promediada sobre la coordenada radial [87], proporciona una descripción adecuada de este tipo de sistemas y constituye la principal herramienta utilizada [88–92]. En este contexto, únicamente es posible analizar los estados del condensado (dados por la función de onda axial  $\phi(z, t)$ ) en la dirección en la que se extiende la red óptica. Recientemente, Zhang y colaboradores [93] han demostrado que es posible sistematizar la clasificación de los solitones de gap unidimensionales, agrupándolos en familias de solitones cuya estructura se corresponde con la de las ondas de Bloch lineales de cada banda permitida. Sin embargo, los solitones de gap cuasi-unidimensionales no son fáciles de generar con los parámetros experimentales habituales. En el trabajo de Oberthaler y colaboradores [18] se consiguieron solitones sobre redes ópticas muy someras ( $s \simeq 0.7$ ) y dentro de un régimen de confinamiento radial muy débil ( $E_R/\hbar\omega_{\perp} \simeq 44$ ). En estas circunstancias, el espectro del sistema lineal subyacente no presenta gaps prohibidos en su diagrama de energías frente al cuasimomento. Para ver con claridad que esto es así, puede considerarse la aproximación analítica dada para la banda de menor energía en el caso de redes poco profundas [9]:

$$E(q)/E_R = (q - 1)^2 - \sqrt{4(q - 1)^2 + s^2/16}, \quad (5.2)$$

donde  $q$  es el cuasimomento en unidades de  $\pi/d$ , y  $d$  es el período de la red. Esta banda tiene una anchura  $E(1) - E(0) \simeq 0.83 E_R$ , mayor que el gap entre bandas tridimensionales, dado por  $\hbar\omega_{\perp} \simeq 0.025 E_R$ , lo cual ocasiona la superposición de las bandas energéticas y la ausencia de gap.

En este capítulo presentamos los resultados derivados de un estudio pormenorizado de los solitones de gap en condensados con interacciones repulsivas, soportados por redes ópticas unidimensionales y atrapados por potenciales armónicos transversos. Los datos que aportamos demuestran con claridad que, contrariamente a la práctica habitual, la ecuación de Gross-Pitaevskii 1D (5.1) únicamente puede utilizarse con exactitud en el caso de redes poco profundas con confinamiento radial fuerte, una situación que tiene poca relevancia en

condiciones experimentales realistas. En cambio, las ecuaciones efectivas unidimensionales que propusimos en el capítulo anterior proporcionan un modelo preciso para la caracterización de los solitones de gap en la mayoría de los casos de interés práctico. Por otra parte, motivados por los resultados experimentales mencionados anteriormente [18], hemos investigado los solitones de gap en un régimen de confinamiento transversal débil, donde la energía característica (“de retroceso”) de la red  $E_R$  es del mismo orden de magnitud que el cuanto de energía radial  $\hbar\omega_\perp$ . En este régimen, que no ha sido estudiado teóricamente con anterioridad, mostraremos que los solitones de gap poseen una rica estructura radial heredada del problema lineal subyacente. A cada banda espectral del problema lineal tridimensional le corresponde una familia de solitones de gap fundamentales que comparte propiedades topológicas con las ondas de Bloch de su banda lineal asociada. Al contrario de lo que cabía esperar, el régimen de confinamiento radial débil contiene solitones de gap con vidas superiores a un segundo, lo cual concede a nuestro estudio relevancia experimental. Los resultados presentados en este capítulo corresponden a los trabajos publicados en las Referencias [A.6] y [A.7] dadas en el apéndice final.

## 5.1 Validez de las ecuaciones efectivas para el cálculo de solitones de gap

Los experimentos que han generado solitones de *gap* sobre redes ópticas unidimensionales se han realizado en un régimen donde la contribución de los grados de libertad en la dirección perpendicular a la red es relevante. Nuestras ecuaciones efectivas unidimensionales, al contrario que la ecuación estrictamente 1D (5.1), incorporan esta información de una forma sencilla, ya que sin tener que resolver la complicada ecuación de Gross-Pitaevskii tridimensional pueden dar cuenta de la influencia de la función de onda transversal a través del potencial químico local,  $\mu_\perp(n_1)$ , que depende de la densidad axial  $n_1(z) = N|\phi|^2$ . En el caso de sistemas sin vorticidad en una trampa armónica radial de frecuencia  $\omega_\perp$ , y en presencia de una red óptica unidimensional de forma sinusoidal, la ecuación efectiva (4.8) que propusimos en el capítulo anterior resulta ser

$$i\hbar\frac{\partial\phi(z,t)}{\partial t} = \left( -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial z^2} + V_0\sin^2(\pi z/d) + \mu_\perp(n_1) \right) \phi(z,t). \quad (5.3)$$

donde  $V_0$  es la profundidad de la red y  $d$  su período. En este capítulo haremos la suposición habitual de que el confinamiento armónico axial es tan débil que se puede despreciar la modulación que induce en la densidad del condensado.

La ecuación efectiva anterior fue derivada inicialmente para condensados elongados en ausencia de redes ópticas, y en estas condiciones puede asumirse que la densidad axial del sistema experimenta una lenta variación a lo largo del eje. Sin embargo, dado que la red óptica introduce nuevas escalas espaciales y temporales mucho más restrictivas, no resulta inmediato que la condición anterior pueda satisfacerse. En la derivación de la Ecuación (5.3) se partió de un parámetro de orden factorizado

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \varphi(\mathbf{r}_\perp; n_1(z, t))\phi(z, t), \quad (5.4)$$

donde la función de onda transversa  $\varphi$  está normalizada a la unidad en cada plano  $z$ . Cuando se sustituye (5.4) en la ecuación de Gross-Pitaevskii tridimensional dependiente del tiempo (2.2) se llega a la siguiente igualdad:

$$\left( i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} - V_z \phi \right) \varphi = \left( -\frac{\hbar^2}{2M} \nabla_\perp^2 \varphi - \frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial z^2} + V_\perp \varphi + gn_1 |\varphi|^2 \varphi \right) \phi - \frac{\hbar^2}{M} \frac{\partial \varphi}{\partial z} \frac{\partial \phi}{\partial z}, \quad (5.5)$$

que después de premultiplicar por  $\varphi^*$  e integrar sobre la coordenada radial conduce a

$$i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} + V_z \phi + \mu_\perp \phi - \frac{\hbar^2}{M} \left( \int d^2 \mathbf{r}_\perp \varphi^* \frac{\partial \varphi}{\partial z} \right) \frac{\partial \phi}{\partial z}, \quad (5.6)$$

$$\mu_\perp(n_1) \equiv \int d^2 \mathbf{r}_\perp \varphi^* \left( -\frac{\hbar^2}{2M} \nabla_\perp^2 - \frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V_\perp + gn_1 |\varphi|^2 \right) \varphi. \quad (5.7)$$

El potencial químico local  $\mu_\perp$  determinado por la Ecuación (5.7) puede ser estimado variacionalmente mediante una función de prueba transversa de forma independiente de la función de onda axial  $\phi$ , debido a que la densidad axial  $n_1$  interviene en dicha ecuación únicamente como un parámetro externo. De acuerdo con esto, en el capítulo anterior obtuvimos una expresión de gran precisión para  $\mu_\perp$  usando una función de prueba de tipo gaussiano en la Ecuación (5.7) y suponiendo que, como ocurre habitualmente, la energía cinética axial asociada a la función de onda transversa podía ser despreciada. De esta forma, cuando se cumple la condición

$$\int d^2 \mathbf{r}_\perp \varphi^* \left( -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \varphi \ll \mu_\perp, \quad (5.8)$$

podemos aproximar el potencial químico local (5.7) por

$$\mu_{\perp} \sim \int d^2\mathbf{r}_{\perp} \varphi^* \left( -\frac{\hbar^2}{2M} \nabla_{\perp}^2 + V_{\perp}(\mathbf{r}_{\perp}) + gn_1 |\varphi|^2 \right) \varphi \sim \hbar\omega_{\perp} \sqrt{1 + 4an_1}. \quad (5.9)$$

Dado que la función de prueba que conduce a la expresión analítica (5.9) es real, el último término de la Ecuación (5.6) se anula automáticamente. Si además tenemos en cuenta que la longitud característica en la dirección axial está determinada por el espaciado  $d$  de la red óptica, la energía cinética axial asociada a la función de onda transversa será del orden de la energía de retroceso de la red  $E_R = \hbar^2/(2Md^2)$ , y en consecuencia (5.8) se convierte en

$$E_R \ll \hbar\omega_{\perp} \sqrt{1 + 4an_1}. \quad (5.10)$$

Ésta es la condición que buscábamos: la Ecuación (5.10) es condición suficiente para que la Ecuación (5.6) se reduzca a la forma (5.3) y pueda ser aplicada al cálculo de los solitones de gap sobre redes ópticas unidimensionales. Como puede inferirse del análisis anterior, y podremos comprobar en casos concretos más adelante, la Ecuación efectiva (5.3) posee un rango de aplicación en este campo mucho más amplio que la ecuación de Gross-Pitaevskii 1D (5.1). Esta última ecuación puede aplicarse sólo cuando  $an_1 \ll 1$ , con independencia del valor de la relación  $E_R/\hbar\omega_{\perp}$ . Sin embargo, nuestra ecuación efectiva no presenta esta restricción, es decir, es válida para valores cualesquiera de  $an_1$  y  $E_R/\hbar\omega_{\perp}$ . Cuando este último parámetro toma valores grandes, ( $E_R/\hbar\omega_{\perp} \simeq 1$ ), nuestra ecuación efectiva puede ser aplicable siempre que  $an_1$  sea suficientemente grande como para que se cumpla (5.10).

Finalmente, al sustituir la expresión (5.9) en (5.3) se obtiene la ecuación de movimiento que utilizaremos para el cálculo de solitones de gap en presencia de redes ópticas unidimensionales:

$$i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} + V_0 \sin^2(\pi z/d) \phi + \hbar\omega_{\perp} \sqrt{1 + 4an_1} \phi. \quad (5.11)$$

De acuerdo con la hipótesis adiabática de partida, la ecuación efectiva anterior podrá usarse para describir la evolución dinámica de solitones de gap sólo cuando la escala temporal del movimiento axial sea mucho mayor que la escala de tiempo del movimiento radial. Ésta es una condición necesaria que puede expresarse en términos de las frecuencias características de las dos direcciones espaciales. Una estimación de la frecuencia de oscilación axial (de la red) viene dada por  $\omega_{lat} = \frac{\pi}{d} \sqrt{2V_0/m}$  [9], mientras que la frecuencia radial

característica es la asociada al potencial armónico transversal  $\omega_{\perp}$ . Por tanto, la Ecuación (5.11) sólo podrá reproducir la dinámica de un condensado inmerso en una red óptica cuando  $\omega_{lat} \ll \omega_{\perp}$ . Sin embargo, en el caso concreto de la detección y caracterización de los estados estacionarios, que es el más relevante en la búsqueda y generación de solitones de gap, esta condición sobre las escalas temporales no es restrictiva debido a que los grados de libertad transversos disponen siempre de tiempo suficiente para adaptarse a la configuración axial, de modo que la aproximación adiabática se cumple automáticamente.

## 5.2 Solitones de gap en geometrías alargadas

Un análisis dimensional de los diversos términos que intervienen en la ecuación efectiva (5.11), presentada en el apartado anterior, demuestra que el problema dinámico que esta ecuación modela puede caracterizarse completamente mediante tres parámetros adimensionales:

$$an_1, \frac{E_R}{\hbar\omega_{\perp}}, \frac{V_0}{E_R}. \quad (5.12)$$

El primero de ellos,  $an_1$ , es la densidad axial medida en unidades de la longitud de dispersión y caracteriza a la energía de interacción. El segundo parámetro,  $E_R/\hbar\omega_{\perp}$  representa la relación entre las energías en la direcciones axial y radial del problema lineal subyacente. Los valores grandes corresponden al régimen de confinamiento radial débil, en el que pueden intervenir multitud de modos radiales, lo que hace que el sistema esté lejos del límite estrictamente unidimensional. Por el contrario, valores pequeños son propios del régimen de confinamiento radial fuerte. El último de los parámetros,  $V_0/E_R$ , indica la profundidad de la red. Valores crecientes de este parámetro aumentan la localización de la densidad en los pozos del potencial periódico.

Es interesante comprobar los valores que toman estos parámetros en los experimentos con redes ópticas. Los valores típicos para el período  $d$  están en el rango de 0.4 a 1.6  $\mu\text{m}$  [9], lo que en condensados de  $^{87}\text{Rb}$  supone una energía de retroceso  $E_R/(2\pi\hbar)$  que varía desde 3.6 kHz hasta 220 Hz. En cuanto al potencial de atrapamiento, es habitual que  $\omega_{\perp}/2\pi \lesssim 1$  kHz, y por tanto  $E_R/\hbar\omega_{\perp} \gtrsim 1/4$ . Por su parte, en condensados de  $^{23}\text{Na}$ , los parámetros anteriores implican que  $E_R/\hbar\omega_{\perp} \gtrsim 1$  [94], por lo que en este caso lo normal es que la energía de los solitones de gap sea suficientemente grande como para excitar los modos superiores al fundamental del confinamiento radial y generar

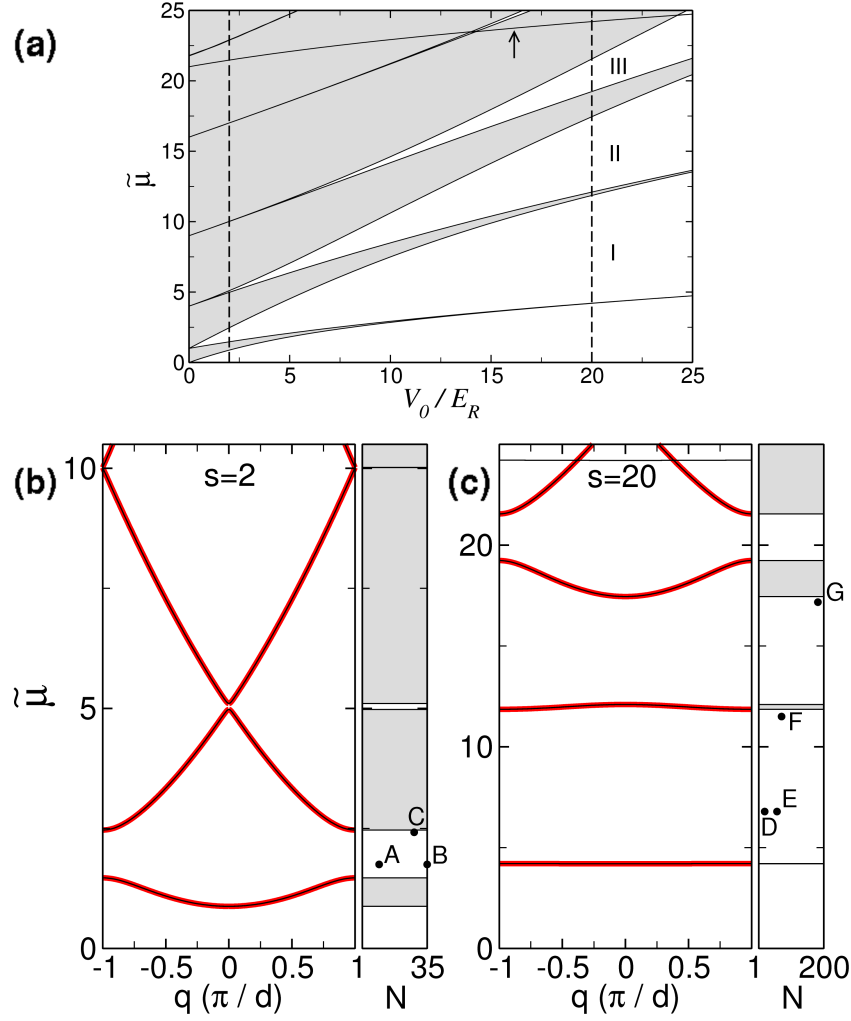


Figura 5.1: (a) Diagrama de bandas de energía para un condensado tridimensional sin interacción con  $E_R/\hbar\omega_\perp = 0.1$  en función de la profundidad  $s \equiv V_0/E_R$  de la red óptica. Los casos particulares para  $s = 2$  (b) y  $s = 20$  (c) representan el potencial químico adimensional  $\tilde{\mu} \equiv (\mu - \hbar\omega_\perp)/E_R$  en función del cuasimomento  $q$ , medido en unidades de  $\pi/d$ . Los paneles a la derecha de los gráficos (b) y (c) indican la posición de los solitones de gap estudiados en este apartado, frente al número de partículas equivalentes de  $^{87}\text{Rb}$  que contienen.

siempre una estructura tridimensional.

Los solitones de gap se pueden caracterizar por el valor que toma el potencial químico en los gaps del espectro de energía del problema lineal subyacente. La Figura 5.1(a) muestra los valores del potencial químico adimensional,  $\tilde{\mu} \equiv (\mu - \hbar\omega_\perp)/E_R$ , de condensados tridimensionales sin interacción con  $E_R/\hbar\omega_\perp = 1/10$ , en función de la profundidad adimensional de la red óptica,



$s \equiv V_0/E_R$ . Las regiones I, II, y III son las primeras bandas prohibidas (gaps) que separan las franjas sombreadas en las que existen soluciones para el problema lineal. La única diferencia de este diagrama de bandas tridimensional (obtenido a partir de la solución numérica de la ecuación de Schrödinger 3D del problema lineal subyacente) con el diagrama correspondiente al espectro unidimensional, es la banda marcada con una flecha. Esta banda adicional es una réplica de la primera banda permitida por la red óptica, trasladada en una energía  $2\hbar\omega_\perp/E_R$  por el primer modo excitado del potencial transversal. Las Figuras 5.1(b) y 5.1(c) corresponden a dos casos particulares de profundidad de red,  $V_0/E_R = 2$  y 20. En ellas se detalla la variación de la banda con el cuasimomento en la primera zona de Brillouin. A modo de referencia, se ha representado con líneas gruesas de color rojo el diagrama de bandas equivalente obtenido con la ecuación unidimensional de Schrödinger. Los paneles situados a la derecha de ambos gráficos sirven para ubicar a los solitones de gap concretos (puntos etiquetados con letras mayúsculas) que se estudian a continuación, indicando en el eje horizontal el número de partículas equivalentes de  $^{87}\text{Rb}$ . Como puede observarse en estos paneles, conforme el número de partículas de los solitones fundamentales es mayor, solitones A, C en la Figura 5.1(b) y D, F, G en la Figura 5.1(c), su potencial químico aumenta, desplazándose en el diagrama hacia la parte superior de las bandas prohibidas. Los puntos B y E están asociados a solitones múltiples, contruidos como combinaciones lineales de solitones fundamentales, cuyo análisis puede encontrarse en la Referencia [A.7].

Con la disminución de la intensidad del confinamiento radial, las réplicas tridimensionales de las bandas se disponen cada vez con menor separación y modifican en mayor medida el diagrama del problema lineal unidimensional. Esto puede verse en la Figura 5.2, donde se han representado los diagramas de bandas de energía, para los mismos casos de profundidad de red  $V_0/E_R = 2$  y 20, pero en confinamiento radial intermedio  $E_R/\hbar\omega_\perp = 0.25$  (Figuras 5.2(a)–(b)) y débil  $E_R/\hbar\omega_\perp = 1$  (Figuras 5.2(c)–(d)). De nuevo, los puntos identificados con letras en los paneles laterales señalan solitones fundamentales (H, J, K, L, M, P, Q, R) o múltiples (I) cuyo estudio detallado se incluye en la Referencia [A.7].

Para encontrar soluciones correspondientes a ondas de materia tridimensionales sobre la red unidimensional, hemos resuelto numéricamente nuestra ecuación efectiva unidimensional (5.11) y la ecuación de Gross-Pitaevskii 3D

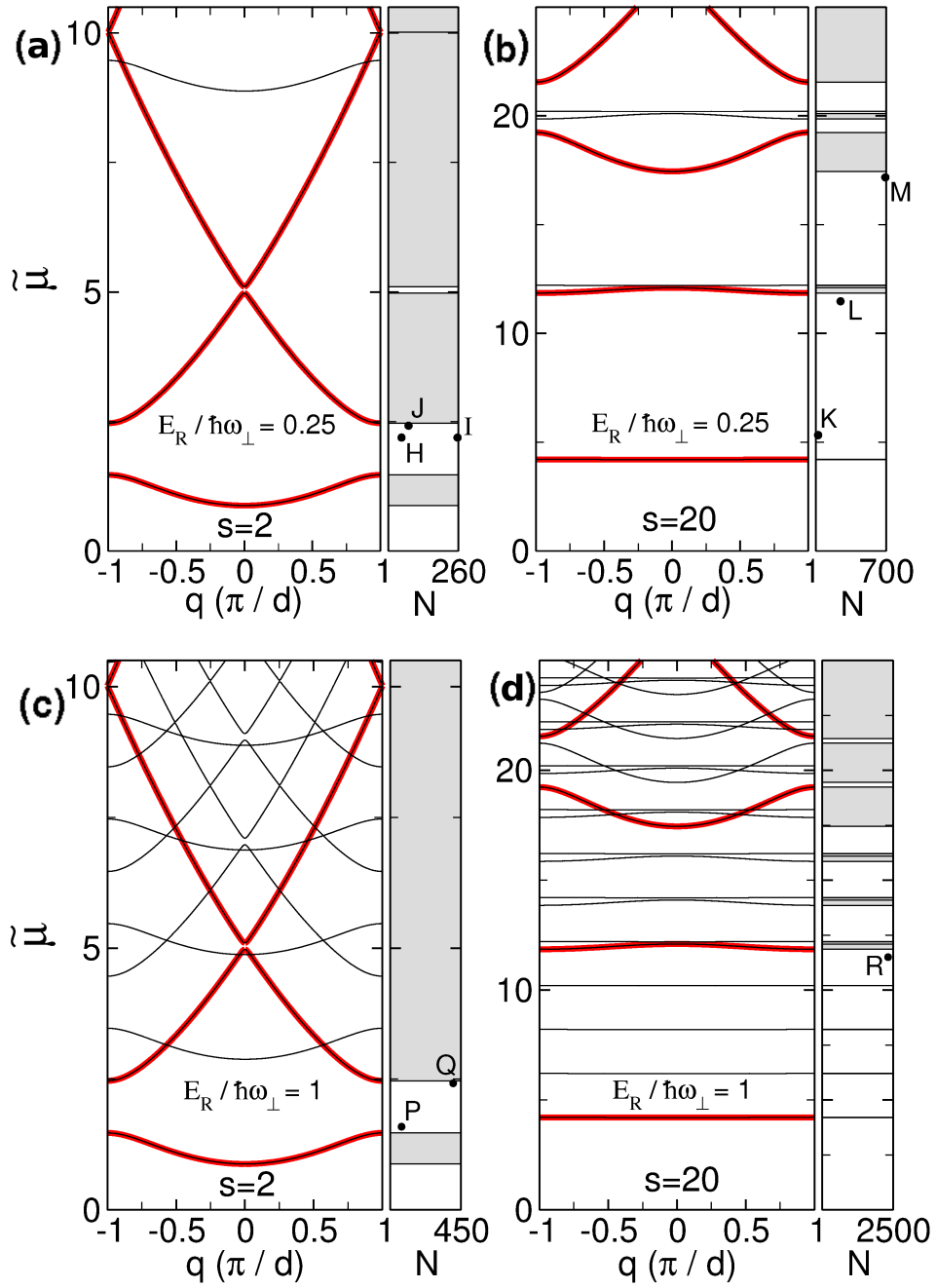


Figura 5.2: Diagramas de bandas de energía, que representan el potencial químico adimensional  $\tilde{\mu}$  en función del cuasimomento (medido en unidades de  $\pi/d$ ), para condensados tridimensionales sin interacción con  $E_R/\hbar\omega_{\perp} = 0.25$  en presencia de una red óptica de profundidad  $s \equiv V_0/E_R = 2$  (a) y  $s = 20$  (b). Los gráficos (c) y (d) presentan idéntica información para un confinamiento radial de valor  $E_R/\hbar\omega_{\perp} = 1$ . Los paneles a la derecha de cada gráfico muestran la posición de solitones de gap en función del número de partículas equivalentes de  $^{87}\text{Rb}$  que contienen.

(2.2), en los diferentes regímenes determinados por los tres parámetros definidos anteriormente, y hemos comparado sus resultados con los producidos por la ecuación de Gross-Pitaevskii 1D (5.1). De esta manera podremos identificar las situaciones en las que las contribuciones puramente tridimensionales son relevantes. Los solitones de gap hallados con nuestra ecuación efectiva muestran un gran acuerdo con las soluciones obtenidas a partir de la ecuación de Gross-Pitaevskii tridimensional en los diferentes regímenes. Los valores del perfil de densidad del solitón, el potencial químico o el número de partículas son calculados con errores típicos del 1 ó 2%. Sin embargo, la ecuación estrictamente unidimensional posee un rango muy limitado de aplicación, ya que su validez necesita de manera simultánea tanto que  $an_1 \ll 1$  (para estar en el límite perturbativo), como que  $N \gg 1$  (para permanecer en el régimen de campo medio).

En la Figura 5.3 se representa el perfil de densidad axial de un solitón en el régimen de confinamiento radial fuerte,  $E_R/\hbar\omega_\perp = 0.1$ , sobre una red óptica de poca profundidad,  $V_0/E_R = 2$ . Este solitón corresponde al punto C de la Figura 5.1(b). Hay que tener en cuenta que para conseguir experimentalmente estos valores de los parámetros en un condensado de  $^{87}\text{Rb}$ , incluso con una red óptica de período  $d \simeq 1.6 \mu\text{m}$ , se necesita una frecuencia armónica radial de  $\omega_\perp/2\pi \gtrsim 2400 \text{ Hz}$ . El estado representado posee  $N = 28$  partículas y se encuentra al final del primer gap, con un potencial químico de  $\mu = 1.24 \hbar\omega_\perp$ . Sólo en este régimen, en el que el potencial químico está muy próximo al de la solución lineal  $\hbar\omega_\perp$  y la función de onda transversa prácticamente coincide con la gaussiana del estado fundamental radial, la ecuación 1D (representada por la línea de trazos azules) puede reproducir correctamente (con un error inferior al 5%) los resultados exactos (en círculos azules). Pero incluso aquí la predicción hecha por nuestra ecuación efectiva (en líneas continuas de color rojo) posee mayor exactitud, con errores inferiores al 1%.

La Figura 5.4 corresponde a una red de igual profundidad que la anterior pero en el régimen de confinamiento radial débil  $E_R/\hbar\omega_\perp = 1.0$ , que puede realizarse por ejemplo con condensados de  $^{87}\text{Rb}$  en una red óptica de período  $d = 1.55 \mu\text{m}$  y una frecuencia de confinamiento radial  $\omega_\perp/2\pi = 240 \text{ Hz}$ . En esta figura se muestra la densidad axial de un solitón con  $N = 74$  partículas en el primer gap del diagrama energético (punto P de la Figura 5.2(c)). Este estado se encuentra muy próximo al borde superior de la primera banda lineal de energía, y por esta razón se extiende sobre varios pozos de la red. Mientras

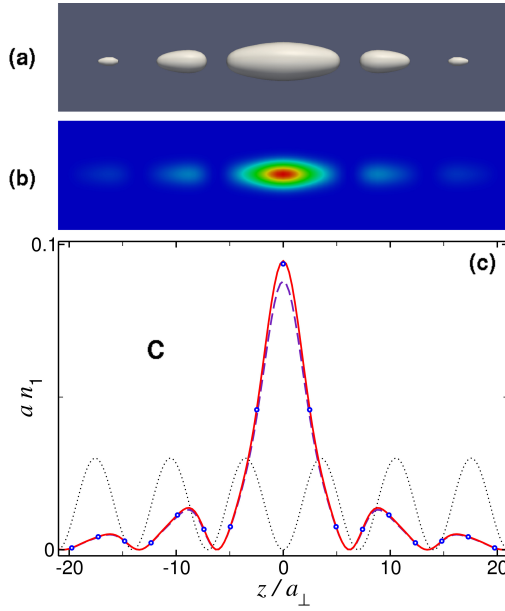


Figura 5.3: Densidad atómica de un solitón de gap con  $N = 28$  partículas y potencial químico  $\mu = 1.24 \hbar\omega_{\perp}$  (correspondiente al punto C de la Figura 5.1(b)), situado al final del primer gap de una red óptica de poca profundidad,  $V_0/E_R = 2$ , en el régimen de confinamiento radial fuerte,  $E_R/\hbar\omega_{\perp} = 0.1$ : (a) isosuperficie de densidad con el 5% de la densidad máxima del condensado, (b) contornos de densidad sobre el plano YZ, (c)  $an_1$  obtenido con nuestra ecuación efectiva (líneas rojas), con la ecuación 1D (trazos azules) y resultados exactos (círculos azules). La línea negra de puntos representa la red.

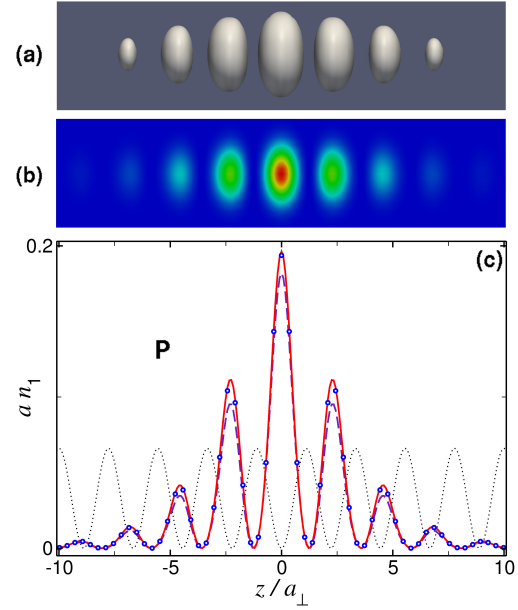


Figura 5.4: Densidad atómica de un solitón de gap con  $N = 74$  partículas y potencial químico  $\mu = 2.59 \hbar\omega_{\perp}$  (correspondiente al punto P de la Figura 5.2(c)), situado al inicio del primer gap de una red óptica de poca profundidad,  $V_0/E_R = 2$ , en el régimen de confinamiento radial débil,  $E_R/\hbar\omega_{\perp} = 1$ : (a) isosuperficie de densidad con el 5% de la densidad máxima del condensado, (b) contornos de densidad sobre el plano YZ, (c) densidad axial adimensional obtenida con nuestra ecuación efectiva (líneas continuas rojas), con la ecuación 1D (línea de trazos azules) y resultados exactos (círculos azules).

que la ecuación efectiva (5.11) (línea continua roja) reproduce de nuevo los resultados con un error del orden del 1%, la ecuación 1D (línea de trazos azules) comete ya errores del 10% frente a la solución exacta (en círculos azules). Los efectos tridimensionales del sistema sólo pueden ser tenidos en cuenta por nuestra ecuación efectiva y no por la ecuación estrictamente 1D. En consecuencia, en este régimen la ecuación de Gross-Pitaevskii 1D limita su rango de aplicación a regiones muy pequeñas del inicio del primer gap y prácticamente sólo a redes poco profundas.

Para cualquier valor de los parámetros con un número de partículas mayor

sólo la ecuación efectiva (5.11) puede modelar correctamente el estado estacionario de los solitones de gap. Esto es lo que ocurre en los casos con mayor profundidad de la red, donde la densidad atómica está más localizada en los pozos del potencial periódico, como por ejemplo en el estado de la Figura 5.5, correspondiente a un confinamiento radial fuerte  $E_R/\hbar\omega_\perp = 0.1$  en una red profunda  $V_0/E_R = 20$ . Este solitón está situado en la parte superior del segundo gap y la solución exacta de la ecuación de Gross-Pitaevskii 3D (círculos azules) indica un contenido de  $N = 182$  partículas, aunque la ecuación unidimensional (línea de trazos azules) predice sólo 119, lo que supone un error superior al 30%. La ecuación efectiva (5.11) mantiene su precisión, con un error del 2.8%.

A medida que nos acercamos al régimen de confinamiento radial débil los efectos tridimensionales aumentan su contribución al estado estacionario del solitón. La Figura 5.6 presenta la información de un solitón en un régimen de confinamiento radial intermedio,  $E_R/\hbar\omega_\perp = 0.25$ , inmerso en una red óptica profunda,  $V_0/E_R = 20$ . El estado se localiza en la parte superior del segundo gap y contiene  $N = 696$  partículas. Estos casos son ya más realistas desde el punto de vista experimental, ya que los valores de los parámetros utilizados permiten aumentar el número de partículas y facilitar su detección. Hay que apuntar, no obstante, que un incremento de  $E_R/\hbar\omega_\perp$  se traduce en una disminución relativa del cuanto de energía radial y por tanto conduce a la excitación de un mayor número de modos radiales que pueden ser fuente de desestabilización del solitón. Ya que el valor del parámetro de interacción no es pequeño [ $an_1(z=0) \simeq 5.4$ ], la ecuación estrictamente 1D (línea de trazos azules) no tiene validez (como lo demuestra su error superior al 55%). Sin embargo, nuestra ecuación efectiva 1D (línea roja) sigue produciendo errores pequeños (3%) frente a la solución exacta 3D (círculos rojos).

En lo referente a la estabilidad de las soluciones, nuestras ecuaciones efectivas proporcionan las mismas conclusiones sobre estabilidad que la ecuación completa tridimensional, si bien no pueden reproducir el decaimiento detallado de los estados inestables. Nuestros análisis se han basado en la introducción de una perturbación aleatoria de tipo gaussiano sobre el solitón y en la posterior monitorización de la estructura del sistema durante un segundo. Hemos considerado estables a aquellos solitones que han sobrevivido durante dicho tiempo. En general, hemos encontrado solitones estables en los diferentes gaps excepto en pequeñas zonas próximas al borde inferior de las bandas permitidas, de

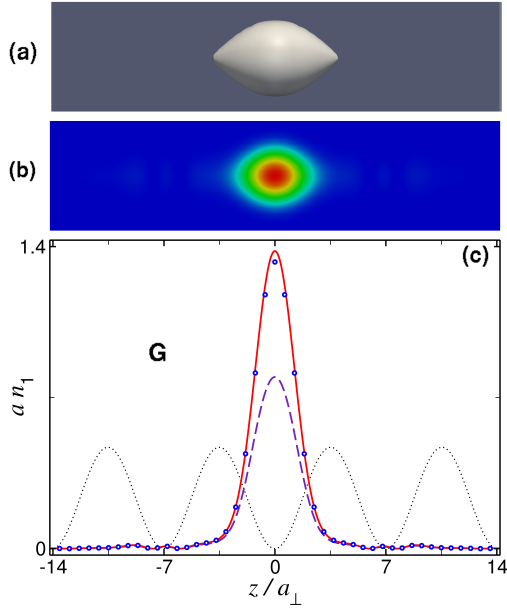


Figura 5.5: Densidad atómica de un solitón de gap con  $N = 182$  partículas y potencial químico  $\mu = 2.72 \hbar\omega_{\perp}$  (correspondiente al punto G de la Figura 5.1(c)), situado al final del segundo gap de una red óptica profunda,  $V_0/E_R = 20$ , en el régimen de confinamiento radial fuerte,  $E_R/\hbar\omega_{\perp} = 0.1$ : (a) isosuperficie de densidad con el 5% de la densidad máxima del condensado, (b) contornos de densidad sobre el plano YZ, (c)  $an_1$  obtenida con nuestra ecuación efectiva (líneas rojas), con la ecuación 1D (trazos azules) y resultados exactos (círculos azules). La línea negra de puntos representa la red.

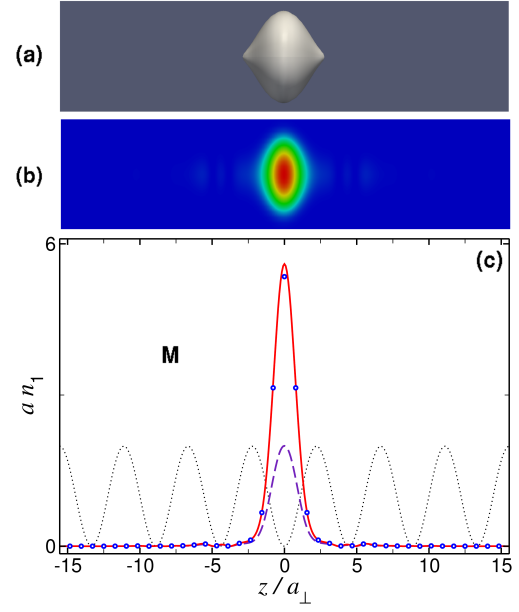


Figura 5.6: Densidad atómica de un solitón de gap con  $N = 696$  partículas y potencial químico  $\mu = 5.3 \hbar\omega_{\perp}$  (correspondiente al punto M de la Figura 5.2(b)), situado al final del segundo gap de una red óptica profunda,  $V_0/E_R = 20$ , en el régimen de confinamiento radial intermedio,  $E_R/\hbar\omega_{\perp} = 0.25$ : (a) isosuperficie de densidad con el 5% de la densidad máxima del condensado, (b) contornos de densidad sobre el plano YZ, (c) densidad axial adimensional obtenida con nuestra ecuación efectiva (líneas continuas rojas), con la ecuación 1D (línea de trazos azules) y resultados exactos (círculos azules).

acuerdo con análisis anteriores realizados con la ecuación de Gross-Pitaevskii 1D para redes profundas [87, 93]. En todos los regímenes de confinamiento radial, hemos comprobado que una mayor profundidad de la red supone una mayor estabilización del solitón. Así, mientras el estado C de la Figura 5.3, próximo al borde inferior de la segunda banda en el régimen de confinamiento radial fuerte, es inestable, los estados G (Figura 5.5) y M (Figura 5.6), situados en lugares equivalentes del diagrama energético pero en redes ópticas de mayor profundidad, son estables. Desde el punto de vista experimental, es importante apuntar la posibilidad de generar solitones fundamentales estables

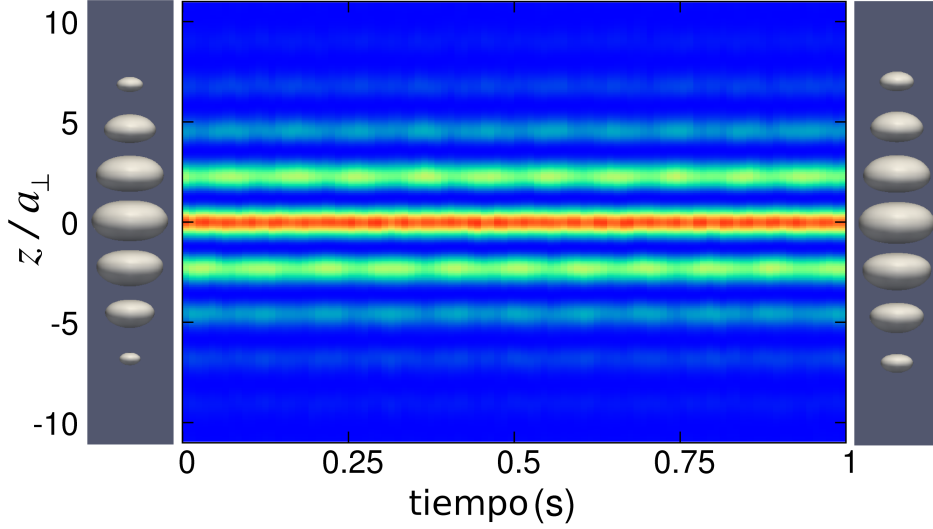


Figura 5.7: Evolución temporal de un solitón de gap con 74 átomos de  $^{87}\text{Rb}$  (solitón de la Figura 5.4) en un confinamiento radial débil  $E_R/\hbar\omega_\perp = 1$  y en presencia de una red óptica somera, de profundidad  $V_0/E_R = 2$ . En el centro (mapa de colores) se muestra la evolución en el tiempo de la densidad axial del solitón, indicando con colores rojos las densidades más altas y con azules las más bajas. Los paneles laterales representan isosuperficies de densidad (con el 5% de la densidad máxima) al comienzo (izquierda) y al final (derecha) de la evolución.

incluso con un confinamiento radial débil ( $E_R/\hbar\omega_\perp \simeq 1$ ), a pesar de que en este régimen los solitones de gap poseen un potencial químico lo suficientemente grande para que los modos excitados de la trampa radial contribuyan siempre. El solitón de gap P de la Figura 5.4, que tiene un potencial químico  $\mu = 2.59 \hbar\omega_\perp$ , y que fue generado con un atrapamiento transversal débil ( $E_R/\hbar\omega_\perp = 1$ ) sobre una red óptica poco profunda ( $V_0/E_R = 2$ ), es un ejemplo de este tipo de estados estables. La Figura 5.7 muestra su evolución temporal posterior a una perturbación inicial aleatoria de tipo gaussiano. En el mapa de color intermedio se ha monitorizado la evolución de la densidad axial del condensado  $an_1(z, t)$ , obtenida con la ecuación de Gross-Pitaevskii 3D. A ambos lados se han representado las isosuperficies de densidad (correspondientes al 5% de la densidad máxima) a tiempos  $t = 0$  (a la izquierda), tras interrumpir la perturbación, y a  $t = 1$  s (a la derecha), al final del período de monitorización. Aunque su potencial químico es nítidamente mayor que el del estado fundamental radial ( $\hbar\omega_\perp$ ), el solitón se mantiene estable durante un segundo de evolución y su estructura resulta robusta frente a las excitaciones tridimensionales.

### 5.3 Caracterización de solitones de gap que contienen estructuras topológicas radiales no triviales

Como se mencionó en la introducción de este capítulo, los solitones de gap cuasi-unidimensionales no son fáciles de generar con los parámetros experimentales habituales. Los experimentos se han realizado en un régimen de confinamiento radial débil ( $E_R/\hbar\omega_\perp \geq 1$ ) [18] donde los modos radiales excitados intervienen en la solución de igual manera que los modos axiales, y en consecuencia el potencial de atrapamiento transverso puede conferir a estos estados una configuración tridimensional no trivial. En este apartado mostraremos cómo los solitones de gap en dicho régimen pueden adoptar una variada topología tridimensional heredada de los estados asociados al problema lineal subyacente, y comprobaremos además que algunos de estos solitones presentan una estabilidad inesperada. Éste es un resultado relevante desde el punto de vista experimental, ya que abre una nueva vía para generar y observar solitones “robustos” tridimensionales. A pesar de las predicciones teóricas, hasta la fecha no ha sido posible conseguir ondas de tipo solitón con una geometría puramente 3D, ni siquiera en medios ópticos [95]. En nuestro análisis nos valdremos de la ecuación de Gross-Pitaevskii tridimensional con el fin de reproducir la configuración completa, radial y axial, de las ondas de materia que surgen sobre la red óptica. Nos centraremos en el caso habitual de condensados atrapados por potenciales armónicos radiales en presencia de redes ópticas unidimensionales.

Para caracterizar a los solitones de gap utilizaremos el diagrama de bandas de energía tridimensional del correspondiente problema lineal. Aunque la red óptica determina un diagrama energético unidimensional con bandas permitidas y prohibidas, el espectro de energía asociado al potencial transverso repite y desplaza dichas bandas a energías más altas con cada modo excitado radial. La Figura 5.8(a) muestra el diagrama tridimensional para el caso de  $E_R/\hbar\omega_\perp = 1.0$ , donde se representa el potencial químico adimensional,  $\tilde{\mu} \equiv (\mu - \hbar\omega_\perp)/E_R$ , frente a la profundidad de la red óptica,  $s = V_0/E_R$ . Los gaps separan las bandas sombreadas correspondientes a las energías permitidas de las ondas de Bloch. A modo de referencia, se ha representado con líneas gruesas de color rojo el diagrama de bandas equivalente obtenido con la ecuación unidimensional de Schrödinger. Para analizar con detalle los diferentes solitones que aparecen en los sucesivos gaps, hemos utilizado el caso representativo de  $s = 15$ , correspondiente a la línea de trazos de la Figura 5.8(a). Este caso se representa en



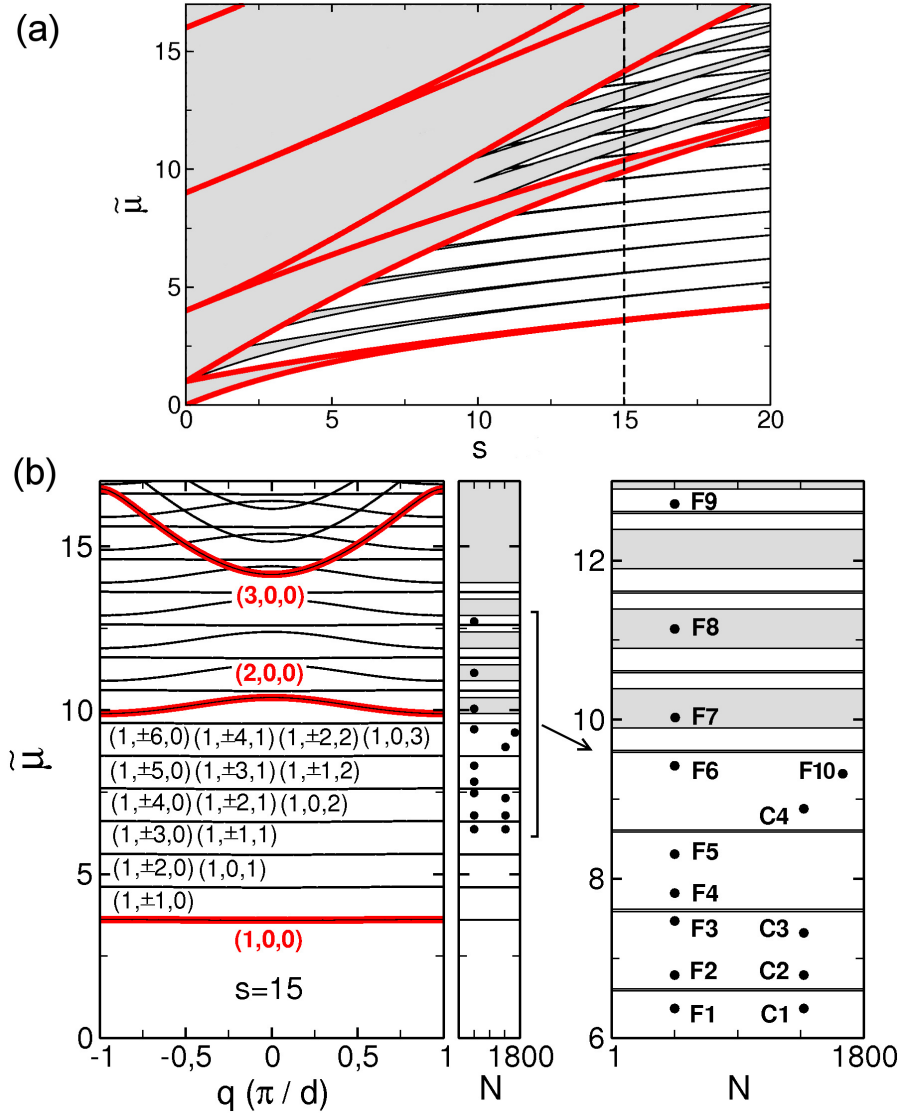


Figura 5.8: Diagrama de bandas tridimensional para condensados con  $E_R/\hbar\omega_\perp = 1.0$ , (a) en función de la profundidad de la red  $s \equiv V_0/E_R$ , y (b) en función del cuasimomento  $q$  (en unidades de  $\pi/d$ ) para el caso con  $s = 15$ . Los dos paneles de la derecha indican el número de partículas de  $^{87}\text{Rb}$  que contienen los solitones de gap (etiquetados con letras).

la Figura 5.8(b), donde se muestra la estructura de las bandas en función del cuasimomento  $q$  en la primera zona de Brillouin. Ya que el espectro de energía del oscilador armónico radial está dado por  $E(n_r, m) = (2n_r + |m| + 1)\hbar\omega_\perp$ , donde  $n_r = 0, 1, 2, \dots$ , es el número cuántico radial y  $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ , es el número cuántico azimutal o de momento angular, puede deducirse de la figura que las sucesivas bandas reflejan la contribución de los diferentes modos

radiales excitados. Es decir, cada banda estrictamente tridimensional está desplazada en una energía igual a  $E(n_r, m)$  respecto a la banda unidimensional original caracterizada por el índice axial  $n = 1, 2, 3, \dots$ . Por este motivo hemos asociado a cada banda de la Figura 5.8 el conjunto de números cuánticos  $(n, m, n_r)$ . Por ejemplo, la banda inferior del diagrama, con la menor energía, no está degenerada y posee los números cuánticos  $(1, 0, 0)$ . Las dos bandas espectrales siguientes, con números cuánticos  $(1, -1, 0)$  y  $(1, +1, 0)$ , tienen la misma energía y están asociadas a estados de oscilador armónico radial que contienen un vórtice de carga unidad. Ambas son réplicas de la banda inferior desplazadas en una cantidad de energía  $\hbar\omega_\perp/E_R$ . Análogamente, las tres bandas siguientes  $(1, \pm 2, 0)$  y  $(1, 0, 1)$ , son réplicas de la banda  $(1, 0, 0)$  desplazadas en  $2\hbar\omega_\perp/E_R$ , etc. Los paneles de la derecha de la Figura 5.8(b), en cuyos ejes horizontales se indica el número de partículas equivalentes de  $^{87}\text{Rb}$ , muestran la localización de los diferentes solitones de gap fundamentales, etiquetados con la inicial F y cuyo análisis se realiza a continuación, así como de los solitones compuestos (múltiples), marcados con la inicial C, que se estudian en detalle en la Referencia [A.6].

Para calcular las ondas de materia sobre la red hemos realizado simulaciones numéricas con la ecuación estacionaria de Gross-Pitaevskii tridimensional utilizando un método de continuación adiabático basado en un desarrollo espectral en bases de Laguerre-Fourier. Nuestros resultados nos permiten concluir que cada banda de energía permitida del problema lineal subyacente origina una nueva familia de solitones de gap tridimensionales con una topología diferenciada. Como muestra la Figura 5.9, que representa el potencial químico frente al número de partículas de los estados, las familias de solitones siguen trayectorias que se aproximan para  $N \rightarrow 0$  a una banda tridimensional lineal con números cuánticos  $(n, m, n_r)$ . Ésta es la razón por la que podemos caracterizar a los solitones de cada familia no lineal con el mismo conjunto de números cuánticos que posee la banda energética lineal de la que provienen. Para cada familia  $(n, m, n_r)$  existe un umbral de potencial químico, dado que los solitones de gap de esta familia no pueden aparecer para valores del potencial químico inferiores a los de la banda lineal correspondiente. Conforme el número de partículas aumenta también lo hace el tamaño de los solitones, pero cada familia conserva la misma estructura topológica radial del caso lineal. Por ejemplo, los solitones de gap fundamentales con 450 partículas F1 a F4 de la Figura 5.9 pertenecen a cuatro familias diferentes. El punto F1 es del

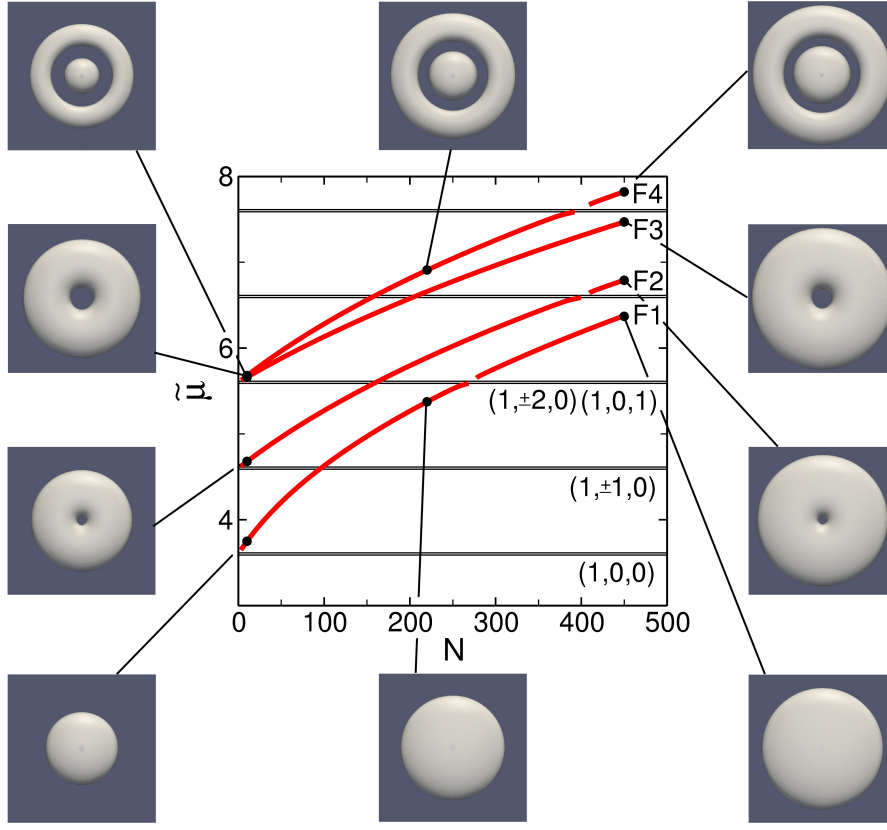


Figura 5.9: Trayectorias en los primeros gaps tridimensionales de las familias de solitones de gap fundamentales en el plano  $\tilde{\mu} - N$ . Los paneles muestran las isosuperficies tridimensionales de densidad atómica con el 10% del valor máximo. Cada panel ocupa un cuadrado de  $4.6 \mu m$  de lado.

tipo  $(1,0,0)$  y en consecuencia es el de menor energía. Los solitones de este tipo poseen forma de disco y se localizan en un único pozo de la red. Cuando el número de partículas que contienen se aproxima a cero, su estado radial tiende al estado fundamental del oscilador armónico. Esto no quiere decir que los solitones de gap del tipo  $(1,0,0)$  puedan ser descritos mediante la ecuación unidimensional de Gross-Pitaevskii. De hecho, el punto F1 tiene un potencial químico,  $\mu = 7.37 \hbar\omega_{\perp}$ , que es mucho mayor que el cuanto de excitación radial. Por lo tanto, queda claro que este solitón, al igual que los demás considerados en nuestro trabajo, pertenecen a un régimen puramente tridimensional. En cuanto a las familias con índice azimutal  $m$  diferente de cero, sus solitones contienen vórtices cuantizados de carga  $m$ , como en las familias  $(1,1,0)$  y  $(1,2,0)$ , que poseen vorticidades asociadas de carga 1 (punto F2) y carga 2 (punto F3). Por su parte, los solitones de gap con índices  $n_r \geq 1$  poseen una estructura

radial compleja, resultante de la composición de numerosos modos de oscilador armónico. A pesar de ello, sus estados presentan anillos de densidad nula de igual manera que lo hacen los autoestados del oscilador que poseen idéntico valor de  $n_r$ . Tal es el caso del solitón F4.

Dado que las propiedades espectrales de los solitones de gap pertenecientes a diferentes familias pueden ser comparadas mejor cuando se mantiene el mismo número de partículas, en la Figura 5.10 se han representado los solitones fundamentales con 450 átomos correspondientes a los puntos F1–F9 de la Figura 5.8(b). Estos solitones se muestran mediante isosuperficies tridimensionales de densidad atómica correspondientes al 10 % del valor máximo en el condensado. La mayor de las figuras, situada a la derecha de cada recuadro, es una vista en perspectiva, mientras que las imágenes superior e inferior, representadas un 45 % más pequeñas, son las vistas frontales y laterales respectivamente. De entre los casos considerados, el de la Figura 5.10(i), perteneciente a la familia  $(2, \pm 1, 0)$ , posee características axiales distintivas. Se trata de un solitón de gap con dos picos de igual densidad, pero con una diferencia de fase de  $\pi$ , confinados en un único pozo de la red. Es por consiguiente un estado procedente de una banda energética lineal con un índice axial de orden superior ( $n = 2$ ). Por otro lado, hay que tener en cuenta que, a causa de que los gaps con valores grandes del potencial químico son estrechos, hay solitones con un determinado número de partículas que no existen. Sin embargo, es posible encontrar estados de familias con diferentes valores del número azimutal  $m$  en el interior de las bandas de Bloch, pues los modos con distinto  $m$  no interfieren. Así, por ejemplo, no hay un solitón con 450 partículas perteneciente a la familia  $(2, 0, 0)$ , mientras que sí existen los correspondientes solitones (puntos F7 y F8) de los tipos  $(1, 1, 2)$  y  $(1, 0, 3)$ , dentro de las bandas  $(2, 0, 0)$  y  $(2, 1, 0)$ , respectivamente. Aunque los solitones unidimensionales cuyo potencial químico cae en el interior de una banda lineal han sido estudiados con detalle [96–99], casos tridimensionales de solitones “incrustados” en las bandas como los tratados aquí no habían sido abordados hasta ahora.

