

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO
CENTRO DE CIÊNCIAS MATEMÁTICAS E DA NATUREZA
MESTRADO EM MATEMÁTICA

Yuri de Macedo Lira
*Condensados de Bose-Einstein: a Energia em Função do
Parâmetro de Interação*

Rio de Janeiro
Fevereiro de 2015

Yuri de Macedo Lira

*Condensados de Bose-Einstein: a Energia em Função do
Parâmetro de Interação*

Dissertação de mestrado apresentada ao Programa de Pós-graduação do Instituto de Matemática, da Universidade Federal do Rio de Janeiro, como parte dos requisitos necessários à obtenção do grau de Mestre em Matemática.

Orientador: Rolci de Almeida Cipolatti
Doutor em Matemática Aplicada - Université de Paris Sud

Rio de Janeiro
Fevereiro de 2015

CIP - Catalogação na Publicação

Lira, Yuri de Macedo
L768c Condensados de Bose-Einstein: a energia em
função do parâmetro de interação / Yuri de Macedo
Lira – Rio de Janeiro, 2015.
54 f

Orientador: Rolci de Almeida Cipolatti
Dissertação (mestrado) - Universidade Federal
do Rio de Janeiro. Instituto de Matemática,
Programa de Pós-Graduação em Matemática, 2015.

1. Física Matemática. 2. Equações Diferenciais
Parciais. I. Cipolatti, Rolci de Almeida, orient.
II. Título

BANCA EXAMINADORA

Presidente, Rolci de Almeida Cipolatti
Doutor em Matemática Aplicada - Université de Paris Sud

Carlos Luis Trallero Giner
Doutor em Física e Matemática Teóricas, e em Ciências em Física e Matemática - Ioffe
Institute

Flavio Dickstein
Doutor em Matemática Aplicada - Université Pierre et Marie Curie, LISE/ CNRS

Juan López Gondar
Doutor em Ciências Físico Matemáticas - Universidade de Havana

Rio de Janeiro
Fevereiro de 2015

*Este trabalho é dedicado às crianças adultas que,
quando pequenas, sonharam em se tornar cientistas.*

Agradecimentos

Ao meu orientador, Professor Rolci Cipolatti, cuja ajuda foi inestimável, bem como o acompanhamento com incrível didática e paciência;

À minha família, que me deu total apoio em todos os momentos.

“Não basta buscar a verdade; há que encontrá-la”

Jorge Ángel Livraga Rizzi

Resumo

Neste trabalho consideramos a forma adimensional da equação de Gross-Pitaevskii (GP), e analisamos também um modelo generalizado (com potência $p \geq 0$ no termo não-linear: $\lambda|\psi|^p$). Mostramos a existência de *ground states*, para ambos, via minimização do funcional energia, utilizando ferramentas clássicas da Análise Funcional. Mostramos também a generalização de um novo método, apresentado na referência [(2)], para obter aproximações para a energia mínima.

Do ponto de vista físico, a equação original é a solução de mínima energia da equação (GP) que descreve o condensado de Bose-Einstein.

Palavras-chaves: Condensados de Bose-Einstein, Estabilidade de Ground-states, Fórmulas de aproximação analíticas.

Abstract

We consider the dimensionless form of the Gross-Pitaevskii equation (GP), and also we study a generalized model (with power $p \geq 0$ in the non-linear term: $\lambda|\psi|^p$). We show the existence of *ground states* for both, using minimization of the energy functional, with classic tools of functional analysis. We develop a generalized method, presented in the reference [(2)], for obtaining approximations for the minimal energy.

From the physical point of view, the original equation is the solution of minimum energy equation (GP) that describes the Bose-Einstein condensate.

Keywords: Bose-Einstein condensates, Stability of ground states, Analytical approximate formulae.

Sumário

Sumário	0
1 Introdução	1
2 Existência de ground states.	4
2.1 O Modelo Cúbico	4
2.2 O Modelo Generalizado	7
3 A energia mínima como função de λ	10
4 Um método para aproximações da energia mínima	14
4.1 Caso Cúbico	14
4.1.1 As fórmulas exatas no caso cubico	14
4.1.2 As fórmulas aproximadas no caso cúbico	16
4.1.3 Análise do caso $V_0 = 0$	17
4.1.4 Exemplos numéricos	24
4.2 Caso Geral	25
4.2.1 As fórmulas exatas no caso geral	25
4.2.2 As fórmulas aproximadas no caso geral	26
4.2.3 Análise do caso geral com $V_0 = 0$	27
4.2.4 Exemplos numéricos - caso geral	32
Apêndices	36
APÊNDICE A Prova do Lema 2.1	37
APÊNDICE B Compacidade da Imersão $X \subset L^p(\mathbb{R})$	40
APÊNDICE C Cálculo de Integrais Especiais	41
APÊNDICE D Cálculo da expressão $\mu''_{app}(\lambda)$	43
Referências	44