Un resultado que cabe destacar es la existencia de solitones estables en este régimen claramente tridimensional, donde el análisis espectral de los estados estacionarios muestra que son necesarios numerosos modos radiales para describir el sistema no lineal. En principio, estos modos aportan nuevos grados de libertad al solitón y abren posibles vías de desestabilización. Sin embargo, por medio de simulaciones numéricas de la ecuación completa de Gross-Pitaevskii

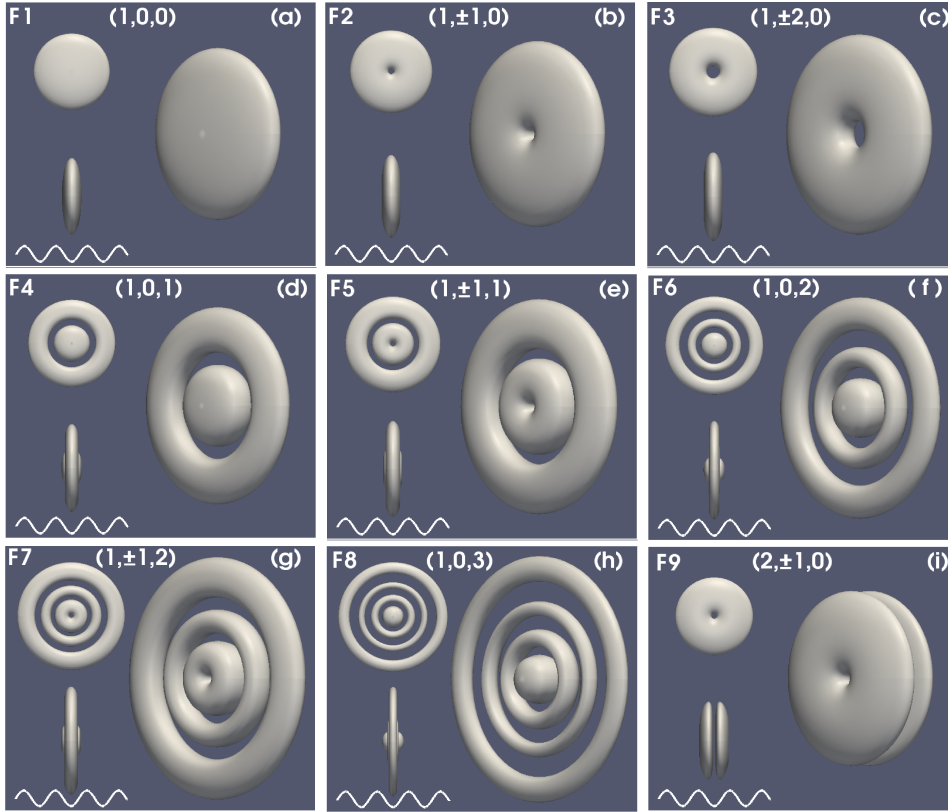


Figura 5.10: Isosuperficies de densidad tridimensionales para los solitones fundamentales F1–F9 de la Figura 5.8(b), todos ellos con 450 partículas. En cada panel, la escala de longitud de las dos figuras de la izquierda (que son un 45% más pequeñas que la imagen de la derecha) está determinada por el período  $d = 1.55 \mu\text{m}$  de la red óptica representada en la parte inferior.

dependiente del tiempo hemos demostrado que algunas familias de solitones mantienen su estructura estable durante tiempos superiores a los dos segundos. Concretamente, los solitones de los tipos  $(1, 0, 0)$  y  $(1, 1, 0)$  conservan la estabilidad dinámica en todo el gap excepto en pequeñas regiones próximas al comienzo de la siguiente banda lineal permitida. En cambio, tanto los solitones con  $n \geq 1$ , equivalentes a los denominados *solitones subfundamentales* de los modelos unidimensionales [79, 80], como los solitones con  $n_r > 0$ , con anillos de densidad nula, son inestables. Un ejemplo representativo de estructura estable es el solitón de gap fundamental con 1650 átomos de  $^{87}\text{Rb}$ , correspondiente al punto F10 de la Figura 5.8(b), cuya evolución tras una fuerte perturbación inicial se muestra en la Figura 5.11(a).

Además, hemos encontrado que los solitones de la familias  $(1, m, 0)$ , que

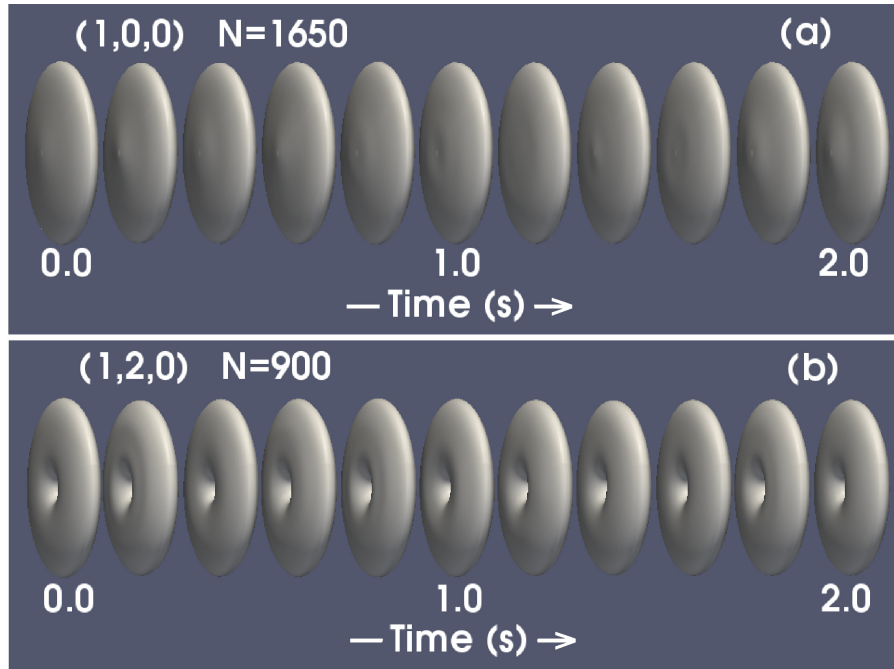


Figura 5.11: Evolución temporal de solitones tridimensionales, sin vorticidad (a) y con un vórtice de carga  $q = 2$  (b), tras una perturbación inicial.

contienen un vórtice axial de carga  $m \geq 2$ , también son estables para determinados rangos del número de partículas, como puede derivarse de un análisis de estabilidad mediante las ecuaciones de Bogoliubov [33]. Por ejemplo, en la familia  $(1, 2, 0)$  los solitones con 100 ó 300 átomos son inestables, mientras que el estado F3 de la Figura 5.9(b) con 450 partículas o el estado con 900 átomos, cuya evolución se muestra en la Figura 5.11(b), permanecen estables. Estos resultados abren nuevas posibilidades para la realización de solitones de gap de larga vida con un número de partículas suficiente para permitir su detección experimental.

## 5.4 Resumen

En este capítulo hemos demostrado cómo la ecuación unidimensional efectiva, derivada en el capítulo anterior para el cálculo de condensados en geometrías alargadas, puede ser aplicada con gran precisión en la determinación de los estados estacionarios de los solitones de gap tridimensionales soportados por redes ópticas extendidas en una dirección espacial. Por el contrario, hemos comprobado que la ecuación de Gross-Pitaevskii unidimensional, aunque es

habitualmente utilizada en la literatura, posee un rango de aplicación restringido a valores extremadamente pequeños del número de partículas del solitón. Mediante argumentos dimensionales basados en los términos de las ecuaciones de movimiento efectivas, hemos identificado los parámetros relevantes para la caracterización de los diferentes regímenes en los que pueden aparecer los solitones de gap: redes ópticas profundas o someras, con confinamientos transversos fuertes, intermedios o débiles frente a la energía característica de la red. Nuestras ecuaciones mantienen su precisión en todos los regímenes y son válidas para cualquier valor de la energía de interacción. En particular, en contra de lo que cabía esperar, hemos encontrado solitones de gap fundamentales que son estables en el régimen de confinamiento radial débil. Éste es un resultado de gran relevancia desde un punto de vista experimental, ya que abre la posibilidad de la generación y detección de tales estados en un régimen cuyos parámetros físicos se encuentran entre los habituales en los experimentos.

Por otra parte, a través de un análisis numérico completo con la ecuación de Gross-Pitaevskii tridimensional, y por primera vez en el estudio teórico de los condensados sobre redes ópticas unidimensionales, hemos encontrado el espectro de soluciones tridimensionales tipo solitón con topologías radiales no triviales en un régimen donde la energía característica de la red óptica es mayor o igual que el cuanto de excitación radial. Hemos clasificado los estados no lineales hallados en los gaps en familias asociadas a las bandas de energía permitidas del problema tridimensional lineal subyacente. Nuestros resultados muestran que dentro de cada familia los solitones de gap mantienen una topología similar a la de las soluciones del problema sin interacción al que tienden cuando el número de partículas se anula. Esto nos ha permitido caracterizar a los solitones de cada familia no lineal con un conjunto de números cuánticos,  $(n, m, n_r)$ , igual al que identifica a las soluciones lineales de la banda energética de la que provienen. Finalmente, como resultado destacable, hemos encontrado que los solitones de gap de las familias  $(1, m, 0)$  (estados con un vórtice axisimétrico de carga  $m = 0, 1, 2, \dots$  y sin nodos radiales), son estables a pesar de las múltiples excitaciones axiales y radiales a que están sometidos en este régimen puramente tridimensional. Para  $m > 1$ , la estabilidad de estos solitones posee un comportamiento cuasiperiódico con el número de partículas, como se deduce de un análisis de estabilidad lineal.

Los resultados presentados en este capítulo se desarrollan con más detalle en las Referencias [A.6, A.7], que se incluyen en el Apéndice A.

## Capítulo 6

# Discusión y conclusiones

Esta Tesis recopila el trabajo que ha sido objeto de las publicaciones científicas relacionadas en el **Apéndice A**. En ellas hemos estudiado los defectos topológicos en condensados escalares de Bose-Einstein formados por átomos con interacciones repulsivas en el régimen de campo medio. Para nuestra investigación hemos desarrollado métodos numéricos tridimensionales capaces de modelar de forma realista los sistemas que son actualmente objeto de los experimentos y hemos propuesto técnicas analíticas que permiten analizar tanto las magnitudes estacionarias como la evolución dinámica de los estados de los condensados.

En nuestra primera publicación abordamos el estudio de la estabilidad de los vórtices con carga múltiple [A.1]. Los vórtices cuantizados son una característica distintiva de los superfluidos y surgen en su seno cuando son sometidos a rotación [100]. Estas estructuras aparecen también en los materiales superconductores de tipo II cuando están inmersos en un campo magnético y su magnetización se produce mediante la formación de líneas de flujo que se disponen formando una red triangular ordenada (red de Abrikosov) [101]. De manera análoga, en respuesta a una rotación creciente, los condensados sólo pueden adquirir mayor momento angular generando una red de vórtices o aumentando la carga cuantizada de un único vórtice [19]. Esta última configuración es energéticamente desfavorable frente a la red y, en presencia de mecanismos disipativos, un vórtice múltiplemente cuantizado decae en una red de vórtices de carga unidad con igual vorticidad total. Gracias a una técnica de impresión topológica de la fase [35] fue posible soslayar esta barrera energética y generar experimentalmente vórtices de carga múltiple en condensados de Bose-Einstein [34], similares a los que se habían conseguido en el  $^3\text{He}$  superfluido [102]. Pero incluso cuando no hay disipación, en el límite de temperatura



nula, el análisis de excitaciones lineales de tales vórtices sugiere que deberían ser dinámicamente inestables [33]. Sin embargo, en el trabajo experimental de Ketterle y colaboradores [14], donde se analizaba el decaimiento de los vórtices de carga doble en condensados alargados, habían quedado abiertas una serie de cuestiones sobre la inestabilidad de estos sistemas. Los resultados experimentales no parecían estar de acuerdo con el modelo teórico de densidad local propuesto por Möttönen y colaboradores [36] y por tanto no se podía confirmar que se tratara de una inestabilidad dinámica, o al menos que el modelo de densidad local fuera realmente aplicable en las condiciones experimentales. Para llevar a cabo nuestro estudio diseñamos programas de cálculo numérico capaces de resolver la ecuación de Gross-Pitaevskii tridimensional dependiente del tiempo en condiciones realistas. Esto nos permitió modelar la compleja evolución dinámica del proceso de desdoblamiento de los vórtices y demostrar así que, en contra de lo que sugerían algunos autores [37], la inestabilidad que genera este proceso es de tipo dinámico y no energético. A pesar de que las perturbaciones a las que sometíamos al condensado modificaban sólo imperceptiblemente la energía y el momento angular del sistema, en todos los casos los vórtices dobles decaían en dos vórtices de carga unidad. Nuestros resultados constataron que la inestabilidad comienza en aquellas secciones transversales del condensado tridimensional cuyo valor de la densidad integrada  $an_z$  pertenece a una de las zonas cuasiperiódicas de inestabilidad dinámica calculadas en un condensado bidimensional equivalente, tal como predice la aproximación de densidad local para los condensados alargados. Aunque el experimento apuntaba a un incremento monótono del tiempo de vida de los vórtices con el valor de la densidad axial máxima, nuestras evoluciones numéricas mostraron que en los condensados más elongados, que eran también los de mayor densidad, los tiempos observados incorporan el tiempo de propagación desde la zona de desdoblamiento inicial hasta la sección central de monitorización. Esto puso de manifiesto que, cuando se considera localmente, el desdoblamiento comienza aproximadamente al mismo tiempo para todos los condensados, con independencia de su longitud, lo cual es de nuevo consistente con el modelo de densidad local.

El excelente acuerdo obtenido entre los resultados numéricos de la ecuación de Gross-Pitaevskii y los datos experimentales de sistemas tridimensionales tan complejos como los del experimento de decaimiento de los vórtices dobles, demuestra que dicha ecuación modela con gran precisión la dinámica de los

condensados de Bose-Einstein en el régimen de campo medio [A.1, 60]. Pero el análisis numérico de tales sistemas es en general muy costoso y por ello es útil disponer de métodos analíticos para calcular sus características básicas. Aunque la ecuación de Gross-Pitaevskii tridimensional independiente del tiempo proporciona de forma numérica el estado estacionario de los condensados, su solución analítica es únicamente posible en los límites perturbativo y de Thomas-Fermi [12, 40]. En nuestros trabajos hemos desarrollado una extensión de la aproximación de Thomas-Fermi que incorpora de forma sencilla la energía de punto cero de la trampa, y que es aplicable en la situación habitual de condensados atrapados por potenciales armónicos con simetría cilíndrica [A.2, A.3]. Este modelo nos ha permitido derivar expresiones analíticas para los valores medios de las magnitudes relevantes del estado estacionario de condensados con un número arbitrario de partículas, tales como la energía media, el potencial químico, la energía de interacción, los radios del condensado, las densidades axiales y radiales, o las velocidades del sonido. Nuestras fórmulas son aplicables incluso a condensados con un vórtice recto cuantizado de carga múltiple, y tienen una precisión típica del 1 % cuando se comparan con los valores numéricos exactos obtenidos con la ecuación de Gross-Pitaevskii tridimensional. Además, todas las expresiones analíticas encontradas poseen los límites correctos tanto en el régimen perturbativo como en el de Thomas-Fermi. En particular, hemos aplicado esta técnica a condensados alargados y achatados. Estos sistemas, que tienen gran notoriedad en el terreno experimental, son generados por potenciales de confinamiento con geometrías altamente anisótropas. La utilidad de nuestras fórmulas analíticas puede ponerse de manifiesto en la caracterización detallada de los condensados producidos en los experimentos, como por ejemplo, en la descripción de los condensados elongados del experimento de decaimiento de vórtices citado anteriormente. En este caso, los condensados no se encuentran dentro de los regímenes perturbativo o de Thomas-Fermi, y sin embargo el valor de su longitud, su potencial químico o su densidad axial, magnitudes relevantes del experimento, pueden calcularse de forma analítica usando nuestra formulación.

Como se ha dicho previamente, los condensados atrapados por potenciales anisótropos presentan un perfil de densidad alargado o achatado. Este tipo de confinamiento es muy habitual en los trabajos experimentales ya que aumentando la relación de aspecto de la trampa se consigue pasar desde los casos anisótropos puramente tridimensionales hasta los sistemas de dimensionalidad

reducida, cuasi-2D o cuasi-1D [14, 34, 71, 103, 104]. Este tipo de sistemas permite estudiar fenómenos físicos característicos de dichos regímenes que poseen una relevancia multidisciplinar, como es el caso, por ejemplo, de los vórtices o de los solitones.

Los estados de los condensados en trampas muy anisótropas están gobernados por dos escalas de tiempo bien diferenciadas asociadas a los grados de libertad correspondientes a las direcciones mutuamente perpendiculares que definen su geometría. En la dirección de confinamiento más intenso la escala de tiempo es mucho menor que en la dirección de confinamiento débil. Basándonos en este hecho, y aplicando la aproximación adiabática, hemos derivado ecuaciones de movimiento de dimensionalidad reducida para la evolución del sistema tridimensional [A.4]. Se trata de ecuaciones unidimensionales para los condensados alargados, y bidimensionales para los condensados achatados, que incorporan adecuadamente la información proveniente de los grados de libertad rápidos a través de las expresiones analíticas para el potencial químico local derivadas en nuestra extensión de la aproximación de Thomas-Fermi. Estas ecuaciones efectivas son más sencillas y, sin embargo, más precisas que las que habían sido propuestas previamente [A.5], y tienen la ventaja adicional de que por su simplicidad permiten derivar (utilizando la aproximación de densidad local) fórmulas analíticas para las magnitudes del estado estacionario de los condensados. Por todo ello constituyen una herramienta alternativa para el estudio teórico de problemas estáticos o dinámicos no triviales cuyo análisis con la ecuación de Gross-Pitaevskii tridimensional resulta muy difícil. Grupos teórico-experimentales independientes de nosotros han demostrado que, a diferencia de lo que ocurre con la ecuación de Gross-Pitaevskii 1D, en el régimen de validez de la aproximación adiabática nuestras ecuaciones efectivas reproducen de forma precisa los resultados experimentales [15, 16].

Nuestros trabajos también han demostrado que una aproximación variacional basada en el funcional del potencial químico puede producir mejores resultados que el método variacional habitual basado en el funcional de la energía [A.5]. Si bien este último conduce al resultado correcto cuando el proceso de minimización se produce en el espacio completo de funciones admisibles, esto deja de ser cierto cuando, como ocurre casi siempre en la práctica, el subespacio de funciones variacionales de prueba no genera el espacio completo. En tales circunstancias puede resultar más eficiente la minimización del funcional del potencial químico. Basándonos en este resultado, hemos podido

derivar nuevas ecuaciones efectivas unidimensionales que describen la dinámica de condensados alargados con interacciones interatómicas repulsivas, incluso en presencia de un vórtice axisimétrico múltiple de carga  $q$  [A.5]. Además, en el caso de condensados sin vorticidad ( $q = 0$ ) o con un vórtice de carga unidad ( $q = 1$ ), que son los únicos sistemas dinámicamente estables, las ecuaciones efectivas obtenidas mediante este procedimiento coinciden con las derivadas anteriormente a partir de nuestra extensión de la aproximación de Thomas-Fermi. Éste es un hecho remarcable que aporta solidez a nuestras ecuaciones efectivas, ya que su derivación ha sido posible mediante dos procedimientos completamente diferentes.

Un importante ámbito de aplicación de nuestro modelo unidimensional es el de las ondas solitarias de materia (solitones). El estudio de estas estructuras es relevante no sólo en los condensados de Bose-Einstein sino también en otros campos de la Física, tales como la mecánica de fluidos (donde fueron descubiertas por primera vez) [105], los plasmas (con solitones que se propagan sobre el campo magnético) [106] o la óptica cuántica, en la que han sido estudiadas con más profundidad [95]. Su origen, en todos los casos, se debe al balance que se establece entre la no linealidad y la dispersión del medio en el que se generan, y su descripción matemática puede hacerse de forma unificada, con independencia del campo de aplicación, mediante ecuaciones no lineales como la ecuación de Schrödinger no lineal (equivalente a la ecuación de Gross-Pitaevskii en los condensados) [106]. Las ecuaciones efectivas unidimensionales que hemos derivado permiten analizar de forma realista las soluciones tipo solitón que aparecen sobre redes ópticas unidimensionales en condensados atrapados por potenciales armónicos transversos [A.7]. En la literatura, el estudio teórico de estos estados, denominados solitones de gap por su ubicación energética entre las bandas permitidas del diagrama perteneciente al correspondiente problema sin interacción, se ha limitado, en prácticamente la totalidad de los casos, al régimen cuasi-1D. En este régimen, el confinamiento transverso es tan intenso que la dinámica radial del condensado queda congelada en el estado fundamental del oscilador armónico. Como consecuencia de ello, la dinámica de estos sistemas puede modelarse con una ecuación de Gross-Pitaevskii 1D cuyo término de interacción se ha reescalado promediando sobre los grados de libertad transversos [87]. Sin embargo, los solitones de gap cuasi-unidimensionales no son fáciles de generar con los parámetros experimentales habituales. En nuestro trabajo, hemos demostrado mediante un análisis comparativo con las

soluciones exactas de la ecuación de Gross-Pitaevskii tridimensional, que en condiciones realistas la ecuación estrictamente unidimensional tiene un rango de aplicación muy limitado. En cambio, nuestras ecuaciones efectivas reproducen de forma precisa los solitones de gap estacionarios en prácticamente todos los casos de interés práctico.

Mediante un análisis dimensional de los términos energéticos de las ecuaciones, hemos identificado los parámetros adimensionales que determinan los regímenes físicamente relevantes en los que pueden encontrarse los solitones de gap. Desde el confinamiento radial fuerte, correspondiente al régimen 1D, hasta el débil, típicamente 3D, y en redes profundas, con mayor localización de la densidad, o someras frente a la energía de retroceso de la red. Para ubicar a los solitones hemos calculado el diagrama de bandas de energía tridimensional del problema lineal subyacente asociado a cada régimen estudiado. Conforme el potencial químico de los solitones de gap aumenta, a la vez que el número de partículas, los condensados recorren las diferentes bandas prohibidas del diagrama energético. Sólo en el régimen de confinamiento fuerte, y al comienzo de los gaps, es posible obtener soluciones precisas con la ecuación estrictamente 1D, mientras que nuestra ecuación efectiva se muestra eficaz en la mayoría de los casos de interés. Como resultado destacado, cabe señalar la estabilidad mostrada por los solitones fundamentales en el régimen de confinamiento débil, donde los estados poseen energía suficiente para excitar modos radiales diferentes del fundamental, y por tanto los efectos tridimensionales son siempre importantes.

A pesar de las severas limitaciones mencionadas para la aplicación de la ecuación de Gross-Pitaevskii 1D, los solitones de gap han sido estudiados tradicionalmente mediante esta ecuación, lo cual ha motivado que no se haya tenido en cuenta la estructura transversa de estos sistemas, de modo que el análisis se ha restringido a familias de solitones que presentan diferentes configuraciones axiales. En cambio, los solitones de gap que han sido generados en los experimentos [18] se consiguieron en redes ópticas muy someras y dentro de un régimen de confinamiento radial muy débil. En estas condiciones, el potencial de confinamiento transversal puede conferir al condensado una configuración radial no trivial que sólo puede ser determinada a través de un estudio puramente tridimensional. Éste es el tipo de análisis que hemos empleado en el cálculo de los solitones de gap sobre redes unidimensionales en el régimen de confinamiento débil. Hemos considerado el caso habitual de un potencial

armónico transversal y, utilizando como modelo la ecuación de Gross-Pitaevskii tridimensional, hemos mostrado por primera vez las diversas estructuras topológicas radiales que pueden exhibir los solitones de gap en las redes ópticas unidimensionales [A.6]. Cada banda espectral lineal tridimensional, que hemos descrito con tres índices cuánticos (indicando los nodos axiales, nodos radiales y carga del vórtice), tiene asociada una familia de solitones de gap fundamentales que comparte una configuración transversal similar a la de las ondas de Bloch de la correspondiente banda lineal. Nuestros resultados ponen de manifiesto que los solitones de estas familias poseen un potencial químico que se aproxima a la energía de la banda asociada cuando el número de partículas del condensado tiende a cero. Esta característica nos ha permitido identificar a cada familia con el mismo conjunto de tres números cuánticos de la banda lineal correspondiente. Un resultado destacable es la existencia de zonas de estabilidad para los solitones de gap tridimensionales de las familias  $(1, q, 0)$ , es decir, estados con los menores valores de los números cuánticos axial y radial, pero que pueden incluir un vórtice de carga  $q$ . Este resultado es relevante desde el punto de vista experimental ya que la estabilidad de solitones tridimensionales abre la posibilidad de generar y detectar estas estructuras gracias a que contienen un número de partículas mayor que el de los solitones estrictamente unidimensionales.

## 6.1 Conclusiones

- Hemos reproducido de forma realista el experimento del MIT [14] sobre el decaimiento de vórtices cuantizados de carga doble en condensados elongados mediante la resolución numérica de la ecuación de Gross-Pitaevskii tridimensional. El buen acuerdo entre nuestros resultados numéricos y los datos experimentales demuestra que la ecuación anterior modela fielmente la dinámica de los condensados en el régimen de campo medio y nos ha permitido dar explicación a una serie de cuestiones que habían quedado sin respuesta.
- Nuestras simulaciones demuestran que, contrariamente a lo que se había sugerido en algunos trabajos anteriores [37], los resultados experimentales son consistentes con un decaimiento de los vórtices producido por una inestabilidad de tipo dinámico.

- También ponemos de manifiesto que una correcta interpretación del proceso de decaimiento requiere considerar el valor local de la densidad axial a lo largo de todo el eje del vórtice, y no sólo en la zona central (como se hizo en el experimento). Como demuestran nuestros resultados numéricos, cuando se estudia el proceso localmente es posible predecir las regiones del condensado donde se inicia la inestabilidad y estimar además el tiempo de vida de los vórtices.
- Por otra parte, nuestras simulaciones indican que el incremento monótono en los tiempos de vida observados en el experimento, que parecía contradecir el modelo de densidad local [36], se debe a la contribución del tiempo de propagación de la perturbación local desde el punto inicial de desdoblamiento hasta la sección central de monitorización.
- Hemos derivado expresiones analíticas para las propiedades estacionarias de cualquier condensado escalar de Bose-Einstein con interacciones repulsivas, atrapado por potenciales armónicos con simetría cilíndrica, dentro del régimen de campo medio. Las expresiones obtenidas resultan aplicables también para condensados con un vórtice axisimétrico múltiplemente cuantizado y poseen los límites correctos tanto en el régimen perturbativo como en el de Thomas-Fermi.
- El modelo propuesto representa una extensión de la aproximación de Thomas-Fermi basada en la incorporación de la energía de punto cero del potencial armónico de confinamiento, no posee ningún parámetro libremente ajustable y reproduce con una precisión típica del 1% las propiedades estacionarias de condensados con cualquier número de partículas.
- En los casos de condensados elongados o achatados hemos presentado expresiones analíticas simples que proporcionan la longitud axial, el radio, el potencial químico, la energía media de interacción, las energías cinética y potencial, los perfiles de densidad axial o radial y las velocidades locales del sonido con una precisión comparable a la que se obtiene resolviendo numéricamente la correspondiente ecuación de Gross-Pitaevskii.
- A partir de los resultados anteriores y de la aproximación adiabática, hemos propuesto ecuaciones de movimiento efectivas de dimensionalidad

reducida que describen la evolución dinámica de condensados alargados o achatados dentro del régimen de campo medio, incluso en presencia de un vórtice axisimétrico cuantizado de carga múltiple. Estas ecuaciones incorporan correctamente la contribución de los grados de libertad irrelevantes a través de un término de interacción no polinómico procedente del potencial químico local. Tal como han puesto de manifiesto otros autores, nuestra ecuación efectiva 1D reproduce de forma precisa los resultados experimentales [15, 16].

- La simplicidad de las ecuaciones de movimiento efectivas presentadas permite derivar expresiones analíticas de gran precisión para propiedades del estado fundamental tales como el potencial químico, el tamaño del condensado, el perfil de densidad, la velocidad local del sonido o las frecuencias de respiración axial. Estas expresiones coinciden con las encontradas previamente mediante nuestra extensión de la aproximación de Thomas-Fermi.
- Hemos demostrado que una aproximación variacional basada en el funcional del potencial químico puede conducir a mejores resultados que la aproximación variacional usual basada en el funcional de la energía. Esto es posible cuando la búsqueda de los puntos críticos no se realiza en el espacio completo de funciones admisibles, sino que, como suele ocurrir necesariamente en la práctica, se restringe a un subespacio de funciones variacionales de prueba. Haciendo uso de este resultado, hemos derivado de forma sistemática *nuevas* ecuaciones efectivas unidimensionales que resultan más simples y precisas que las que se obtienen a partir de un método variacional usual.
- Para el caso de condensados con un vórtice axisimétrico de carga  $q = 0$  ó  $|q| = 1$  (que son los únicos sistemas de este tipo dinámicamente estables), las ecuaciones efectivas unidimensionales que hemos obtenido con el método variacional anterior (basado en la minimización del funcional del potencial químico) coinciden con las ecuaciones derivadas a partir de nuestra extensión de la aproximación de Thomas-Fermi:

$$i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} + V_z(z)\phi + \hbar\omega_{\perp} \sqrt{\beta_q^2 + 4aN |\phi|^2} \phi, \quad (6.1)$$

donde  $\beta_0 = 1$  y  $\beta_1 = 2$ .



- Hemos demostrado que nuestras ecuaciones efectivas unidimensionales tienen validez general para el cálculo de los estados estacionarios de los solitones de gap soportados por redes ópticas extendidas en una dirección espacial. La ecuación de Gross-Pitaevskii estrictamente unidimensional, sin embargo, a pesar de su uso habitual, posee un rango de aplicación restringido a valores extremadamente pequeños de la interacción.
- Mediante un análisis dimensional de las ecuaciones de movimiento, hemos identificado los parámetros relevantes para la caracterización de los diferentes regímenes en los que pueden aparecer los solitones de gap: redes ópticas profundas o someras, con confinamientos transversos fuertes, intermedios o débiles frente a la energía característica de la red. Nuestras ecuaciones poseen gran precisión en la mayoría de los regímenes de interés y son válidas para un número arbitrario de partículas.
- Al contrario de lo cabía esperar, hemos encontrado solitones de gap fundamentales que permanecen estables en el régimen de confinamiento transversal débil. Este resultado tiene gran relevancia experimental, ya que abre la posibilidad de la generación y detección de tales estados en un régimen de parámetros físicos habitual en los experimentos.
- Por primera vez en el estudio de los condensados de Bose-Einstein, hemos presentado el espectro de soluciones tipo solitón con topologías radiales no triviales sobre redes unidimensionales en un régimen puramente tridimensional, donde la energía característica de la red óptica es mayor o igual que el cuanto de excitación radial.
- Nuestros resultados han puesto de manifiesto que los estados tridimensionales no lineales encontrados en los gaps pueden agruparse en familias asociadas a las bandas de energía permitidas del problema tridimensional lineal subyacente. Dentro de cada familia, los solitones de gap mantienen una topología similar a la de las soluciones del problema sin interacción.
- A pesar de las múltiples excitaciones axiales y radiales que aparecen en este régimen tridimensional, hemos encontrado que los solitones de gap de las familias con un vórtice axisimétrico de carga  $q = 0, 1, 2, \dots$  y sin nodos radiales, son estables. Como se deduce del análisis de estabilidad lineal, para  $q > 1$ , la estabilidad de estos solitones posee un comportamiento cuasiperiódico con el número de partículas.

## 6.2 Continuación de la investigación

Las líneas de investigación que hemos presentado en los trabajos descritos en esta tesis siguen actualmente su desarrollo. En particular, motivados por el descubrimiento de la larga vida de los solitones de gap tridimensionales, hemos abordado el estudio de la estabilidad dinámica de estas estructuras mediante las ecuaciones de Bogoliubov-de Gennes. Por otra parte, hemos retomado el análisis de características concretas de los condensados cuasi-unidimensionales en las que no habíamos podido profundizar en nuestros trabajos previos. En esta línea, por ejemplo, estamos concluyendo un trabajo sobre la propagación del sonido en condensados alargados sometidos a diversos tipos de confinamiento. Por último, con el fin de que diversas predicciones teóricas sobre estados con vorticidad cuantizada múltiple puedan tener una comprobación experimental, tenemos el propósito de trabajar en la búsqueda de procesos de estabilización de tales sistemas.

## Apéndice A

### Publicaciones asociadas a esta Tesis

### **A.1 Dynamical evolution of a doubly quantized vortex imprinted in a Bose-Einstein condensate**

A. Muñoz Mateo and V. Delgado,  
Physical Review Letters **97**, 180409 (2006).

**Dynamical Evolution of a Doubly Quantized Vortex Imprinted in a Bose-Einstein Condensate**

A. Muñoz Mateo\* and V. Delgado†

*Departamento de Física Fundamental II, Universidad de La Laguna, Tenerife, Spain*

(Received 4 June 2006; published 2 November 2006)

The recent experiment by Shin *et al.* [Phys. Rev. Lett. **93**, 160406 (2004)] on the decay of a doubly quantized vortex is analyzed by numerically solving the Gross-Pitaevskii equation. Our results demonstrate that the vortex decay is mainly a consequence of dynamical instability. The monotonic increase observed in the vortex lifetimes is a consequence of the fact that the measured lifetimes incorporate the time it takes for the initial perturbation to reach the central slice. When considered locally, the splitting occurs approximately at the same time in every condensate.

DOI: [10.1103/PhysRevLett.97.180409](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.97.180409)

PACS numbers: 03.75.Kk, 03.75.Lm, 67.90.+z

Since the creation of the first dilute-gas Bose-Einstein condensates, there has been great interest in characterizing their superfluid properties. This has stimulated a great deal of theoretical and experimental work aimed at studying the rotational properties of dilute Bose gases [1] and, in particular, the nucleation and stability properties of vortices [2]. Numerous experiments have succeeded in generating vortices [3]. In practically all of them, the vorticity appears concentrated in a number of singly quantized vortices. This is a consequence of the fact that multiply quantized vortices are energetically unstable against their splitting in an array of vortices with unit topological charge [4]. Multiply quantized vortices are also dynamically unstable, which implies that they decay even in the zero-temperature limit [5].

Recently, Leanhardt *et al.* [6] obtained multiply quantized vortices in a gaseous Bose-Einstein condensate by using a topological phase-imprinting technique proposed by Nakahara *et al.* [7]. They started from nonrotating  $^{23}\text{Na}$  condensates in the  $|1, -1\rangle$  and  $|2, +2\rangle$  hyperfine states. By adiabatically inverting the magnetic bias field, the initial states were transformed into vortex states with axial angular momentum per particle  $2\hbar$  and  $-4\hbar$ , respectively. This has opened the possibility for studying experimentally the stability of multiply quantized vortices and has stimulated new theoretical work. In particular, Möttönen *et al.* [8] have studied numerically the stability of a doubly quantized vortex in a cylindrical condensate as a function of the (dimensionless) interaction strength per unit length along the condensate axis,  $an_z$ , where  $a$  is the  $s$ -wave scattering length and  $n_z = \int |\Psi(\mathbf{r})|^2 dx dy$  is the linear atom density along  $z$ . They found a series of quasiperiodic instability regions in the parameter space of  $an_z$  [5]. The first two of them (the only ones relevant to this work) correspond to  $an_z < 3$  and  $11.4 \lesssim an_z \lesssim 16$ , respectively. By comparing with the solution of the Gross-Pitaevskii equation for a harmonically trapped cigar-shaped condensate, these authors conclude that a doubly quantized vortex is dynamically unstable, and it is in the above instability regions where the vortex decay is initiated, giving rise in the process to a pair of intertwining singly quantized vortices.

Shortly thereafter, a second experiment was carried out at Massachusetts Institute of Technology (MIT) [9], aimed at studying the characteristic time scale of the splitting process as a function of the interaction strength  $an_{z=0}$ . Experimental results were obtained from integrated absorption images along the condensate axis after 15 ms of ballistic expansion. A key ingredient was the fact that, in order to increase the visibility of the vortex cores, absorption images were restricted to a  $30 \mu\text{m}$  thick central slice of the condensate. This experiment showed that, even at  $T \simeq 0$ , doubly quantized vortices decay into two singly quantized vortices on a time scale that is longer at higher atom density, with an observed lifetime that increases monotonically with  $an_{z=0}$ , showing no quasiperiodic behavior.

These results pose a number of open questions. First, the observed monotonic behavior seems to be not consistent with the local density approach proposed in Ref. [8]. According to this proposal, as the atom density increases, for  $an_{z=0} \sim 12$ , the second instability region mentioned above arises within the central slice. One then would expect this fact to manifest as a decrease in the observed lifetime, which does not occur. This raises some doubts on the validity of the local density approach [9]. Second, numerical work has appeared recently that suggests that the vortex decay is a consequence of thermal fluctuations [10]. Even though it seems reasonable to attribute the splitting to a dynamical instability, it would be desirable to have theoretical results in good quantitative agreement with the experiment, which could corroborate this assumption. Finally, the detailed dynamical behavior of the vortex along the entire  $z$  axis can be especially relevant for characterizing the splitting process in very elongated condensates such as those studied in the MIT experiment. Different regions along the  $z$  axis could exhibit different local behavior which could be determinant to understand the process. The experimental results cannot provide this kind of information, and, thus, it would be desirable to complement them with the detailed dynamics of the vortex along the entire condensate.

In this Letter, we address the above questions by performing a realistic computer simulation of the MIT experiment. Our results, which are in very good quantitative agreement with the experiment, enable us to understand the experimental results by providing a detailed visualization of the splitting process. They confirm that the decay of the vortex core is essentially a dissipationless process driven by a dynamical instability. They also indicate that the local density picture proposed in Ref. [8] provides the key ingredients to interpret properly the splitting process. When considered locally, the decay is characterized by the sole parameter  $an_z$ , and it is always initiated in those regions along the  $z$  axis where  $an_z \simeq 1.5$  or  $an_z \simeq 13.75$ , on a time scale that is in all cases of the order of 15 ms. For large condensates ( $an_{z=0} \gtrsim 3$ ), the lifetime observed in the central slice incorporates the time it takes for the nonlinear perturbation to propagate from the location where the splitting is initiated to the final position where it is eventually detected. This nonlocal process explains the observed monotonic increase in the vortex lifetime and makes the local density picture compatible with the experimental results.

In the zero-temperature limit, the dynamics of dilute Bose gases is accurately described by the Gross-Pitaevskii equation (GPE), which governs the time evolution of the condensate wave function

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) + gN|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 \right) \Psi, \quad (1)$$

where  $N$  is the number of atoms,  $g = 4\pi\hbar^2 a/m$  is the interaction strength, and  $V(\mathbf{r}) = \frac{1}{2}m(\omega_r^2 + \omega_z^2)r^2$  is the external confining potential.

For the  $^{23}\text{Na}$  condensates used in the MIT experiment,  $a = 2.75$  nm and  $\omega_r/2\pi = 220$  Hz. The experimental results were obtained using, without distinction, three different axial trap frequencies  $\omega_z/2\pi = 2.7, 3.7,$  and  $12.1$  Hz. Integration of the 3D GPE for such highly elongated condensates is a very demanding computational task. As the system evolves in time, it develops a complex fine structure that can be properly resolved only by using very large basis or gridpoint sets. To verify the convergence and accuracy of our numerical results, we have implemented two different integration methods: a Laguerre-Fourier and a Laguerre-Hermite-Fourier pseudospectral method. The evolution in time has been carried out by a third-order Adams-Bashforth time-marching scheme. The same results have been obtained with the two integration methods and using very different basis sets and time steps.

We have solved the GPE starting, in all cases, from the stationary state compatible with a doubly quantized vortex. A quantum system is dynamically unstable when it is unstable against arbitrarily small perturbations. To determine whether the vortex decay can be unambiguously attributed to a dynamical instability, at  $t = 0$ , we introduce a small fluctuation in the trapping potential. Specifically, we introduce a 1% quadrupolar perturbation for a short

interval of 0.3 ms. Such a small perturbation produces an almost undetectable change in both the energy and the angular momentum per particle ( $\Delta E/E, \Delta L_z/L_z < 10^{-5}$ ). In order to compare with the experiment, we have followed the same procedure as used at MIT. Condensates with different values of  $an_{z=0}$  were produced by varying  $N$ , and integrated absorption images of a  $30 \mu\text{m}$  thick central slice were then generated at different times. In all cases, the initial vortex decayed into a pair of singly quantized vortices. We have also considered the potential effect of dissipative processes by introducing a phenomenological imaginary time, and, for values consistent with the experiment, we have found it to be negligible. The vortex lifetime was inferred from the absorption images by identifying the instant at which two vortex cores can be resolved unambiguously. An example is shown in Fig. 1(a). We have also analyzed the effect of the ballistic expansion by solving numerically the corresponding GPE in a number of representative cases. This process modifies the predicted lifetime by only 1–2 ms approximately [Fig. 1(b)], which is a consequence of the fact that most of the expansion is a mere scale transformation. Since this correction is of the order of measurement uncertainties, we neglect it in what follows.

To investigate the effects of both the strength and the duration of the perturbation, we have considered two additional cases: a 4% and a 1% quadrupolar perturbation acting for 0.3 and 2 ms, respectively. The corresponding numerical results, obtained for an axial trap frequency  $\nu_z = 12$  Hz, are shown in Fig. 1(c). Even though the local value of  $an_z$  essentially determines where and when the splitting starts, the sole parameter  $an_{z=0}$  is not sufficient to characterize completely the observed splitting times in the central slice. For instance, for the 4% quadrupolar perturbation, the predicted splitting time for a condensate with  $an_{z=0} = 3.27$  in the trap with  $\nu_z = 3.7$  Hz turns out to be 55 ms, whereas for a condensate with the same value of

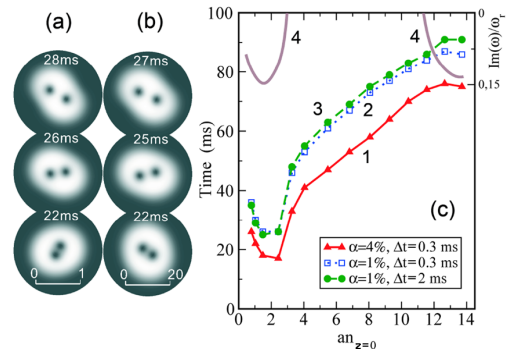


FIG. 1 (color online). (a) In-trap absorption images of a condensate with  $an_{z=0} = 1.48$ . (b) Same as (a) after 15 ms of ballistic expansion. Lengths are in units of the axial trap  $a_z = 6.05 \mu\text{m}$ . (c) Predicted splitting times as a function of  $an_{z=0}$  for three different perturbations (curves 1–3). Curve 4 shows the excitation spectrum of the unstable modes.

$an_{z=0}$  but in the 12 Hz trap one obtains 33 ms. In general, for  $an_{z=0} \gtrsim 3$ , the more elongated the condensate, the longer the measured lifetime. This is a consequence of the fact that measured lifetimes incorporate the time it takes for the initial perturbation to reach the central slice. Since the shortest lifetimes occur for the largest axial frequency (12 Hz), this is the only case one has to consider: Experimental data corresponding to two visible cores must lie above the theoretical curve. Note that this does not prevent data corresponding to a single core (those obtained with  $\nu_z = 2.7$  or 3.7 Hz) from also lying above the theoretical curve.

While the perturbation strength has an important influence on the predicted lifetimes, its duration seems to be of little importance [Fig. 1(c)]. The main effect of stronger perturbations is to shift the predicted curve toward shorter times. The best agreement with the experiment is found for the 4% quadrupolar perturbation (curve 1). However, the predicted lifetimes are somewhat longer than the experimental ones. Note that the experimental results do not include the 12 ms spent in the inversion of the axial magnetic field  $B_z$  (the vortex imprinting). Since the vortex already forms as  $B_z = 0$  [11], from this process (the preparation time) one reasonably can expect a contribution of about 5–6 ms. Figure 2 shows the corresponding theoretical curve (from which we have subtracted a conservative amount of 6 ms to account for the preparation time) along with the experimental data of the MIT experiment. The good agreement demonstrates that the decay is driven mainly by a dynamical instability.

During the vortex preparation, as  $B_z$  vanishes, all three  $F = 1$  components appear in the trap. Thus, for a short interval around the instant of preparation, the spinorial character of the multicomponent Bose-Einstein condensate cannot be neglected [11]. The weak-field seeking state becomes necessarily perturbed by the other components. In the presence of gravitational interaction (perpendicular

to the  $z$  axis in the experimental setup), each component is shifted from the  $z$  axis by a different amount [12]. This introduces an effective nonaxially symmetric perturbation on the dynamical evolution of the weak-field seeking component via the corresponding interaction terms. It seems reasonable to think that the quadrupolar component of this complex effective perturbation might be responsible for the vortex decay.

The theoretical curve in Fig. 2 displays a clear minimum about  $an_{z=0} \approx 1.5$ . It is instructive to put this minimum in relation to the excitation spectrum of the unstable (imaginary frequency) modes [see curve 4 in Fig. 1(c)] [5,8]. For small condensates with  $an_{z=0} < 1.5$ , all of the  $z$  axis lies within the first instability region. For such condensates, only a limited subset of the unstable modes associated with that instability region become accessible. The smaller the condensate, the smaller the maximum unstable frequency, and, consequently, the longer the observed decay time. For condensates with  $an_{z=0} \geq 1.5$ , all of the unstable frequencies become accessible. In such condensates, as the number of particles increases, the first instability region (corresponding to those values along the  $z$  axis where  $an_z < 3$ ) moves progressively away from the central slice, towards the edges of the condensate, occupying symmetric positions around  $z = 0$ . As a consequence, the splitting of the vortex core has to propagate from those regions where it is initiated to the central slice before it can be detected. This nonlocal process is responsible for the monotonic increase in the lifetimes for  $an_{z=0} \gtrsim 3$  and explains the minimum predicted about  $an_{z=0} \approx 1.5$ . According to a local density picture, in principle, one also would expect a second minimum about  $an_{z=0} \approx 13.75$ . Even though no such minimum occurs, a clear change in the slope of the predicted curve can be identified as  $an_{z=0}$  enters the second instability region, indicating a different physical behavior.

In Fig. 3, we have calculated the density along the  $z$  axis of every condensate (characterized by the different  $an_{z=0}$ ), at the same instant of time ( $t = 15$  ms). This axial density has been renormalized in each  $z$  plane in such a way that the maximum density in that plane is 1. Thus, for a given  $an_{z=0}$ , dark zones in the plot density indicate those regions along the condensate axis where the vortex splitting has already begun. As is evident from Fig. 3, when considered as a local process, the splitting takes place approximately

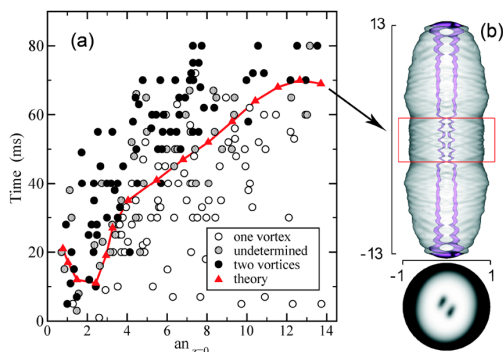


FIG. 2 (color online). (a) Predicted splitting times as a function of  $an_{z=0}$  for a 4% quadrupolar perturbation acting during 0.3 ms. (b) Density isosurface of a condensate with  $an_{z=0} = 13.75$  at  $t = 75$  ms. The corresponding axial absorption image of the central slice (rectangle in the figure) is also shown. Lengths are in units of  $a_z = 6.05 \mu\text{m}$ .

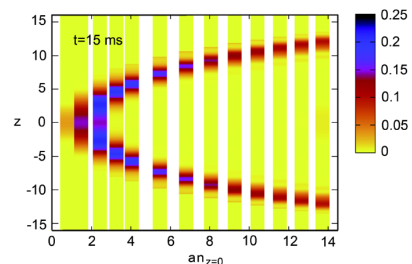


FIG. 3 (color online). Density along the  $z$  axis as a function of  $an_{z=0}$  at  $t = 15$  ms. Lengths are in units of  $a_z = 6.05 \mu\text{m}$ .



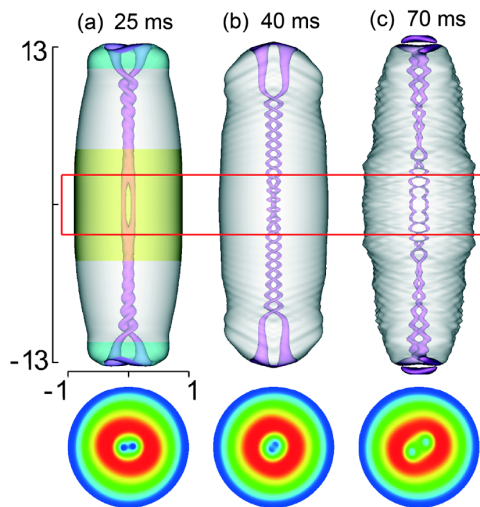


FIG. 4 (color online). Evolution in time of the splitting process of a condensate with  $an_{z=0} = 13.75$ . The shaded zones in (a) indicate the instability regions. The corresponding axial absorption images of the central slice (rectangle in the figure) are also shown. Lengths are in units of  $a_z = 6.05 \mu\text{m}$ .

at the same time (on a time scale of the order of 15 ms) in every condensate, regardless of its size. In all cases, the process starts precisely at the predicted instability regions. Figure 3 also shows that for small condensates with  $an_{z=0} < 3$  the splitting occurs almost simultaneously along the entire  $z$  axis, which is a consequence of the fact that in such condensates the entire  $z$  axis lies within the first instability region. As a result, the initial vortex decays into a pair of nearly straight unit-charge vortices. Note that, for  $an_{z=0} < 1.5$ , the splitting takes somewhat longer times, as expected. As the condensate size increases, the vortex splitting becomes a localized phenomenon that propagates along the  $z$  axis, producing in this case a pair of intertwining singly quantized vortices [8], which is a consequence of the dephase in time between different  $z$  planes. For  $an_{z=0} > 12$ , a new instability region appears at the center of the condensate, and the vortex splitting is initiated first at the edges of the condensate and a few milliseconds later at the central slice (a consequence of the smaller value of the corresponding maximum unstable frequency).

Figure 4 shows the evolution in time of the splitting process for a condensate with  $an_{z=0} = 13.75$ . The first and second instability regions correspond to the shaded zones in Fig. 4(a). This figure clearly shows that, at  $t = 25$  ms, the splitting process has already begun in both the edges and the center of the condensate. However, the two vortex cores overlap [Fig. 4(b)] and, thus, cannot be experimentally resolved until much longer times. At  $t \approx 70$  ms [Fig. 4(c)], the vortex cores begin to disentangle in such a way that they can be unambiguously resolved at  $t = 75$  ms [Fig. 2(b)]. Thus, despite appearances, no contradiction exists with the local density picture. No decrease is observed in the decay times due to the fact that the time

required to resolve the two vortex cores is much longer than that it takes for the instability originating at the edges of the condensate to reach the central slice.

In conclusion, we have analyzed the experiment by Shin *et al.* [9] on the decay of a doubly quantized vortex imprinted in  $^{23}\text{Na}$  condensates, by solving numerically the 3D Gross-Pitaevskii equation. Our results, which are in very good quantitative agreement with the experiment, demonstrate that the vortex decay is driven mainly by a dynamical instability and allow a better understanding of the splitting process. Despite apparent contradictions, the local density approach is consistent with the experimental results. The monotonic increase observed in the vortex lifetimes is a consequence of the fact that, for large condensates, the measured lifetimes incorporate the time it takes for the initial perturbation to reach the central slice. When considered locally, the splitting occurs approximately at the same time in every condensate, regardless of its size.

This work has been supported by MEC (Spain) and the FEDER fund (EU) (Contract No. Fis2005-02886).

*Note added.*—After this work was finished, we learned about a very recent preprint [13] in which the same experiment is analyzed.

*Note added in proof.*—A final version of the above preprint has been published in Ref. [14].

\*Electronic address: ammateo@ull.es

†Electronic address: vdelgado@ull.es

- [1] For a review, see A. L. Fetter and A. A. Svidzinsky, *J. Phys. Condens. Matter* **13**, R135 (2001), and references therein.
- [2] A. A. Svidzinsky and A. L. Fetter, *Phys. Rev. A* **58**, 3168 (1998); J. J. García-Ripoll and V. M. Pérez-García, *Phys. Rev. A* **60**, 4864 (1999).
- [3] M. R. Matthews *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **83**, 2498 (1999); K. W. Madison *et al.*, *ibid.* **84**, 806 (2000); J. R. Abo-Shaer *et al.*, *Science* **292**, 476 (2001); E. Hodby *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 010405 (2001).
- [4] D. S. Rokhsar, *Phys. Rev. Lett.* **79**, 2164 (1997).
- [5] H. Pu, C. K. Law, J. H. Eberly, and N. P. Bigelow, *Phys. Rev. A* **59**, 1533 (1999).
- [6] A. E. Leanhardt, A. Görlitz, A. P. Chikkatur, D. Kielpinski, Y. Shin, D. E. Pritchard, and W. Ketterle, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 190403 (2002).
- [7] M. Nakahara, T. Isoshima, K. Machida, S.-i. Ogawa, and T. Ohmi, *Physica (Amsterdam)* **284B**, 17 (2000).
- [8] M. Möttönen, T. Mizushima, T. Isoshima, M. M. Salomaa, and K. Machida, *Phys. Rev. A* **68**, 023611 (2003).
- [9] Y. Shin, M. Saba, M. Vengalattore, T. A. Pasquini, C. Sanner, A. E. Leanhardt, M. Prentiss, D. E. Pritchard, and W. Ketterle, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 160406 (2004).
- [10] K. Gawryluk, M. Brewczyk, and K. Rzążewski, *J. Phys. B* **39**, L225 (2006).
- [11] S. I. Ogawa, M. Möttönen, M. Nakahara, T. Ohmi, and H. Shimada, *Phys. Rev. A* **66**, 013617 (2002).
- [12] Y. Kawaguchi *et al.*, *Phys. Rev. A* **70**, 043605 (2004).
- [13] J. Huhtamäki *et al.*, *quant-ph/0605125*.
- [14] J. Huhtamäki *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 110406 (2006).



**A.2 Extension of the Thomas-Fermi approximation for trapped Bose-Einstein condensates with an arbitrary number of atoms**

A. Muñoz Mateo and V. Delgado,  
Physical Review A **74**, 065602 (2006).

PHYSICAL REVIEW A **74**, 065602 (2006)

## Extension of the Thomas-Fermi approximation for trapped Bose-Einstein condensates with an arbitrary number of atoms

A. Muñoz Mateo\* and V. Delgado†

*Departamento de Física Fundamental II, Universidad de La Laguna, La Laguna, Tenerife, Canary Islands, Spain*

(Received 20 September 2006; published 20 December 2006)

By incorporating the zero-point energy contribution we derive simple and accurate extensions of the usual Thomas-Fermi (TF) expressions for the ground-state properties of trapped Bose-Einstein condensates that remain valid for an arbitrary number of atoms in the mean-field regime. Specifically, we obtain approximate analytical expressions for the ground-state properties of spherical, cigar-shaped, and disk-shaped condensates that reduce to the correct analytical formulas in both the TF and the perturbative regimes, and remain valid and accurate in between these two limiting cases. Mean-field quasi-one-dimensional (quasi-1D) and -2D condensates appear as simple particular cases of our formulation. The validity of our results is corroborated by an independent numerical computation based on the 3D Gross-Pitaevskii equation.

DOI: [10.1103/PhysRevA.74.065602](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.74.065602)

PACS number(s): 03.75.Hh, 05.30.Jp, 31.15.Bs, 32.80.Pj

The experimental realization of Bose-Einstein condensates (BECs) of dilute atomic gases confined in optical and magnetic traps [1–3] has stimulated great activity in the characterization of these quantum systems. Of particular interest are the ground-state properties of trapped BECs with repulsive interatomic interactions [4]. These properties derive from the condensate wave function  $\psi(\mathbf{r})$  which, in the zero-temperature limit, satisfies the stationary Gross-Pitaevskii equation (GPE) [5]

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r}) + gN|\psi|^2\right)\psi = \mu\psi, \quad (1)$$

where  $N$  is the number of atoms,  $g = 4\pi\hbar^2 a/m$  is the interaction strength,  $a$  is the  $s$ -wave scattering length,  $V(\mathbf{r}) = \frac{1}{2}m(\omega_\perp^2 r_\perp^2 + \omega_z^2 z^2)$  is the harmonic potential of the confining trap, and  $\mu$  is the chemical potential.

Only in two limiting cases can Eq. (1) be solved analytically: in the Thomas-Fermi (TF) and perturbative regimes. When  $N$  is sufficiently large that  $\mu \gg \hbar\omega_\perp, \hbar\omega_z$ , one enters the TF regime. In this case the kinetic energy can be neglected in comparison with the interaction energy and the GPE reduces to a simple algebraic equation. Useful analytical expressions can then be obtained for the condensate ground-state properties [4]. In the simple case of a spherical trap characterized by an oscillator length  $a_r = \sqrt{\hbar/m\omega}$ , Eq. (1) leads in the TF limit to

$$\frac{1}{2}m\omega^2 r^2 + gN|\psi(r)|^2 = \mu, \quad 0 \leq r \leq R, \quad (2)$$

where the condensate radius  $R = \sqrt{2\mu/\hbar\omega a_r}$  is determined from the condition  $|\psi(r)|^2 \geq 0$ , and the chemical potential  $\mu = \frac{1}{2}(15Na/a_r)^{2/5}\hbar\omega$  follows from the normalization of  $\psi(r)$ .

In the opposite limit, when  $N$  is small enough that the interaction energy can be treated as a weak perturbation, one enters the (ideal gas) perturbative regime. In this case, to the

lowest order,  $\psi(r)$  is given by the harmonic oscillator ground state  $\psi(r) = (\pi a_r^2)^{-3/4} \exp(-r^2/2a_r^2)$ , and the chemical potential satisfies

$$(3/2)\hbar\omega + g\bar{n} = \mu, \quad (3)$$

where  $\bar{n} = N/(\sqrt{2\pi}a_r)^3$  is the mean atom density. Away from these two limiting cases, in principle, one has to solve the GPE numerically. Very few theoretical works have addressed the question of looking for approximate analytical solutions valid in between the two analytically solvable regimes. The most relevant proposals are based on a variational trial wave function [6], or on the semiclassical limit of the Wigner phase-space distribution function of the condensate [7]. However, the practical usefulness of these approaches turns out to be somewhat limited in comparison with the simple TF approximation.

In this work we address the above question from a different point of view. We start from the usual TF approximation and modify it conveniently to account, in a simple manner, for the zero-point energy contribution. This enables us to derive simple and accurate extensions of the TF expressions that remain valid for an arbitrary number of atoms in the mean-field regime. Specifically, we obtain general analytical expressions for the ground-state properties of spherical, cigar-shaped, and disk-shaped condensates that reduce to the correct analytical formulas in both the TF and the perturbative regimes, and remain valid and accurate in between these two limiting cases.

We begin by considering a BEC in a spherical trap. In principle, we start from the TF relation of Eq. (2). However, since we intend to apply this equation to arbitrarily small condensates, we introduce a lower cutoff radius  $r_0$ , defined through  $\frac{1}{2}m\omega^2 r_0^2 = \frac{3}{2}\hbar\omega$ , in order to be consistent with the fact that the contribution from the harmonic oscillator energy cannot be smaller than the zero-point energy. As for the small volume  $V_0 \sim a_r^3$  corresponding to  $r \leq r_0$ , we do not aspire to get a precise knowledge of the wave function therein. Instead, we content ourselves with an effective condensate density  $\bar{n}_0$  in that region. As we shall see, this is all that is

\*Electronic mail: ammato@ull.es

†Electronic mail: vdelgado@ull.es

## BRIEF REPORTS

 PHYSICAL REVIEW A **74**, 065602 (2006)

needed to obtain very accurate approximate formulas for most of the condensate ground-state properties. Thus we start from the ansatz

$$\frac{1}{2}m\omega^2 r^2 + gN|\psi(r)|^2 = \mu, \quad r_0 < r \leq R, \quad (4a)$$

$$\frac{3}{2}\hbar\omega + g\sqrt{6/\pi\bar{n}_0} = \mu, \quad 0 \leq r \leq r_0, \quad (4b)$$

with  $\psi(r)=0$  for  $r>R$ . A renormalization constant  $\kappa^{-1} \equiv \sqrt{6/\pi}$  has been introduced in Eq. (4b) to guarantee the correct perturbative limit. In this limit  $\mu \rightarrow \frac{3}{2}\hbar\omega$  and  $R \rightarrow r_0 = \sqrt{3}a_r$ . Under these circumstances, only Eq. (4b) contributes significantly to the chemical potential, and in this case  $\bar{n}_0 = N/V_0$ . This corresponds to a uniform spherical condensate, defined in the finite volume  $V_0$ . In order for this uniform density to produce the same chemical potential as the ground state of the harmonic oscillator over the volume of the entire space it is only necessary to renormalize the corresponding interaction strength by multiplying by  $\sqrt{6/\pi}$ . Equations (4) also yield the correct result in the TF regime. This is mainly a consequence of the direct relation existing between the number of particles and the size of a trapped BEC. For large condensates, such that  $\mu \gg \hbar\omega$ , one has  $R \gg r_0$  and, as a result, the relative contribution from Eq. (4b) to the normalization integral that determines  $\mu$  becomes negligible. Since we have renounced an explicit expression for  $\psi(r)$  in  $V_0$ , in this respect, our approach cannot provide more information than the TF approach. Only when  $R \gg r_0$  can we have a sufficiently precise knowledge of the wave function and, in this case, it coincides with the TF wave function.

The chemical potential follows from the normalization of  $\psi(r)$ . After a straightforward calculation one obtains

$$\frac{1}{15}\bar{R}^5 + \frac{\sqrt{3}}{2}(\kappa-1)\bar{R}^2 - \frac{3\sqrt{3}}{2}\left(\kappa - \frac{3}{5}\right) = N\frac{a}{a_r}, \quad (5)$$

where  $\bar{R} = R/a_r$ , and  $\bar{\mu} = \frac{1}{2}\bar{R}^2$  is the chemical potential in units of  $\hbar\omega$ . As Eq. (5) shows, the ground-state properties depend on the sole parameter  $\chi_0 \equiv Na/a_r$ . When  $\chi_0 \gg 1$  (TF limit) the above equation leads to  $\bar{\mu} = \frac{1}{2}(15\chi_0)^{2/5}$ , as expected. The  $\chi_0 \ll 1$  limit corresponds to the perturbative regime and, in this case, one obtains  $\bar{\mu} = 3/2 + \sqrt{2/\pi}\chi_0$ , which is nothing but the perturbative result (3). For arbitrary  $\chi_0$ , in principle one has to solve numerically the above quintic polynomial equation (which has only one physically meaningful real solution). This is a simple task that can be carried out with standard mathematical software packages. We have found, however, a rather accurate approximate solution. It can be shown that the expression

$$\bar{R}^2 = 3 + \left( \frac{1}{(15\chi_0)^{2/5} + \frac{5}{2}} + \frac{1}{\frac{7}{2}\chi_0^{11/15} + 10} + \frac{\sqrt{\pi/2}}{2\chi_0} \right)^{-1} \quad (6)$$

satisfies Eq. (5) with a residual error [8] smaller than 0.7% for any  $\chi_0 \in [0, \infty)$ . Figures 1(a) and 1(b) show, respectively, the predicted chemical potential,  $\bar{\mu} = \frac{1}{2}\bar{R}^2$ , and condensate radius, obtained from Eq. (6) (solid lines), along with the exact

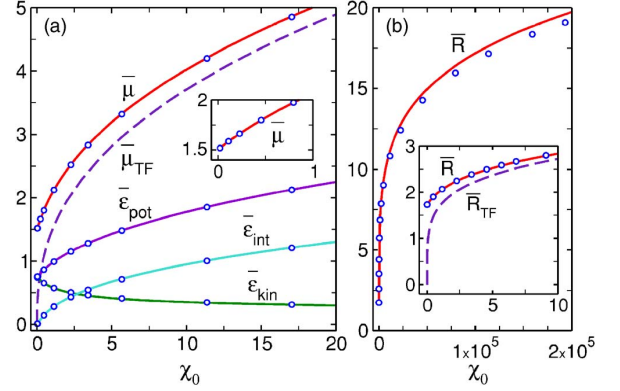


FIG. 1. (Color online) Theoretical prediction for the ground-state properties of spherical condensates (solid lines). The open circles are the exact numerical results. For comparison purposes we have also included the TF prediction (dashed lines).

results obtained from the numerical solution of the three-dimensional (3D) GPE (open circles). For the numerical calculation we have defined the radius through the condition  $|\psi(R)|^2 = 0.05|\psi(0)|^2$ . With this definition, Eq. (6) reproduces the numerical  $R$  with a relative error smaller than 3% for any  $\chi_0$ . Most of the error, however, comes from the region where  $\chi_0 \gg 1$  (TF limit) because in that region  $R \rightarrow R_{TF}$  and it rather satisfies  $|\psi(R)|^2 = 0$ . The accuracy with respect to the numerical  $\bar{\mu}$  is better than 0.5%.

A straightforward calculation yields the mean-field interaction energy per particle,  $\bar{\epsilon}_{\text{int}} \equiv \epsilon_{\text{int}}/\hbar\omega \equiv E_{\text{int}}/N\hbar\omega$ ,

$$\bar{\epsilon}_{\text{int}} = \frac{1}{8\chi_0} \left[ \frac{8}{105}\bar{R}^7 + \sqrt{3}(\kappa-1)\bar{R}^4 - 6\sqrt{3}\left(\kappa - \frac{3}{5}\right)\bar{R}^2 + 9\sqrt{3}\left(\kappa - \frac{3}{7}\right) \right]. \quad (7)$$

For  $\chi_0 \gg 1$ , one recovers the TF result,  $\epsilon_{\text{int}} = (2/7)\mu$ . In the  $\chi_0 \ll 1$  limit, using that  $\bar{R}^2 = 3 + 2\sqrt{2/\pi}\chi_0 - (1/\pi)(1/9 + \sqrt{2/3}\pi)\chi_0^2 + O(\chi_0^3)$  is a perturbative solution of Eq. (5), one obtains  $\epsilon_{\text{int}} = \chi_0\hbar\omega/\sqrt{2\pi} = g\bar{n}/2$ , which again is the correct result. Finally, the kinetic and potential energies can be readily obtained in terms of the previous results by using the exact relations [5]

$$\epsilon_{\text{kin}} \equiv E_{\text{kin}}/N = \mu/2 - (7/4)E_{\text{int}}/N, \quad (8a)$$

$$\epsilon_{\text{pot}} \equiv E_{\text{pot}}/N = \mu/2 - (1/4)E_{\text{int}}/N. \quad (8b)$$

In Fig. 1(a) we show the theoretical prediction for  $\bar{\epsilon}_{\text{int}}$ ,  $\bar{\epsilon}_{\text{kin}}$ , and  $\bar{\epsilon}_{\text{pot}}$ , obtained from Eqs. (6)–(8) (solid lines), along with the exact numerical results (open circles).

Next we consider a BEC confined in a cigar-shaped magnetic trap with oscillator lengths  $a_{\perp} = \sqrt{\hbar/m\omega_{\perp}}$  and  $a_z = \sqrt{\hbar/m\omega_z}$  and an aspect ratio  $\lambda = \omega_z/\omega_{\perp} \ll 2$ . We shall restrict ourselves to the mean-field regime, which requires  $N\lambda a_{\perp}^2/a^2 \gg 1$  [9–11]. As before, we start from the usual TF expression, which we assume to be valid up to a minimum radial distance  $r_{\perp}^0 = \sqrt{2}a_{\perp}$ , determined from the condition that

## BRIEF REPORTS

the contribution from the radial harmonic oscillator energy should not be smaller than  $\hbar\omega_{\perp}$ . This defines an outer region  $V_{+} \equiv \{(r_{\perp}, z): r_{\perp}^2/R^2 + z^2/Z_{\text{TF}}^2 \leq 1 \wedge r_{\perp} > r_{\perp}^0\}$ , which is nothing but the usual TF ellipsoidal density cloud, truncated at  $r_{\perp} = r_{\perp}^0$ . Note that unlike what happens with the condensate radius  $R = \sqrt{2\mu/\hbar\omega_{\perp}}a_{\perp}$ , which remains the same, now the axial condensate half-length  $Z = \sqrt{2(\mu/\hbar\omega_{\perp} - 1)}a_z/\sqrt{\lambda}$  coincides with the TF value  $Z_{\text{TF}}$  only in the limit  $\mu/\hbar\omega_{\perp} \gg 1$ . For large condensates, when  $\mu \gg \hbar\omega_{\perp}$  (TF regime), this is the only region that contributes significantly. On the contrary, in the perturbative regime, as  $\mu \rightarrow \hbar\omega_{\perp}$  most of the contribution comes from the inner cylinder  $V_{-} \equiv \{(r_{\perp}, z): r_{\perp} \leq r_{\perp}^0 \wedge |z| \leq Z\}$ . In this case, if  $a \ll a_{\perp}$ , the transverse dynamics becomes frozen in the radial ground state of the harmonic trap and the condensate wave function can be factorized as  $\psi(r_{\perp}, z) = \varphi(r_{\perp})\phi(z)$ , with  $\varphi(r_{\perp}) = (\pi a_{\perp}^2)^{-1/2} \exp(-r_{\perp}^2/2a_{\perp}^2)$ . This corresponds to a mean-field quasi-1D condensate. Substituting then in Eq. (1) and integrating out the radial dynamics, one finds

$$\hbar\omega_{\perp} + \frac{1}{2}m\omega_z^2 z^2 + g_{\text{1D}}N|\phi(z)|^2 = \mu, \quad (9)$$

where  $g_{\text{1D}} = g/2\pi a_{\perp}^2$  [12], and we have used that  $\mu \sim \hbar\omega_{\perp} \gg \frac{1}{2}\hbar\omega_z$  to neglect the axial kinetic energy. Note that  $g_{\text{1D}}$  can be conveniently rewritten as  $g\bar{n}_2$  with  $\bar{n}_2 = 1/\pi(r_{\perp}^0)^2$ , indicating that one can account for the contribution from the radial ground state by using a uniform mean density per unit area normalized to unity in  $V_{-}$ . Guided by these simple ideas, we then propose the following ansatz:

$$\frac{1}{2}m\omega_{\perp}^2 r_{\perp}^2 + \frac{1}{2}m\omega_z^2 z^2 + gN|\psi(r_{\perp}, z)|^2 = \mu, \quad \mathbf{r} \in V_{+},$$

$$\hbar\omega_{\perp} + \frac{1}{2}m\omega_z^2 z^2 + gN\bar{n}_2|\phi(z)|^2 = \mu, \quad \mathbf{r} \in V_{-},$$

with  $\psi=0$  elsewhere. The normalization of  $\psi$  leads to

$$\frac{1}{15}(\sqrt{\lambda}\bar{Z})^5 + \frac{1}{3}(\sqrt{\lambda}\bar{Z})^3 = N\lambda \frac{a}{a_{\perp}}, \quad (10)$$

where  $\bar{Z} \equiv Z/a_z$  and  $\bar{R} \equiv R/a_{\perp}$ . The chemical potential  $\bar{\mu} \equiv \mu/\hbar\omega_{\perp}$  is given by  $\bar{\mu} = 1 + \frac{1}{2}(\sqrt{\lambda}\bar{Z})^2$ . Now the relevant parameter determining the ground-state properties is  $\chi_1 \equiv N\lambda a/a_{\perp}$ . When  $\chi_1 \gg 1$  (TF regime), Eq. (10) leads to  $\bar{\mu} = \frac{1}{2}(15\chi_1)^{2/5}$  and  $\bar{Z} = \lambda^{-1/2}(15\chi_1)^{1/5}$ . When  $\chi_1 \ll 1$  (mean-field quasi-1D regime), one obtains  $\bar{\mu} = 1 + \frac{1}{2}(3\chi_1)^{2/3}$  and  $\bar{Z} = \lambda^{-1/2}(3\chi_1)^{1/3}$ , in agreement with previous results [10,11]. In general, for arbitrary  $\chi_1$ , an approximate solution satisfying Eq. (10) with a residual error less than 0.75% for any  $\chi_1 \in [0, \infty)$  is given by

$$\sqrt{\lambda}\bar{Z} = \left( \frac{1}{(15\chi_1)^{4/5} + \frac{1}{3}} + \frac{1}{57\chi_1 + 345} + \frac{1}{(3\chi_1)^{4/3}} \right)^{-1/4}. \quad (11)$$

The mean-field interaction energy  $\bar{\epsilon}_{\text{int}} \equiv \epsilon_{\text{int}}/\hbar\omega_{\perp}$  is

## PHYSICAL REVIEW A 74, 065602 (2006)

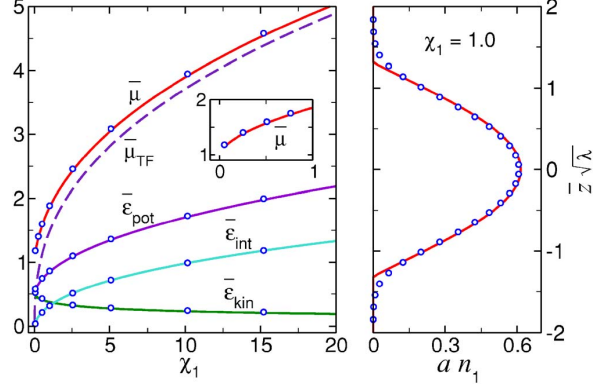


FIG. 2. (Color online) Theoretical prediction for the ground-state properties of arbitrary cigar-shaped condensates with  $\lambda \ll 2$  (solid lines). The open circles are exact numerical results obtained with  $\lambda=0.2$ . The dashed line is the TF prediction.

$$\bar{\epsilon}_{\text{int}} = \frac{1}{15\chi_1} \left( (\sqrt{\lambda}\bar{Z})^5 + \frac{1}{7}(\sqrt{\lambda}\bar{Z})^7 \right). \quad (12)$$

For  $\chi_1 \gg 1$ , Eq. (12) reduces to  $\bar{\epsilon}_{\text{int}} = (2/7)\mu$ , while for  $\chi_1 \ll 1$ , it leads to  $\bar{\epsilon}_{\text{int}} = (2/5)(\mu - \hbar\omega_{\perp})$ , which again are the correct analytical limits. As for the condensate density per unit length,  $n_1(z) \equiv N \int 2\pi r_{\perp} dr_{\perp} |\psi(r_{\perp}, z)|^2$ , after a straightforward calculation one finds

$$n_1(z) = \frac{(\sqrt{\lambda}\bar{Z})^2}{4a} \left( 1 - \frac{z^2}{\bar{Z}^2} \right) + \frac{(\sqrt{\lambda}\bar{Z})^4}{16a} \left( 1 - \frac{z^2}{\bar{Z}^2} \right)^2. \quad (13)$$

The first term is the contribution from  $V_{-}$  and thus it is the only one that contributes significantly in the  $\chi_1 \ll 1$  limit. On the contrary, the second term, which is the contribution from  $V_{+}$ , gives the dominant contribution in the  $\chi_1 \gg 1$  limit, in good agreement with previous results [11].

Figure 2 shows the theoretical predictions for the ground-state properties of arbitrary cigar-shaped condensates with  $\lambda \ll 2$ , obtained from Eqs. (8) and (11)–(13) (solid lines), along with exact numerical results (open circles).

Finally, we consider a BEC in a disk-shaped trap with  $\lambda \gg 2$  and  $a_z \gg a$ . In this case, in the mean-field perturbative regime, which occurs when  $\chi_2 \equiv Na/\lambda^2 a_z \ll 1$ , the system reduces to a quasi-2D condensate satisfying

$$\frac{1}{2}\hbar\omega_z + \frac{1}{2}m\omega_{\perp}^2 r_{\perp}^2 + g_{\text{2D}}N|\varphi(r_{\perp})|^2 = \mu, \quad (14)$$

with  $g_{\text{2D}} = g/\sqrt{2\pi}a_z$  [13]. We then rewrite  $g_{\text{2D}}$  as  $g\kappa_2^{-1}\bar{n}_1$ , where  $\bar{n}_1 = 1/2a_z$  is a uniform mean density per unit length and  $\kappa_2^{-1} \equiv \sqrt{2/\pi}$  is the appropriate renormalization factor, and propose the following ansatz:

$$\frac{1}{2}m\omega_z^2 z^2 + \frac{1}{2}m\omega_{\perp}^2 r_{\perp}^2 + gN|\psi(r_{\perp}, z)|^2 = \mu, \quad \mathbf{r} \in V_{+},$$

BRIEF REPORTS

 PHYSICAL REVIEW A **74**, 065602 (2006)

$$\frac{1}{2} \hbar \omega_z + \frac{1}{2} m \omega_\perp^2 r_\perp^2 + g \kappa_2^{-1} N \bar{n}_1 |\varphi(r_\perp)|^2 = \mu, \quad \mathbf{r} \in V_-, \quad (15)$$

with  $\psi=0$  elsewhere. In the above equations,  $V_+ \equiv \{(r_\perp, z) : r_\perp^2/R_{\text{TF}}^2 + z^2/Z^2 \leq 1 \wedge |z| > z_0\}$  and  $V_- \equiv \{(r_\perp, z) : r_\perp \leq R \wedge |z| \leq z_0\}$ , where  $z_0 = a_z$ ,  $R_{\text{TF}} = \sqrt{2\mu/\hbar\omega_z} \sqrt{\lambda} a_\perp$ ,  $R = \sqrt{2(\mu/\hbar\omega_z - 1/2)} \sqrt{\lambda} a_\perp$ , and  $Z = \sqrt{2\mu/\hbar\omega_z} a_z$ . More precisely, one expects  $\kappa_2^{-1} \rightarrow \sqrt{2/\pi}$  in the perturbative regime ( $\chi_2 \ll 1$ ), while  $\kappa_2^{-1} \rightarrow 1$  in the TF regime ( $\chi_2 \gg 1$ ). The final results are not very sensitive to the specific functional form of  $\kappa_2^{-1}$ . We thus propose one of the simplest possibilities:

$$\kappa_2^{-1}(\chi_2) \equiv \sqrt{2/\pi} + \Theta(\chi_2 - 0.1) \times \left(1 - \sqrt{2/\pi}\right) \left(1 - \frac{R_{\text{TF}}(\chi_2 = 0.1)}{R_{\text{TF}}(\chi_2)}\right), \quad (16)$$

where  $\Theta(x)$  is the Heaviside function and  $R_{\text{TF}}(\chi_2) = (15\chi_2)^{1/5} a_\perp$  is the TF radius. The normalization of  $\psi$  yields

$$\frac{1}{15} \bar{Z}^5 + \frac{1}{8} (\kappa_2 - 1) \frac{\bar{R}^4}{\lambda^2} - \frac{\bar{R}^2}{6\lambda} - \frac{1}{15} = \frac{Na}{\lambda^2 a_z}, \quad (17)$$

where  $\bar{Z} = Z/a_z$ ,  $\bar{R} = R/a_\perp$ , and  $\bar{Z}^2 - \bar{R}^2/\lambda = 1$ . The chemical potential is  $\bar{\mu} \equiv \mu/\hbar\omega_z = \frac{1}{2}(1 + \bar{R}^2/\lambda)$ .

For  $\chi_2 \gg 1$  Eq. (17) leads to the usual TF results, while for  $\chi_2 \ll 1$  (mean-field quasi-2D regime), one obtains  $\bar{\mu} = 1/2 + (2\sqrt{2/\pi}\chi_2)^{1/2}$  and  $\bar{R} = \lambda^{1/2}(8\sqrt{2/\pi}\chi_2)^{1/4}$ . An approximate solution that satisfies Eq. (17) with a residual error less than 0.95% for any  $\chi_2 \in [0, \infty)$  is given by

$$\bar{R}_\lambda \equiv \bar{R}/\sqrt{\lambda} = [(1/15\chi_2)^{8/5} + (\kappa_2/8\chi_2)^2]^{-1/8}. \quad (18)$$

After some calculation one finds the following expressions for the mean-field interaction energy  $\bar{\epsilon}_{\text{int}} \equiv \epsilon_{\text{int}}/\hbar\omega_z$  and the condensate density per unit area  $n_2(r_\perp)$ :

$$\bar{\epsilon}_{\text{int}} = \frac{1}{8\chi_2} \left( \frac{8\bar{Z}^7}{105} + \xi \frac{\bar{R}_\lambda^6}{6} - \frac{\bar{R}_\lambda^4}{3} - \frac{4\bar{R}_\lambda^2}{15} - \frac{8}{105} \right), \quad (19)$$

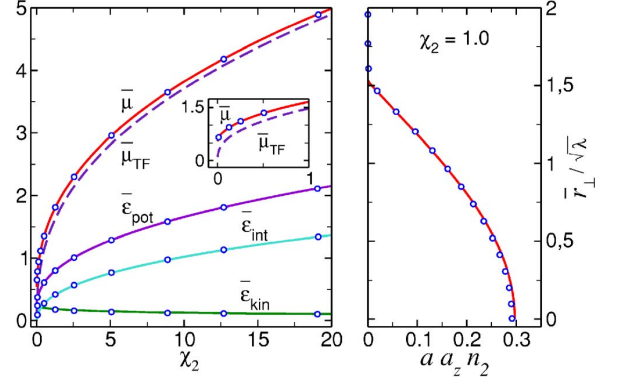


FIG. 3. (Color online) Theoretical prediction for the ground-state properties of arbitrary disk-shaped condensates with  $\lambda \gg 2$  (solid lines). The open circles are exact numerical results obtained with  $\lambda=20$ . The dashed line is the TF prediction.

$$n_2(r_\perp) = \frac{\xi[2\bar{\mu}_z(r_\perp) - 1]}{4\pi a a_z} + \frac{[2\bar{\mu}_z(r_\perp)]^{3/2} - 1}{6\pi a a_z}, \quad (20)$$

where  $\xi \equiv (\kappa_2 - 1)$  and  $2\bar{\mu}_z(r_\perp) \equiv 1 + \bar{R}_\lambda^2(1 - r_\perp^2/R^2)$ .

In Fig. 3 we show the ground-state properties of arbitrary disk-shaped condensates with  $\lambda \gg 2$ , obtained from our analytical formulas [Eqs. (8) and (18)–(20)] (solid lines), along with exact numerical results (open circles).

In conclusion, modifying the usual TF approximation conveniently to account for the zero-point energy contribution, we have derived general analytical expressions for the ground-state properties of spherical, cigar-shaped, and disk-shaped condensates that reduce to the correct analytical formulas in both the TF and the mean-field perturbative regimes and remain valid and accurate in between these two limiting cases. Mean-field quasi-1D and -2D condensates appear as simple particular cases of our formulation.

This work has been supported by MEC (Spain) and FEDER fund (EU) (Contract No. Fis2005-02886).

- [1] M. H. Anderson *et al.*, *Science* **269**, 198 (1995).  
 [2] K. B. Davis *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 3969 (1995).  
 [3] C. C. Bradley *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 985 (1997).  
 [4] G. Baym and C. J. Pethick, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 6 (1996).  
 [5] For a review see, for example F. Dalfovo, S. Giorgini, L. P. Pitaevskii, and S. Stringari, *Rev. Mod. Phys.* **71**, 463 (1999).  
 [6] A. L. Fetter, *J. Low Temp. Phys.* **106**, 643 (1997).  
 [7] P. Schuck and X. Viñas, *Phys. Rev. A* **61**, 043603 (2000).

- [8] Given  $P(R)=\chi$ , we define the residual error associated with the approximate solution  $R_\epsilon$  as  $[P(R_\epsilon)-\chi]/\chi$ .  
 [9] D. S. Petrov *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 3745 (2000).  
 [10] V. Dunjko, V. Lorent, and M. Olshanii, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 5413 (2001).  
 [11] C. Menotti and S. Stringari, *Phys. Rev. A* **66**, 043610 (2002).  
 [12] M. Olshanii, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 938 (1998).  
 [13] D. S. Petrov *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 2551 (2000).

### **A.3 Ground-state properties of trapped Bose-Einstein condensates: Extension of the Thomas-Fermi approximation**

A. Muñoz Mateo and V. Delgado,  
Physical Review A **75**, 063610 (2007).



PHYSICAL REVIEW A **75**, 063610 (2007)

## Ground-state properties of trapped Bose-Einstein condensates: Extension of the Thomas-Fermi approximation

A. Muñoz Mateo\* and V. Delgado†

*Departamento de Física Fundamental II, Universidad de La Laguna, La Laguna, Tenerife, Spain*

(Received 30 January 2007; published 11 June 2007)

We derive general approximate formulas that provide with remarkable accuracy the ground-state properties of any mean-field scalar Bose-Einstein condensate with short-range repulsive interatomic interactions, confined in arbitrary cylindrically symmetric harmonic traps. Our formulation is even applicable for condensates containing a multiply quantized axisymmetric vortex. We have checked the validity of our formulas by numerically solving the three-dimensional Gross-Pitaevskii equation.

DOI: [10.1103/PhysRevA.75.063610](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.75.063610)

PACS number(s): 03.75.Hh, 05.30.Jp, 32.80.Pj

### I. INTRODUCTION

Since the experimental realization of the first dilute Bose-Einstein condensates (BECs) of trapped atomic gases [1–3] there has been great interest in the study of the physical properties of ultracold quantum gases [4]. Under the usual experimental conditions, these systems can be accurately described by the Gross-Pitaevskii equation (GPE) [5], a mean-field equation of motion governing the behavior of the condensate wave function  $\psi(\mathbf{r})$ . In the stationary case the GPE is given by the nonlinear Schrödinger equation

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r}) + gN|\psi|^2\right)\psi = \mu\psi, \quad (1)$$

where  $\mu$  is the chemical potential,  $N$  is the number of atoms,  $g=4\pi\hbar^2 a/m$  is the interaction strength, determined by the  $s$ -wave scattering length  $a$ , and  $V(\mathbf{r})$  is the trap potential.

In this work we shall concentrate in the usual case of condensates with repulsive interatomic interactions ( $a>0$ ), confined in cylindrically symmetric harmonic traps,  $V(\mathbf{r}) = \frac{1}{2}m(\omega_\perp^2 r_\perp^2 + \omega_z^2 z^2)$ . To obtain the condensate ground-state properties one has to solve the nonlinear differential equation (1). No explicit analytical solutions are known, so that, in general, this has to be done numerically. However, solving numerically the three-dimensional (3D) GPE is a nontrivial computational task, especially for highly asymmetric trap geometries, where large basis or gridpoint sets can be required to guarantee convergence. Fortunately, approximate analytical solutions can be found in certain limiting cases. In the Thomas-Fermi (TF) regime, which essentially occurs for condensates with a large number of atoms, the kinetic energy can be neglected to a good approximation. In this case the GPE reduces to a simple algebraic equation and one can obtain explicit analytical expressions for the condensate ground-state properties [6]. This approximation, however, cannot reproduce correctly the decay of the wave function at the boundary of the atomic cloud, a region where the kinetic energy has a decisive influence. Corrections to the TF approximation have been proposed to account for the proper

behavior of the density cloud at the condensate surface [7–9]. In the (ideal gas) perturbative regime, when the number of atoms in the condensate is sufficiently small, explicit analytical expressions can also be obtained by treating the interaction energy term in Eq. (1) as a weak perturbation.

Another approximation scheme that has proved to be useful in the characterization of dilute BECs is that based on variational techniques [6]. This approximation method has the additional interest that it can be equally applied to the study of the condensate dynamics [10,11]. By using appropriate variational trial wave functions, the ground-state properties of trapped Bose-condensed gases have been studied beyond the two analytically solvable regimes, for both isotropic [12] and highly anisotropic condensates [13]. For this purpose semiclassical approximations ( $\hbar \rightarrow 0$ ) have also been considered [14,15]. These approximate methods can be applied to the study of vortex states as well [16–18].

Particular attention has been devoted to the physical properties of quasi-1D [19–23] and quasi-2D [24,25] condensates, systems so tightly confined in the radial or the axial dimension, respectively, that the corresponding dynamics is restricted to zero-point oscillations. In a previous work, by modifying the usual TF approximation conveniently, we derived very accurate approximate analytical expressions for the ground-state properties of trapped spherical, cigar-shaped, and disk-shaped condensates with an arbitrary number of atoms in the mean-field regime [26]. In this work we extend our previous results and derive general approximate formulas that provide with remarkable accuracy the ground-state properties of any mean-field scalar Bose-Einstein condensate with short-range repulsive interatomic interactions, confined in arbitrary cylindrically symmetric harmonic traps, and even containing a multiply quantized axisymmetric vortex.

### II. MODEL

We consider a BEC with an axisymmetric vortex line of topological charge  $q$ , and confined in a harmonic trap characterized by oscillator lengths  $a_\perp = \sqrt{\hbar/m\omega_\perp}$  and  $a_z = \sqrt{\hbar/m\omega_z}$ . The trap aspect ratio is given by  $\lambda = \omega_z/\omega_\perp$ . In this work we shall distinguish between ground and vortex states only through the value of the vortex charge. Accord-

\*Electronic address: [ammateo@ull.es](mailto:ammateo@ull.es)

†Electronic address: [vdelgado@ull.es](mailto:vdelgado@ull.es)

A. MUÑOZ MATEO AND V. DELGADO

PHYSICAL REVIEW A **75**, 063610 (2007)

ingly, we shall refer to the lowest-energy state of the condensate compatible with an axisymmetric vortex of charge  $q$  as the ground state with a charge- $q$  vortex. This terminology will permit us to make a unified treatment in which the actual ground state of the condensate is simply a particular case corresponding to  $q=0$ .

For condensates with a sufficiently small number of atoms the mean-field interaction energy can be treated as a weak perturbation. In this perturbative regime the condensate wave function that minimizes the energy functional is given, to the lowest order, by

$$\psi_q(r_\perp, z, \theta) = \exp(iq\theta) \varphi_q(r_\perp) \phi(z), \quad (2)$$

with

$$\varphi_q(r_\perp) = (\pi a_\perp^2 |q|!)^{-1/2} (r_\perp / a_\perp)^{|q|} \exp(-r_\perp^2 / 2a_\perp^2), \quad (3)$$

$$\phi(z) = (\pi a_z^2)^{-1/4} \exp(-z^2 / 2a_z^2). \quad (4)$$

Using this result one obtains the following analytical expression for the chemical potential:

$$\mu = \frac{1}{2} \hbar \omega_z + (|q| + 1) \hbar \omega_\perp + g \bar{n}, \quad (5)$$

where  $\bar{n} = c_q N / (2\pi)^{3/2} a_\perp^2 a_z$  is the mean atom density and the coefficient  $c_q$  is a function of the vortex charge that takes values in the interval  $[1, 0)$  and accounts for the dilution effect that the centrifugal force associated with the vortex has on the condensate mean density

$$c_q = \frac{(2|q|)!}{2^{2|q|} (|q|!)^2}. \quad (6)$$

For  $q=0$  one has  $c_q=1$ , and the usual results for the ground-state properties of a BEC in the perturbative regime are recovered. For a unit charge vortex the dilution coefficient takes the value  $1/2$ , and, in general, for  $|q| \gg 1$ , it decreases slowly as  $1/\sqrt{\pi|q|}$ .

In the Thomas-Fermi regime, for condensates in the ground state ( $q=0$ ) and with a sufficiently large number of atoms, one can neglect the kinetic energy in comparison with the interaction energy, and the stationary GPE leads to

$$\mu = \frac{1}{2} m \omega_z^2 z^2 + \frac{1}{2} m \omega_\perp^2 r_\perp^2 + g N |\psi(r_\perp, z)|^2. \quad (7)$$

In the presence of a vortex of charge  $q \neq 0$  the above equation is no longer a good approximation. In this case neglecting the kinetic energy amounts to neglecting the vortex itself. However, for a large  $N$ , the condensate density cloud outside the vortex core is still given, to a very good approximation, by the Thomas-Fermi profile. We thus shall assume the above TF expression to be valid up to a lower cutoff radius

$$r_\perp^0 = \sqrt{2(|q| + 1)} a_\perp, \quad (8)$$

determined from the condition that, in the presence of a vortex, the contribution from the radial harmonic oscillator energy cannot be smaller than  $(|q| + 1) \hbar \omega_\perp$ , i.e.,

$$\frac{1}{2} m \omega_\perp^2 (r_\perp^0)^2 = (|q| + 1) \hbar \omega_\perp. \quad (9)$$

Likewise, the contribution from the axial harmonic oscillator energy should not be smaller than the corresponding zero-point energy. To account for this fact we introduce a second cutoff  $z_0$ , defined through the condition

$$\frac{1}{2} m \omega_z^2 z_0^2 = \frac{1}{2} \hbar \omega_z, \quad (10)$$

which yields the axial cutoff

$$z_0 = a_z. \quad (11)$$

This leads us to consider the TF expression (7) applicable in a volume  $V_3$  that corresponds to the usual TF ellipsoidal density cloud truncated at both  $r_\perp = r_\perp^0$  and  $|z| = z_0$ ,

$$V_3 \equiv \{(r_\perp, z) : r_\perp^2 / R_{\text{TF}}^2 + z^2 / Z_{\text{TF}}^2 \leq 1, r_\perp > r_\perp^0 \wedge |z| > z_0\}. \quad (12)$$

In the above equation  $R_{\text{TF}} \equiv \sqrt{2\mu / \hbar \omega_\perp} a_\perp$  and  $Z_{\text{TF}} \equiv \sqrt{2\mu / \hbar \omega_z} a_z$  are the usual TF values for the condensate radius and axial half-length, respectively. In our approach, however, the condensate radius and axial half-length do not coincide with the above TF expressions. Because of the cutoffs we have introduced they are given instead by

$$R = \sqrt{2\mu / \hbar \omega_\perp - \lambda} a_\perp, \quad (13)$$

$$Z = \sqrt{2\mu / \hbar \omega_z - 2(|q| + 1) / \lambda} a_z. \quad (14)$$

However, when  $\mu \gg (|q| + 1) \hbar \omega_\perp$ , then  $Z$  becomes indistinguishable from  $Z_{\text{TF}}$ . This is true, in particular, whenever  $\lambda \gg 2(|q| + 1)$ . Likewise, if  $\mu \gg \frac{1}{2} \hbar \omega_z$ , then  $R \rightarrow R_{\text{TF}}$ .

More generally, for condensates with  $\mu \gg (|q| + 1) \hbar \omega_\perp$ , which occurs whenever  $\lambda \gg 2(|q| + 1)$ , the relative contribution to the condensate properties coming from the region  $r_\perp \leq r_\perp^0$  becomes negligible. The same occurs with the relative contribution from the region corresponding to  $|z| \leq z_0$  when the chemical potential is much larger than the axial zero-point energy, which occurs whenever  $\lambda \leq 1$ . It is then clear that when the number of atoms is sufficiently large that  $\mu \gg (|q| + 1) \hbar \omega_\perp + \frac{1}{2} \hbar \omega_z$  the dominant contribution comes from the  $V_3$  volume introduced above.

Only for condensates with  $\mu \approx (|q| + 1) \hbar \omega_\perp$  is the contribution from the region  $r_\perp \leq r_\perp^0$  the most significant one. These are condensates with the transverse dynamics frozen in the lowest energy state compatible with a charge- $q$  axisymmetric vortex. In this case the condensate wave function can be factorized as  $\psi_q(r_\perp, z, \theta) = \exp(iq\theta) \varphi_q(r_\perp) \phi(z)$ , with  $\varphi_q(r_\perp)$  given by Eq. (3). After substituting this wave function in the stationary GPE, multiplying by  $\psi_q^*$  and integrating over the radial dynamics, one obtains

$$\frac{1}{2} m \omega_z^2 z^2 + (|q| + 1) \hbar \omega_\perp + g_{1D} N |\phi(z)|^2 = \mu, \quad (15)$$

where  $g_{1D} = c_q g / 2\pi a_\perp^2$ , and we have neglected the axial kinetic energy ( $\sim \frac{1}{2} \hbar \omega_z$ ) against  $(|q| + 1) \hbar \omega_\perp$ . It is convenient to rewrite  $g_{1D}$  as  $g \kappa_1^{-1} \bar{n}_2$ , where  $\bar{n}_2 = 1 / \pi (r_\perp^0)^2 = 1 / [2\pi a_\perp^2 (|q|$



GROUND-STATE PROPERTIES OF TRAPPED BOSE-...

 PHYSICAL REVIEW A **75**, 063610 (2007)

+1)] is a uniform mean density per unit area normalized to unity in the region  $r_{\perp} \leq r_{\perp}^0$ , and

$$\kappa_1^{-1} \equiv (|q| + 1)c_q \quad (16)$$

is the appropriate renormalization factor. The important point is that the effect of the vortex can be incorporated in an exact manner into a localized uniform mean density  $\bar{n}_2$  with a renormalized interaction strength  $g\kappa_1^{-1}$ . We shall assume that, to a good approximation, this still remains true for condensates with an arbitrary chemical potential.

On the other hand, the contribution from the region  $|z| \leq z_0$  is the most significant one only for condensates with  $\mu \approx \frac{1}{2}\hbar\omega_z$ . In this case the axial dynamics is restricted to zero-point oscillations, and the wave function of such quasi-2D condensates can be written as  $\psi_q(r_{\perp}, z, \theta) = \exp(iq\theta)\varphi(r_{\perp})\phi(z)$ , where now  $\phi(z)$  is given by Eq. (4). Substituting into the stationary GPE and integrating out the axial dynamics one obtains

$$\frac{1}{2}\hbar\omega_z + \frac{1}{2}m\omega_{\perp}^2 r_{\perp}^2 + g_{2D}N|\varphi(r_{\perp})|^2 = \mu, \quad (17)$$

where  $g_{2D} = g/\sqrt{2\pi}a_z$ , and now we have neglected the radial kinetic energy against the axial zero-point energy, which is a good approximation as long as  $\mu \approx \frac{1}{2}\hbar\omega_z$ . As before, it is convenient to rewrite  $g_{2D}$  in terms of a uniform mean density per unit length normalized to unity in the volume  $|z| \leq z_0$ . To this end we introduce a renormalization factor  $\kappa_2^{-1} \equiv \sqrt{2/\pi}$  and rewrite  $g_{2D}$  as  $g\kappa_2^{-1}\bar{n}_1$  with  $\bar{n}_1 = 1/2a_z$ . This indicates that the contribution from the axial zero-point oscillations, which is the dominant contribution in these quasi-2D condensates, can be properly accounted for by simply introducing a localized uniform mean density per unit length with a renormalized interaction strength. Again, we shall assume this to be also valid for condensates with an arbitrary chemical potential. One finds, however, that somewhat more accurate results are obtained when one lets the renormalization factor  $\kappa_2^{-1}$  to approach unity in the TF regime [26]. Since the final results are little sensitive to the specific functional form of  $\kappa_2^{-1}$ , we propose one of the simplest possibilities [26]

$$\kappa_2^{-1}(\chi_2) \equiv \sqrt{2/\pi} + \Theta(\chi_2 - 0.1) \times (1 - \sqrt{2/\pi}) \left(1 - \frac{R_{TF}(\chi_2 = 0.1)}{R_{TF}(\chi_2)}\right), \quad (18)$$

where  $\Theta(x)$  is the step function,  $\chi_2 \equiv Na/\lambda^2 a_z$ , and  $R_{TF}(\chi_2) = (15\chi_2)^{1/5} a_{\perp}$  is the TF radius.

Motivated by the above ideas and the fact that there exists a direct relation between the number of atoms and the size of a trapped BEC, we propose the following ansatz for the ground-state properties of any mean-field scalar Bose-Einstein condensate with an axisymmetric vortex of charge  $q$ , confined in an arbitrary axisymmetric harmonic trap:

$$\frac{1}{2}m\omega_z^2 z^2 + \frac{1}{2}m\omega_{\perp}^2 r_{\perp}^2 + gN|\psi(r_{\perp}, z)|^2 = \mu, \quad \mathbf{r} \in V_3,$$

$$\frac{1}{2}\hbar\omega_z + \frac{1}{2}m\omega_{\perp}^2 r_{\perp}^2 + g\kappa_2^{-1}N\bar{n}_1|\varphi(r_{\perp})|^2 = \mu, \quad \mathbf{r} \in V_2,$$

$$\frac{1}{2}m\omega_z^2 z^2 + \alpha_q \hbar\omega_{\perp} + g\kappa_1^{-1}N\bar{n}_2|\phi(z)|^2 = \mu, \quad \mathbf{r} \in V_1,$$

$$\frac{1}{2}\hbar\omega_z + \alpha_q \hbar\omega_{\perp} + g\kappa_0^{-1}\bar{n}_0 = \mu, \quad \mathbf{r} \in V_0,$$

with  $\psi=0$  elsewhere. In the above equations  $\alpha_q \equiv (|q| + 1)$  and  $\kappa_0 \equiv \kappa_1\kappa_2$ , with  $\kappa_1$  and  $\kappa_2$  defined by Eqs. (16) and (18), respectively. As already seen,  $\bar{n}_1 = 1/2a_z$  and  $\bar{n}_2 = 1/2\pi a_{\perp}^2 \alpha_q$ , whereas  $\bar{n}_0$  is an effective mean density (per unit volume) localized in  $V_0$  and defined in terms of  $\mu$  through the above expressions. Note that  $\kappa_0^{-1}$  is exactly the renormalization constant required to make the latter of the above equations compatible with the other ones as well as with the perturbative result (5). The outer volume  $V_3$  is defined by Eq. (12) while the remaining inner volumes are defined by

$$V_2 \equiv \{(r_{\perp}, z): r_{\perp}^0 < r_{\perp} \leq R \wedge |z| \leq z_0\},$$

$$V_1 \equiv \{(r_{\perp}, z): r_{\perp} \leq r_{\perp}^0 \wedge z_0 < |z| \leq Z\},$$

$$V_0 \equiv \{(r_{\perp}, z): r_{\perp} \leq r_{\perp}^0 \wedge |z| \leq z_0\}.$$

The ansatz we have just introduced represents a direct generalization of our previous proposal in Ref. [26] and extends the applicability of the approach to mean-field condensates confined in axisymmetric harmonic traps with an arbitrary geometry, and containing an axisymmetric vortex of charge  $q$ . As we shall see, in the appropriate limits the results obtained in the present work reduce to those previously obtained in Ref. [26].

From Eq. (14) the chemical potential can be written in terms of the dimensionless axial half-length  $\bar{Z} \equiv Z/a_z$  as

$$\frac{\mu}{\hbar\omega_z} = \frac{1}{2}\bar{Z}^2 + \frac{1}{\lambda}(|q| + 1). \quad (19)$$

As usual, the condition that the condensate contains  $N$  particles determines the precise value of  $\mu$ . After a straightforward calculation one obtains

$$\frac{\chi_0}{\lambda^{5/3}} = \frac{1}{15}\bar{Z}^5 + \frac{\xi_1}{8}\bar{Z}^4 + \frac{\beta_q}{3\lambda}\bar{Z}^3 + \frac{1}{2}\left(\frac{\beta_q\xi_1}{\lambda} - \frac{\xi_3}{2}\right)\bar{Z}^2 - \frac{1}{2}\left(\frac{\beta_q\xi_3}{\lambda} - \frac{\xi_5}{4}\right), \quad (20)$$

where  $\beta_q \equiv \kappa_1(|q| + 1) = 1/c_q$ ,  $\xi_n \equiv (\kappa_2 - 1/n)$  with  $n = 1, 3, 5, \dots$ , and we have defined the dimensionless interaction parameter  $\chi_0$  as

$$\chi_0 \equiv Na/a_0, \quad (21)$$

with  $a_0 \equiv (a_{\perp}^2 a_z)^{1/3}$  being the mean oscillator length. From Eqs. (13) and (14) one also finds the following expression for the condensate radius  $\bar{R} \equiv R/a_{\perp}$ :

$$\bar{R}^2 = \lambda(\bar{Z}^2 - 1) + 2(|q| + 1). \quad (22)$$

The mean-field interaction energy per particle  $\epsilon_{\text{int}} \equiv E_{\text{int}}/N$  is defined by  $\epsilon_{\text{int}} = (1/2) \int g_r N |\psi(\mathbf{r})|^4 d^3\mathbf{r}$ , where  $N|\psi|^2$  represents the local density in each region and  $g_r$  de-

A. MUÑOZ MATEO AND V. DELGADO

PHYSICAL REVIEW A **75**, 063610 (2007)

notes the corresponding renormalized interaction strength. After some calculation one obtains

$$\frac{\epsilon_{\text{int}}}{\hbar\omega_z} = \frac{\lambda^{5/3}}{8\chi_0} \left[ \frac{8}{105}\bar{Z}^7 + \frac{\xi_1}{6}\bar{Z}^6 + \frac{8\beta_q}{15\lambda}\bar{Z}^5 + \left( \frac{\beta_q\xi_1}{\lambda} - \frac{\xi_3}{2} \right)\bar{Z}^4 - 2\left( \frac{\beta_q\xi_3}{\lambda} - \frac{\xi_5}{4} \right)\bar{Z}^2 + \left( \frac{\beta_q\xi_5}{\lambda} - \frac{\xi_7}{6} \right) \right]. \quad (23)$$

Finally, the kinetic and potential energies can be readily obtained in terms of the previous results by using the *exact* relations [4]

$$\epsilon_{\text{kin}} \equiv E_{\text{kin}}/N = \mu/2 - (7/4)E_{\text{int}}/N, \quad (24a)$$

$$\epsilon_{\text{pot}} \equiv E_{\text{pot}}/N = \mu/2 - (1/4)E_{\text{int}}/N. \quad (24b)$$

Equations (19)–(24) provide the ground-state properties we are looking for. All that is needed is to solve the quintic polynomial equation (20). This is a general equation that provides the axial half-length  $\bar{Z}$  of any mean-field scalar condensate as a function of only three parameters: the interaction parameter  $\chi_0$ , the trap aspect ratio  $\lambda$ , and the vortex charge  $q$ . In certain particular cases it is possible to find useful approximate analytical solutions. However, in general, Eq. (20) has to be solved numerically. It is important to note that this is a trivial computational task that can be done immediately with the built-in capabilities of symbolic computational software packages such as MATHEMATICA or MATLAB. In fact, to obtain the roots of a polynomial one simply has to type in a single instruction and the answer is instantaneous.

### III. LIMITING CASES

The above formulas simplify considerably in two limiting cases that, essentially, correspond to condensates confined in disk-shaped traps satisfying  $\lambda \gg 2(|q|+1)$  and cigar-shaped traps satisfying  $\lambda \ll 1$ . We have already found these two limiting cases before. As mentioned above, in the first case the relative contribution to the condensate properties coming from the inner cylinder  $r_\perp \leq r_\perp^0$  becomes negligible, while, in the second case, it is the relative contribution from the inner disk  $|z| \leq z_0$  that becomes negligible. Under these circumstances we shall be able to find approximate analytical solutions of the polynomial equation (20).

#### A. Disk-shaped traps

Taking into account that  $\beta_q/\lambda \ll (|q|+1)/\lambda$ , it follows that in the limit  $\lambda \gg 2(|q|+1)$  Eq. (20) reduces to

$$\chi_2 = \frac{1}{15}\bar{Z}^5 + \frac{\xi_1}{8}\bar{Z}^4 - \frac{\xi_3}{4}\bar{Z}^2 + \frac{\xi_5}{8}, \quad (25)$$

where  $\chi_2 \equiv Na/\lambda^2 a_z$  is now the only relevant physical parameter. Using Eq. (22) one can easily see that for  $q=0$  the above equation coincides exactly with that obtained previously in Ref. [26]. This is true in general (i.e., for any  $q$ ) whenever  $\lambda \gg 2(|q|+1)$ . Under these circumstances the contribution of the vortex can be neglected to a good approxi-

mation and we can use the analytical solution found in Ref. [26]

$$\bar{Z}^2 = 1 + [(1/15\chi_2)^{8/5} + (\kappa_2/8\chi_2)^2]^{-1/4}. \quad (26)$$

From this result one immediately obtains the chemical potential using Eq. (19)

$$\frac{\mu}{\hbar\omega_z} = \frac{1}{2}\bar{Z}^2. \quad (27)$$

On the other hand, in the limit we are considering, the interaction energy (23) becomes

$$\frac{\epsilon_{\text{int}}}{\hbar\omega_z} = \frac{1}{8\chi_2} \left( \frac{8}{105}\bar{Z}^7 + \frac{\xi_1}{6}\bar{Z}^6 - \frac{\xi_3}{2}\bar{Z}^4 + \frac{\xi_5}{2}\bar{Z}^2 - \frac{\xi_7}{6} \right). \quad (28)$$

As before, it is not hard to see that this equation is the same as that obtained previously in Ref. [26].

Another relevant physical quantity in the characterization of disk-shaped condensates is the condensate density per unit area, defined as  $n_2(r_\perp) \equiv N \int dz |\psi(r_\perp, z)|^2$ . Outside the vortex core ( $r_\perp > r_\perp^0$ ), which we are neglecting in this limit, a straightforward calculation leads to

$$n_2(r_\perp) = \frac{\xi_1[2\bar{\mu}_z(r_\perp) - 1]}{4\pi a a_z} + \frac{[2\bar{\mu}_z(r_\perp)]^{3/2} - 1}{6\pi a a_z}, \quad (29)$$

where  $n_2(r_\perp > R) = 0$  and  $\bar{\mu}_z(r_\perp) \equiv \mu_z(r_\perp)/\hbar\omega_z$  is given by

$$\bar{\mu}_z(r_\perp) \equiv \frac{1}{2} + \frac{1}{2}(\bar{R}/\sqrt{\lambda})^2 \left( 1 - \frac{r_\perp^2}{R^2} \right), \quad (30)$$

with  $\bar{R}^2 \approx \lambda(\bar{Z}^2 - 1)$  [Eq. (22)]. Again, this result coincides with that derived in Ref. [26]. In fact, in general, in the limit  $\lambda \gg 2(|q|+1)$  the formalism proposed in the previous section becomes independent of both  $\lambda$  and  $q$  and reduces to that developed in Ref. [26].

It can be easily verified that  $\mu_z(r_\perp)$  is nothing but the local chemical potential, defined as  $\mu_z(r_\perp) = \mu - \frac{1}{2}m\omega_\perp^2 r_\perp^2$  [15]. Equation (29) is a cubic equation in  $\bar{\mu}_z^{1/2}$  which has only one real solution. Solving this equation, after some algebra one finds the following expression for the local chemical potential as a function of the condensate density per unit area [27]:

$$\bar{\mu}_z(r_\perp) \equiv \frac{1}{8} [ (\eta + \sqrt{\eta^2 - \xi_1^6})^{1/3} + (\eta - \sqrt{\eta^2 - \xi_1^6})^{1/3} - \xi_1 ]^2, \quad (31)$$

where  $\eta = 4 + 6\xi_1 - \xi_1^3 + 24\pi a a_z n_2(r_\perp)$ . In the TF regime ( $\chi_2 \gg 1 \rightarrow a a_z n_2 \gg 1$ ), the above equation reduces to

$$\bar{\mu}_z(r_\perp) = [(3\pi/\sqrt{2})a a_z n_2(r_\perp)]^{2/3}, \quad (32)$$

which coincides with the expression that can be obtained directly from the 3D Gross-Pitaevskii equation in this regime. In the quasi-2D perturbative limit ( $\chi_2 \ll 1 \rightarrow a a_z n_2 \ll 1$ ), Eq. (31) reduces to

GROUND-STATE PROPERTIES OF TRAPPED BOSE-...