1 Introdução

Uma partícula atômica (simples ou composta) que possui spin inteiro é denominada *bóson*. O nome é uma homenagem ao físico indiano Satyendra Nath Bose (1894-1974). Entre os exemplos de bósons estão partículas elementares como o fóton, o glúon, o (agora famoso) bóson de Higgs; e entre partículas compostas, os mésons e os núcleos atômicos estáveis, como o hélio-4. As partículas de spin fracionário, tais como prótons, elétrons, quarks, neutrinos, são denominadas *férmions*.

Em 1924, Bose submeteu para publicação um trabalho no qual propunha que os pacotes quânticos de luz, propostos por Einstein em 1905, deveriam se comportar como partículas indistinguíveis, satisfazendo, portanto, uma estatística diferente da apresentada por Maxwell e Boltzmann.

Bose submeteu seu trabalho original para a revista inglesa *Philosophical Magazine*, que o rejeitou. Ele então o enviou para Einstein que, percebendo a profundidade dos resultados, o traduziu para o alemão e o encaminhou para a revista alemã *Zeitschrift für Physik*, que o publicou.

Em trabalhos subsequentes, Einstein aplicou a estatística de Bose a um gás perfeito monoatômico, considerando-o como sendo formado por partículas indistinguíveis em estados quânticos bem definidos. Como consequência desses trabalhos, Einstein conjecturou que se um gás de bósons fosse submetido a temperaturas abaixo de um limite crítico, grande parte das partículas se condensaria no mais baixo estado quântico e o gás se tornaria uma espécie de “sopa quântica” de partículas indistinguíveis. Assim, grande parte dos átomos desse gás experimentariam uma transição de fase quanto-mecânica e formariam uma nuvem de átomos ocupando o mesmo estado quântico e, nessas condições, os efeitos quânticos poderiam ser observados em escala macroscópica. É essa “sopa quântica” que hoje denominamos *condensados de Bose-Einstein* (CBE, em inglês “BEC”).

Portanto, teoricamente, a obtenção de BECs parece uma tarefa muito simples: basta submeter o gás de bósons a temperaturas suficientemente baixas, de modo que os pacotes de onda se sobreponham, condensando-se em seguida. Entretanto, a grande dificuldade nessa tarefa reside justamente em se atingir essas temperaturas, que necessariamente devem ser da ordem de 10^{-9} Kelvin.

Há uma história muito interessante sobre os diversos experimentos para se obter temperaturas muito baixas. As técnicas de resfriamento mais eficazes são obtidas pelo *aprisionamento de átomos*, seja com a utilização de laser, seja com a aplicação de campos magnéticos, ou com a junção dessas duas técnicas, hoje conhecidas como *armadilhas ótico-magnéticas*. Com essas técnicas, o primeiro condensado foi produzido em 1995, por

Eric Cornell e Carl Wieman, na Universidade do Colorado, usando um gás de átomos de rubídio resfriados a 170 nanokelvins (nK), isto é, 170×10^{-9} K. Por tal feito, eles foram laureados com o Prêmio Nobel de Física em 2001.

Do ponto de vista teórico, os condensados de Bose-Einstein são descritos pela *Equação de Heisenberg*, isto é,

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}(t, x) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_{\text{ext}}(x) + \int_{\mathbb{R}^3} \overline{\Psi(t, y)} V(x - y) \Psi(t, y) dy \right] \Psi(t, x),$$

onde \hbar é a constante de Dirac (ou constante de Planck reduzida), Ψ denota o operador de campo, m é a massa atômica, V_{ext} o campo externo de confinamento (neste caso, a armadilha ótico-magnética), V o potencial interatômico (*two-body interatomic potential*) e $x = (x_1, x_2, x_3)$.

Uma simplificação desse modelo, denominado *modelo de campo médio* ou *aproximação de Bogoliubov*, foi proposta pelo matemático e físico teórico soviético Nikolai Nikolaievich Bogoliubov, em 1947. Ela se caracteriza pela hipótese de que, para as colisões entre as partículas de baixa energia num gás resfriado a temperaturas muito baixas, o potencial interatômico toma a forma

$$V(x - y) = \lambda_{3D} \delta(x - y), \quad \lambda_{3D} = \frac{4\pi \hbar^2 a}{m}$$

onde δ denota a “Delta de Dirac” e a a distância média de espalhamento de onda, característica das partículas que compõem o gás ($a > 0$ no caso repulsivo e $a < 0$ no caso atrativo). Nessas condições, a Equação de Heisenberg toma a forma

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}(t, x) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_{\text{ext}}(x) + \lambda_{3D} |\psi(t, x)|^2 \right] \psi(t, x), \quad (1.1)$$

onde $\psi(t, x) = \langle \Psi(t, x) \rangle$ é o valor esperado do operador de campo (denominado *função de onda macroscópica do condensado*) e λ_{3D} é a constante de interação das partículas. A equação (1.1) é atualmente conhecida como *Equação de Gross-Pitaevskii* (GP).