 PHYSICAL REVIEW A **75**, 063610 (2007)

$$\bar{\mu}_z(r_\perp) = 1/2 + 2\sqrt{2\pi}aa_z n_2(r_\perp). \quad (33)$$

This is again the correct result, as follows from the perturbative solution of the GPE in this limit.

Equations (29)–(31) permit us to derive a general formula for the (local) radial (first) sound velocity  $c_{2D}$  of a disk-shaped condensate, which is defined by

$$c_{2D}^2 = \frac{n_2}{m} \frac{\partial \mu_z}{\partial n_2}. \quad (34)$$

From Eq. (29) one immediately obtains

$$\frac{mc_{2D}^2}{\hbar\omega_z} = \frac{\frac{3}{2}\xi_1[2\bar{\mu}_z(r_\perp) - 1] + [2\bar{\mu}_z(r_\perp)]^{3/2} - 1}{3\xi_1 + 3[2\bar{\mu}_z(r_\perp)]^{1/2}}. \quad (35)$$

This equation in the TF regime ( $\chi_2 \gg 1$ ) reduces to

$$\frac{mc_{2D}^2}{\hbar\omega_z} = \frac{2}{3}\bar{\mu}_z(r_\perp) = \left(\frac{2\pi}{\sqrt{3}}aa_z n_2(r_\perp)\right)^{2/3}, \quad (36)$$

while in the quasi-2D perturbative regime ( $\chi_2 \ll 1$ ), it reduces to

$$\frac{mc_{2D}^2}{\hbar\omega_z} = \bar{\mu}_z(r_\perp) - \frac{1}{2} = 2\sqrt{2\pi}aa_z n_2(r_\perp). \quad (37)$$

These are the correct limits as follows from the substitution of Eqs. (32) and (33) into Eq. (34). In fact, it is not hard to see that all the analytical formulas derived in this section reduce to the correct expressions in both the TF and the perturbative regimes [26].

For the particular case of a homogeneous disk-shaped condensate (no radial confinement and  $n_2$  constant) the authors of Ref. [23] obtained an expression for the radial sound velocity that interpolates between the above two regimes. Such expression leads to the correct perturbative result and reproduces to a good approximation the TF result. Even though this expression is analytic, it is too complicated to be written in a useful compact way and the authors of Ref. [23] do not provide an explicit analytical formula in their work.

### B. Cigar-shaped traps

In the  $\lambda \ll 1$  limit Eq. (20) reduces to

$$\chi_1 = \frac{1}{15}(\sqrt{\lambda\bar{Z}})^5 + \frac{1}{3}\beta_q(\sqrt{\lambda\bar{Z}})^3, \quad (38)$$

with  $\chi_1 \equiv \lambda Na/a_\perp$ . In this limit the formalism becomes independent of  $\lambda$  and the vortex contribution enters in a rather simple way through the parameter

$$\beta_q = \frac{2^{2|q|}(|q|!)^2}{(2|q|)!}. \quad (39)$$

This fact will permit us to find an approximate analytical solution.

Given a polynomial equation  $P(x) = \chi$ , we define the residual error associated with the approximate solution  $x_e$  as  $[P(x_e) - \chi]/\chi$  [26]. We have explicitly verified that the expression

$$\sqrt{\lambda\bar{Z}} = \left[ \frac{1}{(15\chi_1)^{4/5} + \frac{1}{3}} + \frac{1}{57\chi_1 + 345} + \frac{1}{(3\chi_1/\beta_q)^{4/3}} \right]^{-1/4} \quad (40)$$

satisfies Eq. (38) with a residual error smaller than 3.2% for any  $\chi_1 \in [0, \infty)$  and  $0 \leq |q| \leq 10$ . In fact, as seen in Ref. [26], in the absence of vortices ( $q=0$ ) the above solution is somewhat more accurate and the error is less than 0.75%.

From Eq. (19) the chemical potential is given now by

$$\frac{\mu}{\hbar\omega_\perp} = (|q| + 1) + \frac{1}{2}(\sqrt{\lambda\bar{Z}})^2. \quad (41)$$

In the  $\lambda \ll 1$  limit the interaction energy becomes

$$\frac{\epsilon_{\text{int}}}{\hbar\omega_\perp} = \frac{1}{15\chi_1} \left[ \frac{1}{7}(\sqrt{\lambda\bar{Z}})^7 + \beta_q(\sqrt{\lambda\bar{Z}})^5 \right]. \quad (42)$$

On the other hand, the condensate density per unit length,  $n_1(z) \equiv N \int 2\pi r_\perp dr_\perp |\psi(r_\perp, z)|^2$ , is

$$n_1(z) = \beta_q \frac{(\sqrt{\lambda\bar{Z}})^2}{4a} \left(1 - \frac{z^2}{Z^2}\right) + \frac{(\sqrt{\lambda\bar{Z}})^4}{16a} \left(1 - \frac{z^2}{Z^2}\right)^2 \quad (43)$$

with  $n_1(z) = 0$  for  $|z| > Z$ .

The local chemical potential, defined as  $\mu_\perp(z) \equiv \mu - \frac{1}{2}m\omega_z^2 z^2$  [15], is given by

$$\frac{\mu_\perp(z)}{\hbar\omega_\perp} = (|q| + 1) + \frac{1}{2}(\sqrt{\lambda\bar{Z}})^2 \left(1 - \frac{z^2}{Z^2}\right). \quad (44)$$

The above analytical formulas generalize those obtained in Ref. [26] to the case of condensates containing an axisymmetric vortex. This is particularly interesting because, in this case, the usual TF approximation does not lead to explicit analytical formulas for the condensate properties. In the absence of vortices  $\beta_q \rightarrow 1$  and one recovers the results of Ref. [26].

Substituting Eq. (44) into Eq. (43) and solving for  $\bar{\mu}_\perp(z) \equiv \mu_\perp(z)/\hbar\omega_\perp$  one obtains the local chemical potential as a function of the condensate density per unit length

$$\bar{\mu}_\perp(z) = (|q| + 1) + \sqrt{\beta_q^2 + 4an_1(z)} - \beta_q. \quad (45)$$

This equation in the absence of vortices takes the simple form

$$\bar{\mu}_\perp(z) = \sqrt{1 + 4an_1(z)}. \quad (46)$$

In the TF regime ( $\chi_1 \gg 1 \rightarrow an_1 \gg 1$ ) the above expression reduces to

$$\bar{\mu}_\perp(z) = 2\sqrt{an_1(z)}, \quad (47)$$

which is the well-known result that can be obtained directly from the GPE in this regime [22]. In the mean-field quasi-1D limit ( $\chi_1 \ll 1 \rightarrow an_1 \ll 1$ ) Eq. (46) reads

$$\bar{\mu}_\perp(z) = 1 + 2an_1(z). \quad (48)$$

This is again the correct result that follows from the perturbative solution of the GPE in this limit [22]. In fact, it can be

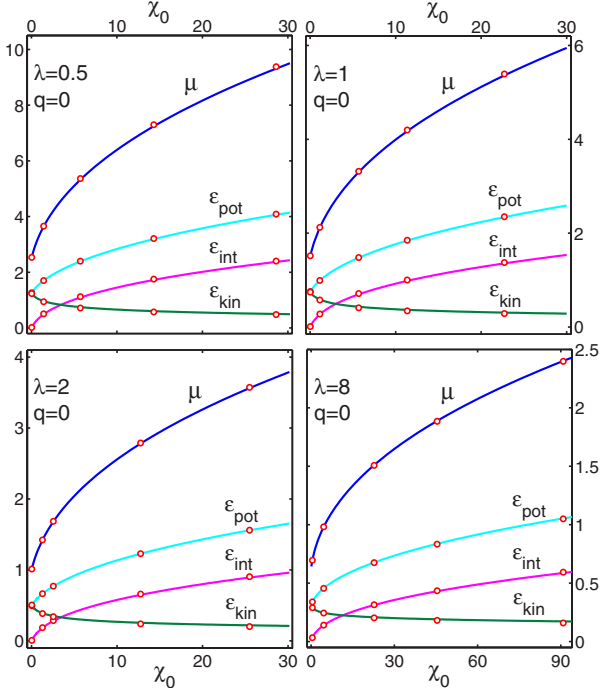


FIG. 1. (Color online) Theoretical prediction for the ground-state properties (in units of  $\hbar\omega_z$ ) of arbitrary condensates with  $q=0$  in different trap geometries  $\lambda$  (solid lines). The open circles are the exact numerical results.

easily verified that all the analytical formulas derived in this section have the correct limits in both the TF and the perturbative regimes [26].

From the above results one can derive a general formula for the (local) axial (first) sound velocity  $c_{1D}$  of a cigar-shaped condensate, defined by

$$c_{1D}^2 = \frac{n_1}{m} \frac{\partial \mu_{\perp}}{\partial n_1}. \quad (49)$$

Substitution of Eq. (45) in Eq. (49) leads to

$$\frac{mc_{1D}^2}{\hbar\omega_{\perp}} = \sqrt{\frac{4a^2 n_1^2(z)}{\beta_q^2 + 4an_1(z)}}. \quad (50)$$

In the absence of vortices and in the TF regime ( $\beta_q=1$ ,  $\chi_1 \gg 1$ ) the expression above reduces to

$$\frac{mc_{1D}^2}{\hbar\omega_{\perp}} = \sqrt{an_1(z)} = \frac{1}{2} \bar{\mu}_{\perp}(z). \quad (51)$$

This result is in agreement with the formula obtained by Zaremba for the sound velocity of a homogeneous cigar-shaped condensate in the TF regime [28].

In the quasi-1D mean field regime with no vortices ( $\chi_1 \ll 1$ ,  $\beta_q=1$ ) Eq. (50) reduces to

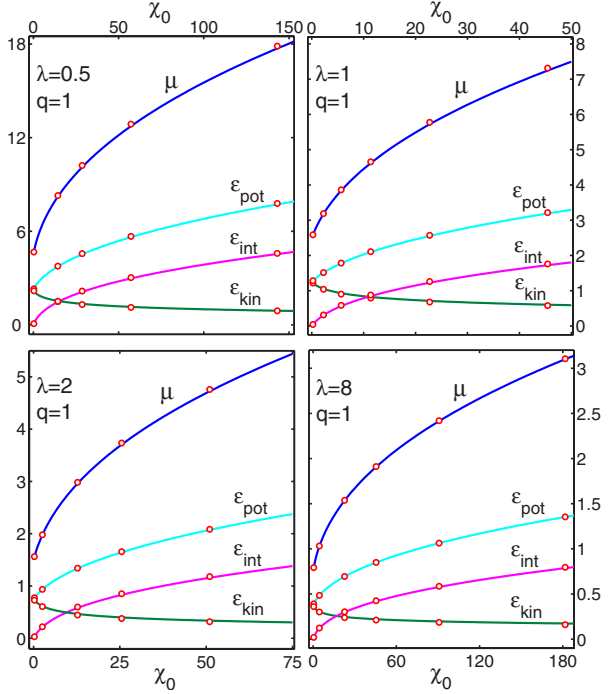


FIG. 2. (Color online) Theoretical prediction for the ground-state properties (in units of  $\hbar\omega_z$ ) of arbitrary condensates with a  $q=1$  vortex in different trap geometries  $\lambda$  (solid lines). The open circles are the exact numerical results.

$$\frac{mc_{1D}^2}{\hbar\omega_{\perp}} = 2an_1(z) = \bar{\mu}_{\perp}(z) - 1, \quad (52)$$

which is also the correct result as follows from the substitution of Eq. (48) into Eq. (49).

For the particular case of a homogeneous cigar-shaped condensate (no axial confinement and  $n_1$  constant) the authors of Ref. [23] have obtained an analytical expression for the axial sound velocity that reproduces correctly the perturbative result and, to a good approximation (with a relative error less than 3%), also the TF result, interpolating between these two regimes. This expression has been obtained using an approach different from that used here and, in fact, it exhibits a functional dependence on  $an_1$  that is very different from that in Eq. (50). However, particularizing Eq. (50) for an axially homogeneous condensate one finds that, in this case, both expressions are in quantitative agreement within 3.75%.

#### IV. NUMERICAL RESULTS

To verify the predictions of our model we have numerically solved the stationary Gross-Pitaevskii equation (1) by using a pseudospectral method evolving in imaginary time. Figure 1 shows the ground-state properties of condensates with  $q=0$  and an arbitrary number of particles ( $\chi_0$ ) in different trap geometries ( $\lambda$ ). The open circles are exact numerical results obtained from the Gross-Pitaevskii equation. The

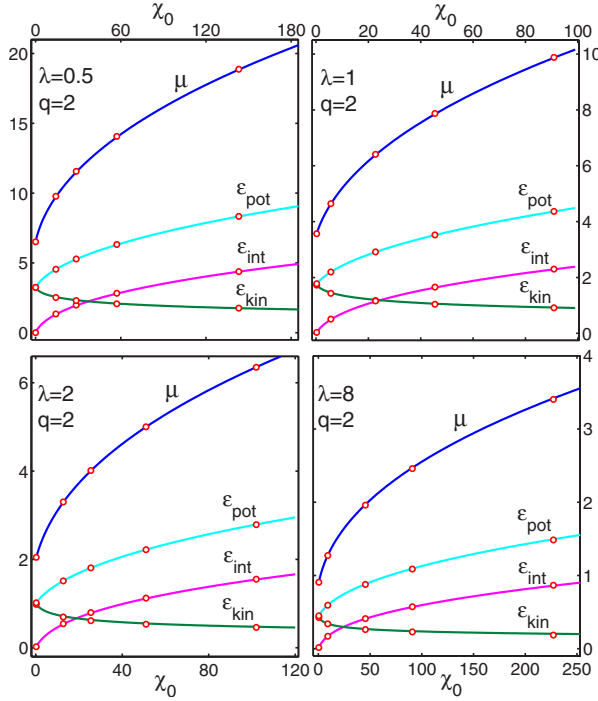


FIG. 3. (Color online) Same as Fig. 2 for arbitrary condensates with a  $q=2$  vortex.

solid lines are the theoretical predictions (in units of  $\hbar\omega_c$ ) obtained from Eqs. (19)–(24). We have solved the polynomial equation (20) by using a symbolic software package. As already said, this is a trivial computational task that only requires one to type in a single instruction.

As is evident from Fig. 1, the agreement is very good in all trap geometries (typically better than 1%). In particular, although our formalism is cylindrically symmetric it can describe accurately the properties of spherical condensates ( $\lambda=1$ ). For trap anisotropies higher than those considered in Fig. 1 one can make use of the analytical solutions (26) and (40) found above. These cases will be examined below (Fig. 5).

In Figs. 2–4 we show the ground-state properties of condensates containing an axisymmetric vortex of charge  $q=1, 2$ , and  $4$ , respectively. As before, the solid lines are the theoretical results obtained from Eqs. (19)–(24). These figures show that, regardless of the number of particles ( $\chi_0$ ) and trap geometry ( $\lambda$ ), our model, despite its simplicity, can also reproduce very accurately the physical properties of condensates containing an axisymmetric vortex. This is remarkable because, rather crudely, we have incorporated the effect of the vortex into a uniform mean density  $\bar{n}_2$  (with a renormalized interaction strength  $g\kappa_1^{-1}$ ) localized in the inner cylinder  $r_\perp \leq r_\perp^0$ . In turn, the radius  $r_\perp^0$  follows from Eq. (9), which cannot account for the effect of the mean-field interaction energy. However, for condensates of intermediate size, the interaction energy is no longer negligible in comparison with the kinetic energy. In fact, it plays an important role in determining the size of the vortex core, which decreases as  $N$

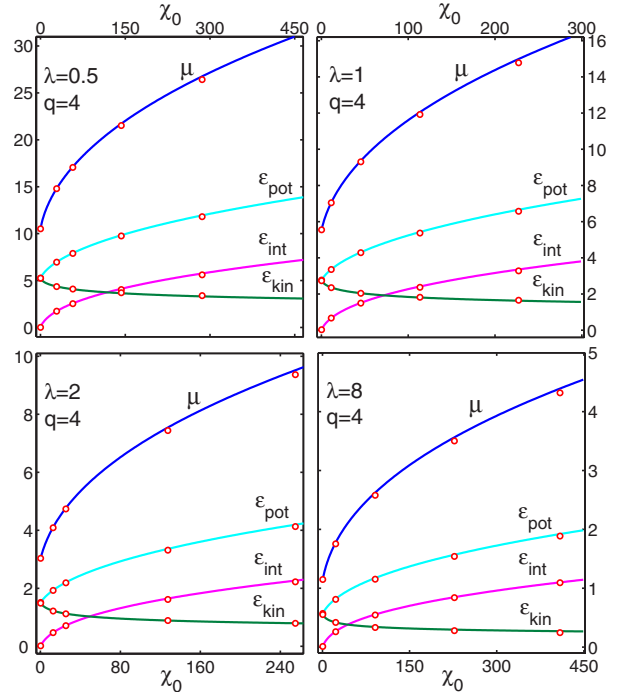


FIG. 4. (Color online) Same as Fig. 2 for arbitrary condensates with a  $q=4$  vortex.

increases. Equation (9) cannot incorporate this correction, which is proportionally more important for a high  $q$  and an intermediate number of particles (for a sufficiently large  $N$  the overall contribution of the vortex becomes negligible). Thus, one expects the formulas above to be less accurate as  $q$  increases. This can be appreciated from Fig. 4, which shows that for condensates with a  $q=4$  vortex and a  $\chi_0$  sufficiently large that  $\epsilon_{\text{int}} > \epsilon_{\text{kin}}$  the theoretical predictions are slightly less accurate than those corresponding to a  $q=1$  or a  $q=2$  vortex.

Next, we consider the ground-state properties of condensates confined in disk-shaped traps satisfying  $\lambda \gg 2(|q|+1)$  and cigar-shaped traps satisfying  $\lambda \ll 1$ . As already seen, in these limiting cases the theoretical results become independent of  $\lambda$  and can be directly obtained from explicit analytical formulas. In Fig. 5 we show the chemical potentials and interaction energies obtained from Eqs. (26)–(28) and (40)–(42), along with exact numerical results. The corresponding kinetic and potential energies follow immediately from Eqs. (24).

As Fig. 5(a) reflects, the chemical potential increases with the vortex charge, a consequence of the larger kinetic and potential energies associated with multiply quantized vortex states. However, as shown in Fig. 5(b), the opposite occurs with the mean interaction energy, which decreases as  $q$  increases because of the dilution effect that the centrifugal barrier produced by the vortex has on the mean condensate density. The small errors that can be appreciated in Fig. 5(b) are due, in part, to the fact that, for  $q \neq 0$ , the approximate solution (40) incorporates a residual error of order 2–3%. The exact solution of the polynomial equation (38) leads to somewhat better results.



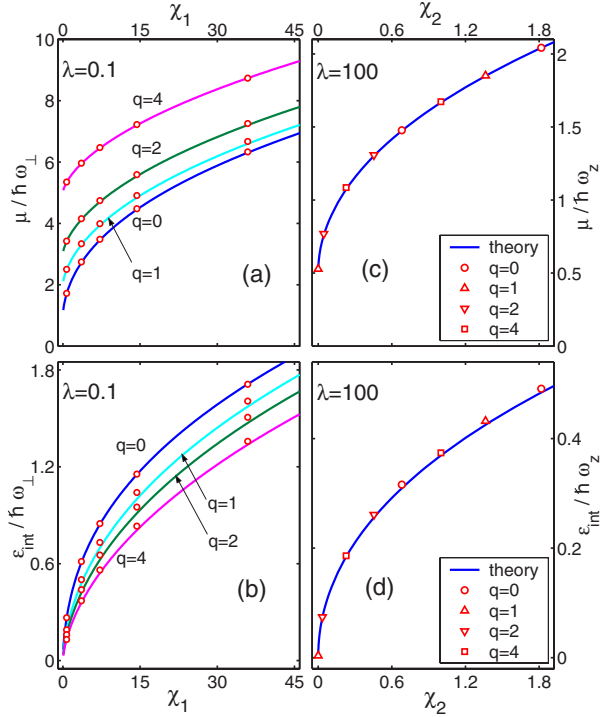


FIG. 5. (Color online) (a),(b): Theoretical prediction for the ground-state properties (in units of  $\hbar\omega_{\perp}$ ) of arbitrary cigar-shaped condensates with  $\lambda \leq 1$  and different vortex charges  $q$  (solid lines). The open circles are exact numerical results obtained with  $\lambda=0.1$ . (c),(d) Theoretical prediction for the ground-state properties (in units of  $\hbar\omega_z$ ) of arbitrary disk-shaped condensates with  $\lambda \geq 2(|q|+1)$  and different vortex charges  $q$  (solid lines). The open symbols are exact numerical results obtained with  $\lambda=100$ .

On the other hand, Figs. 5(c) and 5(d) reflect the fact that for highly asymmetric trap geometries satisfying  $\lambda \geq 2(|q|+1)$  the vortex contribution to the condensate properties becomes negligible. Figure 6(a) shows the condensate density per unit length  $n_1(z)$  of arbitrary cigar-shaped condensates with  $\lambda \leq 1$  [obtained from our analytical formulas (40) and (43)], while Fig. 6(b) shows the condensate density per unit area  $n_2(r_{\perp})$  of arbitrary disk-shaped condensates with  $\lambda \geq 2(|q|+1)$  [obtained from Eqs. (26) and (29)]. The good agreement between theoretical and exact results demonstrates that the formulas derived above are applicable for any trap geometry.

## V. CONCLUSION

In a previous work we derived very accurate approximate analytical expressions for the ground-state properties of trapped spherical, cigar-shaped, and disk-shaped condensates with an arbitrary number of atoms in the mean-field regime [26]. In this work we have extended our previous proposal and have derived general approximate formulas that provide with remarkable accuracy the ground-state properties of any mean-field scalar Bose-Einstein condensate with short-range

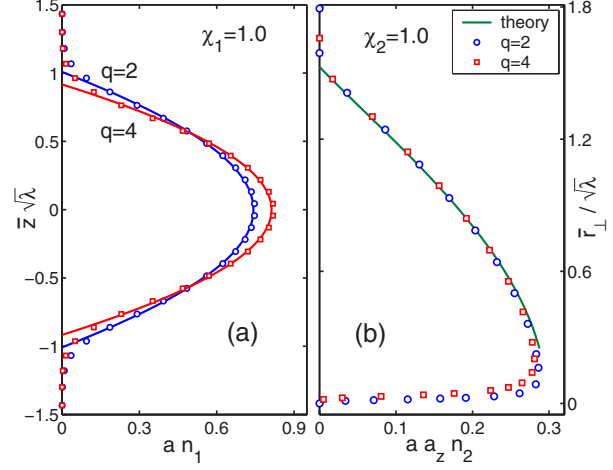


FIG. 6. (Color online) (a) Theoretical prediction for the condensate density per unit length  $n_1(z)$  of arbitrary  $\chi_1=1$  cigar-shaped condensates with  $\lambda \leq 1$  and different vortex charges  $q$  (solid lines). The open symbols are exact numerical results obtained with  $\lambda=0.1$ . (b) Theoretical prediction for the condensate density per unit area  $n_2(r_{\perp})$  of arbitrary  $\chi_2=1$  disk-shaped condensates with  $\lambda \geq 2(|q|+1)$  and different vortex charges  $q$  (solid line). The open symbols are exact numerical results obtained with  $\lambda=100$ .

repulsive interatomic interactions, confined in arbitrary cylindrically symmetric harmonic traps, and even containing a multiply quantized axisymmetric vortex.

In the appropriate limits (corresponding to cigar-shaped and disk-shaped condensates) the ground-state properties follow from explicit analytical formulas that generalize those obtained in Ref. [26]. In the general case, however, one has to solve a quintic polynomial equation. In this regard, it is important to note that while solving the GP equation can be a complex computational problem (especially in highly asymmetric trap geometries), solving a polynomial equation is a trivial computational task. Using the built-in capabilities of symbolic software packages such as MATHEMATICA or MATLAB one obtains an instantaneous result after typing in a single instruction.

The model presented in this work is essentially a convenient approximation method motivated by two simple ideas: (i) There exists a direct relation between the number of particles and the size of a trapped BEC and (ii) the contribution from the harmonic oscillator energy to the chemical potential cannot be smaller than the zero-point energy. Applying these simple ideas one finds useful formulas of great generality that provide the condensate ground-state properties in terms of the correct physically relevant magnitudes. Moreover, even though no freely adjustable parameters are introduced, in all cases the formulas obtained reproduce simultaneously with a remarkable accuracy the condensate chemical potential and the interaction energy and, as a consequence, the kinetic and the potential energy as well. And this is true for mean-field condensates with any number of particles, confined in any axisymmetric harmonic trap, and even

GROUND-STATE PROPERTIES OF TRAPPED BOSE-...

PHYSICAL REVIEW A **75**, 063610 (2007)

containing an axisymmetric vortex. Finally, note that the results of this work are applicable in general to any nonlinear system characterized by the stationary nonlinear Schrödinger equation (1).

## ACKNOWLEDGMENTS

This work has been supported by MEC (Spain) and FEDER fund (EU) (Contract No. Fis2005-02886).

- 
- [1] M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthews, C. E. Wieman, and E. A. Cornell, *Science* **269**, 198 (1995).
- [2] K. B. Davis, M.-O. Mewes, M. R. Andrews, N. J. van Druten, D. S. Durfee, D. M. Kurn, and W. Ketterle, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 3969 (1995).
- [3] C. C. Bradley, C. A. Sackett, and R. G. Hulet, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 985 (1997).
- [4] For a review, see for example, F. Dalfovo, S. Giorgini, L. P. Pitaevskii, and S. Stringari, *Rev. Mod. Phys.* **71**, 463 (1999).
- [5] E. P. Gross, *Nuovo Cimento* **20**, 454 (1961); *J. Math. Phys.* **4**, 195 (1963); L. P. Pitaevskii, *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **40**, 646 (1961) [*Sov. Phys. JETP* **13**, 451 (1961)].
- [6] G. Baym and C. J. Pethick, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 6 (1996).
- [7] F. Dalfovo, L. Pitaevskii, and S. Stringari, *Phys. Rev. A* **54**, 4213 (1996).
- [8] E. Lundh, C. J. Pethick, and H. Smith, *Phys. Rev. A* **55**, 2126 (1997).
- [9] A. L. Fetter and D. L. Feder, *Phys. Rev. A* **58**, 3185 (1998).
- [10] V. M. Pérez-García, H. Michinel, J. I. Cirac, M. Lewenstein, and P. Zoller, *Phys. Rev. A* **56**, 1424 (1997).
- [11] L. Salasnich, A. Parola, and L. Reatto, *Phys. Rev. A* **65**, 043614 (2002); L. Salasnich, *Laser Phys.* **12**, 198 (2002).
- [12] A. L. Fetter, *J. Low Temp. Phys.* **106**, 643 (1997).
- [13] K. K. Das, *Phys. Rev. A* **66**, 053612 (2002).
- [14] P. Schuck and X. Viñas, *Phys. Rev. A* **61**, 043603 (2000).
- [15] E. Timmermans, P. Tommasini, and K. Huang, *Phys. Rev. A* **55**, 3645 (1997).
- [16] D. S. Rokhsar, *Phys. Rev. Lett.* **79**, 2164 (1997).
- [17] S. Sinha, *Phys. Rev. A* **55**, 4325 (1997).
- [18] M. Urban, P. Schuck, and X. Viñas, *Eur. Phys. J. D* **27**, 147 (2003).
- [19] M. Olshanii, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 938 (1998).
- [20] D. S. Petrov, G. V. Shlyapnikov, and J. T. M. Walraven, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 3745 (2000).
- [21] V. Dunjko, V. Lorent, and M. Olshanii, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 5413 (2001).
- [22] C. Menotti and S. Stringari, *Phys. Rev. A* **66**, 043610 (2002).
- [23] L. Salasnich, A. Parola, and L. Reatto, *Phys. Rev. A* **69**, 045601 (2004).
- [24] D. S. Petrov, M. Holzmann, and G. V. Shlyapnikov, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 2551 (2000).
- [25] A. Görlitz, J. M. Vogels, A. E. Leanhardt, C. Raman, T. L. Gustavson, J. R. Abo-Shaeer, A. P. Chikkatur, S. Gupta, S. Inouye, T. Rosenband, and W. Ketterle, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 130402 (2001).
- [26] A. Muñoz Mateo and V. Delgado, *Phys. Rev. A* **74**, 065602 (2006).
- [27] M. Abramowitz and I. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions* (Dover, New York, 1972).
- [28] E. Zaremba, *Phys. Rev. A* **57**, 518 (1998).

#### **A.4 Effective mean-field equations for cigar-shaped and disk-shaped Bose-Einstein condensates**

A. Muñoz Mateo and V. Delgado,  
Physical Review A **77**, 013617 (2008).



PHYSICAL REVIEW A **77**, 013617 (2008)

## Effective mean-field equations for cigar-shaped and disk-shaped Bose-Einstein condensates

A. Muñoz Mateo<sup>\*</sup> and V. Delgado<sup>†</sup>

*Departamento de Física Fundamental II, Universidad de La Laguna, La Laguna, Tenerife, Spain*

(Received 17 July 2007; published 24 January 2008)

By applying the standard adiabatic approximation and using the accurate analytical expression for the corresponding local chemical potential obtained in our previous work [Phys. Rev. A **75**, 063610 (2007)] we derive an effective 1D equation that governs the axial dynamics of mean-field cigar-shaped condensates with repulsive interatomic interactions, accounting accurately for the contribution from the transverse degrees of freedom. This equation, which is more simple than previous proposals, is also more accurate. Moreover, it allows treating condensates containing an axisymmetric vortex with no additional cost. Our effective equation also has the correct limit in both the quasi-1D mean-field regime and the Thomas-Fermi regime and permits one to derive fully analytical expressions for ground-state properties such as the chemical potential, axial length, axial density profile, and local sound velocity. These analytical expressions remain valid and accurate in between the above two extreme regimes. Following the same procedure we also derive an effective 2D equation that governs the transverse dynamics of mean-field disk-shaped condensates. This equation, which also has the correct limit in both the quasi-2D and the Thomas-Fermi regime, is again more simple and accurate than previous proposals. We have checked the validity of our equations by numerically solving the full 3D Gross-Pitaevskii equation.

DOI: [10.1103/PhysRevA.77.013617](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.77.013617)

PACS number(s): 03.75.Kk, 05.30.Jp

### I. INTRODUCTION

The experimental realization of Bose-Einstein condensates (BECs) of dilute atomic gases confined in optical and magnetic traps [1–3] has opened new opportunities for investigating the coherence properties of degenerate quantum systems. From a theoretical point of view, under the usual experimental conditions these systems can be accurately described by the Gross-Pitaevskii equation (GPE) [4], a mean-field equation of motion governing the behavior of the condensate wave function  $\psi(\mathbf{r}, t)$

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) + gN|\psi|^2 \right) \psi. \quad (1)$$

In the above equation  $N$  is the number of atoms,  $g = 4\pi\hbar^2 a/m$  is the interaction strength,  $a$  is the  $s$ -wave scattering length, and  $V(\mathbf{r})$  is the potential of the confining trap. In what follows we shall restrict ourselves to the usual case of condensates with repulsive interatomic interactions ( $a > 0$ ).

The GPE has proved to be very successful in describing the evolution in time of dilute quantum gases near the zero-temperature limit. From a mathematical point of view this equation is a time-dependent nonlinear differential equation. Since no explicit analytical solutions are known, in general, Eq. (1) has to be solved numerically. This is a nontrivial numerical task that demands a considerable computational effort. Moreover, in many circumstances the superfluid dynamics of a zero-temperature condensate can become chaotic which requires large basis or grid point sets to guarantee convergence [5]. In recent years there has been particular

interest in BECs confined in highly anisotropic traps [6–12]. In such geometries the condensate is so tightly confined in the radial or the axial dimension that the corresponding dynamics becomes effectively one dimensional or two dimensional, respectively. The time evolution of these systems with reduced dimensionality is characterized by two very different time scales. Even though usually one is only interested in the evolution of the slow degrees of freedom in the effective mean field induced by the fast degrees of freedom, from a computational point of view it is also required to resolve accurately the irrelevant fast degrees of freedom. It is clear that for sufficiently anisotropic traps this can represent a computational challenge. It is therefore convenient to develop theoretical models that permit one to study the condensate dynamics in terms of effective equations of lower dimensionality. In this regard various approaches have been followed in recent years [13–18]. Among them, the effective 1D and 2D nonpolynomial nonlinear Schrödinger equations by Salasnich *et al.* [15] have proved the most efficient.

In this work we derive effective 1D and 2D wave equations that govern the dynamics of mean-field cigar-shaped and disk-shaped condensates with repulsive interatomic interactions. These equations which incorporate properly the contribution from the fast degrees of freedom have the correct limits in both the TF and the perturbative regime. Even though the equations by Salasnich *et al.* are in general very accurate, we demonstrate that our effective equations are more accurate. Moreover, as a consequence of its simplicity, they also permit one to obtain fully analytical expressions for various relevant ground-state properties such as chemical potentials, condensate lengths, density profiles, and local sound velocities.

### II. CIGAR-SHAPED CONDENSATES

Consider a BEC confined in a highly elongated trap. The high anisotropy of the trap has important consequences on

<sup>\*</sup>ammateo@ull.es

<sup>†</sup>vdelgado@ull.es

A. MUÑOZ MATEO AND V. DELGADO

PHYSICAL REVIEW A 77, 013617 (2008)

the condensate dynamics which under usual conditions becomes governed by two very different time scales. In these circumstances the characteristic evolution time of the fast transverse motion ( $\sim \omega_{\perp}^{-1}$ ) is so small in comparison with the characteristic time scale of the axial motion ( $\sim \omega_z^{-1}$ ) that one can assume that at every instant of time the transverse degrees of freedom adjust instantaneously to the lowest-energy configuration compatible with the axial configuration occurring at that time (*adiabatic approximation*). This implies, in particular, that the correlations between transverse and axial motions can be neglected and the condensate wave function can be factorized as [13,19]

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \varphi(\mathbf{r}_{\perp}; n_1(z, t)) \phi(z, t), \quad (2)$$

where  $\mathbf{r}_{\perp} = (x, y)$  and  $n_1(z, t)$  is the local condensate density per unit length characterizing the axial configuration

$$n_1(z, t) \equiv N \int d^2 \mathbf{r}_{\perp} |\psi(\mathbf{r}_{\perp}, z, t)|^2. \quad (3)$$

Normalizing the transverse wave function to unity

$$\int d^2 \mathbf{r}_{\perp} |\varphi(\mathbf{r}_{\perp}; n_1)|^2 = 1, \quad (4)$$

Eq. (3) takes the desirable form

$$n_1(z, t) = N |\phi(z, t)|^2. \quad (5)$$

Substituting now the wave function (2) into the GPE and assuming the confining potential to be separable as  $V(\mathbf{r}) = V_{\perp}(\mathbf{r}_{\perp}) + V_z(z)$ , one obtains

$$\begin{aligned} & \left( i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} - V_z(z) \phi \right) \varphi(\mathbf{r}_{\perp}; n_1) \\ & = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{\perp}^2 \varphi + V_{\perp}(\mathbf{r}_{\perp}) \varphi + g n_1(z, t) |\varphi|^2 \varphi \right) \phi(z, t). \end{aligned} \quad (6)$$

Both the axial and time variations induced in the transverse wave function  $\varphi$  by the axial density  $n_1$  have been neglected in the above equation. Neglecting the time derivative of  $\varphi$  is in fact the essence of the adiabatic approximation already discussed. Neglecting the second derivative of  $\varphi$  with respect to  $z$  requires the axial density to vary sufficiently slowly along the axial direction. For condensates in highly elongated traps such condition usually holds in most cases of practical interest.

Multiplying Eq. (6) by  $\varphi^*(\mathbf{r}_{\perp}; n_1)$  and integrating on the transverse coordinates  $\mathbf{r}_{\perp}$  we arrive at

$$i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} + V_z(z) \phi + \mu_{\perp}(n_1) \phi, \quad (7)$$

where we have defined

$$\mu_{\perp}(n_1) \equiv \int d^2 \mathbf{r}_{\perp} \varphi^* \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{\perp}^2 + V_{\perp}(\mathbf{r}_{\perp}) + g n_1 |\varphi|^2 \right) \varphi. \quad (8)$$

Equation (7) is an effective 1D mean-field equation that governs the axial dynamics of cigar-shaped BECs, incorporating the contribution from the transverse degrees of freedom through  $\mu_{\perp}(n_1)$ . Substitution of Eq. (7) into Eq. (6) yields

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{\perp}^2 + V_{\perp}(\mathbf{r}_{\perp}) + g n_1 |\varphi|^2 \right) \varphi = \mu_{\perp}(n_1) \varphi, \quad (9)$$

which shows that at every instant of time and  $z$  plane the transverse wave function  $\varphi$  satisfies the *stationary* GPE of an axially homogeneous condensate characterized by a density per unit length  $n_1(z, t)$ , with  $\mu_{\perp}(n_1)$  being the corresponding (transverse) local chemical potential. Clearly, the usefulness of the effective 1D axial Eq. (7) depends, to a great extent, on the possibility of finding a simple way of solving Eq. (9). In this regard, it is important to note that  $n_1$  enters the equation above as a mere external parameter, so that, in practice, the solution of the transverse equation does not require the knowledge of the axial evolution. Before considering this problem in more detail we will first take a look at the condensate stationary states, which must satisfy

$$\phi(z, t) = \phi_0(z) e^{-i\mu t/\hbar}. \quad (10)$$

Substituting in Eq. (7) one obtains

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \phi_0}{\partial z^2} + V_z(z) \phi_0 + \mu_{\perp}(n_1) \phi_0 = \mu \phi_0, \quad (11)$$

where the condensate chemical potential  $\mu$  is the Lagrange parameter that guarantees the normalization condition  $\int dz |\phi(z, t)|^2 = 1$ . When  $\phi_0$  varies so slowly that the typical length scale  $\Delta_z$  of its spatial variations along  $z$  is much greater than the corresponding *axial healing length*, i.e.,

$$\Delta_z \gg \frac{\hbar}{\sqrt{2m[\mu_{\perp}(n_1) - \hbar\omega_{\perp}]}}, \quad (12)$$

then the first term on the left in Eq. (11) can be neglected in comparison with the mean-field interaction energy and one arrives at the local density approximation

$$\mu = \mu_{\perp}(n_1) + V_z(z). \quad (13)$$

When this equation is applicable, the knowledge of the transverse chemical potential permits one to obtain an analytic expression for the ground-state axial condensate profile  $n_1(z)$ . In any case, as Eq. (7) shows, the analytic determination of  $\mu_{\perp}(n_1)$  is the key ingredient to derive a useful 1D effective equation of motion for the condensate axial dynamics.

We shall concentrate in what follows on cigar-shaped condensates confined in the radial direction by an axisymmetric harmonic potential characterized by an oscillator length  $a_{\perp} = \sqrt{\hbar/m\omega_{\perp}}$ ,

EFFECTIVE MEAN-FIELD EQUATIONS FOR CIGAR-...

PHYSICAL REVIEW A 77, 013617 (2008)

$$V(\mathbf{r}) = \frac{1}{2}m\omega_{\perp}^2 r_{\perp}^2 + V_z(z). \quad (14)$$

Introducing dimensionless variables  $\bar{r}_{\perp} = r_{\perp}/a_{\perp}$  and  $\bar{\varphi} = a_{\perp}\varphi$ , the transverse Eq. (9) determining the local chemical potential  $\bar{\mu}_{\perp} = \mu_{\perp}/\hbar\omega_{\perp}$  takes the form [12]

$$\left(-\frac{1}{2}\bar{\nabla}_{\perp}^2 + \frac{1}{2}\bar{r}_{\perp}^2 + 4\pi an_1|\bar{\varphi}|^2\right)\bar{\varphi} = \bar{\mu}_{\perp}(n_1)\bar{\varphi}. \quad (15)$$

This equation, that depends on the sole parameter  $an_1$ , can be analytically solved in two limiting cases. When  $an_1 \ll 1$  the mean-field interaction energy can be treated as a weak perturbation. In this perturbative regime the condensate wave function that minimizes the energy functional is given, to the lowest order, by the Gaussian ground state of the harmonic oscillator and the condensate is tightly confined in the radial direction. Under these conditions the radial motion is frozen out, restricted to zero-point oscillations, and the condensate becomes effectively one dimensional. Thus the perturbative regime corresponds to quasi-1D mean-field condensates with a local chemical potential given by

$$\bar{\mu}_{\perp}(n_1) = 1 + 2an_1. \quad (16)$$

When  $an_1 \gg 1$  the kinetic energy term can be safely neglected in comparison with the mean-field interaction energy. This is the Thomas-Fermi regime, in which many modes of the transverse harmonic trap become excited and the condensate exhibits a parabolic radial profile

$$|\bar{\varphi}|^2 = \frac{1}{4\pi an_1} \left( \bar{\mu}_{\perp} - \frac{1}{2}\bar{r}_{\perp}^2 \right), \quad (17)$$

where the local chemical potential ensuring normalization is now given by

$$\bar{\mu}_{\perp}(n_1) = 2\sqrt{an_1}. \quad (18)$$

Note that in passing from the Thomas-Fermi regime to the perturbative regime the system undergoes an effective dimensional crossover from a 3D cigar-shaped condensate to a quasi-1D mean-field condensate.

In previous works [20], by using a suitable approximation scheme, we derived general approximate formulas that provide with remarkable accuracy (typically better than 1%) the ground-state properties of any mean-field scalar Bose-Einstein condensate with short-range repulsive interatomic interactions, confined in arbitrary cylindrically symmetric harmonic traps, and even containing a multiply quantized axisymmetric vortex. This approximation scheme essentially represents an extension of the Thomas-Fermi approximation that incorporates conveniently the zero-point energy contribution. In the limiting cases of cigar-shaped and disk-shaped condensates the ground-state properties follow from explicit analytical formulas that reduce to the correct analytical expressions in both the TF and the perturbative regimes, and remain valid and accurate in between these two limiting cases, thus accounting properly for the corresponding dimensional crossover. Physical quantities such as the condensate radius, axial length, chemical potential, mean-field interaction energy, kinetic and potential energies, density profiles,

and local sound velocities can be easily and accurately obtained in this way in terms of the physically relevant parameters (number of atoms, trap aspect ratio, and vortex charge). In particular, in Ref. [20], we found that the transverse local chemical potential of a condensate with an axisymmetric vortex of charge  $q$ , as a function of the condensate density per unit length  $n_1$ , is given by

$$\bar{\mu}_{\perp}(n_1) = (|q| + 1) + \sqrt{\beta_q^2 + 4an_1} - \beta_q, \quad (19)$$

with

$$\beta_q = \frac{2^{2|q|}(|q|!)^2}{(2|q|)!}. \quad (20)$$

The parameter  $\beta_q^{-1}$  accounts for the dilution effect that the centrifugal force associated with the vortex has on the condensate mean density [20]. In the absence of vortices  $q=0 \rightarrow \beta_q=1$ , the equation above simplifies to

$$\bar{\mu}_{\perp}(n_1) = \sqrt{1 + 4an_1}. \quad (21)$$

Clearly, in the appropriate limits, this equation reduces to the quasi-1D and TF expressions (16) and (18), respectively. As we shall see, it also describes correctly the corresponding dimensional crossover.

The above equations were derived in Ref. [20] by using a suitable TF-like ansatz for the local density  $|\psi(r_{\perp}, z)|^2$  of a harmonically trapped BEC in its ground state. Such local density, which is not factorizable in general, is defined in a volume that corresponds to the usual TF ellipsoidal density cloud conveniently truncated in order to account for the zero-point energy contribution. Note that even though the expression (19) was originally obtained for a condensate in its ground state (compatible with an axisymmetric vortex of charge  $q$ ) and axially confined by a harmonic potential, it is, however, of general validity. This is so because, as already said, the solution of the transverse Eq. (15) does not depend on the particular axial evolution. To convince the reader that this is the case we have numerically solved Eq. (15) for a wave function of the form

$$\bar{\varphi}(\bar{\mathbf{r}}_{\perp}) = \exp(iq\theta)\bar{\varphi}_q(\bar{\mathbf{r}}_{\perp}), \quad (22)$$

with  $q=0, 1, 2$ , and  $4$ . The results of the numerical calculation are shown in Fig. 1 (open circles) along with the theoretical prediction obtained from Eq. (19) (solid lines). As is apparent, Eq. (19) accurately accounts for the dimensional crossover, the agreement with the numerical results being excellent for any value of the dimensionless interaction parameter  $an_1$ . The maximum error is smaller than 1% for  $q=0$  and 2, and smaller than 1.2% for  $q=1$ . Even though one expects [20] this maximum error to increase with  $q$ , it is still smaller than 2.5% for  $q=4$ . This demonstrates that the local chemical potential as given by Eq. (19) is an accurate solution of the transverse Eq. (9). This result is of interest in its own right. For instance, in Ref. [19], it has been shown that the velocity of sound in an axially uniform Bose-Einstein condensate immersed in a 1D optical lattice and radially confined by a harmonic trap can be obtained, in a wide range of optical lattice depths, from the knowledge of the local chemical potential  $\bar{\mu}_{\perp}$  as a function of the linear average

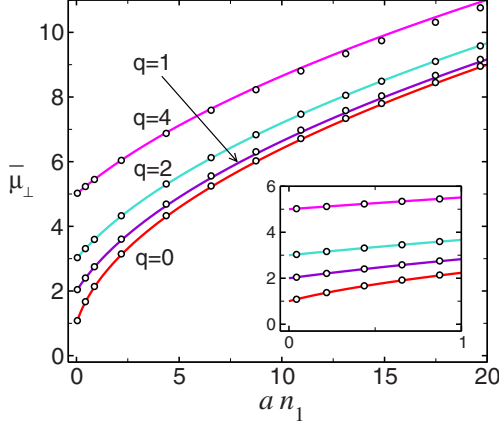


FIG. 1. (Color online) Theoretical prediction for the transverse local chemical potential  $\bar{\mu}_\perp$  as a function of  $an_1$  for different vortex charges  $q$  (solid lines). The open circles are exact numerical results obtained by solving the stationary Gross-Pitaevskii Eq. (15).

density  $n_1 = N/d$ , with  $d$  being the lattice period. In such an approach the effect of the lattice is incorporated into a suitable renormalization of the mass and of the coupling constant. In the present work, however, the main interest of Eq. (19) comes from the fact that when substituted in Eq. (7) it leads to the following effective 1D mean-field equation:

$$i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} + V_z(z)\phi + \hbar\omega_\perp \sqrt{\beta_q^2 + 4aN} |\phi|^2 \phi, \quad (23)$$

where  $\beta_q$  is given by Eq. (20) and we have absorbed the constant term proportional to  $(|q|+1) - \beta_q$  into the definition of the generic axial potential  $V_z(z)$ . For  $q=0, 1, 2, \dots$  the parameter  $\beta_q$  takes the values 1, 2, 8/3, ..., respectively.

Equation (23) is the equation we were looking for. It governs the axial dynamics of arbitrary mean-field cigar-shaped condensates with repulsive interatomic interactions even in the presence of an axisymmetric vortex of charge  $q$ , accounting for the effects from the transverse degrees of freedom through the term proportional to  $\hbar\omega_\perp$ . Since vortices with  $q \geq 2$  are dynamically unstable and decay into an array of singly quantized vortices [5,21], in such cases the applicability of Eq. (23) is restricted to times shorter than the corresponding decay time. As is apparent, the equation above is much simpler than previous proposals. It is also more accurate, as we shall see. Since we have found an expression for the transverse local chemical potential that is very accurate, the validity of Eq. (23) relies almost exclusively on the validity of the well established adiabatic approximation.

When  $4an_1 \ll \beta_q^2$  one enters the quasi-1D mean-field regime. In this case, Eq. (23) reduces to

$$i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} + V_z(z)\phi + g_{1D}N |\phi|^2 \phi, \quad (24)$$

with

$$g_{1D} = \beta_q^{-1} \frac{g}{2\pi a_\perp^2} = \beta_q^{-1} 2a\hbar\omega_\perp. \quad (25)$$

This equation generalizes the well-known 1D GPE to the case of condensates containing an axisymmetric vortex. In the absence of vortices,  $\beta_q=1$  and one recovers the usual equation. When the number of particles is high enough that  $4an_1 \gg \beta_q^2$ , the condensate enters the TF regime. In this case, Eq. (23) reduces to

$$i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} + V_z(z)\phi + 2\hbar\omega_\perp \sqrt{aN} |\phi|^2 \phi, \quad (26)$$

which again is the correct result as follows from the direct substitution of Eq. (18) into Eq. (7).

The effective 1D Eq. (23) also permits deriving an accurate analytical expression for the stationary axial density profile  $n_1(z) = N |\phi_0(z)|^2$ . To see this we shall consider a harmonic axial confinement  $V_z(z) = \frac{1}{2}m\omega_z^2 z^2$  with corresponding oscillator length  $a_z = \sqrt{\hbar/m\omega_z}$ . For cigar-shaped condensates the trap aspect ratio  $\lambda = \omega_z/\omega_\perp$  must satisfy the inequality  $\lambda \ll 1$ . Under these circumstances the condition (12) can be easily fulfilled. It would be sufficient (though not necessary) that  $\Delta_z \gg a_\perp / \sqrt{4an_1}$ . Taking into account that, in the stationary state,  $\Delta_z$  is of the order of the condensate axial length it is clear that, except for extremely small values of  $an_1$ , in cigar-shaped condensates this condition always holds. As a consequence, the stationary Eq. (11) reduces to the local density approximation (13). Substitution of Eq. (19) into Eq. (13) yields

$$4an_1(\bar{z}) = \left( \frac{\mu}{\hbar\omega_\perp} - (|q|+1) + \beta_q - \frac{1}{2}(\sqrt{\lambda}\bar{z})^2 \right)^2 - \beta_q^2, \quad (27)$$

where  $\bar{z} = z/a_z$ . The dimensionless axial half-length  $\bar{Z} = Z/a_z$  follows from the condition  $n_1(\bar{Z}) = 0$

$$\frac{\mu}{\hbar\omega_\perp} = (|q|+1) + \frac{1}{2}(\sqrt{\lambda}\bar{Z})^2. \quad (28)$$

Substituting this expression in Eq. (27) we obtain

$$n_1(z) = \beta_q \frac{(\sqrt{\lambda}\bar{Z})^2}{4a} \left( 1 - \frac{z^2}{Z^2} \right) + \frac{(\sqrt{\lambda}\bar{Z})^4}{16a} \left( 1 - \frac{z^2}{Z^2} \right)^2 \quad (29)$$

with  $n_1(z) = 0$  for  $|z| > Z$ . In order for this equation to be useful one also needs an analytic expression for  $\bar{Z}$  or, equivalently, for  $\mu$ . From the normalization condition

$$N = \int_{-Z}^{+Z} dz n_1(z), \quad (30)$$

one finds that the axial half-length satisfies the quintic polynomial equation



$$\frac{1}{15}(\sqrt{\lambda}\bar{Z})^5 + \frac{1}{3}\beta_q(\sqrt{\lambda}\bar{Z})^3 = \chi_1, \quad (31)$$

where  $\chi_1 \equiv \lambda Na/a_\perp$  is (apart from the vortex charge) the only relevant parameter. An approximate solution of the above equation is given by

$$\sqrt{\lambda}\bar{Z} = \left[ \frac{1}{(15\chi_1)^{4/5} + \frac{1}{3}} + \frac{1}{57\chi_1 + 345} + \frac{1}{(3\chi_1/\beta_q)^{4/3}} \right]^{-1/4}. \quad (32)$$

This expression satisfies Eq. (31) for any  $\chi_1 \in [0, \infty)$ , with a residual error [20] that is smaller than 0.75% for  $q=0$  and smaller than 3.2% for  $1 \leq |q| \leq 10$ . The (local) axial (first) sound velocity  $c_{1D}$  of a cigar-shaped condensate is defined by

$$c_{1D}^2 = \frac{n_1}{m} \frac{\partial \mu_\perp}{\partial n_1}. \quad (33)$$

Substituting Eq. (19) in Eq. (33) one obtains

$$\frac{mc_{1D}^2}{\hbar\omega_\perp} = \sqrt{\frac{4a^2n_1^2(z)}{\beta_q^2 + 4an_1(z)}}. \quad (34)$$

Equations (28)–(34) coincide with the results we obtained in previous works [20]. Note, however, that the derivation is quite different. The formulation of Ref. [20] is not restricted to condensates of specific geometry. The formulas obtained there are valid for condensates confined in arbitrary cylindrically symmetric harmonic traps and reduce to those derived in the present work in the limiting case of highly elongated condensates. In particular, Eq. (28) above appears in Ref. [20] as part of the initial ansatz for the local density  $|\psi(r_\perp, z)|^2$ . On the other hand, Eq. (29) follows in Ref. [20] from a direct integration of this ansatz over the radial coordinate, while Eq. (31) is obtained after integrating  $|\psi(r_\perp, z)|^2$  over both the radial and the axial coordinates.

As shown in Ref. [20], Eqs. (28)–(34) predict very accurately the condensate ground-state properties. They also reduce to the correct expressions in the two analytically solvable regimes. In particular, in the quasi-1D mean-field regime (corresponding to  $\chi_1 \ll 1 \rightarrow an_1 \ll 1$ ) the axial density profile (29) is well approximated by the first term on the right-hand side while, in the TF regime (corresponding to  $\chi_1 \gg 1 \rightarrow an_1 \gg 1$ ), the last term on the right-hand side is the only one that contributes significantly, in good agreement with previous results obtained in these two particular limits [12]. Equation (29) also reproduces accurately the axial density profile in between these two limiting cases. This has been demonstrated in Ref. [20], where we compare the theoretical prediction obtained from Eqs. (29) and (32) with exact numerical results obtained from the full 3D GPE. The agreement is always very good except at the condensate edges, as expected for a TF-like expression obtained by neglecting the derivative kinetic term. In this regard, we note again that the derivation of the above equations followed in the present work is based on the local density approximation which in turn requires the condition (12) to be true. As already said, however, for cigar-shaped condensates with

$\lambda \ll 1$  this requirement is not very demanding and can be satisfied even in the perturbative regime (see also Ref. [12]).

Our effective 1D Eq. (23) is a Schrödinger equation with an effective mean-field potential

$$V_{\text{eff}}(\phi) = \hbar\omega_\perp \sqrt{\beta_q^2 + 4aN|\phi|^2}. \quad (35)$$

As mentioned in the Introduction, by using a variational approach [22], Salasnich *et al.* obtained in Ref. [15] effective 1D and 2D nonpolynomial nonlinear Schrödinger equations (NPSEs) for the axial and radial dynamics of cigar-shaped and disk-shaped condensates, respectively. Their 1D equation coincides with our equation above but with a different effective mean-field potential

$$V_{\text{eff}}(\phi) = \frac{gN}{2\pi a_\perp^2} \frac{|\phi|^2}{\sqrt{1 + 2aN|\phi|^2}} + \frac{\hbar\omega_\perp}{2} \left( \frac{1}{\sqrt{1 + 2aN|\phi|^2}} + \sqrt{1 + 2aN|\phi|^2} \right). \quad (36)$$

Next we will compare our effective 1D Eq. (23) with that by Salasnich *et al.* These authors demonstrated that their equations provide much more accurate results than any other proposed effective equation. Actually, their results are always very close to the exact results obtained from the 3D GPE. It is thus sufficient to compare our equations with those proposed in Ref. [15]. As we shall see, our effective equation is more accurate. Moreover, it allows treating condensates containing an axisymmetric vortex, with no additional cost. For instance, to account for a  $q=1$  vortex it suffices to make the change  $\beta_{q=0}=1 \rightarrow \beta_{q=1}=2$  in Eq. (35). Our effective equation also permits one to derive useful and accurate analytical expressions for ground-state properties such as the chemical potential, axial length, axial density profile, and local sound velocity. In this regard, it should be noticed that although Salasnich *et al.* also obtained in Ref. [23] analytical expressions for the axial density profile and local sound velocity, such expressions depend on the condensate chemical potential which because of the complexity of Eq. (36) in general cannot be determined analytically except in the two analytically solvable regimes or in the simple case of a homogeneous condensate with no axial confinement. Finally, note that the approach of Ref. [15] is also valid for condensates with attractive interatomic interactions.

Figure 2 shows the axial density profile  $n_1(\bar{z})$  of cigar-shaped condensates in a harmonic trap with aspect ratio  $\lambda = \omega_z/\omega_\perp = 0.1$  in the different relevant regimes, which, for a given vorticity  $q$ , are completely characterized by the value of the sole parameter  $\chi_1$ . Figures 2(a)–2(c) correspond to the ground-state ( $q=0$ ) equilibrium configuration, while Fig. 2(d) shows the equilibrium configuration compatible with a vortex of charge  $q=1$  and 2. Solid lines are numerical results obtained from our effective 1D Eq. (23). Dashed lines are numerical results obtained from the 1D NPSE by Salasnich *et al.* and open symbols are exact numerical results obtained from the full 3D GPE. As is apparent from Fig. 2(a), in the perturbative regime ( $\chi_1=0.1$ ), both approaches are practically indistinguishable, a consequence of the fact that both have the correct perturbative limit. However, as  $\chi_1$  increases

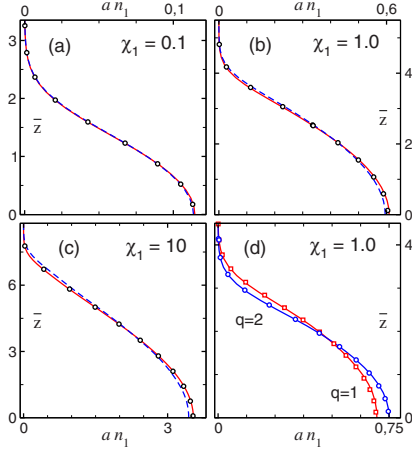


FIG. 2. (Color online) Axial density profile  $n_1(\bar{z})$  of cigar-shaped condensates in a harmonic trap with aspect ratio  $\lambda = \omega_z/\omega_\perp = 0.1$  and  $\chi_1 = 0.1, 1$ , and  $10$ . (a)–(c) Ground-state ( $q=0$ ) equilibrium configuration. (d) Equilibrium configuration compatible with a vortex of charge  $q=1$  and  $2$ . Solid lines are numerical results obtained from our effective 1D Eq. (23). Dashed lines are numerical results obtained from the 1D NPSE by Salasnich *et al.* Open symbols are exact numerical results obtained from the full 3D GPE.

our effective 1D equation is always more accurate [Figs. 2(b) and 2(c)], which is a consequence of the fact that our approach, unlike that by Salasnich *et al.*, also reproduces correctly the TF limit. The difference, though small, can be clearly appreciated even for  $\chi_1=1$ . Moreover, our approach also allows treating the case of condensates containing an axisymmetric vortex, with no additional cost. Figure 2(d) shows the equilibrium configuration of condensates with a vortex of charge  $q=1$  and  $2$ , obtained from the same effective 1D Eq. (23) by simply taking  $\beta_q=2$  and  $8/3$ , respectively. As is apparent, the agreement with the exact numerical results (open symbols) is again very good.

Our approach also reproduces very accurately the time evolution of cigar-shaped condensates. To see this we start from the equilibrium configuration of condensates confined in a harmonic trap with aspect ratio  $\lambda = \omega_z/\omega_\perp = 0.1$ . Then we introduce a sudden perturbation by increasing the axial confinement frequency as  $\omega_z \rightarrow 1.1\omega_z$  and follow the subsequent evolution in time of the mean squared axial amplitude  $\langle \bar{z}^2 \rangle = \int d\bar{z} \bar{z}^2 n_1(\bar{z}, t)$ . Figure 3 shows the corresponding results obtained for condensates with  $\chi_1=1$  and  $10$  and vortex charges  $q=0$  and  $1$ . As before solid lines are numerical results obtained from our effective 1D Eq. (23), dashed lines are numerical results obtained from the 1D NPSE by Salasnich *et al.*, and open symbols are exact numerical results obtained from the full 3D GPE. For  $\chi_1=0.1$  (not shown in the figure) both approaches produce results that are indistinguishable on the scale of the figure from the exact results. It is apparent that our approach is more accurate than that by Salasnich *et al.* Moreover, as Fig. 3(a) shows, it also produces very accurate results for condensates containing an axisymmetric vortex. Note also that for  $\chi_1=1$  and  $q=0$ , Fig. 3(a) shows that the results from the 1D NPSE begin to dephase at large

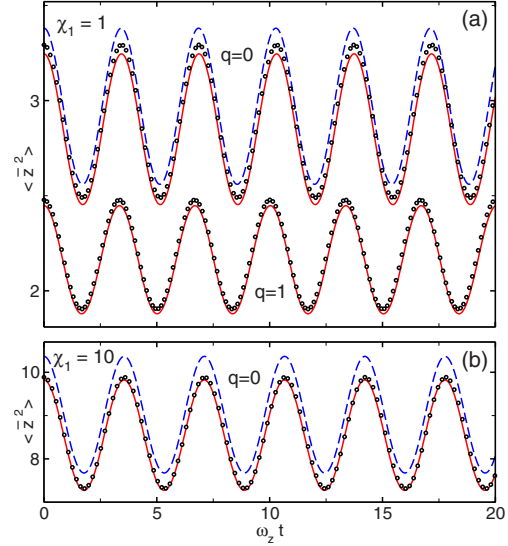


FIG. 3. (Color online) Time evolution of the mean squared amplitude  $\langle \bar{z}^2 \rangle$  of cigar-shaped condensates with  $\chi_1=1$  and  $10$  and vortex charges  $q=0$  and  $1$  after a perturbation  $\omega_z \rightarrow 1.1\omega_z$ . The aspect ratio of the harmonic trap before perturbation is  $\lambda = \omega_z/\omega_\perp = 0.1$ . Solid lines are numerical results obtained from our effective 1D Eq. (23). Dashed lines are numerical results obtained from the 1D NPSE by Salasnich *et al.* Open symbols are exact numerical results obtained from the full 3D GPE.

times. To see this behavior more clearly, it is convenient to consider a more complex situation. To this end we consider a BEC with  $\chi_1=2$  in a harmonic trap with  $\lambda=0.1$ , subject to a blue-detuned laser beam modeled by the Gaussian potential

$$V(z) = V_0 \exp(-z^2/2z_0^2), \quad (37)$$

with  $V_0 = 12\hbar\omega_z$  and  $z_0 = \sqrt{2\lambda}a_z$ . We let the condensate reach its equilibrium configuration and then, at  $\tau = \omega_z t = 0$ , we suddenly switch off the laser beam and let the system evolve in the harmonic trap. Figure 4 shows the time evolution of the axial density profile  $n_1(\bar{z})$ . Solid lines are numerical results obtained from our effective 1D Eq. (23), dashed lines are numerical results obtained from the 1D NPSE by Salasnich *et al.*, and open symbols are exact numerical results obtained from the full 3D GPE. At  $\tau=1$  one recognizes in each half-axis a dark solitonlike structure that develops from the initial configuration and propagates toward the corresponding condensate edge (only the positive half-axis is represented in the figure). At  $\tau=2$  the soliton becomes black and it comes back toward the condensate center for  $\tau > 2$ , as can be seen in the snapshot at  $\tau=3$ . This figure demonstrates again that our approach is more accurate than that by Salasnich *et al.* In particular, it is apparent that the results obtained from the 1D NPSE become somewhat dephased with respect to the exact results.

### III. DISK-SHAPED CONDENSATES

Consider now a condensate confined in an anisotropic trap that is much stronger in the axial than in the radial direction.

In this case, using similar arguments as before, one can resort to the adiabatic approximation and assume that at every instant of time the (fast) axial degrees of freedom adjust instantaneously to the equilibrium configuration compatible with the radial configuration occurring at that time. Under these circumstances the condensate wave function can be factorized as

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \varphi(\mathbf{r}_\perp, t) \phi(z; n_2(\mathbf{r}_\perp, t)), \quad (38)$$

where  $n_2(\mathbf{r}_\perp, t)$  is the local condensate density per unit area characterizing the radial configuration

$$n_2(\mathbf{r}_\perp, t) \equiv N \int dz |\psi(\mathbf{r}_\perp, z, t)|^2. \quad (39)$$

The normalization condition

$$\int dz |\phi(z; n_2)|^2 = 1 \quad (40)$$

leads to

$$n_2(\mathbf{r}_\perp, t) = N |\varphi(\mathbf{r}_\perp, t)|^2. \quad (41)$$

After substituting Eq. (38) into Eq. (1), one arrives at

$$\begin{aligned} & \left( i\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_\perp^2 \varphi - V_\perp(\mathbf{r}_\perp) \varphi \right) \phi(z; n_2) \\ &= \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} + V_z(z) \phi + g n_2(\mathbf{r}_\perp, t) |\phi|^2 \phi \right) \varphi(\mathbf{r}_\perp, t), \end{aligned} \quad (42)$$

where as before we have assumed the confining potential to be separable. Integrating out the fast degrees of freedom one obtains

$$i\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_\perp^2 \varphi + V_\perp(\mathbf{r}_\perp) \varphi + \mu_z(n_2) \varphi, \quad (43)$$

with

$$\mu_z(n_2) \equiv \int dz \phi^* \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V_z(z) + g n_2 |\phi|^2 \right) \phi. \quad (44)$$

Substituting Eq. (43) in Eq. (42) one finds

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V_z(z) + g n_2 |\phi|^2 \right) \phi = \mu_z(n_2) \phi. \quad (45)$$

The effective 2D mean-field Eq. (43) governs the radial dynamics of disk-shaped BECs, incorporating the contribution from the axial degrees of freedom through the (axial) local chemical potential  $\mu_z(n_2)$ . This quantity, in turn, follows from the *stationary* Gross-Pitaevskii Eq. (45) determining the axial configuration  $\phi(z; n_2)$ .

The condensate stationary states

$$\varphi(\mathbf{r}_\perp, t) = \varphi_0(\mathbf{r}_\perp) e^{-i\mu t/\hbar} \quad (46)$$

satisfy

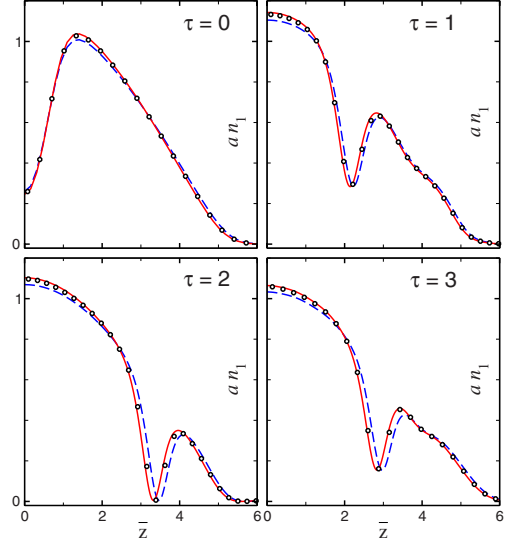


FIG. 4. (Color online) Evolution of the axial density profile  $n_1(\bar{z})$  of a cigar-shaped condensate in a harmonic trap with aspect ratio  $\lambda = \omega_z/\omega_\perp = 0.1$  and  $\chi_1 = 2$  for different times  $\tau = \omega_z t$ . Solid lines are numerical results obtained from our effective 1D Eq. (23). Dashed lines are numerical results obtained from the 1D NPSE by Salasnich *et al.* Open symbols are exact numerical results obtained from the full 3D GPE.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_\perp^2 \varphi_0 + V_\perp(\mathbf{r}_\perp) \varphi_0 + \mu_z(n_2) \varphi_0 = \mu \varphi_0, \quad (47)$$

where the chemical potential  $\mu$  guarantees the condition  $\int d^2 \mathbf{r}_\perp |\varphi(\mathbf{r}_\perp, t)|^2 = 1$ . When the typical length scale  $\Delta_\perp$  of the spatial variations of  $\varphi_0$  is much greater than the corresponding *radial healing length*, i.e.,

$$\Delta_\perp \gg \frac{\hbar}{\sqrt{2m[\mu_z(n_2) - \frac{1}{2}\hbar\omega_z]}}, \quad (48)$$

then Eq. (47) reduces to the local density approximation

$$\mu = \mu_z(n_2) + V_\perp(\mathbf{r}_\perp). \quad (49)$$

We shall consider in what follows disk-shaped condensates confined in the axial direction by a harmonic potential characterized by an oscillator length  $a_z = \sqrt{\hbar/m\omega_z}$ ,

$$V(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} m \omega_z^2 z^2 + V_\perp(\mathbf{r}_\perp). \quad (50)$$

In terms of dimensionless variables  $\bar{z} = z/a_z$ ,  $\bar{\phi} = \sqrt{a_z} \phi$ , and  $\bar{\mu}_z = \mu_z/\hbar\omega_z$ , the axial Eq. (45) reads

$$\left( -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial \bar{z}^2} + \frac{1}{2} \bar{z}^2 + 4\pi a_z n_2 |\bar{\phi}|^2 \right) \bar{\phi} = \bar{\mu}_z(n_2) \bar{\phi}. \quad (51)$$

In Ref. [20], we found the following expression for the axial local chemical potential  $\bar{\mu}_z$  as a function of the condensate density per unit area  $n_2$ :

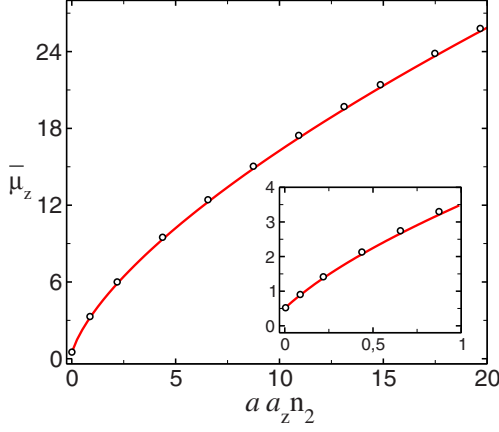


FIG. 5. (Color online) Theoretical prediction for the axial local chemical potential  $\bar{\mu}_z$  as a function of  $aa_z n_2$  (solid lines). The open circles are exact numerical results obtained by solving the stationary Gross-Pitaevskii Eq. (51).

$$\bar{\mu}_z(n_2) \equiv \frac{1}{8} [(\eta + \sqrt{\eta^2 - \xi_1^6})^{1/3} + (\eta - \sqrt{\eta^2 - \xi_1^6})^{1/3} - \xi_1]^2, \quad (52)$$

where  $\eta = 4 + 6\xi_1 - \xi_1^3 + 24\pi a a_z n_2$  and  $\xi_1 \equiv (\kappa_2 - 1)$  with

$$\kappa_2^{-1}(\bar{n}_2) \equiv \sqrt{2/\pi} + \Theta(\bar{n}_2 - 0.1)(1 - \sqrt{2/\pi})[1 - (10\bar{n}_2)^{-1/5}]. \quad (53)$$

In the above equation,  $\Theta(x)$  is the step function and  $\bar{n}_2 \equiv aa_z n_2$  is the only relevant parameter. Note that in Ref. [20] we used the same expression (53) but in terms of the dimensionless parameter  $\chi_2 \equiv Na/\lambda^2 a_z$  instead of  $\bar{n}_2$ . It was shown there that  $\chi_2$  is the only relevant parameter for the description of harmonically trapped disk-shaped condensates, so that  $\bar{n}_2$  and  $\chi_2$  are directly related to each other. In particular, the quasi-2D perturbative regime corresponds to  $\chi_2 \ll 1 \leftrightarrow \bar{n}_2 \ll 1$ , while in the TF regime  $\chi_2 \gg 1 \leftrightarrow \bar{n}_2 \gg 1$ . On the other hand, as explained in Ref. [20], the (slowly varying) last term in Eq. (53) was conveniently introduced to ensure that in the TF limit  $\kappa_2^{-1} \rightarrow 1$ , its specific functional form being not very relevant. This way one guarantees the correct expression for  $\bar{\mu}_z(n_2)$  in both the TF and the perturbative regimes. On these grounds and taking into account that  $\chi_2 \sim \bar{n}_2$ , we have simply made the substitution  $\chi_2 \rightarrow \bar{n}_2$  in Eq. (53) which now becomes a very slowly varying function of  $\bar{n}_2$ .

Figure 5 shows the theoretical prediction for  $\bar{\mu}_z$  obtained from Eq. (52) (solid lines) along with the exact results obtained from the numerical solution of the axial Eq. (51) (open circles). As is apparent, not only does Eq. (52) have the correct limit in the two relevant extreme regimes, but it also accounts accurately for the corresponding dimensional crossover.

Substituting Eqs. (52) and (53) with  $n_2 = N|\varphi(\mathbf{r}_\perp, t)|^2$  into Eq. (43), we finally obtain the desired effective 2D equation. This equation governs the transverse dynamics of arbitrary

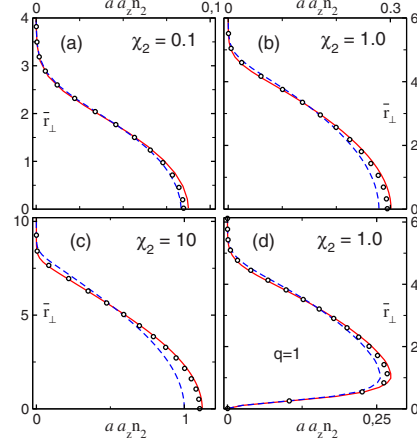


FIG. 6. (Color online) Radial density profile  $n_2(r_\perp)$  of disk-shaped condensates in a harmonic trap with aspect ratio  $\lambda = \omega_z/\omega_\perp = 10$  and  $\chi_2 = 0.1, 1, \text{ and } 10$ . (a)–(c) Ground-state ( $q=0$ ) equilibrium configuration. (d) Equilibrium configuration compatible with a vortex of charge  $q=1$ . Solid lines are numerical results obtained from our effective 2D Eq. (43). Dashed lines are numerical results obtained from the 2D NPSE by Salasnich *et al.* Open symbols are exact numerical results obtained from the full 3D GPE.

mean-field disk-shaped condensates with repulsive interatomic interactions, accounting properly for the effects from the axial degrees of freedom. In the quasi-2D mean-field regime ( $aa_z n_2 \ll 1$ ), it reduces to

$$i\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_\perp^2 \varphi + V_\perp(\mathbf{r}_\perp) \varphi + g_{2D} N |\varphi|^2 \varphi, \quad (54)$$

where  $g_{2D} = g/\sqrt{2\pi} a_z = 2\sqrt{2\pi} a a_z \hbar \omega_z$  and we have absorbed a constant  $\hbar \omega_z/2$  into the definition of the generic transverse potential  $V_\perp(\mathbf{r}_\perp)$ . Similarly, in the TF regime ( $aa_z n_2 \gg 1$ ), the effective 2D equation reduces to

$$i\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_\perp^2 \varphi + V_\perp(\mathbf{r}_\perp) \varphi + \hbar \omega_z [(3\pi/\sqrt{2}) a a_z N |\varphi|^2]^{2/3} \varphi. \quad (55)$$

It can be easily verified that both Eq. (54) and Eq. (55) are the correct limits of the underlying 3D GPE. As in the 1D case, our effective 2D equation permits one to derive analytical expressions for ground-state properties of disk-shaped condensates such as the chemical potential, condensate radius, radial density profile, and local sound velocity. These analytical expressions reduce to the correct formulas in both the TF and the perturbative regimes, and remain valid and accurate in between these two limiting cases. Since the calculations are more complicated than before we refer the reader to our previous work for details [20].

Next we shall consider disk-shaped condensates in a confining potential that is also harmonic in the radial direction  $V_\perp(r_\perp) = \frac{1}{2} m \omega_\perp^2 r_\perp^2$ . The corresponding oscillator length is  $a_\perp = \sqrt{\hbar/m\omega_\perp}$  and the trap aspect ratio now satisfies the inequality  $\lambda = \omega_z/\omega_\perp \gg 1$ . In Fig. 6 we show the radial density



profile  $n_2(r_\perp)$  of condensates in a trap with  $\lambda=10$ , in the different relevant regimes characterized by the parameter  $\chi_2$ . The dimensionless variable  $\bar{r}_\perp$  is defined as  $\bar{r}_\perp=r_\perp/a_\perp$ . Figures 6(a)–6(c) correspond to the ground-state ( $q=0$ ) equilibrium configuration, while Fig. 6(d) corresponds to the equilibrium configuration compatible with a  $q=1$  vortex. Solid lines are numerical results obtained from our effective 2D Eq. (43) with  $\mu_z(|\varphi|^2)$  given by Eqs. (52) and (53). Dashed lines are numerical results obtained from the 2D NPSE by Salasnich *et al.* [15] and open symbols are exact numerical results obtained from the full 3D GPE. In the perturbative regime, for  $\chi_2=0.1$ , the 2D NPSE is somewhat more accurate. This is precisely the parameter region where the error of our effective equation is maximum. As  $\chi_2$  increases, our equation becomes more accurate. This can be appreciated in Figs. 6(b)–6(d) which show that our results remain very accurate as  $\chi_2$  increases. On the contrary, the error of the 2D NPSE increases with  $\chi_2$ , being of the order of 5% for  $\chi_2=1$  and of the order of 10% for  $\chi_2=10$ . This is a consequence of the fact that the underlying (Gaussian) variational wave function that leads to the 2D NPSE cannot reproduce properly the TF regime.

To investigate the validity of our effective equation in time-dependent problems we have followed the same procedure as before. We start from the equilibrium configuration of condensates confined in a harmonic trap with  $\lambda=10$ . We then perturb the system by changing instantaneously the radial confinement frequency as  $\omega_\perp \rightarrow 1.1\omega_\perp$  and follow the subsequent evolution in time of the mean squared radial amplitude  $\langle \bar{r}_\perp^2 \rangle = \int d^2\bar{r}_\perp \bar{r}_\perp^2 n_2(\bar{r}_\perp, t)$ . Figure 7 shows the corresponding results for condensates with  $\chi_2=1$  and 10. Solid lines are numerical results obtained from our effective 2D Eq. (43) with  $\mu_z(|\varphi|^2)$  given by Eqs. (52) and (53), dashed lines are numerical results obtained from the 2D NPSE, and open symbols are exact numerical results obtained from the full 3D GPE. As is apparent from the figure, our effective 2D equation is again more accurate than the 2D NPSE by Salasnich *et al.*

#### IV. CONCLUSION

In this work, by applying the standard adiabatic approximation and using the analytical expression for the transverse local chemical potential obtained in our previous work [20], we have derived an effective 1D equation that governs the axial dynamics of mean-field cigar-shaped condensates with repulsive interatomic interactions. This equation, which incorporates accurately the contribution from the transverse degrees of freedom, has the correct limits in both the quasi-1D mean-field regime and the TF regime. Since our expression for the local chemical potential is very accurate, the validity of the above equation relies almost exclusively on the validity of the well established adiabatic approximation.

We have compared our effective 1D equation with the 1D NPSE by Salasnich *et al.* which provides more accurate results than any other previously proposed effective equation.

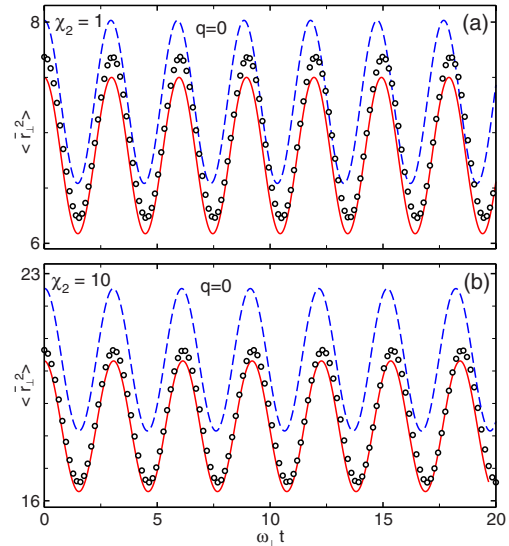


FIG. 7. (Color online) Time evolution of the mean squared amplitude ( $\bar{r}_\perp^2$ ) of disk-shaped condensates with  $\chi_2=1$  and 10 after a perturbation  $\omega_\perp \rightarrow 1.1\omega_\perp$ . The aspect ratio of the harmonic trap before perturbation is  $\lambda=\omega_z/\omega_\perp=10$ . Solid lines are numerical results obtained from our effective 2D Eq. (43). Dashed lines are numerical results obtained from the 2D NPSE by Salasnich *et al.* Open symbols are exact numerical results obtained from the full 3D GPE.

We have demonstrated that our effective 1D equation is more accurate, which, in part, is a consequence of the fact that our approach, unlike that by Salasnich *et al.*, reproduces correctly the TF limit. Moreover, our equation allows treating condensates containing an axisymmetric vortex with no additional cost. Because of its simplicity, it also permits one to derive fully analytical expressions for ground-state properties such as the chemical potential, axial length, axial density profile, and local sound velocity. These analytical expressions reduce to the correct analytical formulas in both the TF and the perturbative regimes, and remain valid and accurate in between these two limiting cases.

Following the same procedure we have also derived an effective 2D equation that governs the transverse dynamics of mean-field disk-shaped condensates, accounting properly for the contribution from the axial degrees of freedom. This equation is also more accurate than the 2D NPSE by Salasnich *et al.* As in the 1D case, from this effective equation, which also has the correct limits in both the quasi-2D and the TF regime, one can derive analytical expressions for ground-state properties of cigar-shaped condensates such as the chemical potential, condensate radius, radial density profile, and local sound velocity.

#### ACKNOWLEDGMENTS

This work has been supported by MEC (Spain) and FEDER fund (EU) (Contract No. Fis2005-02886).

A. MUÑOZ MATEO AND V. DELGADO

PHYSICAL REVIEW A **77**, 013617 (2008)

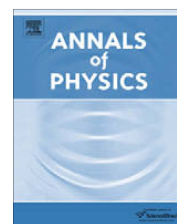
- [1] M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthews, C. E. Wieman, and E. A. Cornell, *Science* **269**, 198 (1995).
- [2] K. B. Davis, M.-O. Mewes, M. R. Andrews, N. J. van Druten, D. S. Durfee, D. M. Kurn, and W. Ketterle, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 3969 (1995).
- [3] C. C. Bradley, C. A. Sackett, and R. G. Hulet, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 985 (1997).
- [4] E. P. Gross, *Nuovo Cimento* **20**, 454 (1961); *J. Math. Phys.* **4**, 195 (1963); L. P. Pitaevskii, *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **40**, 646 (1961) [*Sov. Phys. JETP* **13**, 451 (1961)].
- [5] A. M. Mateo and V. Delgado, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 180409 (2006).
- [6] M. Olshanii, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 938 (1998).
- [7] D. S. Petrov, G. V. Shlyapnikov, and J. T. M. Walraven, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 3745 (2000).
- [8] D. S. Petrov, M. Holzmann, and G. V. Shlyapnikov, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 2551 (2000).
- [9] V. Dunjko, V. Lorent, and M. Olshanii, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 5413 (2001).
- [10] K. K. Das, *Phys. Rev. A* **66**, 053612 (2002).
- [11] A. Görlitz, J. M. Vogels, A. E. Leanhardt, C. Raman, T. L. Gustavson, J. R. Abo-Shaeer, A. P. Chikkatur, S. Gupta, S. Inouye, T. Rosenband, and W. Ketterle, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 130402 (2001).
- [12] C. Menotti and S. Stringari, *Phys. Rev. A* **66**, 043610 (2002).
- [13] A. D. Jackson, G. M. Kavoulakis, and C. J. Pethick, *Phys. Rev. A* **58**, 2417 (1998).
- [14] M. L. Chiofalo and M. P. Tosi, *Phys. Lett. A* **268**, 406 (2000).
- [15] L. Salasnich, A. Parola, and L. Reatto, *Phys. Rev. A* **65**, 043614 (2002).
- [16] P. Massignan and M. Modugno, *Phys. Rev. A* **67**, 023614 (2003).
- [17] A. M. Kamchatnov and V. S. Shchesnovich, *Phys. Rev. A* **70**, 023604 (2004).
- [18] W. Zhang and L. You, *Phys. Rev. A* **71**, 025603 (2005).
- [19] M. Krämer, C. Menotti, and M. Modugno, *J. Low Temp. Phys.* **138**, 729 (2005).
- [20] A. M. Mateo and V. Delgado, *Phys. Rev. A* **75**, 063610 (2007); A. Muñoz Mateo and V. Delgado, *ibid.* **74**, 065602 (2006).
- [21] J. A. M. Huhtamäki, M. Möttönen, T. Isoshima, V. Pietilä, and S. M. Virtanen, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 110406 (2006).
- [22] V. M. Pérez-García, H. Michinel, J. I. Cirac, M. Lewenstein, and P. Zoller, *Phys. Rev. A* **56**, 1424 (1997); V. M. Pérez-García, H. Michinel, J. I. Cirac, M. Lewenstein, and P. Zoller, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 5320 (1996).
- [23] L. Salasnich, A. Parola, and L. Reatto, *Phys. Rev. A* **69**, 045601 (2004).

## **A.5 Effective one-dimensional dynamics of elongated Bose-Einstein condensates**

A. Muñoz Mateo and V. Delgado,  
Annals of Physics (NY) **324**, 709 (2009).

Contents lists available at [ScienceDirect](http://www.sciencedirect.com)

# Annals of Physics

journal homepage: [www.elsevier.com/locate/aop](http://www.elsevier.com/locate/aop)

## Effective one-dimensional dynamics of elongated Bose–Einstein condensates

A. Muñoz Mateo, V. Delgado\*

*Departamento de Física Fundamental II, Universidad de La Laguna, La Laguna, Tenerife, Spain*

### ARTICLE INFO

#### Article history:

Received 3 September 2008

Accepted 8 October 2008

Available online 1 November 2008

#### PACS:

03.75.Kk

05.30.Jp

#### Keyword:

Effective equations for cigar-shaped BECs

### ABSTRACT

By using a variational approach in combination with the adiabatic approximation we derive a new effective 1D equation of motion for the axial dynamics of elongated condensates. For condensates with vorticity  $|q| = 0$  or 1, this equation coincides with our previous proposal [A. Muñoz Mateo, V. Delgado, *Phys. Rev. A* 77 (2008) 013617]. We also rederive the nonpolynomial Schrödinger equation (NPSE) in terms of the adiabatic approximation. This provides a unified treatment for obtaining the different effective equations and allows appreciating clearly the differences and similarities between the various proposals. We also obtain an expression for the axial healing length of cigar-shaped condensates and show that, in the local density approximation and in units of the axial oscillator length, it coincides with the inverse of the condensate axial half-length. From this result it immediately follows the necessary condition for the validity of the local density approximation. Finally, we obtain analytical formulas that give the frequency of the axial breathing mode with accuracy better than 1%. These formulas can be relevant from an experimental point of view since they can be expressed in terms only of the axial half-length and remain valid in the crossover between the Thomas–Fermi and the quasi-1D mean-field regimes. We have corroborated the validity of our results by numerically solving the full 3D Gross–Pitaevskii equation.

© 2008 Elsevier Inc. All rights reserved.

### 1. Introduction

In recent years there has been great interest in the physics of Bose–Einstein condensates of dilute atomic gases confined in highly elongated traps [1–9]. These systems are routinely produced exper-

\* Corresponding author.

E-mail addresses: [ammateo@ull.es](mailto:ammateo@ull.es) (A. Muñoz Mateo), [vdelgado@ull.es](mailto:vdelgado@ull.es) (V. Delgado).

imentally by using microfabricated atom chips [10–12] or tight optical lattices [13,14] and have important applications in generation and manipulation of matter-wave solitons [15,16] and in the design of highly sensitive quantum devices such as matter-wave interferometers [17–19]. From a theoretical point of view, in the mean-field regime and zero temperature limit, they are accurately described in terms of a macroscopic wave function  $\psi(\mathbf{r}, t)$  that satisfies the Gross–Pitaevskii equation (GPE) [20]

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) + gN |\psi|^2 \right) \psi, \quad (1)$$

where  $N$  is the number of atoms,  $g = 4\pi\hbar^2 a/m$  is the interaction strength determined by the  $s$ -wave scattering length  $a$ , and  $V(\mathbf{r})$  is the potential of the confining trap. In this work we shall restrict ourselves to condensates with repulsive interatomic interactions ( $a > 0$ ).

In highly anisotropic cigar-shaped traps the radial confinement can be so tight that the transversal motion becomes practically reduced to zero-point oscillations. Under these circumstances, only the slow axial degrees of freedom are relevant and the condensate dynamics becomes effectively one-dimensional. This is the quasi-1D mean-field regime. More generally, a high anisotropy always induces two very different time scales. When the axial motion is sufficiently slow in space and time that the radial degrees of freedom can adjust practically instantaneously to the different axial configurations, the radial motion becomes irrelevant and one can still study the condensate dynamics in terms of an effective equation of lower dimensionality. Several proposals have been made in recent years in this respect [21–26].

By using the adiabatic approximation and the local chemical potential that follows from a suitable ansatz for the condensate local density [27], we derived in Ref. [28] an effective 1D equation of motion for the axial dynamics of cigar-shaped condensates with repulsive interatomic interactions. We demonstrated that this equation, which is also applicable to condensates containing an axisymmetric vortex of topological charge  $q$ , is more accurate than previous proposals. It also has the advantage that it allows to obtain very accurate analytical expressions for a number of ground-state properties, and these expressions remain valid for condensates with an arbitrary number of particles. Despite these merits, from a fundamental point of view it would be desirable to find a more systematic way of deriving this equation. In this work, by using a variational approach in combination with the adiabatic approximation we derive a new effective equation of motion which, for  $|q| = 0$  and 1, coincides exactly with our previous proposal. We also rederive the nonpolynomial Schrödinger equation (NPSE) in terms of the adiabatic approximation. This provides a unified method for obtaining the different effective equations and allows appreciating clearly the differences and similarities between the various proposals. Interestingly, it also demonstrates that in certain cases a variational approach based on the chemical-potential functional can produce more simple and accurate results than the usual variational approach based on the energy functional. We also obtain an expression for the *axial healing length* of cigar-shaped condensates and show that, in the local density approximation and in units of the axial oscillator length, it coincides with the inverse of the axial half-length. From this result it immediately follows the necessary condition for the validity of the local density approximation. Finally, we obtain analytic formulas that give the frequency of the axial breathing mode of an elongated condensate with accuracy better than 1% and remain valid in the crossover between the Thomas–Fermi (TF) and the quasi-1D mean-field regimes.

## 2. Effective 1D equation of motion

In Ref. [28] we demonstrated that under usual conditions the axial dynamics of highly elongated mean-field condensates with repulsive interatomic interactions, confined in the radial direction by a harmonic potential and containing, in general, an axisymmetric vortex of charge  $q$ , can be described by the effective 1D equation

$$i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} + V_z(z)\phi + \hbar\omega_{\perp} \sqrt{\beta_q^2 + 4aN} |\phi|^2 \phi. \quad (2)$$

This equation incorporates properly the contribution from the transverse degrees of freedom through the term proportional to  $\hbar\omega_{\perp}$ . The contribution from the vortex is contained entirely in the parameter

$$\beta_q = \frac{2^{2|q|} (|q|!)^2}{(2|q|)!}. \quad (3)$$

The absence of vortices is a particular case corresponding to  $q = 0$  and  $\beta_q = 1$ . Since vortices with  $q \geq 2$  are dynamically unstable [29–32], for condensates containing a multiply quantized vortex the equation above is only applicable up to times shorter than the vortex decay time.

Eq. (2) was derived in Ref. [28] by applying the *adiabatic approximation* and using for the corresponding local chemical potential the analytical expression

$$\mu_{\perp}(n_1) = \hbar\omega_{\perp} (|q| + 1 - \beta_q) + \hbar\omega_{\perp} \sqrt{\beta_q^2 + 4an_1}. \quad (4)$$

This expression, in turn, follows from an approximation scheme based on a suited TF-like ansatz for the condensate local density which, essentially, represents a simple extension of the Thomas–Fermi approximation [27]. In what follows we will give an alternative derivation that permits obtaining the above result in a more systematic way. To this end, it is convenient to recall very briefly the main steps that led us to Eq. (2). Under usual conditions, the time scales characterizing the axial and the radial dynamics of highly elongated condensates are so different that one can appeal to the adiabatic approximation and factorize the condensate wave function as [21,33]

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \varphi(\mathbf{r}_{\perp}; n_1(z, t)) \phi(z, t), \quad (5)$$

where  $\mathbf{r}_{\perp} = (x, y)$  and  $n_1(z, t)$  is the local density per unit length along  $z$

$$n_1(z, t) \equiv N \int d^2 \mathbf{r}_{\perp} |\psi(\mathbf{r}_{\perp}, z, t)|^2 = N |\phi(z, t)|^2. \quad (6)$$

Substituting Eq. (5) into the GPE and assuming that the axial density varies sufficiently slowly in space and time, one obtains [28]

$$i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} + V_z(z)\phi + \mu_{\perp}(n_1)\phi, \quad (7)$$

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{\perp}^2 + V_{\perp}(\mathbf{r}_{\perp}) + gn_1 |\phi|^2 \right) \phi = \mu_{\perp}(n_1)\phi, \quad (8)$$

where we also have assumed a separable confining potential  $V(\mathbf{r}) = V_{\perp}(\mathbf{r}_{\perp}) + V_z(z)$ . Eq. (7) shows that the axial dynamics is affected by the radial degrees of freedom only via the transverse local chemical potential  $\mu_{\perp}(n_1)$ . Eq. (8), which is a *stationary* GPE, reveals that, at every instant  $t$ , the transverse wave function  $\phi$  coincides locally with the equilibrium wave function of an axially uniform condensate characterized by a linear density  $n_1(z, t)$ . This result simply reflects the fact that, for highly elongated condensates, at every instant of time the (fast) transverse degrees of freedom can adjust instantaneously to the local equilibrium configuration compatible with the axial configuration of the condensate.

In what follows, we shall consider the confining potential to be axisymmetric and harmonic in the radial direction, while it remains generic in the axial direction

$$V(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} m\omega_{\perp}^2 r_{\perp}^2 + V_z(z). \quad (9)$$

Using that  $\mu_{\perp}(n_1)$  as given by Eq. (4) is an accurate approximate solution of Eq. (8), after substituting in Eq. (7) and taking into account Eq. (6), one finally arrives at Eq. (2).

Other different effective equations of motion can be obtained by using the adiabatic approximation in combination with a variational approach. To see this, it is convenient to consider the axially uniform condensate described by the transverse equation (8) as composed of an infinite series of identical

pieces of length  $L$ , with periodic boundary conditions, and containing  $N$  particles each. The exact solutions of this equation are the critical points of the energy functional

$$\frac{E[\varphi]}{N} \equiv \int d^2 \mathbf{r}_\perp \left( \frac{\hbar^2}{2m} |\nabla_\perp \varphi|^2 + V_\perp |\varphi|^2 + \frac{1}{2} g n_1 |\varphi|^4 \right), \quad (10)$$

where  $n_1 = N/L$  is the density per unit length. Thus, the problem of finding the eigenfunctions  $\varphi$  that satisfy Eq. (8) is equivalent to the problem of finding, within the *whole* space of admissible functions, those functions that make the above energy functional stationary. The corresponding local chemical potential then follows from the relationship:

$$\mu_\perp(n_1) = \frac{\partial E[\varphi]}{\partial N}. \quad (11)$$

In general, however, both problems are equally complicated, so that, in practice, one usually has to limit the search for the critical points of  $E[\varphi]$  to a subspace of convenient variational trial functions. The solutions so obtained, in general, no longer satisfy exactly the transverse equation (8), and the corresponding energy  $E[\varphi]$  and chemical potential  $\mu_\perp(n_1)$  can only be considered as mere estimations of the actual values.

Multiplying by  $\varphi^*$  and integrating on the radial coordinates, Eq. (8) leads to the chemical-potential functional

$$\mu_\perp[\varphi] \equiv \int d^2 \mathbf{r}_\perp \varphi^* \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_\perp^2 + V_\perp(\mathbf{r}_\perp) + g n_1 |\varphi|^2 \right) \varphi. \quad (12)$$

Since for condensates with repulsive interatomic interactions  $\mu_\perp[\varphi]$  is bounded from below, an independent estimation for the local chemical potential of the ground state can be obtained by minimizing directly the above functional. In the ideal-gas perturbative regime ( $g \rightarrow 0$ ) the system becomes quasi-linear and both estimates coincide. In general, however, Eqs. (10) and (12) lead to different results. When the search is performed within the whole space of admissible functions, minimization of the energy functional always yields the correct result. However, as we shall see, when the search is restricted to a subspace of variational trial functions (as is usually the case), the direct minimization of the functional (12) can lead to a better result for the chemical potential of the ground state.

To the lowest order in the perturbative regime, the ground-state solution of Eq. (8) compatible with an axisymmetric vortex of charge  $q$  takes the form [27]

$$\varphi_q(r_\perp, \theta) = \frac{\exp(iq\theta)}{\sqrt{\pi a_\perp^2 |q|!}} (r_\perp/a_\perp)^{|q|} \exp(-r_\perp^2/2a_\perp^2), \quad (13)$$

where  $a_\perp = \sqrt{\hbar/m\omega_\perp}$  is the oscillator length. It is then natural to look for the critical points of the energy functional (10) within the subspace composed of the above functions with the substitution  $a_\perp \rightarrow \Gamma a_\perp$ , where  $\Gamma$  is a dimensionless variational parameter determining the condensate width [34,35]. Minimization of Eq. (10) thus yields

$$\Gamma = \left( 1 + \frac{2an_1}{(|q|+1)\beta_q} \right)^{1/4}. \quad (14)$$

Substituting in Eq. (10) one obtains the condensate energy

$$\frac{E}{N} = \hbar\omega_\perp (|q|+1) \sqrt{1 + \frac{2an_1}{(|q|+1)\beta_q}}. \quad (15)$$

Using this expression in Eq. (11) one finally finds the desired chemical potential

$$\mu_\perp = \hbar\omega_\perp (|q|+1) \frac{1 + \frac{3an_1}{(|q|+1)\beta_q}}{\sqrt{1 + \frac{2an_1}{(|q|+1)\beta_q}}}. \quad (16)$$



Substitution of Eq. (16) into Eq. (7) then leads to the following effective 1D equation, to be compared to Eq. (2):

$$i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} + V_z(z)\phi + \hbar\omega_{\perp}(|q|+1) \frac{1 + \frac{3aN|\phi|^2}{(|q|+1)\beta_q}}{\sqrt{1 + \frac{2aN|\phi|^2}{(|q|+1)\beta_q}}} \phi. \quad (17)$$

This equation, derived here by using the standard adiabatic approximation, is nothing but the non-polynomial Schrödinger equation (NPSE) [36]. Eq. (17) is also applicable to condensates with attractive interatomic interactions.

As already said, one can still obtain a different effective equation of motion by estimating the chemical potential directly from the functional (12). In doing so, one finds a condensate width

$$\Gamma = \left( 1 + \frac{4an_1}{(|q|+1)\beta_q} \right)^{1/4}, \quad (18)$$

and, after substitution in Eq. (12) one arrives at the following expression for the local chemical potential:

$$\mu_{\perp} = \hbar\omega_{\perp}(|q|+1) \sqrt{1 + \frac{4an_1}{(|q|+1)\beta_q}}. \quad (19)$$

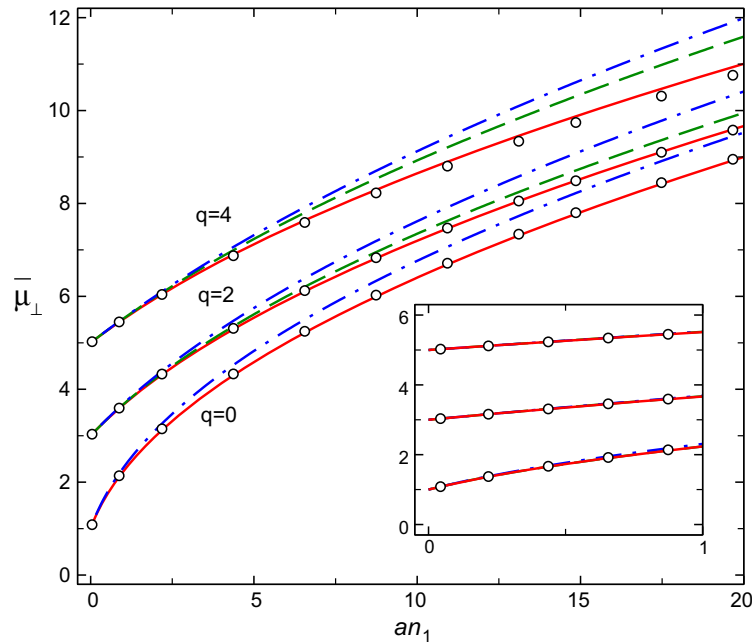
Substituting again in Eq. (7) one finally obtains

$$i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} + V_z(z)\phi + \hbar\omega_{\perp}(|q|+1) \sqrt{1 + \frac{4aN|\phi|^2}{(|q|+1)\beta_q}} \phi. \quad (20)$$

This equation, to be compared to Eqs. (2) and (17), is a new effective 1D equation governing the axial dynamics of the condensate. As can be easily verified, for  $|q| = 0$  and 1 the equation above coincides exactly with our previous proposal (2). This is remarkable since the chemical potentials that lead to both equations have been derived by applying very different techniques: while the chemical potential (19) follows from a variational approach, the chemical potential (4) was derived in Ref. [27] by using a suited TF-like ansatz for the condensate local density. This nontrivial coincidence provides additional support to our previous results. Note also that, from a dynamical point of view, these cases (corresponding to  $|q| = 0$  and 1) are precisely the most relevant ones, since for condensates with a larger vortex charge the applicability of the above equations is limited to times shorter than the vortex lifetime. For  $|q| \geq 2$ , Eqs. (2) and (20) give somewhat different results, which is a consequence of the different way in which the chemical potentials (4) and (19) incorporate the effect of the vortex. The point is to determine which of the above equations give better results. In Ref. [28] we demonstrated that, for  $q = 0$ , Eq. (2) is somewhat more accurate than Eq. (17). It remains to be seen whether this is also the case for condensates containing a vortex. It is clear that the ability of the above equations for reproducing accurately the axial dynamics of the condensate is directly related to the ability of the corresponding chemical potentials (4), (16) and (19) for reproducing accurately the lowest eigenvalue of the transverse equation (8).

Fig. 1 compares the different theoretical estimates for the local chemical potential, obtained from the above formulas, with exact results (open circles) obtained by solving numerically Eq. (8), with no approximations, for a wave function of the form  $\exp(iq\theta)\phi(r_{\perp})$  with  $q = 0, 2$  and 4. As seen in Ref. [28] our chemical potential, Eq. (4), (solid lines) is in good agreement with the numerical results. The maximum error is smaller than 1% for  $q = 0$  and 2, and smaller than 2.5% for  $q = 4$ , and this is so for any value of the dimensionless interaction parameter  $an_1$  (not only in the range shown in the figure). As mentioned before, the theoretical estimate from Eq. (19) (dashed lines) coincides exactly with that from Eq. (4) for  $q = 0$  (and also for  $q = 1$ , not shown in the figure). For  $q = 2$  the maximum error (in the range of the figure) is of the order of 3% and for  $q = 4$  it is of the order of 7%. The estimate from Eq. (16) (dash-dotted lines) turns out to be somewhat less accurate. In this case the maximum error is of the order of 5% for  $q = 0$ , of the order of 7% for  $q = 2$ , and of the order of 10% for  $q = 4$ . Moreover, these er-





**Fig. 1.** Different theoretical estimates for the local chemical potential  $\bar{\mu}_\perp = \mu_\perp/\hbar\omega_\perp$  as a function of  $an_1$ . Solid lines have been obtained from Eq. (4), dashed lines from Eq. (19), and dash-dotted lines from Eq. (16). Open circles are exact results obtained by solving numerically Eq. (8) with no approximations.

rors continue increasing with  $an_1$ . These results indicate that the effective 1D equation (2) should give a better description of the condensate dynamics than the two other alternative equations.

To verify this point we have studied the dynamical evolution of an elongated condensate with  $\lambda = 0.1$  after a sudden perturbation that excites its axial breathing mode. Figs. 2 and 3 show the evolution in time of the mean squared axial amplitude  $\langle z^2 \rangle = N^{-1} \int dz z^2 n_1(z, t)$  after a sudden perturbation at  $t=0$  in the axial confinement frequency of the form  $\omega_z \rightarrow 1.1\omega_z$ . Fig. 2 corresponds to a condensate containing a vortex of charge  $q = 1$  while Fig. 3 corresponds to a condensate containing a  $q = 3$  vortex. Solid lines have been obtained from our effective equation (2), dashed lines have been obtained from the variational equation (20), and dash-dotted lines from the NPSE (17). Open circles are exact results obtained by solving numerically the full 3D GPE with no approximations. Since all the three effective equations have the correct perturbative ( $an_1 \ll 1$ ) limit (see inset in Fig. 1), they turn out to be practically indistinguishable in this regime. As Fig. 2(a) shows, for condensates with  $q = 1$  and a (dimensionless) peak axial density  $an_1 = 1$  these equations still give rather similar results. The differences increase as  $an_1$  does, as expected from Fig. 1. This can be appreciated from Fig. 2(b) which corresponds to a condensate with  $an_1 = 10$ . In this case Eqs. (2) and (20), which for  $q = 1$  are indistinguishable, give more accurate results (solid lines) than Eq. (17) (dash-dotted lines).

As Fig. 3(a) shows, for  $q = 3$  Eq. (2) gives somewhat better results than the two other ones even for condensates with a peak axial density  $an_1 = 1$ . In this case, the results from Eq. (20) (not shown in the figure for clarity) lie exactly in between the two curves shown. Again, as Fig. 3(b) reflects, the differences become more evident as  $an_1$  increases. These results indicate that the effective 1D equation (2) is the one that gives a more accurate description of the condensate dynamics. It is important to note, however, that for condensates with  $|q| = 0$  or 1 this equation coincides exactly with the variational equation (20).

Eq. (2) has the additional advantage that, in combination with the local density approximation (whose conditions of validity will be analyzed in detail in Section 3), it allows to derive a number of useful analytical expressions for the ground-state properties of elongated condensates [28]. We next give those that will be needed later on. Consider a trapping potential that is also harmonic in the axial direction  $V_z(z) = \frac{1}{2}m\omega_z^2 z^2$ , with  $a_z = \sqrt{\hbar/m\omega_z}$  being the axial oscillator length and

$\lambda = \omega_z/\omega_\perp$  the trap aspect ratio. Then, it can be shown that the total chemical potential is given by [28]

$$\frac{\mu}{\hbar\omega_\perp} = (|q| + 1) + \frac{1}{2} \left( \sqrt{\lambda} \bar{Z} \right)^2, \quad (21)$$

where  $\bar{Z} = Z/a_z$  is the dimensionless axial half-length. The axial density profile follows from the formula

$$n_1^0(z) = \beta_q \frac{(\sqrt{\lambda} \bar{Z})^2}{4a} \left( 1 - \frac{z^2}{Z^2} \right) + \frac{(\sqrt{\lambda} \bar{Z})^4}{16a} \left( 1 - \frac{z^2}{Z^2} \right)^2 \quad (22)$$

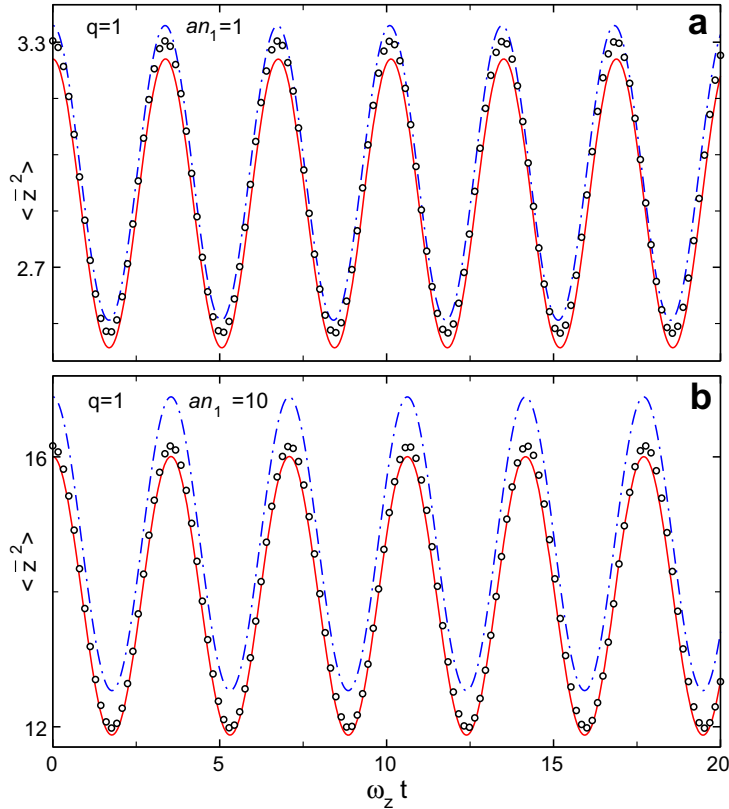
with  $n_1^0(z) = 0$  for  $|z| > Z$ . The interest of the above formulas lies in the fact that they are valid and accurate (with an accuracy typically better than 1%) not only in the TF and in the quasi-1D mean-field regime, but also in between these two limiting cases. Moreover, since they only depend on an easily measurable physical quantity (the condensate axial half-length) they can be useful for a more precise experimental characterization of these kind of systems. In the present work we will use these expressions in order to derive an approximate analytical formula for the frequencies of the axial breathing mode of elongated condensates.

It can be shown that the axial half-length satisfies the following polynomial equation [28]:

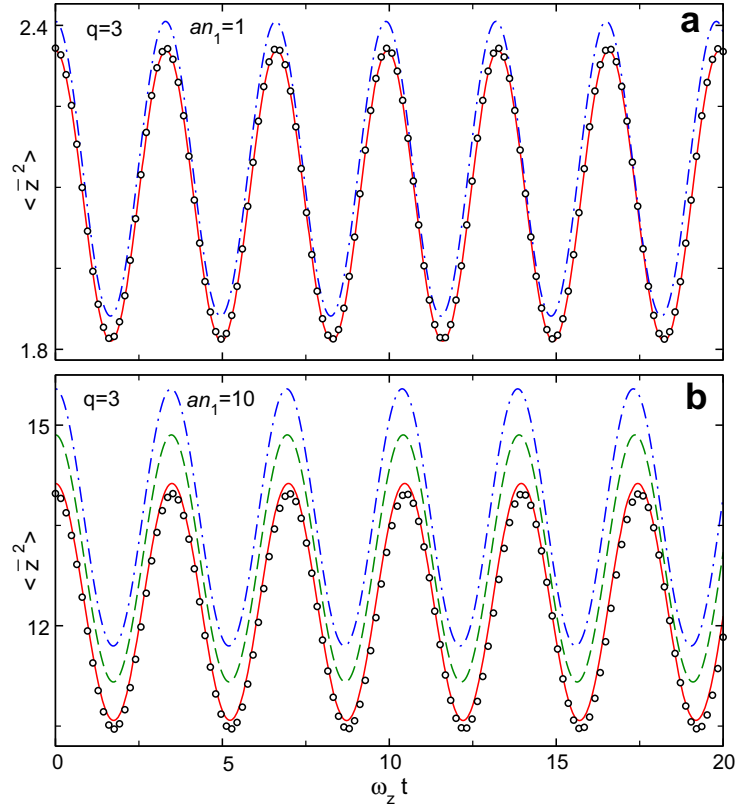
$$\frac{1}{15} \left( \sqrt{\lambda} \bar{Z} \right)^5 + \frac{1}{3} \beta_q \left( \sqrt{\lambda} \bar{Z} \right)^3 = \chi_1, \quad (23)$$

with

$$\chi_1 \equiv \frac{\lambda N a}{a_\perp}. \quad (24)$$



**Fig. 2.** Evolution of  $\langle \bar{z}^2 \rangle$  for an elongated condensate with  $q = 1$ , after a perturbation that excites its axial breathing mode ( $\bar{z} \equiv z/a_z$ ). Solid lines have been obtained from Eq. (2), dashed lines from Eq. (20), and dash-dotted lines from Eq. (17). Open circles are exact results obtained from the full 3D GPE.



**Fig. 3.** Evolution of  $\langle \bar{z}^2 \rangle$  for an elongated condensate with  $q = 3$ , after a perturbation that excites its axial breathing mode ( $\bar{z} \equiv z/a_z$ ). Solid lines have been obtained from Eq. (2), dashed lines from Eq. (20), and dash-dotted lines from Eq. (17). Open circles are exact results obtained from the full 3D GPE.

An approximate solution that satisfies the above equation for any  $\chi_1 \in [0, \infty)$ , with a residual error [27] smaller than 0.75% for  $q = 0$  and smaller than 3.2% for  $1 \leq |q| \leq 10$  is given by

$$\sqrt{\lambda} \bar{Z} = \left[ \frac{1}{(15\chi_1)^{\frac{4}{3}} + \frac{1}{3}} + \frac{1}{57\chi_1 + 345} + \frac{1}{(3\chi_1/\beta_q)^{\frac{4}{3}}} \right]^{-\frac{1}{4}}. \quad (25)$$

It is clear that the variational equation (20) also permits deriving analytical expressions for the relevant ground-state properties. For  $|q| = 0$  and 1 one obtains the same expressions (21)–(25). For  $|q| \geq 2$ , the only modification is that the second term on the right-hand side of Eq. (22) and the first term on the left-hand side of Eq. (23) become multiplied by the factor  $\beta_q/(|q| + 1)$ . As expected from Fig. 1, these modified equations turn out to be somewhat less accurate than the above equations, and for this reason, except for the present Section, we shall not consider them further in this work. Substitution of Eqs. (6) and (13) (with  $a_{\perp} \rightarrow \Gamma a_{\perp}$ ) into Eq. (5) leads to the equilibrium variational wave function

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{\exp(iq\theta)}{\Gamma a_{\perp} \sqrt{\pi|q|!}} \left( \frac{r_{\perp}}{\Gamma a_{\perp}} \right)^{|q|} \exp\left(-\frac{r_{\perp}^2}{2\Gamma^2 a_{\perp}^2}\right) \sqrt{\frac{n_1^0(z)}{N}}, \quad (26)$$

where  $\Gamma(n_1^0)$  is the ( $z$ -dependent) equilibrium condensate width given by Eq. (18) and  $n_1^0(z)$  is the axial density profile given by Eq. (22) (conveniently modified if  $|q| \geq 2$ ). On the other hand, from the equilibrium condensate density  $n(\mathbf{r}) = N |\psi(\mathbf{r})|^2$  one finds the following expression relating the peak density  $n(\mathbf{0})$  with the peak axial density  $n_1^0(0)$  of a cigar-shaped condensate with no vortices:

$$n(\mathbf{0}) = \frac{n_1^0(0)}{\pi a_{\perp}^2 \sqrt{1 + 4an_1^0(0)}}. \quad (27)$$

Since  $an_1^0(0) = \left(\sqrt{\lambda\bar{Z}}/2\right)^2 + \left(\sqrt{\lambda\bar{Z}}/2\right)^4$ , the above formula can also be used to obtain  $n(\mathbf{0})$  as a function of  $Z$ . Eq. (27) has the correct limits in the two extreme regimes. In particular, in the perturbative regime ( $an_1 \ll 1$ ) it reduces to  $n(\mathbf{0}) = n_1^0(0)/\pi a_\perp^2$ , whereas in the TF regime ( $an_1 \gg 1$ ) it takes the form  $n(\mathbf{0}) = \sqrt{n_1^0(0)/a}/2\pi a_\perp^2$ .

### 3. Axial healing length

For later purposes, it is convenient to rewrite the effective 1D equation (2) in terms of an equivalent system of hydrodynamic equations describing the superfluid dynamics of the condensate [37]. To this end we write the axial wave function in polar form

$$\sqrt{N}\phi(z, t) = \sqrt{n_1(z, t)} e^{iS(z, t)}. \quad (28)$$

By substituting in Eq. (2), one arrives after some algebra at the following equations governing the evolution in time of the axial density  $n_1$  and velocity field  $v \equiv (\hbar/m)\partial S/\partial z$ :

$$\frac{\partial n_1}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial z}(n_1 v) = 0, \quad (29)$$

$$m \frac{\partial v}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial z} \left( \mu_\perp(n_1) + V_z + \frac{1}{2} m v^2 - \frac{\hbar^2}{2m\sqrt{n_1}} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \sqrt{n_1} \right) = 0. \quad (30)$$

In these equations, that are completely equivalent to Eq. (2), the mean-field interaction energy between atoms enters through the local chemical potential  $\mu_\perp(n_1)$  given by Eq. (4). The term proportional to  $\hbar^2$  is the quantum pressure, which has its origin in the quantum kinetic energy of the system. Note that  $\mu_\perp(n_1)$  can always be written as

$$\mu_\perp(n_1) = \hbar\omega_\perp(|q| + 1) + \tilde{\mu}_\perp(n_1). \quad (31)$$

This can be seen from the transverse equation (8), whose exact perturbative solution is an infinite series of the form  $\mu_\perp(n_1) = \hbar\omega_\perp(|q| + 1) + 2\beta_q^{-1}\hbar\omega_\perp an_1 + \dots$ . From Eq. (30) it is thus clear that the last term on the right-hand side of Eq. (31) is the only one that contributes to the dynamics. Taking this into account, and defining, as usual, the axial healing length  $\xi_z$  as the length scale for which the spatial variations in the condensate density induce a quantum pressure comparable in magnitude to the contribution from the interaction energy, i.e.,

$$\frac{\hbar^2}{2m\xi_z^2} \sim \tilde{\mu}_\perp(n_1), \quad (32)$$

one obtains the following expression for the axial healing length of elongated condensates:

$$\xi_z = \frac{\hbar}{\sqrt{2m[\mu_\perp(n_1) - \hbar\omega_\perp(|q| + 1)]}}. \quad (33)$$

In the absence of vortices ( $q = 0$ ), the above formula reduces to that introduced in Ref. [28]. When the length scale  $\Delta_z$  of the spatial variations of the condensate density along  $z$  is much greater than  $\xi_z$  the contribution from the quantum pressure becomes negligible in comparison with the contribution from the interaction energy, and Eq. (30) reduces to

$$m \frac{\partial v}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial z} \left( \mu_\perp(n_1) + V_z + \frac{1}{2} m v^2 \right) = 0. \quad (34)$$

In the stationary state  $v = 0$ , and the above equation leads to

$$\mu = \mu_\perp(n_1^0) + V_z(z), \quad (35)$$

where  $n_1^0(z)$  denotes the equilibrium density per unit length and  $\mu$  is the total chemical potential of the condensate. Eq. (35), which holds whenever  $\Delta_z \gg \xi_z$  and involves no additional approximations, is the so-called local density approximation.

In what follows, we shall consider a stationary condensate confined by a trapping potential that is also harmonic in the axial direction  $V_z(z) = \frac{1}{2}m\omega_z^2 z^2$ . Substituting Eqs. (35) and (21) into Eq. (33) one finds the following expression for the *local* axial healing length of an elongated condensate in the local density approximation:

$$\frac{\xi_z(z)}{a_z} = \frac{(Z/a_z)^{-1}}{\sqrt{1 - z^2/Z^2}}. \quad (36)$$

This formula shows that at the condensate edges the axial healing length diverges, which is an expected result since in this region the kinetic energy can never be neglected in comparison with the interaction energy. Defining, as is usual, the healing length of the condensate as the healing length at the center of the density cloud one arrives at

$$\frac{\xi_z}{a_z} = \left(\frac{Z}{a_z}\right)^{-1}. \quad (37)$$

This formula reflects that in the local density approximation and in units of the axial oscillator length, the healing length of the condensate coincides with the inverse of its axial half-length. As already said, in order for the local density approximation to be valid it is sufficient that  $\xi_z \ll \Delta_z$ . Thus, taking into account that for a condensate in its stationary state  $\Delta_z$  is of the order of  $Z$ , it follows from Eq. (37) that the validity of the local density approximation requires the condition

$$\frac{Z}{a_z} \gg \left(\frac{Z}{a_z}\right)^{-1}. \quad (38)$$

It can be easily verified that in the intermediate and TF regimes the condition  $\lambda \ll 1$  (which always holds for elongated condensates) already guarantees the above requirement. In the quasi-1D mean-field regime, however, the trap aspect ratio  $\lambda$  must be sufficiently small so as to satisfy the inequality (38). Taking into account that in this regime  $an_1^0(0) \simeq \beta_q \left(\sqrt{\lambda}Z/2\right)^2$ , one finds that the validity of the local density approximation in the perturbative ( $an_1^0 \ll 1$ ) regime requires the condition

$$\lambda \ll \frac{4an_1^0(0)}{\beta_q}. \quad (39)$$

Alternatively, using that for  $\chi_1 \ll 1$  one has  $\chi_1 \simeq (\beta_q/3) \left(\sqrt{\lambda}Z\right)^3$ , the above condition can also be written as

$$\lambda \ll \left(\frac{3\chi_1}{\beta_q}\right)^{2/3}. \quad (40)$$

#### 4. Collective oscillations

We are interested in obtaining an analytic formula for the frequency of the axial breathing mode of elongated condensates, applicable also in the crossover between the TF and the quasi-1D mean-field regimes. To this end we will use the hydrodynamical equation (34). Considering small linear oscillations around the equilibrium configuration  $n_1 = n_1^0 + \delta n_1$  and  $v = \delta v$ , after linearization, Eq. (34) takes the form

$$m \frac{\partial}{\partial t} \delta v + \frac{\partial}{\partial z} \left( \mu_{\perp}(n_1^0) + \left. \frac{\partial \mu_{\perp}}{\partial n_1} \right|_0 \delta n_1 + V_z \right) = 0, \quad (41)$$

Taking into account Eq. (35), the above equation reduces to

$$m \frac{\partial}{\partial t} \delta v + \frac{\partial}{\partial z} \left( \left. \frac{\partial \mu_{\perp}}{\partial n_1} \right|_0 \delta n_1 \right) = 0, \quad (42)$$

where, from Eq. (4), one has

$$\left. \frac{\partial \mu_{\perp}}{\partial n_1} \right|_0 = \frac{2ah\omega_{\perp}}{\sqrt{\beta_q^2 + 4an_1^0}}, \quad (43)$$

with  $n_1^0(z)$  given by Eq. (22). We look for solutions of Eq. (42) in the form of (axial) dilatations [38,39], that is, we introduce a scaling parameter  $b(t)$  satisfying the relationships  $z = b(t)z_0$  and  $v = \dot{b}(t)z_0 = zb(t)/b(t)$ , and assume that the axial density cloud at any  $t$  is related to its initial value as

$$n_1(z, t) = \frac{1}{b(t)} n_1^0(z_0) = \frac{1}{b(t)} n_1^0\left(\frac{z}{b(t)}\right). \quad (44)$$

For linear oscillations, the case we are interested in,  $b(t) = 1 + \delta b(t)$  and  $\delta v = \delta \dot{b}(t)z$  with  $\delta b(t) = \delta b_0 e^{-i\omega t}$ . Thus, the first term in Eq. (42) takes the form

$$m \frac{\partial}{\partial t} \delta v = -m\omega^2 z \delta b. \quad (45)$$

As for the second term, we note that taking into account Eq. (44),  $\delta n_1$  can be written as

$$\delta n_1 = \left. \frac{\partial n_1}{\partial b} \right|_{b=1} \delta b = - \left[ \left( 1 + z \frac{\partial}{\partial z} \right) n_1^0(z) \right] \delta b. \quad (46)$$

Using now Eq. (22), one finds

$$\delta n_1 = \left[ \frac{(\sqrt{\lambda} \bar{z})^2}{2a} \frac{z^2}{Z^2} \left\{ \beta_q + \frac{(\sqrt{\lambda} \bar{z})^2}{2} \left( 1 - \frac{z^2}{Z^2} \right) \right\} - n_1^0 \right] \delta b. \quad (47)$$

From Eqs. (4), (35) and (21) one has

$$\sqrt{\beta_q^2 + 4an_1^0} - \beta_q = \frac{(\sqrt{\lambda} \bar{z})^2}{2} \left( 1 - \frac{z^2}{Z^2} \right). \quad (48)$$

Using this relationship in Eq. (47) we obtain

$$\delta n_1 = \left[ \frac{(\sqrt{\lambda} \bar{z})^2}{2a} \frac{z^2}{Z^2} \sqrt{\beta_q^2 + 4an_1^0} - n_1^0 \right] \delta b. \quad (49)$$

Substituting now Eqs. (43), (49) and (22) into the second term of Eq. (42), after some algebra one finally obtains

$$\frac{\partial}{\partial z} \left( \left. \frac{\partial \mu_{\perp}}{\partial n_1} \right|_0 \delta n_1 \right) = m\Omega^2(z) \omega_z^2 z \delta b, \quad (50)$$

where

$$\Omega^2(z) \equiv \left( 3 - \frac{2an_1^0(z)}{\beta_q^2 + 4an_1^0(z)} \right). \quad (51)$$

From Eqs. (45) and (50) it is then clear that only in the TF and the quasi-1D mean-field regimes Eq. (42) admit solutions in the form of dilatations. In the TF regime one has  $4an_1^0 \gg \beta_q^2$  and as a consequence  $\Omega^2(z) = 5/2$ . In this case, Eq. (42) reflects that the axial breathing mode is an oscillatory dilatation with a frequency  $\omega^2 = (5/2)\omega_z^2$ , in good agreement with previous results [37]. In the quasi-1D mean-field regime  $4an_1^0 \ll \beta_q^2$  and one obtains the well-known result  $\omega^2 = 3\omega_z^2$  [40–42]. In between these two limiting cases, however, the condensate dynamics does not depart too much from a dilatation. This

is a direct consequence of the fact that  $\Omega^2(z)$  as given by Eq. (51) is a slowly varying function of  $z$  that can be well approximated by its mean value

$$\Omega^2(z) \approx \frac{1}{2Z} \int_{-z}^{+z} \left( 3 - \frac{2an_1^0}{\beta_q^2 + 4an_1^0} \right) dz. \quad (52)$$

Substituting Eq. (22) and performing the integration one obtains the following analytical expression for the frequency of the axial breathing mode of a highly elongated condensate:

$$\frac{\omega^2}{\omega_z^2} = \Omega^2 \approx \frac{5}{2} + \frac{1}{2(\zeta^2 + 2)} + \frac{\tanh^{-1}(\zeta/\sqrt{\zeta^2 + 2})}{\zeta(\zeta^2 + 2)^{3/2}}, \quad (53)$$

where  $\zeta \equiv \sqrt{\lambda/\beta_q Z}$ . It can be easily verified that the above formula has the correct limits in both the TF and the quasi-1D mean-field regimes. According to Eq. (53) one can obtain  $\omega^2$  experimentally from a measurement of the condensate axial half-length  $Z$  in the equilibrium configuration. Alternatively one can also use Eq. (25) to express  $\omega^2/\omega_z^2$  as a function only of  $\chi_1$  and  $\beta_q$ .

One can still derive an independent analytic estimate for  $\omega^2$  by using the formula [6]

$$\omega^2 = -2 \frac{\langle z^2 \rangle}{d\langle z^2 \rangle/d\omega_z^2}. \quad (54)$$

This formula, which follows from a sum-rule approach, gives an upper bound to the frequency of the axial breathing mode. Substituting Eq. (22) in the mean squared amplitude

$$\langle z^2 \rangle = N^{-1} \int dz z^2 n_1^0(z), \quad (55)$$

and carrying out the integration, Eq. (54) becomes

$$\frac{\omega^2}{\omega_z^2} = \frac{8(\zeta^2 + 7)}{7 - \zeta^2 - (70 + 14\zeta^2)\Sigma}, \quad (56)$$

where  $\Sigma = (\lambda/\bar{Z})d\bar{Z}/d\lambda$ . The derivative with respect to  $\lambda$  can be conveniently rewritten as

$$\frac{d\bar{Z}}{d\lambda} = \frac{1}{\lambda\sqrt{\lambda}} \left[ \chi_1 \frac{d(\sqrt{\lambda}\bar{Z})}{d\chi_1} - \frac{1}{2}(\sqrt{\lambda}\bar{Z}) \right]. \quad (57)$$

Now the derivative on the right-hand side can be obtained from Eq. (23). In doing so, one finds

$$\Sigma = \frac{\chi_1}{5\chi_1 - \frac{2}{3}\beta_q(\sqrt{\lambda}\bar{Z})^3} - \frac{1}{2}. \quad (58)$$

Substituting this result in Eq. (56) and using again Eq. (23) to eliminate  $\zeta^5$  in favor of  $\zeta^3$  one finally obtains

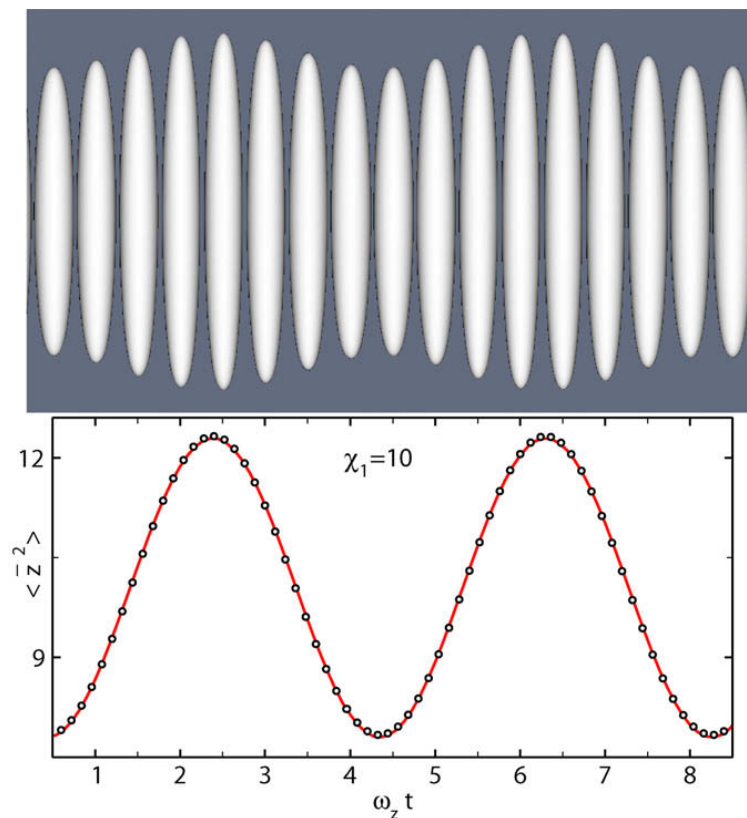
$$\frac{\omega^2}{\omega_z^2} = \frac{4\beta_q^{5/2}\zeta^3 - 15\chi_1(\zeta^2 + 5)}{3\beta_q^{5/2}\zeta^3 - 6\chi_1(\zeta^2 + 5)}, \quad (59)$$

where  $\zeta \equiv \sqrt{\lambda/\beta_q Z}$ . As before, taking into account that according to Eq. (23)  $\chi_1$  can be rewritten in terms of  $Z$ , the above equation shows that  $\omega^2$  can be obtained experimentally from a measurement of the axial half-length in the equilibrium configuration. By using Eq. (25) one can also rewrite  $\omega^2/\omega_z^2$  as a function only of  $\chi_1$  and  $\beta_q$ . Eqs. (53) and (59) have been obtained under the assumption that the quantum pressure has a negligible contribution. This implies that in the quasi-1D mean-field regime ( $\chi_1 \ll 1$ ) the trap aspect ratio  $\lambda$  must be sufficiently small so as to satisfy the requirement (40). In the intermediate and TF regimes, however, the condition  $\lambda \ll 1$  already guarantees the inequality (38) to hold true. It can be easily verified that Eqs. (53) and (59) coincide each other within 0.65% for  $q = 0$  and within 0.77% for  $q = 1$ . In order to determine to what extent the above formulas reproduce



the experimental results we have performed a computer experiment based on the numerical solution of the full 3D Gross–Pitaevskii Eq. (1). We have considered  $^{87}\text{Rb}$  condensates at zero temperature confined in a magnetic trap with axial frequency  $\omega_z = 2\pi \times 3$  Hz and different radial frequencies  $\omega_\perp = \omega_z/\lambda$  with  $\lambda \leq 1/10$ . These condensates have a scattering length  $a = 5.29$  nm and an oscillator length  $a_z = 6.23$   $\mu\text{m}$ . For condensates with a given vortex charge  $q$ , we vary the relevant parameter  $\chi_1 = \sqrt{\lambda}Na/a_z$  by modifying the trap aspect ratio  $\lambda$  and/or the number of atoms  $N$ . For a given value of  $\chi_1$  we always start with  $\lambda = 1/10$  and calculate the condensate equilibrium configuration in the trap. We then excite the axial breathing mode by introducing a small fluctuation in the axial frequency for a period of time  $t = \omega_z^{-1}$  and let the condensate oscillate in the trap. At this stage we monitor the mean squared axial amplitude as a function of time and extract the corresponding oscillation frequency from a nonlinear least-squares fit of a sinusoidal function to the numerical data. We have considered different perturbations of the trap frequency, ranging from 1% to 10%, and different fitting intervals and have always obtained the same results within our required precision (better than 0.1%). Fig. 4 displays an example corresponding to a condensate with 37,220 atoms ( $\chi_1 = 10$ ) and no vortices, in a trap with an aspect ratio  $\lambda = 1/10$ . The top panel shows the condensate evolution after a 10% perturbation in the axial trap frequency. The images are isosurfaces of the condensate density (corresponding to 5% of the maximum density) taken at intervals  $\Delta t = 0.5\omega_z^{-1}$ . The bottom panel shows the evolution of the mean squared axial amplitude in units of  $a_z^2$  ( $\bar{z}$  stands for  $z/a_z$ ). Open circles correspond to the numerical data and the solid line is the best sinusoidal fit to these data. From this fit we obtain an oscillation frequency  $\omega = 1.605\omega_z$  with an accuracy better than 0.1%.

In general, a non-negligible contribution of the quantum pressure manifests itself as an appreciable dependence of the oscillation frequency on the parameter  $\lambda$ . For a given value of  $\chi_1$ , as  $\lambda$  increases the



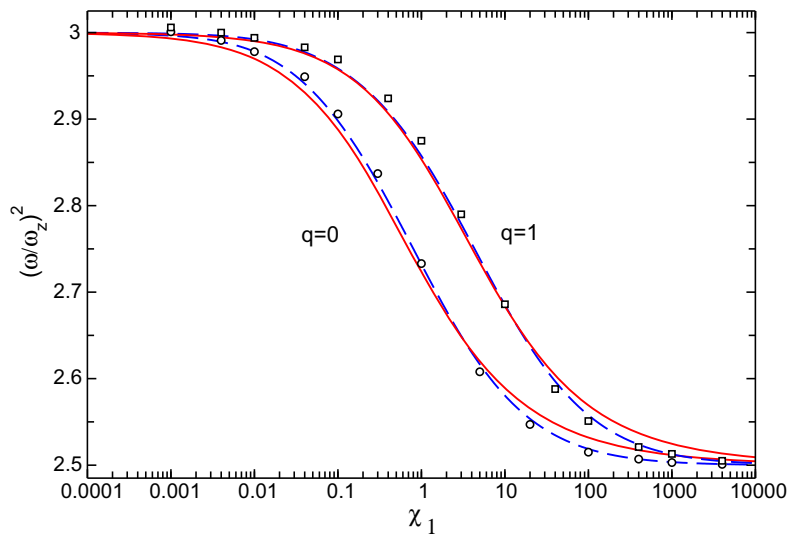
**Fig. 4.** Evolution of a  $^{87}\text{Rb}$  condensate with  $\chi_1 = 10$  and no vortices, in a trap with  $\lambda = 0.1$  after a 10% fluctuation in the axial trap frequency. Top: isosurfaces of the condensate density taken at intervals  $\Delta t = 0.5\omega_z^{-1}$ . Bottom: evolution of the mean squared axial amplitude ( $\bar{z} \equiv z/a_z$ ). Open circles correspond to the numerical data and the solid line is the best sinusoidal fit to these data.



contribution of the quantum pressure also increases, producing in turn an increase in the condensate oscillation frequency. This fact can be used in particular to quantify the contribution of the quantum pressure or, equivalently, the validity of the local density approximation. To guarantee that the numerical results obtained are comparable with the above analytic formulas we have repeated the procedure explained before using smaller and smaller values of  $\lambda$  until reaching an oscillation frequency exhibiting no appreciable dependence on  $\lambda$ . An estimation of the values required can be obtained from Eq. (40). Fig. 5 shows the (squared) frequency of the axial breathing mode  $(\omega/\omega_z)^2$  of highly elongated condensates with vorticity  $q = 0$  and 1, as a function of  $\chi_1$ . Open symbols are numerical results obtained from the full 3D GPE with an accuracy of the order of 0.1%. Solid curves are the theoretical prediction from Eqs. (53) and (25) and dashed curves are the theoretical prediction from Eqs. (59) and (25). Eq. (53) reproduces the numerical results with an accuracy better than 0.8% for  $q = 0$  and better than 0.9% for  $q = 1$ . Eq. (59) is somewhat more accurate. It reproduces the numerical results with an accuracy better than 0.4% for  $q = 0$  and better than 0.65% for  $q = 1$ . As Fig. 5 reflects, in the crossover between the TF and the quasi-1D mean-field regimes there exists a clear dependence of the frequency  $\omega$  on the vortex charge  $q$ . This fact could be used for an indirect detection of unit-charge vortices in the crossover regime. Because of their accuracy and range of applicability the above formulas could also be useful from an experimental point of view, for instance, for calibration of the trap frequencies.

## 5. Conclusion

In this work, by using the adiabatic approximation in combination with a variational approach for determining the local chemical potential associated with the corresponding radial equation, we have derived different effective 1D equations of motion for the axial dynamics of highly elongated condensates. We have shown that the minimization of the radial energy functional within a subspace of convenient variational trial functions leads to the NPSE. We also have demonstrated that in certain cases a variational approach based on the chemical-potential functional can produce better results than the usual variational approach based on the energy functional. In this regard, while the minimization of the energy functional within the whole space of admissible functions always yields the correct chemical potential, the same does not remain true when this minimization is restricted to a certain variational subspace. In fact, we have seen that in this case it is possible to obtain a more simple and yet more accurate result by minimizing directly the chemical-potential functional. By doing this, we have



**Fig. 5.** Squared frequency of the axial breathing mode  $(\omega/\omega_z)^2$  of highly elongated condensates with  $q = 0$  and 1, as a function of  $\chi_1$ . Open symbols are numerical results obtained from the full 3D GPE. Solid curves are the theoretical prediction from Eq. (53) and dashed curves are the theoretical prediction from Eq. (59).

derived a new effective 1D equation of motion which, for condensates with vorticity  $|q| = 0$  and 1, coincides exactly with our previous proposal, obtained in Ref. [28] by using a suited TF-like ansatz. The variational approach followed in this work provides us with a unified method for obtaining the different effective 1D equations in a systematic way and permits us to appreciate clearly the differences and similarities between the various proposals. A direct comparison with numerical results from the full 3D GPE indicates that the effective 1D equation proposed in Ref. [28] is the one that gives a more accurate description of the condensate axial dynamics. This equation also has the advantage that, in combination with the local density approximation, it allows to derive accurate analytical formulas for a number of ground-state properties. These formulas are valid and accurate (with an accuracy typically better than 1%) not only in the TF and in the quasi-1D mean-field regime, but also in between these two limiting cases. Moreover, since they only depend on an easily measurable physical quantity (the condensate axial half-length) they can be useful for a more precise experimental characterization of these kind of systems.

We also have obtained an expression for the axial healing length of elongated condensates and have found that, in the local density approximation and in units of the axial oscillator length, it coincides with the inverse of the condensate axial half-length. From this result it immediately follows the necessary condition for the validity of the local density approximation.

Finally, we have obtained approximate analytic formulas that give the frequency of the axial breathing mode of an elongated condensate with accuracy better than 1% and remain valid in the crossover between the TF and the quasi-1D mean-field regimes. These formulas, which as the rest of the ground-state properties can be expressed in terms only of the axial half-length  $Z$ , could be relevant from an experimental point of view since in the crossover regime (the regime where most experiments are carried out) the usual formulas are not applicable.

## Acknowledgments

This work has been supported by MEC (Spain) and FEDER fund (EU) (Contract No. Fis2005-02886).

## References

- [1] M. Olshanii, *Phys. Rev. Lett.* 81 (1998) 938.
- [2] D.S. Petrov, G.V. Shlyapnikov, J.T.M. Walraven, *Phys. Rev. Lett.* 85 (2000) 3745.
- [3] V. Dunjko, V. Lorent, M. Olshanii, *Phys. Rev. Lett.* 86 (2001) 5413.
- [4] K.K. Das, *Phys. Rev. A* 66 (2002) 053612.
- [5] A. Görlitz, J.M. Vogels, A.E. Leanhardt, C. Raman, T.L. Gustavson, J.R. Abo-Shaeer, A.P. Chikkatur, S. Gupta, S. Inouye, T. Rosenband, W. Ketterle, *Phys. Rev. Lett.* 87 (2001) 130402.
- [6] C. Menotti, S. Stringari, *Phys. Rev. A* 66 (2002) 043610.
- [7] W. Guerin, J.-F. Riou, J.P. Gaebler, V. Josse, P. Bouyer, A. Aspect, *Phys. Rev. Lett.* 97 (2006) 200402.
- [8] A.I. Nicolin, R. Carretero-González, P.G. Kevrekidis, *Phys. Rev. A* 76 (2007) 063609.
- [9] R. Carretero-González, D.J. Frantzeskakis, P.G. Kevrekidis, *Nonlinearity* 21 (2008) R139.
- [10] W. Hansel, P. Hommelhoff, T.W. Hansch, J. Reichel, *Nature* 413 (2001) 498.
- [11] H. Ott, J. Fortagh, G. Schlotterbeck, A. Grossmann, C. Zimmermann, *Phys. Rev. Lett.* 87 (2001) 230401.
- [12] A.E. Leanhardt, A.P. Chikkatur, D. Kielpinski, Y. Shin, T.L. Gustavson, W. Ketterle, D.E. Pritchard, *Phys. Rev. Lett.* 89 (2002) 040401.
- [13] M. Greiner, I. Bloch, O. Mandel, T.W. Hänsch, T. Esslinger, *Phys. Rev. Lett.* 87 (2001) 160405.
- [14] H. Moritz, T. Stöferle, M. Köhl, T. Esslinger, *Phys. Rev. Lett.* 91 (2003) 250402.
- [15] S. Burger, K. Bongs, S. Dettmer, W. Ertmer, K. Sengstock, A. Sanpera, G.V. Shlyapnikov, M. Lewenstein, *Phys. Rev. Lett.* 83 (1999) 5198.
- [16] A. Weller, J.P. Ronzheimer, C. Gross, J. Esteve, M.K. Oberthaler, D.J. Frantzeskakis, G. Theocharis, P.G. Kevrekidis, *Phys. Rev. Lett.* 101 (2008) 130401.
- [17] Y. Shin, M. Saba, T.A. Pasquini, W. Ketterle, D.E. Pritchard, A.E. Leanhardt, *Phys. Rev. Lett.* 92 (2004) 050405.
- [18] T. Schumm, S. Hofferberth, L.M. Andersson, S. Wildermuth, S. Groth, I. Bar-Joseph, J. Schmiedmayer, P. Krüger, *Nat. Phys.* 1 (2005) 57.
- [19] Y.-J. Wang, D.Z. Anderson, V.M. Bright, E.A. Cornell, Q. Diot, T. Kishimoto, M. Prentiss, R.A. Saravanan, S.R. Segal, S. Wu, *Phys. Rev. Lett.* 94 (2005) 090405.
- [20] E.P. Gross, *Nuovo Cimento* 20 (1961) 454;  
*J. Math. Phys.* 4 (1963) 195;  
L.P. Pitaevskii, *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* 40 (1961) 646 [*Sov. Phys. JETP* 13 (1961) 451].
- [21] A.D. Jackson, G.M. Kavoulakis, C.J. Pethick, *Phys. Rev. A* 58 (1998) 2417.
- [22] M.L. Chiofalo, M.P. Tosi, *Phys. Lett. A* 268 (2000) 406.
- [23] L. Salasnich, A. Parola, L. Reatto, *Phys. Rev. A* 65 (2002) 043614.

724

A. Muñoz Mateo, V. Delgado/*Annals of Physics* 324 (2009) 709–724

- [24] P. Massignan, M. Modugno, *Phys. Rev. A* 67 (2003) 023614.
- [25] A.M. Kamchatnov, V.S. Shchesnovich, *Phys. Rev. A* 70 (2004) 023604.
- [26] W. Zhang, L. You, *Phys. Rev. A* 71 (2005) 025603.
- [27] A. Muñoz Mateo, V. Delgado, *Phys. Rev. A* 75 (2007) 063610;  
*Phys. Rev. A* 74 (2006) 065602.
- [28] A. Muñoz Mateo, V. Delgado, *Phys. Rev. A* 77 (2008) 013617.
- [29] Y. Shin, M. Saba, M. Vengalattore, T.A. Pasquini, C. Sanner, A.E. Leanhardt, M. Prentiss, D.E. Pritchard, W. Ketterle, *Phys. Rev. Lett.* 93 (2004) 160406.
- [30] A. Muñoz Mateo, V. Delgado, *Phys. Rev. Lett.* 97 (2006) 180409.
- [31] J.A. Huhtamäki, M. Möttönen, T. Isoshima, V. Pietilä, S.M. Virtanen, *Phys. Rev. Lett.* 97 (2006) 110406.
- [32] H.M. Nilsen, E. Lundh, *Phys. Rev. A* 77 (2008) 013604.
- [33] M. Krämer, C. Menotti, M. Modugno, *J. Low Temp. Phys.* 138 (2005) 729.
- [34] G. Baym, C.J. Pethick, *Phys. Rev. Lett.* 76 (1996) 6.
- [35] V.M. Pérez-García, H. Michinel, J.I. Cirac, M. Lewenstein, P. Zoller, *Phys. Rev. A* 56 (1997) 1424.
- [36] L. Salasnich, B.A. Malomed, F. Toigo, *Phys. Rev. A* 76 (2007) 063614.
- [37] S. Stringari, *Phys. Rev. Lett.* 77 (1996) 2360.
- [38] Yu. Kagan, E.L. Surkov, G.V. Shlyapnikov, *Phys. Rev. A* 54 (1996) R1753.
- [39] Y. Castin, R. Dum, *Phys. Rev. Lett.* 27 (1996) 5315.
- [40] A. Csordas, R. Graham, *Phys. Rev. A* 59 (1999) 1477.
- [41] S. Stringari, *Phys. Rev. A* 58 (1998) 2385.
- [42] T.-L. Ho, M. Ma, *J. Low Temp. Phys.* 115 (1999) 61.

## **A.6 Three-dimensional gap solitons in Bose-Einstein condensates supported by one-dimensional optical lattices**

A. Muñoz Mateo, V. Delgado, and B. A. Malomed,  
Physical Review A **82**, 053606 (2010).

PHYSICAL REVIEW A **82**, 053606 (2010)

## Three-dimensional gap solitons in Bose-Einstein condensates supported by one-dimensional optical lattices

A. Muñoz Mateo,<sup>1</sup> V. Delgado,<sup>1,\*</sup> and Boris A. Malomed<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Departamento de Física Fundamental II, Universidad de La Laguna, E-38206 La Laguna, Tenerife, Spain

<sup>2</sup>Department of Physical Electronics, School of Electrical Engineering, Faculty of Engineering, Tel Aviv University, Tel Aviv IL-69978, Israel  
(Received 11 June 2010; published 8 November 2010)

We study fundamental and compound gap solitons (GSs) of matter waves in one-dimensional (1D) optical lattices (OLs) in a three-dimensional (3D) weak-radial-confinement regime, which corresponds to realistic experimental conditions in Bose-Einstein condensates (BECs). In this regime GSs exhibit nontrivial radial structures. Associated with each 3D linear spectral band exists a family of fundamental gap solitons that share a similar transverse structure with the Bloch waves of the corresponding linear band. GSs with embedded vorticity  $m$  may exist *inside* bands corresponding to other values of  $m$ . Stable GSs, both fundamental and compound ones (including vortex solitons), are those which originate from the bands with lowest axial and radial quantum numbers. These findings suggest a scenario for the experimental generation of robust GSs in 3D settings.

DOI: 10.1103/PhysRevA.82.053606

PACS number(s): 03.75.Lm, 05.45.Yv, 42.65.Tg

### I. INTRODUCTION

A ubiquitous tool for the control of collective excitations in Bose-Einstein condensates (BECs) is provided by optical lattices (OLs), which are induced by the interference of laser beams illuminating the condensate [1]. OLs are especially efficient in supporting matter-wave solitons. It has been predicted that two- and three-dimensional (2D and 3D) OLs can stabilize solitons against collapse [2]. OLs acting in the combination with repulsive interactions can give rise to diverse species of gap solitons (GSs), in one dimensional (1D) [3,4] and multidimensional [5,6] geometries. Quasistable GSs were created in the <sup>87</sup>Rb condensate loaded into a cigar-shaped trap incorporating an axial OL [7]. Extended states, built as segments of nonlinear Bloch waves trapped in the OL, were also reported [8].

Most theoretical studies of GSs have been carried out in the quasi-1D regime, assuming that the transverse confinement is tight enough to reduce the wave function in the transverse plane to the ground state of the corresponding 2D harmonic oscillator (HO) [9,10]. In this case, the description of the relevant dynamics amounts to the 1D Gross-Pitaevskii equation (GPE) in the axial direction, which follows from the underlying 3D equation after averaging out the radial (transverse) degree of freedom. Since in the quasi-1D regime the radial quantum  $\hbar\omega_{\perp}$  is the largest energy scale of the system, GSs cannot decay by exciting higher-order radial modes, being therefore particularly stable. However, the creation of genuine quasi-1D settings, strongly squeezed in the radial direction—for instance, those realizing the Tonks-Girardeau gas [11]—is a challenging experimental problem. The settings used in experiments with GSs [1,7,8] actually correspond to the weak transverse confinement (see details in Sec. IV). In this work we aim to predict matter-wave GSs in the regime of the weak radial confinement, characterized by a recoil energy of the axial OL,  $E_R$ , comparable to  $\hbar\omega_{\perp}$ . While this regime is most relevant to the experiment, the formation of GSs under these conditions was not yet studied theoretically. For instance,

$E_R/\hbar\omega_{\perp} = 1$  corresponds to the <sup>87</sup>Rb condensate, with  $s$ -wave scattering length  $a_s = 5.29$  nm, confined by the combination of the transverse trapping frequency  $\omega_{\perp}/2\pi = 240$  Hz and axial OL of period  $d = 1.55$   $\mu$ m (physical results given in this article correspond to this typical setting). In this regime, the axial GS structure may readily excite higher modes of the radial confinement; hence the 3D character of the dynamics is essential and the 1D reduction cannot be used. The situation is somewhat similar to that for quasi-1D GSs, which were predicted, in the framework of the density-functional description, in fermionic superfluids [12]. In that case, the underlying Fermi distribution implies the filling of many transverse energy levels.

While there are models that generalize the 1D GPE by taking into account small deviations from the one-dimensionality [9,10], we consider the setting in which the axial and radial directions are equally important and inseparable; hence the use of the full 3D equation is necessary. We demonstrate that stable solitons, which are true gap modes in terms of the underlying 3D band-gap structure, exist in this regime, suggesting possibilities for the creation of robust 3D solitons. This objective is of principal significance because, thus far, no truly 2D or 3D matter-wave solitons, nor their counterparts in optical media with the Kerr nonlinearity, have been created, in spite of many theoretical predictions [13]. We also find solitons *inside* the bands, which may exist due to the difference in the azimuthal index between the soliton and the band.

### II. THREE-DIMENSIONAL GAP SOLITONS

The 3D GPE, with the radial-HO and axial potentials,  $V_{\perp}(\mathbf{r}_{\perp}) = (M/2)\omega_{\perp}^2 r_{\perp}^2$  and  $V_z(z) = sE_R \sin^2(\pi z/d)$ , is

$$i\hbar\psi_t = [-(\hbar^2/2M)\nabla^2 + V_{\perp}(\mathbf{r}_{\perp}) + V_z(z) + gN|\psi|^2]\psi, \quad (1)$$

where  $N$  and  $M$  are the atomic number and mass,  $g \equiv 4\pi\hbar^2 a_s/M$ ,  $d$  and  $s$  are the period and depth of the OL, the recoil energy is  $E_R = (\pi\hbar)^2 / (2Md^2)$ , and the norm of the wave function is 1 [14].

Figure 1(a) displays the scaled shifted chemical potential,  $\tilde{\mu} \equiv (\mu - \hbar\omega_{\perp})/E_R$ , of the noninteracting 3D condensate

\*vdelgado@ull.es

A. MUÑOZ MATEO, V. DELGADO, AND BORIS A. MALOMED

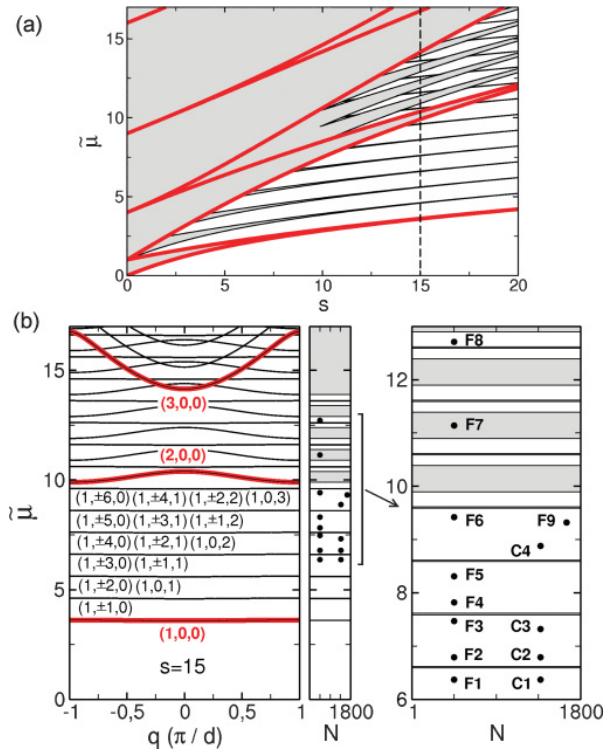
PHYSICAL REVIEW A **82**, 053606 (2010)

FIG. 1. (Color online) The band-gap structure, produced by the linearized GPE, with equal axial and transverse energies,  $E_R/\hbar\omega_\perp = 1$  (white areas are gaps). The normalized chemical potential is shown vs the scaled lattice depth,  $s$  (a), and as a function of quasimomentum  $q$  for  $s = 15$  (b). The right-hand panels in (b) indicate the location of the GSs displayed in this paper. Sets  $(n, m, n_r)$  represent the quantum numbers, and the bold red curves depict the band-gap structure in the 1D model.

( $g = 0$ ) with  $E_R/\hbar\omega_\perp = 1$ , as a function of the OL strength  $s$ . In the plot, band gaps separate shaded Bloch bands. For the sake of comparison, the band-gap diagram obtained from the corresponding 1D equation is also shown (bold red lines). Since the energy levels of the radial HO are  $E = (2n_r + |m| + 1)\hbar\omega_\perp$ , where  $n_r = 0, 1, 2, \dots$  and  $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$  are the radial and azimuthal quantum numbers, the excitation of transverse modes gives rise to a series of replicas of 1D Bloch bands, shifted up in the energy by multiples of  $\hbar\omega_\perp/E_R$ . In what follows, we present most of our results for a strong OL with  $s = 15$ , which corresponds to the dashed vertical line in Fig. 1(a). The respective spectrum is shown in Fig. 1(b), which displays  $\tilde{\mu}$  as a function of quasimomentum  $q$  in the first Brillouin zone. The 3D bands are characterized by quantum-number sets  $(n, m, n_r)$ , where  $n = 1, 2, 3, \dots$  is the band index of the corresponding 1D axial problem. As in Fig. 1(a), the superimposed bold red lines represent the results generated by the corresponding 1D equation. As indicated in Fig. 1(b), the lowest band corresponds to  $(n, m, n_r) = (1, 0, 0)$ . The next two bands, with numbers  $(1, \pm 1, 0)$ , have equal chemical potentials, being replicas of the lowest band shifted upward by  $\hbar\omega_\perp/E_R$ . Likewise, the next three bands, with numbers  $(1, \pm 2, 0)$  and  $(1, 0, 1)$ , are shifted by  $2\hbar\omega_\perp/E_R$  and

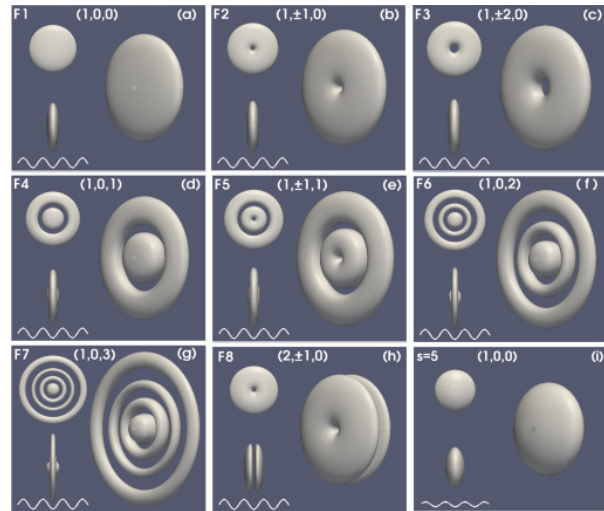


FIG. 2. (Color online) Isosurfaces of the atomic density, taken at 10% of the maximum value, for GSs corresponding to points F1–F8 in Fig. 1(b). Panel (i) depicts a GS in a weaker lattice, with  $s = 5$ . The respective quantum-number sets,  $(n, m, n_r)$ , are indicated in each panel. The length scale of the left part in each panel (reduced to 45% in comparison with the image on the right) is gauged by the OL period.

so on. Dots in the right-hand panels in Fig. 1(b) indicate the location of the GSs that we consider in this paper, with the horizontal axes indicating the number of  $^{87}\text{Rb}$  atoms in each nonlinear state.

GS solutions have been obtained as numerical solutions of the stationary version of Eq. (1), using the Newton continuation method with the Laguerre-Fourier functional basis. In Fig. 2 we display a set of solutions for GSs which correspond to points F1–F8 in Fig. 1(b). Stable GSs correspond to  $n_r = 0$  [panels (a)–(c) and (h)]. In addition, Fig. 2(i) displays an example of a loosely bound but also stable GS supported by a weaker OL, with  $s = 5$ . The parameters are adjusted to  $N = 450$  atoms [ $N = 350$  in Fig. 2(i)]; in Ref. [7], the GS had  $\simeq 250$  atoms. The right-hand image in each panel is a perspective image, while the top and bottom left plots are axial and lateral views.

As shown in Fig. 3, GS families are represented by  $\tilde{\mu}(N)$  curves, each approaching a certain band at  $N \rightarrow 0$ , whose set  $(n, m, n_r)$  is used to label the families. As  $N$  increases, the size of the GSs increases too, keeping a characteristic soliton structure. The GS with the lowest chemical potential, of type  $(1, 0, 0)$ , which corresponds to point F1 in Fig. 1(b), is shown in Fig. 2(a). GSs of this type are disk-shaped objects localized within a single cell of the axial OL. While the radial shape of this GS approaches the ground state of the corresponding HO at  $N \rightarrow 0$ , the contribution of radially excited states becomes more pronounced with the increase of  $N$ , making the GS a fully 3D mode. In particular, point F1 in Fig. 1(b), with  $\tilde{\mu} = 6.37$ , corresponds to  $\mu = 7.37\hbar\omega_\perp$  in physical units, which is *much larger* than the radial-excitation quantum,  $\hbar\omega_\perp$ . The decomposition of this GS over the basis of radial HO modes yields a mixture of states  $n_r = 0, 1$ , and  $2$ , with respective weights 76%, 22%, and 2%.



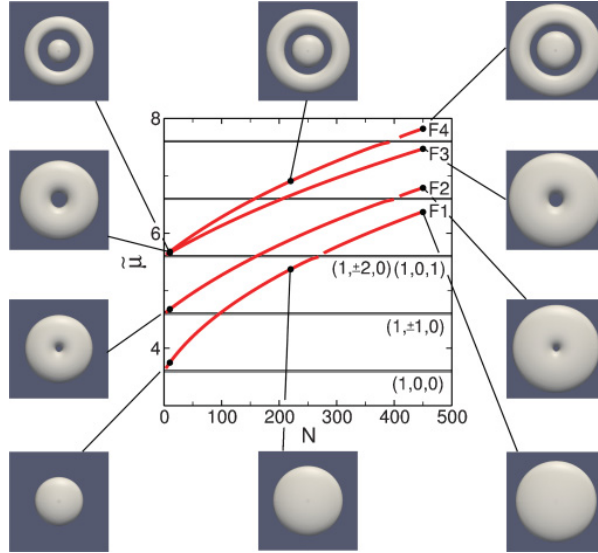


FIG. 3. (Color online) The  $\tilde{\mu}(N)$  curves representing the four lowest-lying GS families. The inserted panels display the solitons at marked points. The field of view in each panel is  $4.6 \mu\text{m} \times 4.6 \mu\text{m}$ , in terms of the  $^{87}\text{Rb}$  condensate.

As per azimuthal index  $m$ , the GSs in the  $(1, 1, 0)$  and  $(1, 2, 0)$  families carry vorticities 1 and 2; see Figs. 2 and 3. (The vorticity may also be embedded into solitons in the case of the tight transverse confinement, with  $\hbar\omega_{\perp} \gg E_R$  [10], as well as into GSs supported by the OL in the 2D geometry [6].) The GSs corresponding to  $n_r \geq 1$  feature a complex radial structure, composed of many HO modes. Nevertheless, these solitons exhibit a set of zero-density rings reminiscent of the HO wave functions with the respective values of  $n_r$ ; see Figs. 2(d), 2(f), and 2(g) for  $n_r = 1, 2$ , and 3.

The higher-order ( $n = 2$ ) band of the axial potential gives rise to GS families of types  $(2, \pm 1, 0)$ . As seen in Fig. 2(h), they exhibit two major peaks in the axial direction with a node between them, all squeezed into a *single* lattice cell (in the 1D GPE, solitons of this type are known as subfundamental GSs [4]). On the other hand, because band gaps emerging at large values of the chemical potential are very narrow, no GS of type  $(2, 0, 0)$  exists here, as it is not able to place itself within the corresponding narrow gap. It is worth noting, too, that GSs of the  $(1, 0, 3)$  and  $(1, 1, 2)$  types are found *inside* the  $(2, 1, 0)$  and  $(2, 0, 0)$  Bloch bands, respectively [the former case corresponds to point F7 in Figs. 1(b) and 2(g)], which is possible because modes with different azimuthal numbers  $m$  do not mix. In fact, these may be understood as examples of “embedded solitons,” whose chemical potential falls within linear bands. While they were studied in detail in 1D models [15], no example of multidimensional embedded solitons has been reported previously.

Fundamental gap solitons play an important role as elementary building blocks of higher order localized nonlinear structures [16]. Some examples of the latter, generated from the symmetric linear combination of three fundamental solitons, are shown in Fig. 4. The gap solitons displayed in Figs. 4(a) and 4(b), which are composed of three identical  $(1, 0, 0)$  and

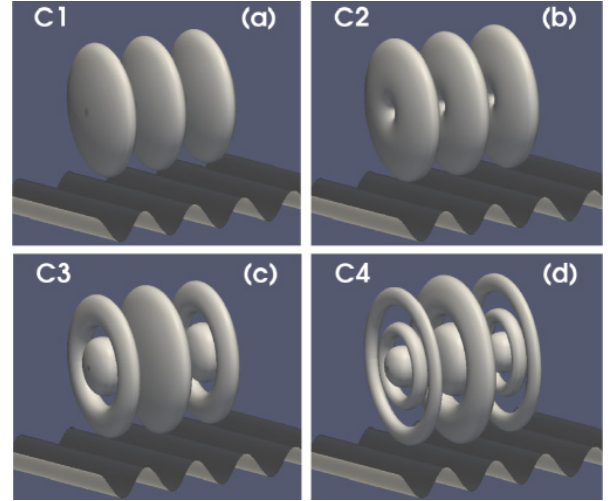


FIG. 4. (Color online) Gap-soliton complexes corresponding to points C1–C4 in Fig. 1(b). The underlying 1D lattice potential is also shown.

$(1, 1, 0)$  solitons, respectively, and correspond to points C1 and C2 in Fig. 1(b), have exactly the same chemical potentials as their respective elementary constituents ( $\tilde{\mu} = 6.37$  and 6.79) but contain approximately three times as many particles ( $N = 1372$ ). The compound gap solitons in Figs. 4(c) and 4(d), which have the same particle content as the previous ones but are higher in the spectrum (points C3 and C4), are bound states of fundamental constituents of different types. The former is composed of one  $(1, 0, 0)$  and two  $(1, 0, 1)$  solitons, while the latter contains one  $(1, 0, 1)$  and two  $(1, 0, 2)$  fundamental solitons.

### III. STABILITY

The stability of the GSs was tested by simulating their perturbed evolution. To this end, Eq. (1) was solved by the Laguerre-Fourier pseudospectral method, using the third-order Adams-Bashforth time-marching scheme. To include all potentially dangerous disturbances, we perturbed the GSs by simultaneously increasing the OL depth and decreasing its period, both by 2%, translating the OL in the axial direction by 2% of the lattice period, and applying a 2% quadrupole deformation to the transverse trapping potential. After waiting for  $t = 1$  ms, the combined perturbation was removed, allowing the system to evolve for 2 s. The simulations demonstrate that the fundamental GSs of the  $(1, 0, 0)$  and  $(1, 1, 0)$  types remain stable, except in narrow regions close to edges of the corresponding band gaps. As a representative example, Fig. 5(a) displays the evolution of the soliton of the  $(1, 0, 0)$  type, corresponding to point F9 in Fig. 1(b), which represents a GS built of 1650 atoms with  $\mu = 10.3\hbar\omega_{\perp}$ . While the latter is much greater than the transverse quantum  $\hbar\omega_{\perp}$ , the GS remains stable under the action of the 3D perturbations. The loosely bound GSs trapped in weaker OLs, such as the one in Fig. 2(i), are stable as well.

Although vortices with the  $m = 2$  are usually unstable against splitting [17], they may be stable in trapped configurations [18]. We have found that the GS of type  $(1, 2, 0)$

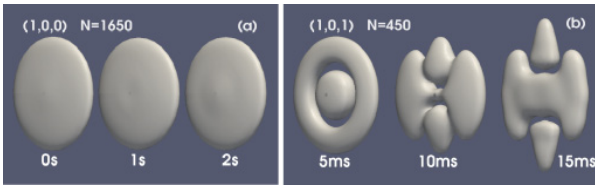


FIG. 5. (Color online) (a) The stable evolution of a GS of the (1,0,0) type after the application of the perturbation. (b) The instability of the soliton of the (1,0,1) type, from Fig. 2(d).

is stabilized by making it heavier: While it is unstable if built of  $\lesssim 300$  atoms, the one shown in Fig. 2(c), which contains 450 atoms, is robust in the simulations. On the other hand, GSs with  $n_r \geq 1$  (that is, those featuring the complex radial structure) are unstable against quadrupole perturbations. In particular, Fig. 5(b) displays the instability for the GS of type (1,0,1), initiated by a very weak (0.1%) quadrupole deformation of the trapping potential, acting for 0.2 ms. GSs with  $n = 2$  are also unstable, similar to the previously mentioned “subfundamental solitons” in 1D models [4]. Finally, the stability of GS complexes coincides with that of their fundamental constituents.

#### IV. CONCLUSION

Up to now, matter-wave GSs were actually created in shallow lattices ( $s \simeq 0.7$ ), with a weak radial confinement ( $E_R/\hbar\omega_\perp \simeq 44$ ) [7]. The respective linear spectrum does not exhibit true band gaps. This can be checked using the approximate dispersion relation for the lowest-energy band in the shallow OL,  $E(q)/E_R = (qd/\pi - 1)^2 -$

$\sqrt{4(qd/\pi - 1)^2 + s^2/16}$  [1]. As follows from this, the width of the lowest band,  $E(1) - E(0) \simeq 0.83E_R$ , is *much larger* than the gap,  $\hbar\omega_\perp \simeq 0.027E_R$ , which separates the replicas corresponding to higher values of azimuthal number  $m$ , and hence different Bloch bands overlap in this case. (For parameters of the experiment from Ref. [7], true gaps open up only at  $s \geq 16$ .) Therefore, the solitary modes obtained under such conditions are actually quasisolitons, decaying on a time scale of  $\simeq 60$  ms [7]. The present results suggest possibilities for the creation of robust fundamental and compound GSs, including vortical ones, which place themselves in true band gaps. Simultaneously, this approach opens possibilities for creating truly multidimensional matter-wave solitons, which thus far have been elusive in experiments.

In addition to the BEC, the proposed scheme may be used for the creation of 3D “light bullets” of the GS type in self-defocusing optical media with the anomalous group-velocity dispersion. In that case,  $t$  and  $z$  in Eq. (1) play the roles of the transmission distance and reduced time [13]. The corresponding lattice cannot be created as a material structure, but it may be induced by a beating wave launched at a different wavelength, similar to the virtual grating used for the creation of optical GSs in one dimension [19]. Thus far, no 3D solitons have been created in optical media.

#### ACKNOWLEDGMENTS

V.D. acknowledges financial support from Ministerio de Ciencia e Innovación FIS2009-07890 (Spain). The work of B.A.M. was supported, in part, by the German-Israel Foundation through Grant No. 149-2006.

- 
- [1] O. Morsch and M. Oberthaler, *Rev. Mod. Phys.* **78**, 179 (2006).  
 [2] B. B. Baizakov, B. A. Malomed, and M. Salerno, *Europhys. Lett.* **63**, 642 (2003); *Phys. Rev. A* **70**, 053613 (2004); J. Yang and Z. H. Musslimani, *Opt. Lett.* **28**, 2094 (2003); J. Yang, I. Makasyuk, A. Bezryadina, and Z. Chen, *Stud. Appl. Math.* **113**, 389 (2004); D. Mihalache, D. Mazilu, F. Lederer, Y. V. Kartashov, L. C. Crasovan, and L. C. Torner, *Phys. Rev. E* **70**, 055603(R) (2004).  
 [3] F. K. Abdullaev, B. B. Baizakov, S. A. Darmanyan, V. V. Konotop, and M. Salerno, *Phys. Rev. A* **64**, 043606 (2001); I. Carusotto, D. Embriaco, and G. C. La Rocca, *ibid.* **65**, 053611 (2002).  
 [4] N. K. Efremidis and D. N. Christodoulides, *Phys. Rev. A* **67**, 063608 (2003); T. Mayteevarunyoo and B. A. Malomed, *ibid.* **74**, 033616 (2006); J. Cuevas, B. A. Malomed, P. G. Kevrekidis, and D. J. Frantzeskakis, *ibid.* **79**, 053608 (2009).  
 [5] B. B. Baizakov, V. V. Konotop, and M. Salerno, *J. Phys. B* **35**, 5105 (2002); P. J. Y. Louis, E. A. Ostrovskaya, C. M. Savage, and Y. S. Kivshar, *Phys. Rev. A* **67**, 013602 (2003); Z. Shi, J. Wang, Z. Chen, and J. Yang, *ibid.* **78**, 063812 (2008).  
 [6] E. A. Ostrovskaya and Y. S. Kivshar, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 160405 (2004); H. Sakaguchi and B. A. Malomed, *J. Phys. B* **37**, 2225 (2004).  
 [7] B. Eiermann, T. Anker, M. Albiez, M. Taglieber, P. Treutlein, K. P. Marzlin, and M. K. Oberthaler, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 230401 (2004).  
 [8] T. Anker, M. Albiez, R. Gati, S. Hunsmann, B. Eiermann, A. Trombettoni, and M. K. Oberthaler, *Phys. Rev. Lett.* **94**, 020403 (2005); T. J. Alexander, E. A. Ostrovskaya, and Y. S. Kivshar, *ibid.* **96**, 040401 (2006).  
 [9] A. E. Muryshev, G. V. Shlyapnikov, W. Ertmer, K. Sengstock, and M. Lewenstein, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 110401 (2002); L. D. Carr and J. Brand, *ibid.* **92**, 040401 (2004); M. Matuszewski, W. Królikowski, M. Trippenbach, and Y. S. Kivshar, *Phys. Rev. A* **73**, 063621 (2006); A. Muñoz Mateo and V. Delgado, *ibid.* **75**, 063610 (2007); **77**, 013617 (2008); *Ann. Phys.* **324**, 709 (2009).  
 [10] L. Salasnich, A. Parola, and L. Reatto, *Phys. Rev. A* **65**, 043614 (2002); **66**, 043603 (2002); L. Salasnich, A. Cetoli, B. A. Malomed, and F. Toigo, *ibid.* **75**, 033622 (2007); L. Salasnich, B. A. Malomed, and F. Toigo, *ibid.* **76**, 063614 (2007).  
 [11] B. Paredes *et al.*, *Nature* **429**, 277 (2004).  
 [12] S. Adhikari and B. A. Malomed, *Europhys. Lett.* **79**, 50003 (2007); *Physica D* **238**, 1402 (2009).  
 [13] B. A. Malomed, D. Mihalache, F. Wise, and L. Torner, *J. Optics B* **7**, R53 (2005).



THREE-DIMENSIONAL GAP SOLITONS IN BOSE- . . .

PHYSICAL REVIEW A **82**, 053606 (2010)

- [14] R. Carretero-González, D. J. Frantzeskakis, and P. G. Kevrekidis, *Nonlinearity* **21**, R139 (2008).
- [15] J. Yang, B. A. Malomed, and D. J. Kaup, *Phys. Rev. Lett.* **83**, 1958 (1999); A. R. Champneys, B. A. Malomed, J. Yang, and D. J. Kaup, *Physica D* **152–153**, 340 (2001); J. K. Yang, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 143903 (2003); X. S. Wang, Z. G. Chen, J. D. Wang, and J. K. Yang, *ibid.* **99**, 243901 (2007).
- [16] M. Matuszewski, E. Infeld, B. A. Malomed, and M. Trippenbach, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 050403 (2005); Y. Zhang and B. Wu, *ibid.* **102**, 093905 (2009); J. D. Wang, J. K. Yang, T. J. Alexander, and Y. S. Kivshar, *Phys. Rev. A* **79**, 043610 (2009).
- [17] A. Muñoz Mateo and V. Delgado, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 180409 (2006); J. A. M. Huhtamäki, M. Mottonen, T. Isoshima, V. Pietila, and S. M. M. Virtanen, *ibid.* **97**, 110406 (2006); K. Gawryluk, M. Brewczyk, and K. Rzazewski, *J. Phys. B* **39**, L225 (2006).
- [18] H. Pu, C. K. Law, J. H. Eberly, and N. P. Bigelow, *Phys. Rev. A* **59**, 1533 (1999).
- [19] G. Van Simaey, S. Coen, M. Haelterman, and S. Trillo, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 223902 (2004).

**A.7 Gap solitons in elongated geometries:  
The one-dimensional Gross-Pitaevskii equation  
and beyond**

A. Muñoz Mateo, V. Delgado, and B. A. Malomed,  
Physical Review A **83**, 053610 (2011).

PHYSICAL REVIEW A **83**, 053610 (2011)

## Gap solitons in elongated geometries: The one-dimensional Gross-Pitaevskii equation and beyond

A. Muñoz Mateo,<sup>1,\*</sup> V. Delgado,<sup>1,†</sup> and Boris A. Malomed<sup>2,‡</sup>

<sup>1</sup>*Departamento de Física Fundamental II, Facultad de Física, Universidad de La Laguna, E-38206 La Laguna, Tenerife, Spain*

<sup>2</sup>*Department of Physical Electronics, School of Electrical Engineering, Faculty of Engineering, Tel Aviv University, Tel Aviv IL-69978, Israel*

(Received 15 February 2011; published 9 May 2011)

We report results of a systematic analysis of matter-wave gap solitons (GSs) in three-dimensional self-repulsive Bose-Einstein condensates (BECs) loaded into a combination of a cigar-shaped trap and axial optical-lattice (OL) potential. Basic cases of the strong, intermediate, and weak radial (transverse) confinement are considered, as well as settings with shallow and deep OL potentials. Only in the case of the shallow lattice combined with tight radial confinement, which actually has little relevance to realistic experimental conditions, does the usual one-dimensional (1D) cubic Gross-Pitaevskii equation (GPE) furnish a sufficiently accurate description of GSs. However, the effective 1D equation with the nonpolynomial nonlinearity, derived in Ref. [Phys. Rev. A **77**, 013617 (2008)], provides for quite an accurate approximation for the GSs in all cases, including the situation with weak transverse confinement, when the soliton's shape includes a considerable contribution from higher-order transverse modes, in addition to the usual ground-state wave function of the respective harmonic oscillator. Both fundamental GSs and their multipeak bound states are considered. The stability is analyzed by means of systematic simulations. It is concluded that almost all the fundamental GSs are stable, while their bound states may be stable if the underlying OL potential is deep enough.

DOI: [10.1103/PhysRevA.83.053610](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.83.053610)

PACS number(s): 03.75.Lm, 05.45.Yv

### I. INTRODUCTION

Matter-wave gap solitons (GSs) are localized modes that can be created in elongated Bose-Einstein condensates (BECs) loaded into one-dimensional (1D) optical-lattice (OL) potentials, with the intrinsic nonlinearity induced by repulsive interactions between atoms. GSs have been the topic of a large number of original works. Results produced by these studies were summarized in several reviews [1–5]. Within the framework of the mean-field approximation, the description of matter-wave patterns is based on the Gross-Pitaevskii equation (GPE) for the macroscopic wave function  $\psi$  [6]:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left( -\frac{\hbar^2}{2M} \nabla^2 + V_{\perp}(\mathbf{r}_{\perp}) + V_z(z) + gN |\psi|^2 \right) \psi, \quad (1)$$

which has proven to be very successful in reproducing experimental results for the zero-temperature BEC (for instance, for multiple vortices, as shown in detail in Refs. [7,8]). In this equation,  $M$  is the atomic mass, the norm of the wave function  $\psi$  is unity,  $N$  is the number of atoms, and  $g = 4\pi\hbar^2 a/M$  is the interaction strength with  $a$  being the  $s$ -wave scattering length. In this work, we consider only repulsive interactions (i.e.,  $a > 0$ ). Furthermore,  $V_{\perp}(\mathbf{r}_{\perp}) = (1/2)M\omega_{\perp}^2 r_{\perp}^2$  is the radial-confinement potential and  $V_z(z)$  is the axial potential, which may include the axial harmonic trap and the 1D OL, with depth  $V_0$  and period  $d$ :

$$V_z(z) = (1/2)M\omega_z^2 z^2 + V_0 \sin^2(\pi z/d). \quad (2)$$

The energy scale in the underlying (no-interaction) linear problem is set by the OL's recoil energy,  $E_R = \hbar^2 \pi^2 / (2Md^2)$ .

Most commonly, theoretical studies of GSs in elongated geometries are carried out in terms of the 1D GPE [1,2,9–13]:

$$i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} + V_z(z)\phi + g_{1D}N|\phi|^2\phi, \quad (3)$$

where  $g_{1D} = 2a\hbar\omega_{\perp}$ . This is an effective evolution equation for the axial dynamics—described by the 1D wave function  $\phi(z,t)$ —which can be derived from the full three-dimensional (3D) GPE after averaging out the radial degrees of freedom under the assumption that the radial confinement is so tight that the transverse dynamics are frozen to zero-point oscillations. These conditions, however, are not easy to realize using typical experimental parameters [2], and when such conditions are not met the transverse excitations can no longer be neglected, making an essentially 3D analysis necessary. In this work, we aim to investigate different physically relevant regimes and capture 3D effects in the generation and stability of matter-wave GSs in elongated BECs. This analysis should make it possible to determine the range of validity of the 1D GPE for the description of the GSs under typical experimental conditions, as well as characteristic features of the fundamental and higher-order GSs in realistic situations.

In principle, when the transverse excitations are relevant, Eq. (3) fails and one has to resort to the full 3D GPE (1), as recently done in Ref. [14], or, alternatively, use extended 1D models that, within the framework of certain assumptions, take into account effects of higher-order radial modes on the axial dynamics of the condensate, leading to effective 1D equations with the cubic-quintic [15] or nonpolynomial [16,17] nonlinearities. In this work, we will consider both the full 3D GPE and the effective 1D model with a nonpolynomial nonlinearity, which was derived, for the case of the self-repulsive nonlinearity, in Ref. [17]. The latter one, which represents a simple generalization of the usual 1D GPE, that reduces to Eq. (3) in the appropriate limit, has demonstrated an excellent quantitative agreement with experimental

\*ammateo@ull.es

†vdelgado@ull.es

‡malomed@post.tau.ac.il

A. MUÑOZ MATEO, V. DELGADO, AND BORIS A. MALOMED

PHYSICAL REVIEW A **83**, 053610 (2011)

observations [18–21] (chiefly, for delocalized dark solitons, which are natural patterns in the case of the self-repulsion; however, the comparison was not reported before for localized GS modes). We will demonstrate that, while the range of applicability of the 1D GPE (3) is severely limited in realistic situations, the above-mentioned generalization gives a good description of stationary matter-wave GSs in virtually all cases of practical interest.

The paper is organized as follows. The model is formulated in Sec. II, where we also recapitulate the derivation of the effective nonpolynomial 1D equation following the lines of Ref. [17], as this derivation is essential for the presentation of the results for the GSs. The main findings are collected in Sec. III, where families of GS solutions are reported in several physically relevant regimes for strong, intermediate, and weak transverse confinement and shallow or deep OL potential. Both fundamental GSs and their multipeak bound states are considered. Only in the case of tight confinement combined with a shallow OL does the ordinary 1D GPE provide for a sufficiently accurate description of the GSs in comparison with results of full 3D computations. On the other hand, the effective nonpolynomial 1D equation provides for good accuracy in all cases; for the fundamental solitons and their bound states alike. The stability of the GSs is studied in Sec. IV by means of systematic simulations of the evolution of perturbed solitons. The conclusion is that the fundamental GSs are stable (except in a narrow region close to the upper edge of the band gaps), even in the case of strong deviation from the usual 1D description. Multisoliton bound states are stable if the OL potential is deep enough. Conclusions following from results of this work, including applicability limits for the mean-field approximation and 1D approximations, are formulated in Sec. V.

## II. THE MODEL

The model that was developed in Ref. [17] for a BEC in the absence of OL potentials resorted to the adiabatic approximation, to neglect correlations between the transverse and axial motions. This approximation assumes that the axial density varies slowly enough to allow the transverse wave function to follow these slow variations. Because the OL imposes a new spatial scale, which may be more restrictive, it is necessary to find out if the adiabatic approximation remains valid in the presence of the OL. To this end, we will now briefly recapitulate the derivation of the effective 1D equation based on this approximation.

The starting point is the ansatz based on the factorized 3D wave function

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \varphi(\mathbf{r}_\perp; n_1(z, t))\phi(z, t), \quad (4)$$

with  $n_1(z, t)$  being the local condensate density per unit length characterizing the axial configuration:

$$n_1(z, t) \equiv N \int d^2\mathbf{r}_\perp |\psi(\mathbf{r}_\perp, z, t)|^2 = N|\phi(z, t)|^2. \quad (5)$$

To derive Eq. (5), we have assumed that the transverse wave function  $\varphi$  is normalized to unity. Next, the substitution of

Eq. (4) into the 3D equation (1) leads to

$$\begin{aligned} & \left( i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} - V_z \phi \right) \varphi \\ &= \left( -\frac{\hbar^2}{2M} \nabla_\perp^2 \varphi - \frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial z^2} + V_\perp \varphi + gn_1 |\varphi|^2 \varphi \right) \phi \\ & \quad - \frac{\hbar^2}{M} \frac{\partial \varphi}{\partial z} \frac{\partial \phi}{\partial z}. \end{aligned} \quad (6)$$

Because of the very different time scales of the axial and radial motions, it is natural to assume that the slow axial dynamics may be accurately described by averaging Eq. (6) over the fast (radial) degrees of freedom. Doing this, one obtains

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial t} &= -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} + V_z \phi + \mu_\perp \phi \\ & \quad - \frac{\hbar^2}{M} \left( \int d^2\mathbf{r}_\perp \varphi^* \frac{\partial \varphi}{\partial z} \right) \frac{\partial \phi}{\partial z}, \end{aligned} \quad (7)$$

$$\begin{aligned} \mu_\perp(n_1) &\equiv \int d^2\mathbf{r}_\perp \varphi^* \left( -\frac{\hbar^2}{2M} \nabla_\perp^2 - \frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right. \\ & \quad \left. + V_\perp + gn_1 |\varphi|^2 \right) \varphi. \end{aligned} \quad (8)$$

Since  $n_1(z, t)$  enters the last term of Eq. (8) merely as an external parameter, it is clear that, whenever the axial kinetic energy associated with the transverse wave function may be neglected; namely,

$$\begin{aligned} K_z[\varphi] &\equiv \int d^2\mathbf{r}_\perp \varphi^* \left( -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \varphi \\ &\ll \int d^2\mathbf{r}_\perp \varphi^* \left( -\frac{\hbar^2}{2M} \nabla_\perp^2 + V_\perp(\mathbf{r}_\perp) + gn_1 |\varphi|^2 \right) \varphi, \end{aligned} \quad (9)$$

the radial dynamics decouple and  $\mu_\perp(n_1)$  can be determined without knowledge of the axial wave function. Actually, the right-hand side of Eq. (9) is the chemical potential of an axially homogeneous condensate characterized by the density per unit length  $n_1$  and wave function  $\varphi$ . For a sufficiently small value of the linear density ( $an_1 \ll 1$ ), the chemical potential of the lowest-energy state of this homogeneous condensate can be readily obtained perturbatively. In this case, to the lowest order,  $\varphi(\mathbf{r}_\perp)$  is given by the Gaussian wave function of the ground state of the radial harmonic oscillator, with the corresponding chemical potential being  $\hbar\omega_\perp(1 + 2an_1)$ . As the linear density increases, more radial modes become excited and, in general, the ground state of the corresponding homogeneous condensate involves many harmonic-oscillator modes.

In previous works, it was shown using different approaches that, also in this case, an analytical solution can be constructed [17]. In particular, by using a variational approach based on the direct minimization of the chemical-potential functional, it was shown that, for any (dimensionless) linear density  $an_1$ , a very accurate estimate for the chemical potential of the ground state is given by  $\hbar\omega_\perp\sqrt{1 + 4an_1}$  [22]. This expression can be easily extended to incorporate the case in which the condensate contains an axisymmetric vortex [17] (see also Ref. [23], where the intrinsic vorticity was included into the derivation of the 1D nonpolynomial nonlinear Schrödinger

equation in the case of self-attraction). However, in this work we restrict the consideration to zero vorticity. Using Eq. (9), we see that a sufficient condition for the second derivative in  $z$  appearing in Eq. (8) to be negligible is

$$K_z[\varphi] \ll \hbar\omega_\perp\sqrt{1+4an_1}. \quad (10)$$

Taking into account an estimate,  $K_z[\varphi] \sim \hbar^2/(2M\Delta_z^2)$ , where  $\Delta_z$  is the characteristic length scale in the axial direction, Eq. (10) can be rewritten as

$$\frac{\hbar^2}{2M\Delta_z^2} \ll \hbar\omega_\perp\sqrt{1+4an_1}. \quad (11)$$

When this condition holds,  $\mu_\perp(n_1)$  coincides, to a good approximation, with the transverse local chemical potential of the stationary radial GPE:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2M}\nabla_\perp^2 + V_\perp(\mathbf{r}_\perp) + gn_1|\varphi|^2\right)\varphi = \mu_\perp(n_1)\varphi, \quad (12)$$

and is given by

$$\mu_\perp(n_1) = \hbar\omega_\perp\sqrt{1+4an_1}. \quad (13)$$

Finally, substituting Eqs. (13) and (5) into Eq. (7) and taking into account that  $\varphi$  is a real normalized wave function (which implies the vanishing of the integral in the last term), we arrive at the following effective 1D equation to govern the slow axial dynamics of the condensate:

$$i\hbar\frac{\partial\phi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2M}\frac{\partial^2\phi}{\partial z^2} + V_z(z)\phi + \hbar\omega_\perp\sqrt{1+4aN}|\phi|^2\phi. \quad (14)$$

We note that the contribution from interatomic interactions enters the above equation through term  $\hbar\omega_\perp(\sqrt{1+4aN}|\phi|^2 - 1)\phi$ , which vanishes for  $N \rightarrow 0$ . Thus, Eq. (14) incorporates an energy shift  $\hbar\omega_\perp$ , which is irrelevant for the dynamics but simplifies the form of the equation and makes the global chemical potential that follows from this effective 1D equation exactly coinciding with the corresponding 3D result.

The above derivation demonstrates that the validity of Eq. (14) relies on two conditions:

(i) The typical time scale  $\Delta_t$  of the axial motion must be much larger than the typical time scale of the radial motion ( $\sim\omega_\perp^{-1}$ ).

(ii) The axial kinetic energy  $K_z[\varphi]$  associated with the transverse wave function must be negligible.

The former requirement is necessary to allow the radial wave function to adiabatically follow the axial dynamics. While the specific temporal scale  $\Delta_t$  depends on the particular initial conditions, typically, in the presence of an OL, the fulfillment of this condition gets more difficult as the lattice period  $d$  decreases, or the linear density  $an_1$  increases. In particular, a sufficient condition for the validity of the adiabatic approximation is:  $d \gg a_\perp$ ,  $an_1 \ll 1$ , with  $a_\perp \equiv \sqrt{\hbar/(M\omega_\perp)}$  being the radial harmonic-oscillator length. Nevertheless, such a constraint, which is hard to satisfy in realistic situations, is not a necessary condition. Actually, for stationary states  $\Delta_t \rightarrow \infty$  and condition (i) always holds. In the present work we are interested in this case, which is the most relevant one to seek for matter-wave GSs.

A sufficient condition for the fulfillment of condition (ii) is given by the inequality (11). In the presence of an OL, the

characteristic length scale  $\Delta_z$  is typically on the order of the lattice period  $d$ , hence Eq. (11) becomes

$$E_R \ll \hbar\omega_\perp\sqrt{1+4an_1}, \quad (15)$$

where  $E_R$  is the corresponding recoil energy. We will demonstrate that this condition is well satisfied for stationary GSs in most cases of interest.

It is clear that, when the linear density is small enough ( $an_1 \ll 1$ ), Eq. (14), which exhibits the nonpolynomial nonlinearity, reduces to the usual 1D GPE (3) with the cubic nonlinearity. This is the quasi-1D mean-field regime, which corresponds to condensates whose radial state, as given by a solution to Eq. (12), may be well approximated by the Gaussian ground state of the corresponding harmonic oscillator [17,24]. Thus, Eq. (14) represents an extension of the 1D GPE for condensates with larger linear densities or, equivalently, larger mean-field interaction energies. In such condensates, the radial ground state satisfying Eq. (12) is, in general, a linear combination of many harmonic-oscillator modes (a similar situation takes place in the derivation of the effective 1D equation for fermionic gases by means of the density-functional approach [25]).

Inspection of Eqs. (1) or (14) demonstrates that the dynamical problem is fully controlled by four dimensionless parameters, which may be defined as

$$\frac{E_R}{\hbar\omega_\perp}, \quad \frac{V_0}{E_R}, \quad \frac{\omega_z}{\omega_\perp}, \quad \frac{Na}{a_\perp}. \quad (16)$$

As said above, the recoil energy  $E_R$  sets the energy scale of the underlying linear problem, while the nonlinear coupling constant  $Na/a_\perp$  determines the order of magnitude of the mean-field interaction energy in units of the radial quantum  $\hbar\omega_\perp$ . Note that the dimensionless linear density  $an_1$  is proportional to  $Na/a_\perp$ .

In this work, we assume the axial confinement to be so weak that the corresponding harmonic-oscillator length,  $a_z \equiv \sqrt{\hbar/(M\omega_z)}$ , is much larger than the lattice period  $d$ . Under these conditions, it is safe to neglect the modulation induced in the condensate density by the axial harmonic trap and set  $\omega_z = 0$ , so that we are left with a uniform 1D lattice potential acting along the axial direction.

### III. MATTER-WAVE GAP SOLITONS IN DIFFERENT PHYSICAL REGIMES

The stationary solutions of the 3D GPE are wave functions of the form  $\psi(\mathbf{r}, t) = \psi_0(\mathbf{r})\exp(-i\mu t)$ , with  $\psi_0$  obeying the time-independent GPE:

$$\mu\psi_0 = \left(-\frac{\hbar^2}{2M}\nabla^2 + V_\perp(\mathbf{r}_\perp) + V_z(z) + gN|\psi_0|^2\right)\psi_0, \quad (17)$$

where  $\mu$  is the chemical potential. When Eq. (14) is applicable, one can instead generate the stationary axial wave function  $\phi_0(z)$  by solving the effective 1D equation

$$\mu\phi_0 = \left(-\frac{\hbar^2}{2M}\frac{\partial^2}{\partial z^2} + V_z(z) + \hbar\omega_\perp\sqrt{1+4aN}|\phi_0|^2\right)\phi_0, \quad (18)$$

A. MUÑOZ MATEO, V. DELGADO, AND BORIS A. MALOMED

PHYSICAL REVIEW A **83**, 053610 (2011)

which, in the limit of  $an_1 \ll 1$ , reduces to the time-independent version of the usual 1D GPE (3):

$$\mu\phi_0 = \left( -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V_z(z) + g_{1D}N|\phi_0|^2 + \hbar\omega_\perp \right) \phi_0. \quad (19)$$

Matter-wave GSs are characterized by a chemical potential lying in a band gap of the energy spectrum of the underlying linear system. To construct solutions for realistic 3D matter-wave GSs in the effectively 1D geometry, we looked for numerical solutions to Eqs. (17) and (18) in different physically relevant regimes, and compared the obtained results with those produced by the usual 1D GPE (19) to determine to what extent 3D contributions are relevant. In particular, the comparison allows us to estimate the accuracy and range of applicability of the effective 1D equations (18) and (19).

Experimentally relevant values for the OL period  $d$  range from 0.4 to 1.6  $\mu\text{m}$  [2], which implies that, for the condensate of  $^{87}\text{Rb}$ ,  $E_R/(2\pi\hbar)$  ranges from 3.6 kHz to 220 Hz. Taking into account that, typically,  $\omega_\perp/2\pi \lesssim 1$  kHz, we conclude that  $E_R/\hbar\omega_\perp \gtrsim 1/4$ . On the other hand, for the condensate of  $^{23}\text{Na}$  one has  $E_R/\hbar\omega_\perp \gtrsim 1$  [26]; therefore, in this case the GS energy is sufficiently large to excite higher modes of the radial confinement, which makes 3D contributions always relevant. Since the  $^{87}\text{Rb}$  condensate is most relevant for the experimental realization of GSs in the quasi-1D setting [27,28], in what follows below we use particular parameters of this condensate to illustrate our results. Nevertheless, the results of the present work, which are always expressed in terms of relevant dimensionless parameters, are valid for any BEC. Actually, this is a direct consequence of the scaling properties of Eqs. (1), (3), and (14).

#### A. Tight radial confinement: $E_R/\hbar\omega_\perp \ll 1$

In this case, the quantum of radial excitations is much greater than the typical energy scale in the linear problem. Note that, to realize this regime in a  $^{87}\text{Rb}$  condensate, even in an OL of period  $d \simeq 1.6$   $\mu\text{m}$ , one needs to use a harmonic trap with radial frequency  $\omega_\perp/2\pi \gtrsim 2400$  Hz.

Figure 1(a) shows the dimensionless chemical potential of the noninteracting 3D condensate with  $E_R/\hbar\omega_\perp = 1/10$ ,

$$\tilde{\mu} \equiv (\mu - \hbar\omega_\perp)/E_R, \quad (20)$$

as a function of the dimensionless lattice depth,  $s \equiv V_0/E_R$ . Since in this work we are interested in GSs with zero vorticity, this diagram, which represents the band-gap structure of the underlying linear problem, has been obtained from the zero-vorticity solutions of the linear version of Eq. (17). Regions I, II, and III correspond to the lowest finite band gaps, which separate shaded bands, where linear solutions exist. An important point is that, within the region of interest in the parameter space (for  $V_0/E_R \lesssim 25$  and up to the third band gap), this 3D diagram is indistinguishable from that obtained using the linear version of the effective 1D equation (18) [which, obviously, coincides with the linear version of the stationary 1D GPE (19)]. In fact, Eq. (18) leads to a band-gap diagram that differs from Fig. 1(a) solely in the band marked by the arrow, which does not appear in the 1D case. This extra band

is, essentially, a replica of the lowest one, shifted up in energy by  $2\hbar\omega_\perp/E_R$ . Taking into account that the energy spectrum of the radial harmonic oscillator is given by

$$E = (2n_r + |m| + 1)\hbar\omega_\perp, \quad (21)$$

where  $n_r = 0, 1, 2, \dots$  is the radial quantum number and  $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$  is the axial angular-momentum quantum number, it is evident that the additional up-shifted band corresponds to the first-excited radial mode with  $m = 0$ . In the notation of Ref. [14], it corresponds to quantum numbers ( $n = 1, m = 0, n_r = 1$ ), with  $n$  being the band index of the 1D axial problem. Thus, the appearance of this band is a purely 3D effect that cannot be accounted for by the above 1D models. Since the energy shift increases as  $E_R/\hbar\omega_\perp$  decreases, it is clear that, within the parameter region of interest, Fig. 1(a) is universal in the sense that it is valid (for both 1D and 3D systems) for any  $E_R/\hbar\omega_\perp \ll 1$ .

In this work, we restrict ourselves to the case of (1,0,0) GSs; that is, the solitons bifurcating from the lowest-energy band. Three-dimensional matter-wave GSs with a nontrivial radial structure have been studied in Ref. [14]. In this subsection, we consider OLs with  $E_R/\hbar\omega_\perp = 1/10$  and depth  $V_0/E_R = 2$  or 20. These two representative cases correspond to the dashed vertical lines in Fig. 1(a) and are shown in more detail in

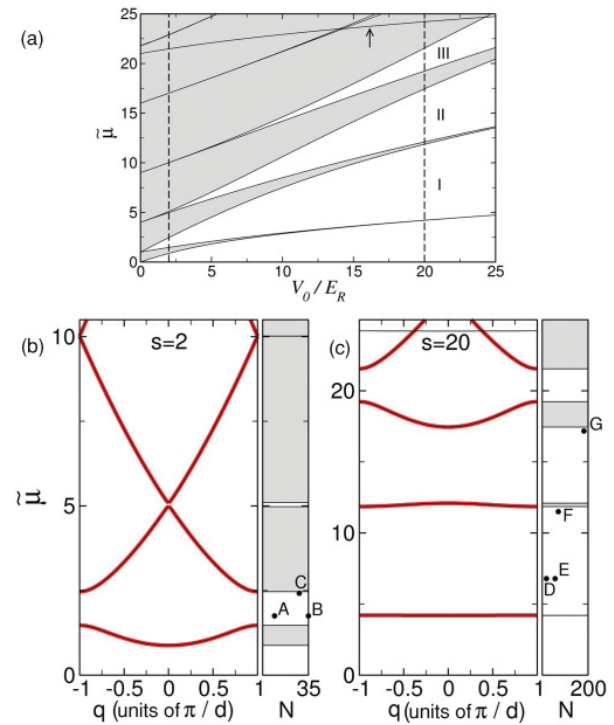


FIG. 1. (Color online) (a) Band-gap structure of a noninteracting 3D BEC with  $E_R/\hbar\omega_\perp = 1/10$ , as a function of the dimensionless lattice depth  $s \equiv V_0/E_R$ . The representative cases  $s = 2$  and 20, indicated by vertical dashed lines, are considered in more detail in (b) and (c), respectively, which show the dimensionless chemical potential  $\tilde{\mu}$  as a function of the quasimomentum  $q$  in the first Brillouin zone (in units of  $\pi/d$ ). The right panels display the location of the  $^{87}\text{Rb}$  gap solitons considered in this work (points A–G).



Figs. 1(b) and 1(c), which display the corresponding band-gap structure as a function of the quasimomentum in the first Brillouin zone (in units of  $\pi/d$ ). Bold red lines in Figs. 1(b) and 1(c) have been obtained from the linear version of the effective 1D equation (18) while thin black lines correspond to results obtained by means of the linear version of the 3D equation (17) that cannot be reproduced with the 1D model. As mentioned above, the only appreciable difference between the 1D and 3D results comes from the contribution of the first-excited radial mode [see the top part of Fig. 1(c)]. The case of  $V_0/E_R = 2$ , displayed in Fig. 1(b), corresponds to the condensate in relatively shallow OL potentials. Under these circumstances, the linear energy spectrum does not differ too much from that corresponding to the translationally invariant case ( $V_z = 0$ ), and the band-gap structure exhibits wide energy bands separated by relatively small gaps, which are tangible only in the lowest part of the spectrum. On the contrary, for  $V_0/E_R = 20$  [the tight-binding regime, see Fig. 1(c)] the condensate is trapped in the deep periodic potential. In this case, the lowest part of the linear spectrum is dominated by large gaps separating relatively narrow energy bands. The panels on the right side of Figs. 1(b) and 1(c) show the location, with respect to the corresponding linear band-gap diagram, of the GSs that will be considered below (points A–G). The horizontal axes in these panels indicate the number of atoms in each GS for these  $^{87}\text{Rb}$  condensates (with the  $s$ -wave scattering length  $a = 5.29$  nm) in the trap with radial frequency  $\omega_\perp/2\pi = 2400$  Hz. For other parameter values, the GS family is described by the same plots, if considered in terms of the above-mentioned nonlinear coupling constant,  $Na/a_\perp$  [ $a = 5.29$  nm and  $\omega_\perp/2\pi = 2400$  Hz correspond to  $a/a_\perp = 0.024$ ]. In other words, the number of atoms in a GS created in the condensate with scattering length  $a'$  and transverse confinement radius  $a'_\perp$ , which is tantamount to the GS with particular values of  $a$ ,  $a_\perp$ , and  $N$ , is given by

$$N' = \frac{aa'_\perp}{a'a_\perp} N. \quad (22)$$

GS solutions have been obtained by numerically solving the full 3D equation (17), as well as the effective 1D equations (18) and (19). To this end, we have implemented a Newton continuation method, based on a Laguerre-Fourier spectral basis, that uses the chemical potential  $\mu$  as a continuation parameter. To ensure the convergence, methods of this kind require initiation of the iterative procedure with a sufficiently good initial guess. This means that one needs a good estimate for both the axial and the radial parts of the wave function. Our computations used the following initial ansatz for the wave function:

$$\psi_0(r_\perp, z) = \frac{1}{\Gamma a_\perp \sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{r_\perp^2}{2\Gamma^2 a_\perp^2}\right) \phi_0(z), \quad (23)$$

where the  $z$ -dependent condensate's width, expressed in units of  $a_\perp$ , is

$$\Gamma = [1 + 2aN|\phi_0(z)|^2]^{1/4}, \quad (24)$$

and  $\phi_0(z) = \sqrt{k_0/2} \operatorname{sech}(k_0 z)$  is the axial wave function. The number of particles,  $N$ , and  $k_0$  are free adjustable parameters. Note that the radial part of the wave function (23) is the same

as the variational solution of Eq. (12), which was found in Ref. [17].

### 1. Shallow optical lattice: $V_0/E_R = 2$

Point A in Fig. 1(b) corresponds to a fundamental GS located near the bottom edge of the first band gap. It looks qualitatively similar to that shown below in Fig. 3, but with the peak linear density  $an_1(0) \simeq 0.04$ . In this case, the effective 1D equations (18) and (19) yield results which are indistinguishable, on the scale of the figures, from those obtained from the full 3D equation (17). This is not surprising because, for these parameters, condition (15) is certainly satisfied, and inequality  $an_1 \ll 1$ , which guarantees the validity of the 1D GPE (19), also holds. The (dimensionless) chemical potential of this GS is  $\tilde{\mu} = 1.75$ , which implies  $\mu = 1.175\hbar\omega_\perp \simeq \hbar\omega_\perp$ , hence the radial wave function of the condensate should not differ too much from the ground state of the corresponding harmonic oscillator. These fundamental GSs, however, can only accommodate 9 particles (for the  $^{87}\text{Rb}$  condensate), which is too small to use the mean-field approximation. Yet these solutions play an important role as building blocks of higher-order GSs. Point B in Fig. 1(b) corresponds to one of these higher-order solitons, which is built as a symmetric linear combination of three fundamental GSs, see Fig. 2. Its chemical potential and number of particles are  $\tilde{\mu} = 1.75$  and  $N = 35$ . Note that, for the relatively shallow OL ( $V_0/E_R = 2$ ), interference effects arising from the overlap between fundamental GSs sitting in adjacent lattice cells play an important role. For this reason, the contrast between the three central peaks and the minima separating them is rather low in Fig. 2, and the total number of particles in the compound soliton does not coincide with the sum of the numbers of its fundamental constituents. Extending this procedure, one can readily build a sequence of compound GSs with an increasing number of peaks.

Panels (a) and (b) in Fig. 2 display the 3D density of the three-peak GSs as, respectively, an isosurface (taken at 5% of the maximum density) and a color map in the cross-section plane drawn through the  $z$  axis. From these results, which have been obtained by solving the full 3D equation (17), we have also derived the axial linear density  $n_1(z)$ , defined as per Eq. (5). This density is shown in Fig. 2(c) by open circles, along with the corresponding results obtained from the effective 1D equations (18) and (19). The OL potential is also displayed by the dotted line (in arbitrary units). It is seen that the effective 1D equation (18) (solid red lines) reproduces the 3D results very accurately. The 1D GPE (19) (dashed blue lines) gives a slight discrepancy ( $\simeq 3\%$ ) against the 3D results. This discrepancy, which would be invisible in the isolated fundamental GSs that build the compound, may also be explained by effects of the interference between the constituents.

Point C in Fig. 1(b) indicates the location of a fundamental gap soliton in the  $(N, \tilde{\mu})$  plane, which sits near the top edge of the first band gap. It contains 28 particles and has chemical potential  $\tilde{\mu} = 2.42$ , which corresponds to  $\mu = 1.242\hbar\omega_\perp$ . This quantity is again very similar to  $\hbar\omega_\perp$ , so that one expects the 1D GPE to be a good approximation in this case. Figure 3 shows the 3D density and the axial linear density  $an_1(z)$  of this GS. In Fig. 3(c) one can see that the 1D GPE (19) (the

A. MUÑOZ MATEO, V. DELGADO, AND BORIS A. MALOMED

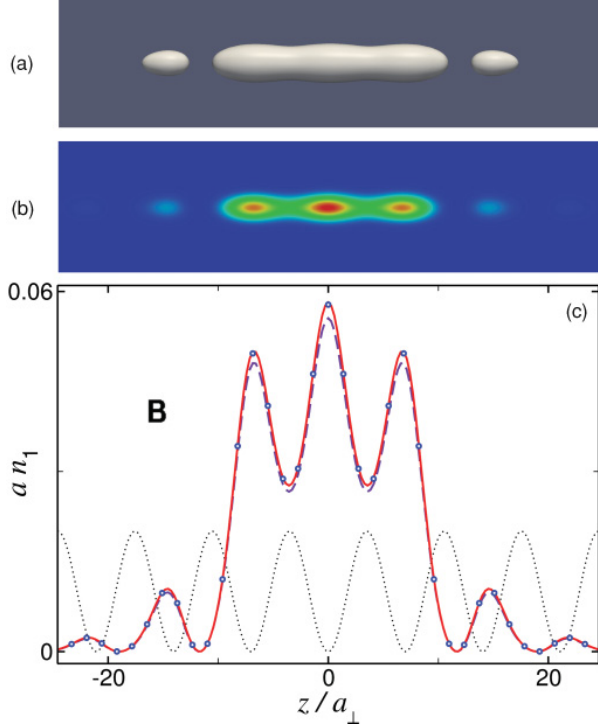
PHYSICAL REVIEW A **83**, 053610 (2011)

FIG. 2. (Color online) Atom density of the gap soliton corresponding to point B in Fig. 1(b), displayed as (a) an isosurface taken at 5% of the maximum density and (b) as a color map along a cutting plane containing the  $z$  axis. (c) Dimensionless axial density  $an_1$  obtained from the 3D wave function, as prescribed by Eq. (5) (open circles) along with the corresponding predictions from the nonpolynomial 1D equation (18) (solid red line) and the ordinary 1D GPE (19) (dashed blue line).

dashed blue line) reproduces the 3D results obtained from the full GPE (17) (shown by open circles) within a 5% deviation. The effective 1D equation (18) (whose results are represented by the solid red line) is again more accurate and reproduces the 3D results with an error  $< 1\%$ . As before, this fundamental GS can be used to build multipeak compounds.

As one moves upward in the band gap, the 3D effects become stronger, which is a consequence of the fact that the corresponding number of particles and, thus, the nonlinear interaction energy increase. The above results, however, indicate that, for the tight radial confinement ( $E_R/\hbar\omega_\perp \ll 1$ ) and shallow OL ( $V_0/E_R \leq 2$ ), the specific 3D effects may eventually be neglected. In fact, under these conditions the maximum number of particles that can be accommodated in a fundamental GS in the first band gap is so small that inequality  $an_1 \ll 1$  always holds. This means that both the linear and the nonlinear energies remain much smaller than the quantum of the radial excitation ( $E_R, an_1\hbar\omega_\perp \ll \hbar\omega_\perp$ ), hence no higher transverse modes are significantly excited. Therefore, the situation considered in this subsection may be categorized as the quasi-1D mean-field regime, in which the 1D GPE (19) accurately describes the matter-wave GSs, provided that condition  $N \gg 1$  holds (otherwise, the mean-field approximation will be invalid).

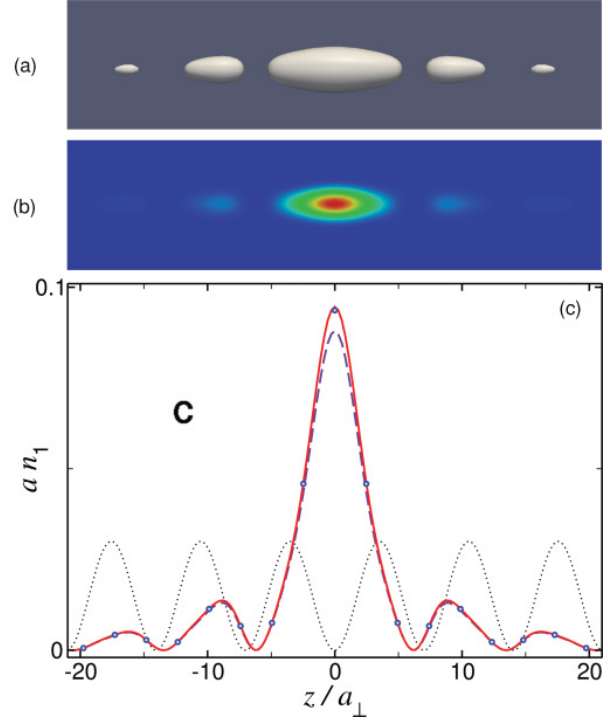


FIG. 3. (Color online) Same as Fig. 2 but for the gap soliton corresponding to point C in Fig. 1(b).

## 2. Deep optical lattice: $V_0/E_R = 20$

In terms of the underlying OL, this is the case of the tight-binding regime,  $V_0 \gg E_R$ . The nonlinear tight-binding regime is realized when the potential depth  $V_0$  is much larger than both the linear and nonlinear (mean-field) energies (i.e.,  $V_0 \gg E_R, an_1\hbar\omega_\perp$ ). Under these circumstances, the condensate density is highly localized near potential minima, making the overlap between densities associated with different wells negligible. Point D in the first band gap of Fig. 1(c) corresponds to a fundamental GS with  $\tilde{\mu} = 6.79$  and  $N = 18$ . Since its peak axial density is  $an_1(0) \simeq 0.2$ , and  $V_0/E_R = 20$  implies  $V_0 = 2\hbar\omega_\perp$ , this fundamental GS belongs to the nonlinear tight-binding regime. Figure 4 shows a compound GS built of three such fundamental solitons. It corresponds to point E in Fig. 1(c). Its chemical potential,  $\tilde{\mu} = 6.79$ , is the same as that of the corresponding fundamental GS, and its number of particles,  $N = 55$ , now coincides with the sum of the number in its constituents (note that we always approximate  $N$  to the nearest integer). As can be seen from Fig. 4, this compound soliton exhibits three well-separated identical peaks (BEC droplets), each one being practically indistinguishable from the above-mentioned fundamental GS. Figure 4(c) shows that the results obtained from the effective 1D equation (18) (the solid red line) agree very well with those produced by the full 3D GPE (17) (open circles). In particular, the 1D equation yields the particle number  $N = 56$ , which is very close to  $N = 55$ , as given by the 3D solution. Since  $N$  represents a measurement of the norm of the wave function, it is clear that the error in the number of particles reflects the error in the corresponding wave functions. The 1D



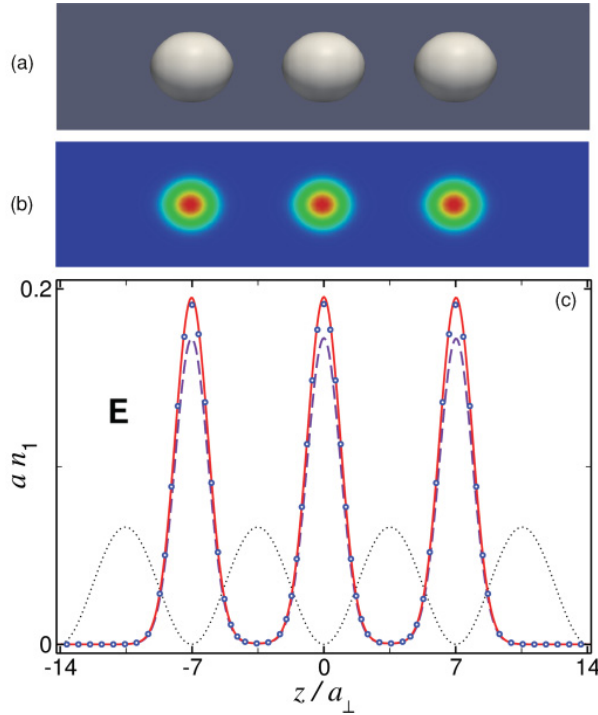


FIG. 4. (Color online) Same as Fig. 2 but for the gap soliton corresponding to point E in Fig. 1(c).

GPE (19), corresponding to the dashed blue line in Fig. 4(c), gives  $N = 49$ , which implies an error  $\sim 10\%$ .

Point F in Fig. 1(c) corresponds to a fundamental GS located near the top edge of the first band gap. This soliton, which is very similar to that shown in Fig. 5, contains 71 particles and has chemical potential  $\tilde{\mu} = 11.5$ , which implies  $\mu = 2.15\hbar\omega_{\perp}$ . At this value of  $\mu$  there is a significant probability of the excitation of higher levels in the radial-confinement potential, which is corroborated by the fact that the peak axial density of this GS is  $an_1(0) \simeq 0.7$ . Because inequality  $an_1 \ll 1$  does not hold in this case, one cannot expect the ordinary 1D GPE (19) to be valid. In fact, it yields the number of particles  $N = 53$ , which implies an error greater than 25%. Nevertheless, the effective nonpolynomial 1D equation (18) remains valid and quite accurate. It produces  $N = 73$ , which corresponds to a maximum error of 2.8%. This is not surprising, since condition (15), which guarantees the validity of the nonpolynomial equation, is satisfied in this case.

The solution pertaining to point G in Fig. 1(c) is qualitatively similar. It corresponds to the fundamental GS located near the top edge of the second band gap, with chemical potential  $\tilde{\mu} = 17.2$  and  $N = 182$ . Figure 5 shows the 3D density and axial linear density  $an_1(z)$  of this BEC droplet. In this case,  $an_1(0) \simeq 1.3$ , indicating a large contribution of excited radial modes. As a consequence, the ordinary 1D GPE (19) [the dashed blue line in Fig. 5(c)] fails to reproduce the 3D results (open circles). It predicts  $N = 119$ , which means the error exceeds 34%. As seen from Fig. 5(c), the effective 1D equation (18) (the solid red line) remains accurate enough

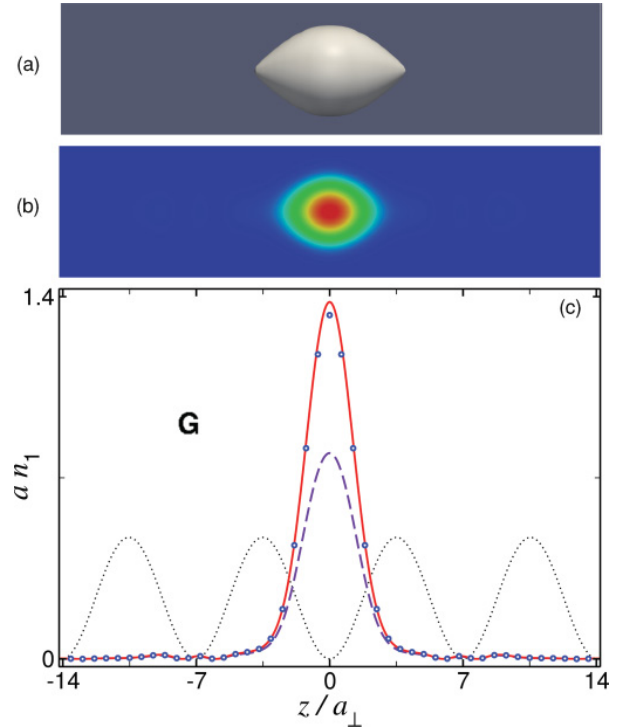


FIG. 5. (Color online) Same as Fig. 2 but for the gap soliton corresponding to point G in Fig. 1(c).

in this case, too. In particular, it yields  $N = 187$ , the respective error being 2.8%.

The above results imply that, with the deep OL, the number of particles that can be accommodated in a fundamental GS can be large enough to make the 3D character of the wave function essential. In fact, even for the tight radial confinement ( $E_R/\hbar\omega_{\perp} \ll 1$ ), which is the most favorable case for the applicability of the 1D approximation, the usual 1D GPE (19) with the deep OL potential cannot be reliably used beyond the first third of the first band gap. Since the validity of the mean field treatment requires  $N \gg 1$ , the usual GPE cannot be used close to the bottom edge of the band gap, either. It is thus clear that the range of validity of this standard 1D equation is limited. This conclusion becomes even more severe if one takes into account that the tight-radial-confinement regime is not easy to realize using typical experimental parameters. Our simulations indicate, however, that the effective nonpolynomial 1D equation (18) properly describes such essentially 3D situations, providing for an accurate description of the fundamental GSs in the entire band gaps.

### B. Intermediate radial confinement: $E_R/\hbar\omega_{\perp} \simeq 1/4$

This regime is of particular interest because it corresponds to typical experimental parameters. It can be realized, for instance, with a  $^{87}\text{Rb}$  condensate in an OL of period  $d = 1.55 \mu\text{m}$ , radially confined by a harmonic potential with  $\omega_{\perp}/2\pi = 960 \text{ Hz}$ . The particle numbers  $N$  of the GSs considered below are given for these physical parameters, and,

A. MUÑOZ MATEO, V. DELGADO, AND BORIS A. MALOMED

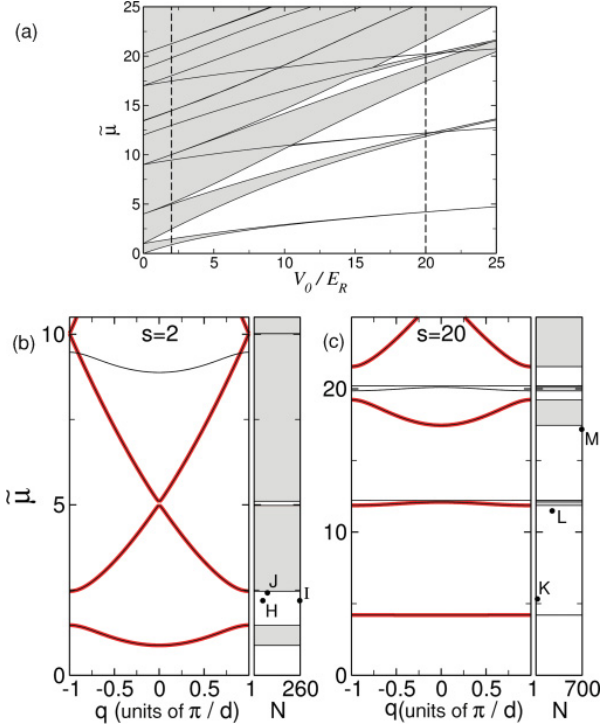
PHYSICAL REVIEW A **83**, 053610 (2011)

FIG. 6. (Color online) (a) Band-gap structure of a noninteracting 3D BEC with  $E_R/\hbar\omega_\perp = 1/4$ , as a function of the dimensionless lattice depth  $s \equiv V_0/E_R$ . The representative cases  $s = 2$  and 20, indicated by vertical dashed lines, are considered in more detail in (b) and (c), respectively, which show the dimensionless chemical potential  $\tilde{\mu}$  as a function of the quasimomentum  $q$  in the first Brillouin zone (in units of  $\pi/d$ ). The right panels display the location of the  $^{87}\text{Rb}$  gap solitons considered in this work (points H–M).

they can be converted into values of  $N$  for other situations by means of Eq. (22) (now, with  $a/a_\perp = 0.015$ ).

Figure 6(a) shows the band-gap structure produced by the linearized version of Eq. (17) for zero-vorticity modes. Recall that the linearization of the effective 1D equations (18) and (19) yields, instead, the diagram displayed in Fig. 1(a) (except for the narrow band marked by the arrow, which, as already mentioned, does not appear in the 1D approximation). It is seen that the 1D approximation cannot reproduce the 3D picture resulting from the excitation of the radial modes, which manifest themselves in Fig. 6(a) as replicas of bands shifted up by integer multiples of  $2\hbar\omega_\perp/E_R$ . Since this quantity is smaller in the present case than it was before, the effect of these contributions in the region of interest is now stronger. While it is obvious that the 1D equations cannot account for the 3D effects originating from the shifted bands, we will demonstrate that these equations may still produce an accurate description of common GSs (i.e., those originating from the  $m = n_r = 0$  energy bands).

Figures 6(b) and 6(c) display the band-gap structure as a function of the quasimomentum for lattice depths  $V_0/E_R = 2$  and 20, respectively. Thin black lines in these figures represent 3D results that cannot be reproduced by the 1D models, and

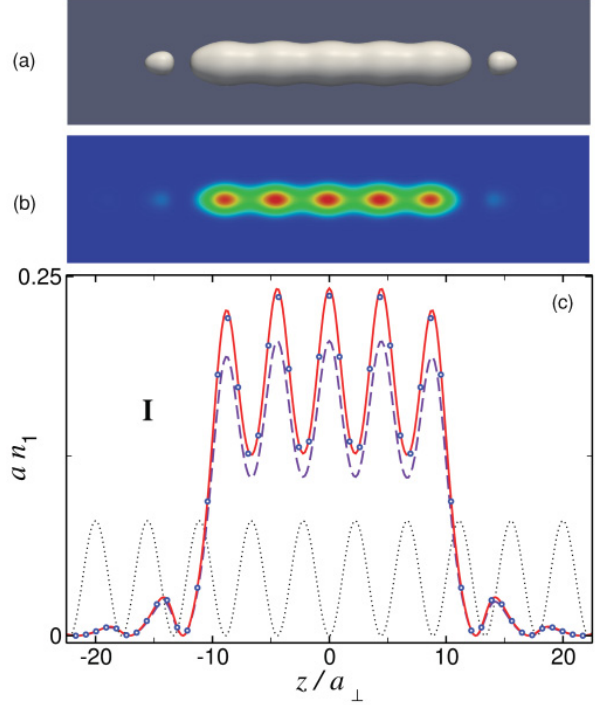


FIG. 7. (Color online) Atom density of the gap soliton corresponding to point I in Fig. 6(b), displayed as (a) an isosurface taken at 5% of the maximum density and (b) as a color map along a cutting plane containing the  $z$  axis. (c) Dimensionless axial density  $an_1$  obtained from the 3D wave function, as prescribed by Eq. (5) (open circles) along with the corresponding predictions from the nonpolynomial 1D equation (18) (solid red line) and the ordinary 1D GPE (19) (dashed blue line).

points H–M in  $(N, \tilde{\mu})$  plane mark examples of GSs that will be considered below.

### 1. Shallow optical lattice: $V_0/E_R = 2$

Point H in Fig. 6(b) corresponds to a fundamental GS with  $\tilde{\mu} = 2.19$  and  $N = 50$ , which is similar to the one in Fig. 3, but with the peak axial density  $an_1(0) \simeq 0.2$ . In this case, the effective 1D equation (18) predicts  $N = 51$ , thus corresponding to a 2% error, while the 1D GPE (19) predicts  $N = 45$  (an 11% error). Symmetric combinations of five such fundamental GSs generate the compound GS shown in Fig. 7, which contains 258 particles and corresponds to point I in Fig. 6(b). The 3D density of this soliton exhibits five weakly separated peaks, as shown in Figs. 7(a) and 7(b) by means of the isosurface and the color map in the cross-section plane drawn through the  $z$  axis. As seen in Fig. 7(c), in this case the effective 1D equation (18) yields an error of 1.5% in the norm of the wave function ( $N = 262$ ) while the use of the ordinary 1D GPE (19) generates an error of 12% ( $N = 226$ ), showing that, already for this GS, the 3D effects play an important role.

Point J in Fig. 6(b) corresponds to a fundamental GS containing 75 particles and located near the top edge of the first band gap. It is qualitatively similar to the one shown in Fig. 3, but having  $\tilde{\mu} = 2.42$  and  $an_1(0) \simeq 0.26$ . In this case,

Eqs. (18) and (19) yield results with an error  $\simeq 1\%$  ( $N = 76$ ) and  $12\%$  ( $N = 66$ ), respectively.

## 2. Deep optical lattice: $V_0/E_R = 20$

Points K, L, and M in Fig. 6(c) correspond to fundamental GSs in the case of the tight-binding underlying linear structure. The first soliton, which contains 19 particles, with  $\tilde{\mu} = 5.33$  and axial density  $an_1(0) \simeq 0.23$ , also corresponds to the nonlinear tight-binding regime and is thus highly localized at a single lattice site. This follows from the fact that, for  $V_0/E_R = 20$  and  $E_R/\hbar\omega_\perp = 1/4$ , one has  $V_0/\hbar\omega_\perp = 5$ , which is much greater than the above-mentioned value of  $an_1(0)$ . For this GS, located near the bottom edge of the first band gap, the ordinary 1D GPE (19) yields an error  $> 11\%$ , which continues to grow as one moves upward in the band gap. However, the effective nonpolynomial 1D equation (18) remains accurate within a 2.5% deviation.

Point L in Fig. 6(c) indicates the position of a fundamental GS near the top edge of the first band gap, with  $\tilde{\mu} = 11.5$ ,  $N = 243$ , and  $an_1(0) \simeq 2.3$ . Since the inequality  $an_1 \ll 1$  does not hold in this case, the ordinary 1D GPE (19) is invalid, giving a 45% error ( $N = 133$ ). Note that, even though point L is relatively close to a 3D energy band [the thin black line in Fig. 6(c)], which cannot be reproduced by the effective 1D equation (18), it can, however, reproduce this GS within a 4% error ( $N = 253$ ). The same is true for the fundamental GS displayed in Fig. 8, which corresponds to point M in Fig. 6(c). It represents a BEC droplet containing 696 particles, with  $\tilde{\mu} = 17.2$  and the peak axial density  $an_1(0) \simeq 5.4$ . Since we have  $V_0/\hbar\omega_\perp < an_1(0)$  in the present case, the system is no longer in the nonlinear tight-binding regime. This is seen in Fig. 8, where the density is not strongly localized around the minimum of the potential well. As seen in Fig. 8(c), the nonpolynomial 1D equation (18) yields results (the solid red line) that agree with the 3D picture produced by the full GPE (17) (open circles), within a 3% deviation [Eq. (18) yields  $N = 719$  in this case]. On the contrary, the 1D GPE (19), which gives results (the dashed blue line) with an error  $> 55\%$  (it yields  $N = 297$ ), clearly is not valid in this case.

These findings demonstrate that, in the physically relevant regime of the intermediate radial confinement ( $E_R/\hbar\omega_\perp \gtrsim 1/4$ ), even for the shallow OL the 3D effects may be important, and thus the usual 1D GPE (19) fails to reproduce correctly the axial density  $an_1(z)$  and the particle content  $N$ . For  $E_R/\hbar\omega_\perp = 1/4$  and potential depth  $V_0/E_R = 2$ , the fundamental GSs located in the first band gap, as predicted by the 1D GPE equation, feature the error  $\simeq 12\%$ , which is still larger for compound GSs. For the deep OL ( $V_0/E_R = 20$ ), the 1D GPE is valid only in a small region near the bottom edge of the first band gap. In general, this equation is applicable only where both conditions  $an_1 \ll 1$  and  $N \gg 1$  hold simultaneously. As  $E_R/\hbar\omega_\perp$  increases, the relative strength of the radial confinement decreases, and the range of validity of the 1D GPE becomes more and more narrow. From the experimental viewpoint, the increase of  $E_R/\hbar\omega_\perp$  may be relevant because, in this way, one can easily increase the number of particles in the fundamental GSs. However, the increase of  $E_R/\hbar\omega_\perp$  also implies a decrease in the relative size of the radial-excitation energy quantum, which can compromise the stability of the

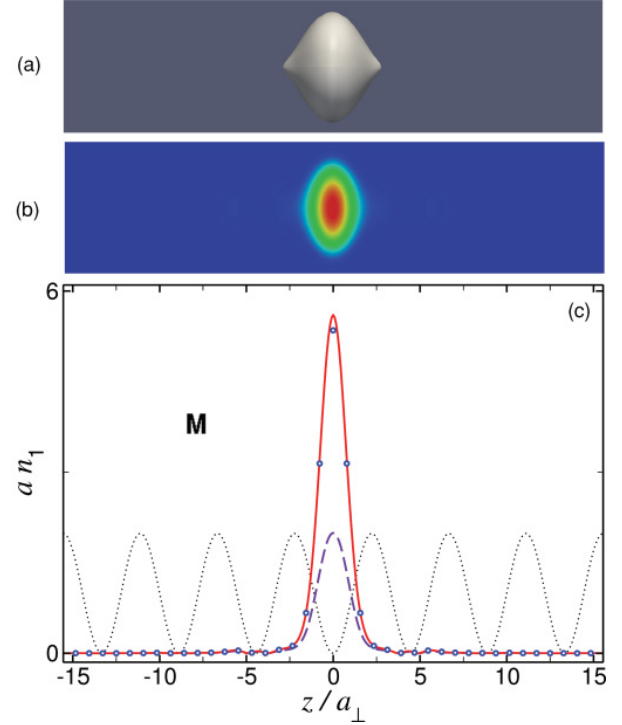


FIG. 8. (Color online) Same as Fig. 7 but for the gap soliton corresponding to point M in Fig. 6(c).

solitons because they can decay by exciting higher radial modes, even for condensates with a relatively small number of particles. We briefly consider this case below. The stability properties of the GSs will be analyzed in Sec. IV.

## C. Weak radial confinement: $E_R/\hbar\omega_\perp \geq 1$

In this regime, the typical energy scale in the underlying linear problem is sufficiently large to easily excite higher transverse modes. As a representative example, we consider the case of  $E_R/\hbar\omega_\perp = 1$ , which can be realized in a  $^{87}\text{Rb}$  condensate in an OL with  $d = 1.55 \mu\text{m}$  and radial-confinement strength  $\omega_\perp/2\pi = 240 \text{ Hz}$ . The particle contents of the GSs considered below correspond to such condensates. As before, the corresponding values of  $N$  can be converted into those corresponding to other situations by means of Eq. (22) (this time,  $a/a_\perp = 7.6 \times 10^{-3}$ ).

Figure 9(a) displays the band-gap structure of the underlying 3D linear problem, to be compared with Fig. 1(a) which shows the band-gap structure obtained from the linearization of 1D equations (18) or (19). As before, the latter equations cannot account for the 3D contributions from the excited radial modes, which account for the series of shifted bands separated by gaps of value  $2\hbar\omega_\perp/E_R$  in Fig. 9(a). Figures 9(b) and 9(c) display the linear band-gap structure as a function of the quasimomentum for  $V_0/E_R = 2$  and 20, respectively.

Point P in Fig. 9(b) corresponds to a fundamental GS with  $\tilde{\mu} = 1.59$  and  $N = 74$ . Its 3D density plot, shown in Fig. 10, demonstrates that this fundamental soliton is spread over several lattice sites, which is a consequence of the fact

A. MUÑOZ MATEO, V. DELGADO, AND BORIS A. MALOMED

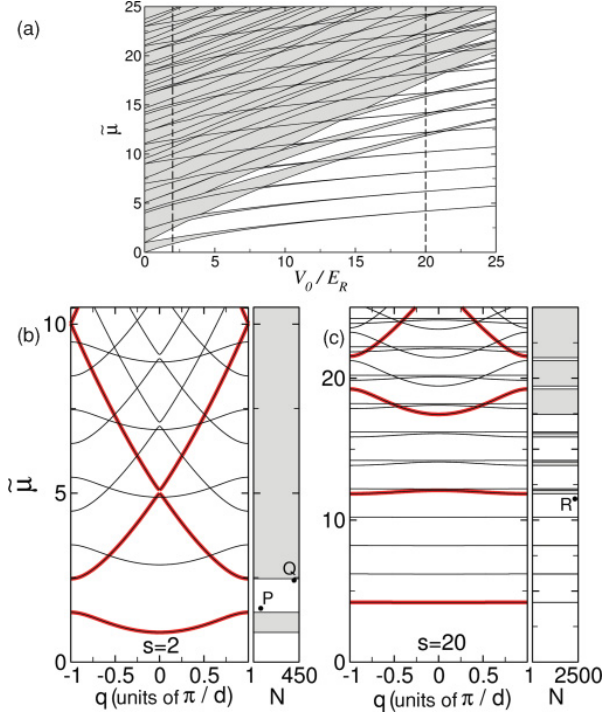
PHYSICAL REVIEW A **83**, 053610 (2011)

FIG. 9. (Color online) (a) Band-gap structure of a noninteracting 3D BEC with  $E_R/\hbar\omega_\perp = 1$ , as a function of the dimensionless lattice depth  $s \equiv V_0/E_R$ . The representative cases  $s = 2$  and  $20$ , indicated by vertical dashed lines, are considered in more detail in (b) and (c), respectively, which show the dimensionless chemical potential  $\tilde{\mu}$  as a function of the quasimomentum  $q$  in the first Brillouin zone (in units of  $\pi/d$ ). The right panels display the location of the  $^{87}\text{Rb}$  gap solitons considered in this work (points P–R).

that its chemical potential is very close to the first linear energy band, where only extended solutions of the stationary GPE exist. Figure 10(c) shows that the results obtained from the effective 1D equation (18) (the solid red line) coincide with the 3D results (open circles) within 1% (it predicts  $N = 75$ ). However, the 1D GPE (19) (the dashed blue line) gives rise to an error  $\simeq 10\%$  (it predicts  $N = 66$ ). We thus conclude that, in the weak-radial-confinement regime [ $E_R/\hbar\omega_\perp \geq 1$ ], the latter equation is only applicable in a narrow region close to the bottom edge of the first band gap, even for shallow OLs. In this regime, the 3D contributions play an important role in most cases. These contributions are, however, well accounted for by the effective 1D equation (18). For instance, for point Q in Fig. 9(b) [which corresponds to a fundamental GS near the top edge of the first band gap, with  $\tilde{\mu} = 2.42$ ,  $N = 400$ , and  $an_1(0) \simeq 1.5$ ] the 1D GPE (19) gives an error of 34% ( $N = 265$ ), while the nonpolynomial 1D equation (18) limits the error to 3.5% ( $N = 414$ ). Point R in Fig. 9(c) is an example of a fundamental GS in a deep OL. It corresponds to a disk-shaped BEC droplet trapped in a single lattice cell [see Fig. 11(b)], which contains 2323  $^{87}\text{Rb}$  atoms, and has  $\tilde{\mu} = 11.5$ . Its axial linear density is qualitatively similar to that shown in Fig. 8(c), but with a maximum value  $an_1(0) \simeq 23$ . In this case, the 1D GPE predicts the particle content  $N = 534$ ,

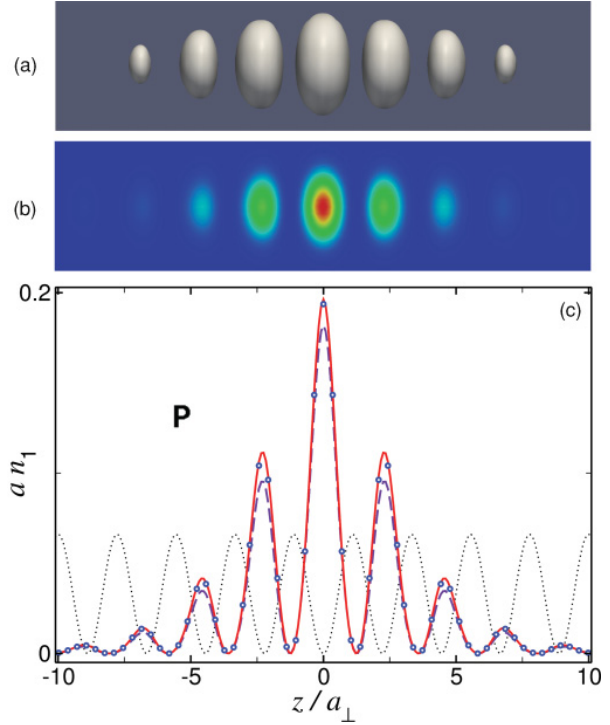


FIG. 10. (Color online) Atom density of the gap soliton corresponding to point P in Fig. 9(b), displayed as (a) an isosurface taken at 5% of the maximum density and (b) as a color map along a cutting plane containing the  $z$  axis. (c) Dimensionless axial density  $an_1$  obtained from the 3D wave function, as prescribed by Eq. (5) (open circles) along with the corresponding predictions from the nonpolynomial 1D equation (18) (solid red line) and the ordinary 1D GPE (19) (dashed blue line).

while the effective 1D equation (18) yields  $N = 2437$ , which corresponds to an error  $\simeq 5\%$  in the norm of the wave function. Thus, the 1D nonpolynomial equation provides for a sufficiently good description of the stationary GSs even in the highly nonlinear ( $an_1 \gg 1$ ) weak-radial-confinement regime.

#### IV. STABILITY ANALYSIS

We have investigated the stability of the GS solutions by monitoring their long-time behavior after the application of a random perturbation [13,29]. Specifically, we have perturbed the corresponding wave functions with a small-amplitude ( $\sim 2\%$ ) additive Gaussian white noise and have monitored the subsequent nonlinear evolution for 1 s. To this end we have numerically solved the full 3D GPE (1), as well as the effective 1D equation (14), using a Laguerre-Fourier pseudospectral method with a third-order Adams-Bashforth time-marching scheme. Numerical integration of the 3D GPE for such a long time is a very demanding computational task. While it is possible for a certain GS to be metastable and decay on a time scale still longer than 1 s, in practice this time is long enough in comparison with the lifetime of the condensate per



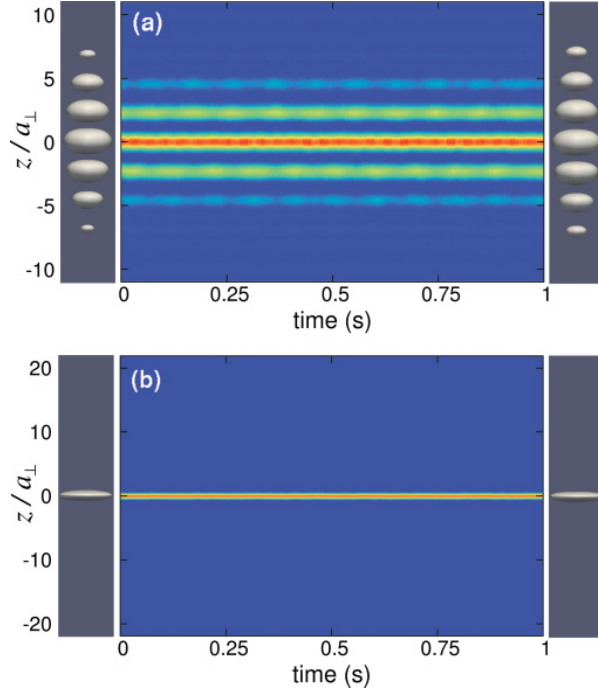


FIG. 11. (Color online) Evolution in time, after the application of a 2% white-noise perturbation, of the fundamental gap solitons corresponding (a) to point P in Fig. 9(b) and (b) to point R in Fig. 9(c).

se, hence the soliton surviving for 1 s may be categorized as stable.

We have found that both the full 3D GPE (1) and the effective nonpolynomial 1D equation (14) lead to the same conclusions regarding the stability of the GSs. However, once an unstable soliton begins to decay, one cannot expect, in general, the latter equation to reproduce the dynamical behavior correctly. The reason for this problem is that, as already mentioned in Sec. II, in the presence of the OL potential the above-mentioned adiabatic condition (i) is hard to fulfill in time-dependent settings. Of course, the same is true for the 1D equation (3), which is a limit form of Eq. (14) and, consequently, has a much narrower range of applicability. The results presented below have been obtained using the full 3D GPE (1). For each GS we have used at least two different basis sets and time steps to check that the results do not depend on details of the numerical procedure.

Our simulations demonstrate that, in general, (1,0,0) fundamental GSs are stable, except in a narrow region close to the top edge of the band gaps. In particular, the solitons corresponding to points A, D, K, and P in Figs. 1, 6, and 9 remain stable up to  $t = 1$  s. On the contrary, GSs in a shallow OL ( $V_0/E_R = 2$ ), located close to the top edge of a band gap, such as those corresponding to points C, H, J, and Q in Figs. 1, 6, and 9, turn out to be unstable. This instability manifests itself as a steady decay of the norm of the GS through emission of radiation, on a time scale that increases as one moves away from the top edge of the band gap. In this regard, one finds that the GS corresponding to point H decays much slower than the other ones. As the lattice depth

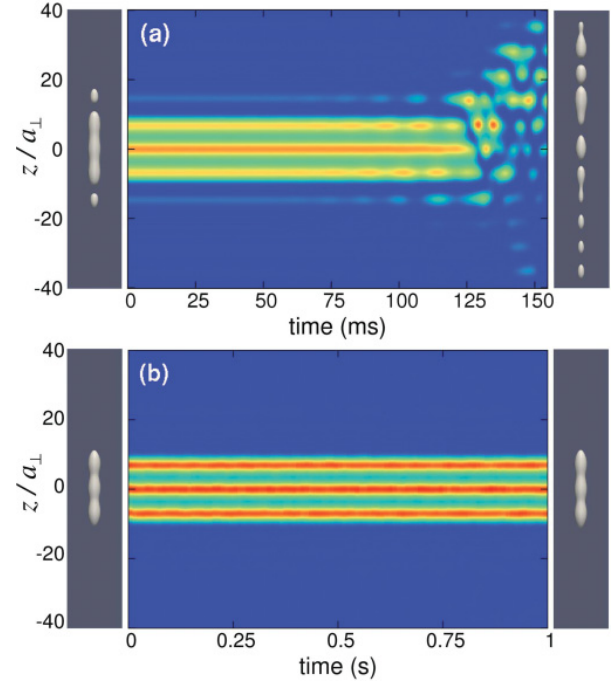


FIG. 12. (Color online) (a) Evolution in time, after the application of a 2% white-noise perturbation, of the compound gap soliton corresponding to point B in Fig. 1(b). Panel (b) displays the long-time behavior, after the application of the perturbation, of a stable three-peak soliton (see text).

$V_0/E_R$  increases, in general, GSs become more stable and the instability region shrinks. In particular, our simulations indicate that GSs such as those corresponding to points F, G, L, M, and R in Figs. 1, 6, and 9 (which are fundamental GSs in the deep OL, with  $V_0/E_R = 20$ , located close to the top edge of the band gap) also remain stable up to  $t = 1$  s. This is in good agreement with previous analyses carried out in the context of deep optical lattices in terms of the ordinary 1D GPE (3) [9,13].

An important result is that (1,0,0) fundamental GSs remain stable even in the weak-radial-confinement regime [ $E_R/\hbar\omega_\perp \simeq 1$ ]. In this regime, GSs always have sufficient energy to excite higher radial modes, and, as a consequence, the 3D effects are always relevant and the usual 1D GPE (3) fails. Figure 11(a) displays the long-time behavior, after the application of the perturbation, of the fundamental GS shown in Fig. 10 [it corresponds to point P in Fig. 9(b)]. This figure shows (by means of a color map) the evolution of the axial density  $an_1(z,t)$ , which has been obtained from the 3D wave function  $\psi(\mathbf{r}_\perp, z, t)$  by integrating out the radial dependence, as per Eq. (5). The left panel in this figure shows the 3D condensate density at  $t = 0$  (i.e., just after the application of the perturbation) as an isosurface taken at 5% of the maximum density, while the right panel represents the density at  $t = 1$  s. This GS has  $\tilde{\mu} = 1.59$ , which implies  $\mu = 2.59\hbar\omega_\perp$ . Note that, despite the fact that this chemical potential is greater than the quantum  $\hbar\omega_\perp$ , the GS remains stable up to 1 s. The same is true for the fundamental GS corresponding to

A. MUÑOZ MATEO, V. DELGADO, AND BORIS A. MALOMED

PHYSICAL REVIEW A **83**, 053610 (2011)

point R in Fig. 9(c), which corresponds to a disk-shaped BEC containing more than 2300  $^{87}\text{Rb}$  atoms with chemical potential  $\mu = 12.5\hbar\omega_{\perp} \gg \hbar\omega_{\perp}$ . As Fig. 11(b) shows, this GS also remains stable.

Our simulations also demonstrate that the compound GS from Fig. 2, corresponding to point B in Fig. 1(b), is unstable. This is seen in Fig. 12(a), which shows how the soliton decays on a time scale  $\simeq 120$  ms after the addition of a 2% white-noise perturbation. This compound GS, which has  $\tilde{\mu} = 1.75$  and  $N = 35$ , was built in the shallow OL ( $V_0/E_R = 2$ ) as the symmetric combination of three fundamental constituents. We have found that, in such shallow lattices, GSs of this type are always unstable. However, it is not difficult to find stable solitons of this type in somewhat deeper lattices. An example is shown in Fig. 12(b), which represents a stable three-peak soliton with  $\tilde{\mu} = 3.13$  and  $N = 59$ , trapped in the OL with  $V_0/E_R = 4$  and  $E_R/\hbar\omega_{\perp} = 1/10$ . Similar dynamics is observed for the GS displayed in Fig. 7, which corresponds to point I in Fig. 6(b). This is a five-peak compound generated in the shallow OL ( $V_0/E_R = 2$ ) in the regime of the intermediate radial-confinement strength [ $E_R/\hbar\omega_{\perp} \simeq 1/4$ ]. Our simulations indicate that this compound soliton is unstable. In fact, no stable five-peak solitons were found in such a shallow lattice. On the other hand, it is not difficult to find stable compounds of this kind for deeper OLs. An example is the five-peak pattern with  $V_0/E_R = 4$ ,  $E_R/\hbar\omega_{\perp} = 1/4$ ,  $\tilde{\mu} = 2.83$ , and  $N = 212$ . In general, GSs naturally become more stable as the lattice depth increases. For deep OLs ( $V_0/E_R = 20$ ), the stability of compound GSs is essentially identical to that of their fundamental constituents. The GS in Fig. 4, which corresponds to point E in Fig. 1(c), is an example of a stable three-peak soliton realized in a deep OL.

## V. CONCLUSIONS

To appraise the physical relevance of the results reported in this work, it is pertinent to recall that the mean-field treatment of the GSs (gap solitons), based on the GPE, is valid if  $N \gg 1$  and the condensate is sufficiently dilute so that  $a^3\bar{n} \ll 1$ , where  $a$  is the scattering length of the interatomic collisions and  $\bar{n}$  is the atomic density. In shallow OLs (optical lattices)

such conditions can be easily met, though the former one imposes a serious limitation on the range of applicability of the usual 1D GPE (19), which fails as  $N$  increases. In deep OLs, where the tunneling between adjacent cells is strongly suppressed, the above conditions must be fulfilled at each site of the lattice. Under these circumstances, GSs may have a rather high local density. A good estimate for the 3D peak density  $n(\mathbf{0}) = N|\psi(\mathbf{0})|^2$  in terms of the peak axial density,  $n_1(0)$ , can be obtained from the following relation [17]:

$$n(\mathbf{0}) = \frac{n_1(0)}{\pi a_{\perp}^2 \sqrt{1 + 4an_1(0)}}. \quad (25)$$

Substituting the values of  $an_1(0)$  obtained in Sec. III for different GSs into Eq. (25), one can easily verify that condition  $a^3n(\mathbf{0}) \ll 1$  is satisfied in all cases, which justifies the use of the mean-field description. The most critical situation occurs for the GS corresponding to point G in Fig. 1(c), which has  $a^3n(\mathbf{0}) \simeq 10^{-4}$ . For the GS corresponding to point R in Fig. 9(c), one finds  $a^3n(\mathbf{0}) \simeq 5 \times 10^{-5}$ .

Despite the fact that applicability conditions for the mean-field treatment can be readily met, it is much harder to justify the validity of the usual 1D GPE (3), which requires both conditions  $an_1 \ll 1$  and  $N \gg 1$  to hold simultaneously. Only in this case may the 3D effects be safely neglected. In most experimentally relevant situations, these conditions are not met, hence the applicability range of Eq. (3) turns out to be very limited. On the contrary, it has been shown in this work that the effective 1D GPE (14) with the nonpolynomial nonlinearity provides for an accurate description of the stationary matter-wave GSs in most cases of practical interest.

A relevant extension of the present analysis may be to GSs with intrinsic vorticity, as well as to mobility of stable solitons. It is also interesting to consider two-component GSs in the realistic 3D setting.

## ACKNOWLEDGMENTS

V. D. acknowledges financial support from Ministerio de Ciencia e Innovación through contract No. FIS2009-07890 (Spain).

- 
- [1] V. A. Brazhnyi and V. V. Konotop, *Mod. Phys. Lett. B* **18**, 627 (2004).
  - [2] O. Morsch and M. Oberthaler, *Rev. Mod. Phys.* **78**, 179 (2006).
  - [3] R. Carretero-González, D. J. Frantzeskakis, and P. G. Kevrekidis, *Nonlinearity* **21**, R139 (2008).
  - [4] *Emergent Nonlinear Phenomena in Bose-Einstein Condensates: Theory and Experiment*, edited by P. G. Kevrekidis, D. J. Frantzeskakis, and R. Carretero-González (Springer, Heidelberg, Germany, 2007).
  - [5] Y. V. Kartashov, B. A. Malomed, and L. Torner, *Rev. Mod. Phys.* **83**, 247 (2011).
  - [6] E. P. Gross, *Nuovo Cimento* **20**, 454 (1961); *J. Math. Phys.* **4**, 195 (1963); L. P. Pitaevskii, *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **40**, 646 (1961) [*Sov. Phys. JETP* **13**, 451 (1961)].
  - [7] A. Muñoz Mateo and V. Delgado, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 180409 (2006).
  - [8] J. A. M. Huhtamäki, M. Möttönen, T. Isoshima, V. Pietilä, and S. M. M. Virtanen, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 110406 (2006).
  - [9] P. J. Y. Louis, E. A. Ostrovskaya, C. M. Savage, and Y. S. Kivshar, *Phys. Rev. A* **67**, 013602 (2003).
  - [10] F. Kh. Abdullaev and M. Salerno, *Phys. Rev. A* **72**, 033617 (2005).
  - [11] T. Mayteevarunyoo and B. A. Malomed, *Phys. Rev. A* **74**, 033616 (2006).
  - [12] Y. Zhang and B. Wu, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 093905 (2009).
  - [13] Y. Zhang, Z. Liang, and B. Wu, *Phys. Rev. A* **80**, 063815 (2009).
  - [14] A. Muñoz Mateo, V. Delgado, and B. A. Malomed, *Phys. Rev. A* **82**, 053606 (2010).

GAP SOLITONS IN ELONGATED GEOMETRIES: THE ...

PHYSICAL REVIEW A **83**, 053610 (2011)

- [15] A. E. Muryshev, G. V. Shlyapnikov, W. Ertmer, K. Sengstock, and M. Lewenstein, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 110401 (2002).
- [16] L. Salasnich, A. Parola, and L. Reatto, *Phys. Rev. A* **65**, 043614 (2002); L. Salasnich, *Laser Phys.* **12**, 198 (2002).
- [17] A. Muñoz Mateo and V. Delgado, *Phys. Rev. A* **77**, 013617 (2008); **75**, 063610 (2007); *Ann. Phys. (NY)* **324**, 709 (2009).
- [18] S. Middelkamp, G. Theocharis, P. G. Kevrekidis, D. J. Frantzeskakis, and P. Schmelcher, *Phys. Rev. A* **81**, 053618 (2010).
- [19] G. Theocharis, A. Weller, J. P. Ronzheimer, C. Gross, M. K. Oberthaler, P. G. Kevrekidis, and D. J. Frantzeskakis, *Phys. Rev. A* **81**, 063604 (2010).
- [20] C. Wang, P. G. Kevrekidis, T. P. Horikis, and D. J. Frantzeskakis, *Phys. Lett. A* **374**, 3863 (2010).
- [21] S. Middelkamp, J. J. Chang, C. Hamner, R. Carretero-González, P. G. Kevrekidis, V. Achilleos, D. J. Frantzeskakis, P. Schmelcher, and P. Engels, *Phys. Lett. A* **375**, 642 (2011).
- [22] An independent derivation of this formula was reported by F. Gerbier, *Europhys. Lett.* **66**, 771 (2004).
- [23] L. Salasnich, B. A. Malomed, and F. Toigo, *Phys. Rev. A* **76**, 063614 (2007).
- [24] A. Muñoz Mateo and V. Delgado, *Phys. Rev. A* **74**, 065602 (2006).
- [25] S. Adhikari and B. A. Malomed, *Europhys. Lett.* **79**, 50003 (2007); *Physica D* **238**, 1402 (2009).
- [26] F. H. Mies, E. Tiesinga, and P. S. Julienne, *Phys. Rev. A* **61**, 022721 (2000).
- [27] B. Eiermann, Th. Anker, M. Albiez, M. Taglieber, P. Treutlein, K.-P. Marzlin, and M. K. Oberthaler, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 230401 (2004).
- [28] J. Armijo, T. Jacqmin, K. Kheruntsyan, and I. Bouchoule, *Phys. Rev. A* **83**, 021605 (2011).
- [29] J. Yang and Z. H. Musslimani, *Opt. Lett.* **28**, 2094 (2003).

# Bibliografía

- [A.1] A. Muñoz Mateo and V. Delgado, *Evolution of a doubly quantized vortex imprinted in a Bose-Einstein condensate*, Phys. Rev. Lett. **97**, 180409 (2006).
- [A.2] A. Muñoz Mateo and V. Delgado, *Extension of the Thomas-Fermi approximation for trapped Bose-Einstein condensates with an arbitrary number of atoms*, Phys. Rev. A **74**, 065602 (2006).
- [A.3] A. Muñoz Mateo and V. Delgado, *Ground-state properties of trapped Bose-Einstein condensates: Extension of the Thomas-Fermi approximation*, Phys. Rev. A **75**, 063610 (2007).
- [A.4] A. Muñoz Mateo and V. Delgado, *Effective mean-field equations for cigar-shaped and disk-shaped Bose-Einstein condensates*, Phys. Rev. A **77**, 013617 (2008).
- [A.5] A. Muñoz Mateo and V. Delgado, *Effective one-dimensional dynamics of elongated Bose-Einstein condensates*, Ann. Phys. (NY) **324**, 709 (2009).
- [A.6] A. Muñoz Mateo, V. Delgado, and B. A. Malomed, *Three-dimensional gap solitons in Bose-Einstein condensates supported by one-dimensional optical lattices*, Phys. Rev. A **82**, 053606 (2010).
- [A.7] A. Muñoz Mateo, V. Delgado, and B. A. Malomed, *Gap solitons in elongated geometries: The one-dimensional Gross-Pitaevskii equation and beyond*, Phys. Rev. A **83**, 053610 (2011).
- [1] *Bose-Einstein condensation*, Eds.: A. Griffin, D. W. Snoke and S. Stringari, Cambridge University Press, (1995).
- [2] *Pairing in fermionic systems: Basic concepts and modern applications*, Eds.: A. Sedrakian, J. W. Clark, and M. Alford, World Scientific, (2006).



- [3] D. G. Fried, T. C. Killian, L. Willmann, D. Landhuis, S. C. Moss, D. Kleppner, and T. J. Greytak, *Bose-Einstein condensation of atomic hydrogen*, Phys. Rev. Lett. **81**, 3811 (1998).
- [4] M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthews, C. E. Wieman, and E. A. Cornell, *Observation of Bose-Einstein condensation in a dilute atomic vapor*, Science **269**, 198 (1995).
- [5] K. B. Davis, M. O. Mewes, M. R. Andrews, N. J. van Druten, D. S. Durfee, D. M. Kurn, and W. Ketterle, *Bose-Einstein condensation in a gas of sodium atoms*, Phys. Rev. Lett. **75**, 3969 (1995).
- [6] C. C. Bradley, C. A. Sackett, and R. G. Hulet, *Bose-Einstein condensation of lithium: Observation of limited condensate number*, Phys. Rev. Lett. **78**, 985 (1997).
- [7] S. Chu, *The manipulation of neutral particles*, Nobel Lecture (1997); C. Cohen-Tannoudji, *Manipulating atoms with photons*, Nobel Lecture (1997); W. D. Phillips, *Laser cooling and trapping of neutral atoms*, Nobel Lecture (1997).
- [8] W. Ketterle, D. S. Durfee, and D. M. Stamper-Kurn, *Making, probing and understanding Bose-Einstein condensates*, 67-176, Enrico Fermi International School of Physics, Corso CXL (IOS Press, Amsterdam) (1999).
- [9] O. Morsch and M. Oberthaler, *Dynamics of Bose-Einstein condensates in optical lattices*, Rev. Mod. Phys. **78**, 179 (2006).
- [10] E. P. Gross, *Structure of a quantized vortex in boson systems*, Nuovo Cimento **20**, 454 (1961); J. Math. Phys. **4**, 195 (1963); L. P. Pitaevskii, *Vortex lines in an imperfect Bose gas*, Zh. Eksp. Teor. Fiz., **40**, 646 (1961) [Sov. Phys. JETP **13**, 451 (1961)].
- [11] F. Dalfovo, S. Giorgini, L. P. Pitaevskii, and S. Stringari, *Theory of Bose-Einstein condensation in the alkali gases*, Rev. Mod. Phys. **71**, 463 (1999).
- [12] M. Edwards and K. Burnett, *Numerical solution of the nonlinear Schrödinger equation for small samples of trapped neutral atoms*, Phys. Rev. A **51**, 1382 (1995).

- [13] M. Edwards, R. J. Dodd, C. W. Clark, and K. Burnett, *Zero-temperature, mean-field theory of atomic Bose-Einstein condensates*, J. Res. Nat. Inst. Stand. Technol. **101**, 553 (1996).
- [14] Y. Shin, M. Saba, M. Vengalattore, T. A. Pasquini, C. Sanner, A. E. Leanhardt, M. Prentiss, D. E. Pritchard, and W. Ketterle, *Dynamical instability of a doubly quantized vortex in a Bose-Einstein condensate*, Phys. Rev. Lett. **93**, 160406 (2004).
- [15] G. Theocharis, A. Weller, J. P. Ronzheimer, C. Gross, M. K. Oberthaler, P. G. Kevrekidis, and D. J. Frantzeskakis, *Multiple atomic dark solitons in cigar-shaped Bose-Einstein condensates*, Phys. Rev. A **81**, 063604 (2010).
- [16] S. Middelkamp, G. Theocharis, P. G. Kevrekidis, D. J. Frantzeskakis, and P. Schmelcher, *Dark solitons in cigar-shaped Bose-Einstein condensates in double-well potentials*, Phys. Rev. A **81**, 053618 (2010).
- [17] C. Wang, P. G. Kevrekidis, T. P. Horikis, and D. J. Frantzeskakis, *Collisional-inhomogeneity-induced generation of matter-wave dark solitons*, Phys. Lett. A, **374**, 3863 (2010).
- [18] B. Eiermann, Th. Anker, M. Albiez, M. Taglieber, P. Treutlein, K.-P. Marzlin, and M. K. Oberthaler, *Bright gap solitons of atoms with repulsive interaction*, Phys. Rev. Lett. **92**, 230401 (2004).
- [19] A. L. Fetter and A. A. Svidzinsky, *Vortices in a trapped dilute Bose-Einstein condensate*, J. Phys. Condens. Matter **13**, R135 (2001).
- [20] A. A. Svidzinsky and A. L. Fetter, *Normal modes of a vortex in a trapped Bose-Einstein condensate*, Phys. Rev. A **58**, 3168 (1998).
- [21] J. J. García-Ripoll and V. M. Pérez-García, *Stability of vortices in inhomogeneous Bose condensates subject to rotation: A three-dimensional analysis*, Phys. Rev. A **60**, 4864 (1999).
- [22] D. L. Feder, C. W. Clark, and B. I. Schneider, *Vortex stability of interacting Bose-Einstein condensates confined in anisotropic harmonic traps*, Phys. Rev. Lett. **82**, 4956 (1999).
- [23] A. Recati, F. Zambelli, and S. Stringari, *Overcritical rotation of a trapped Bose-Einstein condensate*, Phys. Rev. Lett. **86**, 377 (2001).

- [24] S. Sinha and Y. Castin, *Dynamic instability of a rotating Bose-Einstein condensates*, Phys. Rev. Lett. **87**, 190402 (2001).
- [25] J. J. García-Ripoll and V. M. Pérez-García, *Vortex nucleation and hysteresis phenomena in rotating Bose-Einstein condensates*, Phys. Rev. A **63**, 041603(R) (2001).
- [26] E. Lundh, J.-P. Martikainen, and K.-A. Suominen, *Vortex nucleation in Bose-Einstein condensates in time-dependent traps*, Phys. Rev. A **67**, 063604 (2003).
- [27] M. R. Matthews, B. P. Anderson, P. C. Haljan, D. S. Hall, C. E. Wieman and E. A. Cornell, *Vortices in a Bose-Einstein condensate*, Phys. Rev. Lett. **83**, 2498 (1999).
- [28] K. W. Madison, F. Chevy, W. Wohlleben and J. Dalibard, *Vortex formation in a stirred Bose-Einstein condensate*, Phys. Rev. Lett. **84**, 806 (2000).
- [29] K. W. Madison, F. Chevy, W. Wohlleben and J. Dalibard, *Stationary states of a rotating Bose-Einstein condensate: Routes to vortex nucleation*, Phys. Rev. Lett. **86**, 4443 (2001).
- [30] J. R. Abo-Shaeer, C. Raman, J. M. Vogels, and W. Ketterle, *Observation of vortex lattices in Bose-Einstein condensates*, Science **292**, 476 (2001).
- [31] E. Hodby, G. Heckenblaikner, S. A. Hopkins, O. M. Maragò, and C. J. Foot, *Vortex nucleation in Bose-Einstein condensates in an oblate, purely magnetic potential*, Phys. Rev. Lett. **88**, 010405 (2002).
- [32] D. S. Rokhsar, *Vortex stability and persistent currents in trapped Bose gases*, Phys. Rev. Lett. **79**, 2164 (1997).
- [33] H. Pu, C. K. Law, J. H. Eberly, and N. P. Bigelow, *Coherent disintegration and stability of vortices in trapped Bose condensates*, Phys. Rev. A **59**, 1533 (1999).
- [34] A. E. Leanhardt, A. Görlitz, A. P. Chikkatur, D. Kielpinski, Y. Shin, D. E. Pritchard, and W. Ketterle, *Imprinting vortices in a Bose-Einstein condensate using topological phases*, Phys. Rev. Lett. **89**, 190403 (2002).

- [35] M. Nakahara, T. Isoshima, K. Machida, S.-i. Ogawa, and T. Ohmi, *A simple method to create a vortex in Bose-Einstein condensate of alkali atoms*, Physica B **284**, 17 (2000).
- [36] M. Möttönen, T. Mizushima, T. Isoshima, M. M. Salomaa, and K. Machida, *Splitting of a doubly quantized vortex through intertwining in Bose-Einstein condensates*, Phys. Rev. A **68**, 023611 (2003).
- [37] K. Gawryluk, M. Brewczyk and K. Rzążewski, *Thermally induced instability of a doubly quantized vortex in a Bose-Einstein condensate*, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **39**, L225 (2006).
- [38] Y. Castin and R. Dum, *Bose-Einstein condensates in time-dependent traps*, Phys. Rev. Lett. **77**, 5315 (1996).
- [39] Yu. Kagan, E.L. Surkov, and G.V. Shlyapnikov, *Evolution of a Bose-condensed gas under variations of the confining potential*, Phys. Rev. A **54**, R1753 (1996).
- [40] G. Baym and C. J. Pethick, *Ground-State properties of magnetically trapped Bose-Condensed rubidium gas*, Phys. Rev. Lett. **76**, 6 (1996).
- [41] V. M. Pérez-García, H. Michinel, J. I. Cirac, M. Lewenstein, and P. Zoller, *Dynamics of Bose-Einstein condensates: Variational solutions of the Gross-Pitaevskii equations*, Phys. Rev. A **56**, 1424 (1997).
- [42] L. Salasnich, A. Parola, and L. Reatto, *Effective wave equations for the dynamics of cigar-shaped and disk-shaped Bose condensates*, Phys. Rev. A **65**, 043614 (2002).
- [43] P. Schuck and X. Viñas, *Thomas-Fermi approximation for Bose-Einstein condensates in traps*, Phys. Rev. A **61**, 43603 (2000).
- [44] S. Sinha, *Semiclassical analysis of collective excitations in the Bose-Einstein condensate*, Phys. Rev. A **55**, 4325 (1997).
- [45] M. Urban, P. Schuck, and X. Viñas, *Thomas-Fermi approximation to static vortex states in superfluid trapped atomic gases*, Eur. Phys. J. D **27**, 147 (2003).
- [46] A. L. Fetter, *Variational study of dilute Bose condensate in a harmonic trap*, J. Low Temp. Phys. **106**, 643 (1997).

- [47] K. K. Das, *Highly anisotropic Bose-Einstein condensates: Crossover to lower dimensionality*, Phys. Rev. A **66**, 053612 (2002).
- [48] M. Olshanii, *Atomic scattering in presence of an external confinement and a gas of impenetrable bosons*, Phys. Rev. Lett. **81**, 938 (1998).
- [49] D. S. Petrov, G. V. Shlyapnikov, and J. T. M. Walraven, *Regimes of quantum degeneracy in trapped 1D gases*, Phys. Rev. Lett. **85**, 3745 (2000).
- [50] V. Dunjko, V. Lorent, and M. Olshanii, *Bosons in cigar-shape traps: Thomas-Fermi regime, Tonks-Girardeau regime, and between*, Phys. Rev. Lett. **86**, 5413 (2001).
- [51] C. Menotti and S. Stringari, *Collective oscillations of a one-dimensional trapped Bose-Einstein gas*, Phys. Rev. A **66**, 043610 (2002).
- [52] L. Salasnich, A. Parola, and L. Reatto, *Dimensional reduction in Bose-condensed alkali-metal vapors*, Phys. Rev. A **69**, 045601 (2004).
- [53] D. S. Petrov, M. Holzmann, and G. V. Shlyapnikov, *Bose-Einstein condensation in quasi-2D trapped gases*, Phys. Rev. Lett. **84**, 2551 (2000).
- [54] A. Görlitz, J. M. Vogels, A. E. Leanhardt, C. Raman, T. L. Gustavson, J. R. Abo-Shaeer, A. P. Chikkatur, S. Gupta, S. Inouye, T. Rosenband, and W. Ketterle, *Realization of Bose-Einstein condensates in lower dimensions*, Phys. Rev. Lett. **87**, 130402 (2001).
- [55] F. Dalfovo, L. Pitaevskii, and S. Stringari, *Order parameter at the boundary of a trapped bose gas*, Phys. Rev. A **54**, 4213 (1996).
- [56] E. Lundh, C. J. Pethick, and H. Smith, *Zero-temperature properties of a trapped Bose-condensed gas: Beyond the Thomas-Fermi approximation*, Phys. Rev. A **55**, 2126 (1997).
- [57] A. L. Fetter and D. L. Feder, *Beyond the Thomas-Fermi approximation for a trapped condensed Bose-Einstein gas*, Phys. Rev. A **58**, 3185 (1998).
- [58] E. Timmermans, P. Tommasini, and K. Huang, *Variational Thomas-Fermi theory of a nonuniform Bose condensate at zero temperature*, Phys. Rev. A **55**, 3645 (1997).

- [59] E. Zaremba, *Sound propagation in a cylindrical Bose-condensed gas*, Phys. Rev. A **57**, 518 (1998).
- [60] J. A. Huhtamäki, M. Möttönen, T. Isoshima, V. Pietilä, and S. M. Virtanen, *Splitting times of doubly quantized vortices in dilute Bose-Einstein condensates*, Phys. Rev. Lett. **97**, 110406 (2006).
- [61] A. D. Jackson, G. M. Kavoulakis, and C. J. Pethick, *Solitary waves in clouds of Bose-Einstein condensed atoms*, Phys. Rev. A **58**, 2417 (1998).
- [62] M. L. Chiofalo and M. P. Tosi, *Output from Bose condensates in tunnel arrays: The role of mean-field interactions and of transverse confinement*, Phys. Lett. A **268**, 406 (2000).
- [63] P. Massignan and M. Modugno, *One-dimensional model for the dynamics and expansion of elongated Bose-Einstein condensates*, Phys. Rev. A **67**, 023614 (2003).
- [64] A. M. Kamchatnov and V. S. Shchesnovich, *Dynamics of Bose-Einstein condensates in cigar-shaped traps*, Phys. Rev. A **70**, 023604 (2004).
- [65] W. Zhang and L. You, *An effective quasi-one-dimensional description of a spin-1 atomic condensate*, Phys. Rev. A **71**, 025603 (2005).
- [66] M. Krämer, C. Menotti and M. Modugno, *Velocity of sound in a Bose-Einstein condensate in the presence of an optical lattice and transverse confinement*, J. Low Temp. Phys. **138**, 729 (2005).
- [67] R. Carretero-González, D. J. Frantzeskakis, and P. G. Kevrekidis, *Nonlinear waves in Bose-Einstein condensates: Physical relevance and mathematical techniques*, Nonlinearity **21**, R139 (2008).
- [68] *Emergent nonlinear phenomena in Bose-Einstein condensates: Theory and experiment*, Eds.: P. G. Kevrekidis, D. J. Frantzeskakis, and R. Carretero-González, Springer-Verlag, (2007).
- [69] D. J. Frantzeskakis, *Dark solitons in atomic Bose-Einstein condensates: From theory to experiments*, J. Phys. A: Math. Theor. **43**, 213001 (2010).
- [70] S. Middelkamp, J. J. Chang, C. Hamner, R. Carretero-González, P. G. Kevrekidis, V. Achilleos, D. J. Frantzeskakis, P. Schmelcher, and P. Engels,

- Dynamics of dark-bright solitons in cigar-shaped Bose-Einstein condensates*, Phys. Lett. A **375**, 642 (2011).
- [71] A. Weller, J. P. Ronzheimer, C. Gross, J. Esteve, M. K. Oberthaler, D. J. Frantzeskakis, G. Theocharis, and P. G. Kevrekidis, *Experimental observation of oscillating and interacting matter wave dark solitons*, Phys. Rev. Lett. **101**, 130401 (2008).
- [72] Una derivación independiente de esta fórmula fue hecha por F. Gerbier, *Quasi-1D Bose-Einstein condensates in the dimensional crossover regime*, Europhys. Lett. **66**, 771 (2004).
- [73] V. A. Brazhnyi and V. V. Konotop, *Theory of nonlinear matter waves in optical lattices*, Mod. Phys. Lett. B **18**, 627 (2004).
- [74] Y. V. Kartashov, B. A. Malomed, and L. Torner, *Solitons in nonlinear lattices*, Rev. Mod. Phys. **83**, 247 (2011).
- [75] F. Kh. Abdullaev, B. Baizakov, S. Darmanyán, V. Konotop and M. Salerno, *Nonlinear excitations in arrays of Bose-Einstein condensates*, Phys. Rev. A **64**, 043606 (2001).
- [76] I. Carrusotto, D. Embriaco, and G. C. La Rocca, *Nonlinear atom optics and bright-gap-soliton generation in finite optical lattices*, Phys. Rev. A **65**, 053611 (2002).
- [77] M. Krämer, C. Menotti L. Pitaevskii and S. Stringari, *Bose-Einstein condensates in 1D optical lattices: Compressibility, Bloch bands and elementary excitations*, Eur. Phys. J. D **27**, 247 (2003).
- [78] N. K. Efremidis and D. N. Christodoulides, *Lattice solitons in Bose-Einstein condensates*, Phys. Rev. A **67**, 063608 (2003).
- [79] T. Mayteevarunyoo and B. A. Malomed, *Stability limits for gap solitons in a Bose-Einstein condensate trapped in a time-modulated optical lattice*, Phys. Rev. A **74**, 033616 (2006).
- [80] J. Cuevas, B. A. Malomed, P. G. Kevrekidis, and D. J. Frantzeskakis, *Solitons in quasi one-dimensional Bose-Einstein condensates with competing dipolar and local interactions*, Phys. Rev. A **79**, 053608 (2009).

- [81] B. B. Baizakov, V. V. Konotop and M. Salerno, *Regular spatial structures in arrays of Bose–Einstein condensates induced by modulational instability*, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **35**, 5105 (2002).
- [82] Z. Shi, J. Wang, Z. Chen, and J. Yang, *Linear instability of two-dimensional low-amplitude gap solitons near band edges in periodic media*, Phys. Rev. A **78**, 063812 (2008).
- [83] E. A. Ostrovskaya and Y. S. Kivshar, *Matter-wave gap solitons in atomic bandgap structures*, Phys. Rev. Lett. **93**, 160405 (2004).
- [84] H. Sakaguchi and B. A. Malomed, *Two-dimensional loosely and tightly bound solitons in optical lattices and inverted traps*, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **37**, 2225 (2004).
- [85] Th. Anker, M. Albiez, R. Gati, S. Hunsmann, B. Eiermann, A. Trombettoni, and M. K. Oberthaler, *Nonlinear self-trapping of matter waves in periodic potentials*, Phys. Rev. Lett. **94**, 020403 (2005).
- [86] T. J. Alexander, E. A. Ostrovskaya, and Y. S. Kivshar, *Self-trapped nonlinear matter waves in periodic potentials*, Phys. Rev. Lett. **96**, 040401 (2006).
- [87] P. J. Y. Louis, E. A. Ostrovskaya, C. M. Savage, and Y. S. Kivshar, *Bose–Einstein condensates in optical lattices: Band-gap structure and solitons*, Phys. Rev. A **67**, 013602 (2003).
- [88] A. E. Muryshev, G. V. Shlyapnikov, W. Ertmer, K. Sengstock, and M. Lewenstein, *Dynamics of dark solitons in elongated Bose–Einstein condensates*, Phys. Rev. Lett. **89**, 110401 (2002).
- [89] L. D. Carr and J. Brand, *Spontaneous soliton formation and modulational instability in Bose–Einstein condensates*, Phys. Rev. Lett. **92**, 040401 (2004).
- [90] F. Kh. Abdullaev and M. Salerno, *Gap–Townes solitons and localized excitations in low dimensional Bose–Einstein condensates in optical lattices*, Phys. Rev. A **72**, 033617 (2005).



- [91] M. Matuszewski, W. Królikowski, M. Trippenbach, and Y. S. Kivshar, *Simple and efficient generation of gap solitons in Bose-Einstein condensates*, Phys. Rev. A **73**, 063621 (2006).
- [92] Y. Zhang and B. Wu, *Composition Relation between gap solitons and Bloch waves in nonlinear periodic systems*, Phys. Rev. Lett. **102**, 093905 (2009).
- [93] Y. Zhang, Z. Liang, and B. Wu, *Gap solitons and Bloch waves in nonlinear periodic systems*, Phys. Rev. A **80**, 063815 (2009).
- [94] F. H. Mies, E. Tiesinga, and P. S. Julienne, *Manipulation of Feshbach resonances in ultracold atomic collisions using time-dependent magnetic fields*, Phys. Rev. A **61**, 022721 (2000).
- [95] B. A. Malomed, D. Mihalache, F. Wise, and L. Torner, *Spatiotemporal optical solitons*, Optics B: Quant. Semicl. Opt. **7**, R53 (2005).
- [96] J. Yang, B. A. Malomed, and D. J. Kaup, *Embedded solitons in second-harmonic-generating systems*, Phys. Rev. Lett. **83**, 1958 (1999).
- [97] A. R. Champneys, B. A. Malomed, J. Yang, and D. J. Kaup, *Embedded solitons: Solitary waves in resonance with the linear spectrum*, Physica D **152-153**, 340 (2001).
- [98] J. K. Yang, *Stable embedded solitons*, Phys. Rev. Lett. **91**, 143903 (2003).
- [99] X. S. Wang, Z. G. Chen, J. D. Wang, and J. K. Yang, *Observation of in-band lattice solitons*, Phys. Rev. Lett. **99**, 243901 (2007).
- [100] E. J. Yarmchuk, M. J. V. Gordon, and R. E. Packard, *Observation of stationary vortex arrays in rotating superfluid helium*, Phys. Rev. Lett. **43**, 214 (1979).
- [101] A. A. Abrikosov, Soviet Physics JETP **5**, 1174 (1957); U. Essmann and H. Träuble, *The direct observation of individual flux lines in type II superconductors*, Physics Letters, **24A**, 526 (1967).
- [102] R. Blaauwgeers, V. B. Eltsov, M. Krusius, J. J. Ruohio, R. Schanen, and G. E. Volovik, *Double-quantum vortex in superfluid  $^3\text{He-A}$* , Nature **404**, 471 (2000).

- [103] A. H. van Amerongen, J. J. P. van Es, P. Wicke, K. V. Kheruntsyan, and N. J. van Druten, *Yang-Yang thermodynamics on an atom chip*, Phys. Rev. Lett. **100**, 090402 (2008).
- [104] J. Armijo, T. Jacqmin, K. Kheruntsyan, and I. Bouchoule, *Mapping out the quasi-condensate transition through the 1D-3D dimensional crossover*, Phys. Rev. A **83**, 021605(R) (2011).
- [105] G. B. Whitham, *Linear and nonlinear waves*, Wiley-Interscience (1974).
- [106] E.A. Kuznetsov, A.M. Rubenchik, and V.E. Zakharov, *Soliton stability in plasmas and hydrodynamics*, Physics Reports **142**, 103 (1986).