O potencial externo $V_{\text{ext}}(x)$, que descreve as armadilhas ótico-magnéticas utilizadas nas técnicas de resfriamento e na manipulação dos condensados, tem a forma

$$V_{\text{ext}}(x) = V_M(x) + V_O(x),$$

onde

$$V_M(x) = \frac{1}{2} m (\omega_1^2 x_1^2 + \omega_2^2 x_2^2 + \omega_3^2 x_3^2)$$

é o campo harmônico (componente magnética da armadilha) e

$$V_O(x) = V_L \left[\cos^2(k_1 x_1 + \theta_1) + \cos^2(k_2 x_2 + \theta_2) + \cos^2(k_3 x_3 + \theta_3) \right]$$

denota o potencial da rede óptica (componente óptica da armadilha) obtida por feixes de laser.

Nas condições propostas pela aproximação de Bogoliubov, os BECs são descritos pelas *ground states*, (isto é, as ondas estacionárias de energia mínima) da equação (1.1). Como ondas estacionárias entende-se as soluções da forma

$$\psi(t, x) = \varphi(x) \exp(-i\mu t/\hbar).$$

Assim, matematicamente, os BECs são descritos pelas soluções de energia mínima da equação:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_{\text{ext}}(x) + \lambda_{3D} |\varphi(t, x)|^2 \right] \varphi(t, x) = \mu \varphi(x), \quad (1.2)$$

onde μ denota o potencial químico do sistema.

A descoberta de que os condensados de Bose-Einstein estão intimamente relacionados com a supercondutividade de metais e a superfluidade do hélio líquido — manifestações quânticas em sistemas macroscópicos — gerou um grande interesse na comunidade científica, que se reflete pela enorme quantidade de artigos publicados sobre o tema.

A aproximação de Bogoliubov leva naturalmente a uma equação com não-linearidade local do tipo cúbico $|\varphi|^2\varphi$, mas há modelos com diferentes tipos de não-linearidade, como pode ser observado na literatura especializada (1).

Esta dissertação está organizada da seguinte forma: em 2.1 deduzimos a forma adimensional da equação de Gross-Pitaevskii (GP), para a qual mostramos a existência de *ground states* via minimização do funcional de energia, utilizando ferramentas clássicas da Análise Funcional. Do ponto de vista físico, é a solução de mínima energia da equação (GP) que descreve o condensado de Bose-Einstein. Em 2.2 analisamos a existência de estados básicos para o modelo generalizado (com potência $p \geq 0$, onde p é a potência do termo não-linear em (GP)). No Capítulo 3, estudamos algumas propriedades qualitativas do funcional de energia como função do parâmetro λ de interação entre partículas do modelo generalizado.

A parte principal do trabalho está apresentada no Capítulo 4, onde estudamos um método variacional que nos permite aproximar de forma explícita os funcionais energia e potencial químico em função do parâmetro de interação. Iniciamos esse capítulo com o modelo cúbico, que é o fisicamente relevante, detalhando os resultados publicados em (2). Em seguida, estendemos os mesmos resultados para o modelo generalizado. Ainda neste capítulo, apresentamos alguns resultados numéricos, utilizando uma abordagem diferente da que foi utilizada no trabalho de referência (2).

Concluimos a dissertação com apêndices, onde apresentamos alguns resultados clássicos utilizados no trabalho.

2 Existência de ground states.

2.1 O Modelo Cúbico

Se supusermos uma forte assimetria no campo magnético V_M de tal forma que $\omega_3 \ll \omega_1 = \omega_2$, o condensado assume um formato alongado, como um charuto (*cigar-shape BEC*) e a sua dinâmica pode ser aproximada pela equação GP unidimensional:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \psi(x) + \lambda_{1D} |\psi(x)|^2 \psi(x) - V_L \cos^2\left(\frac{2\pi}{d}x\right) \psi = \mu_0 \psi(x), \quad x \in \mathbb{R}, \quad (2.1)$$

onde $m > 0$ é a massa atômica do sistema, $\omega > 0$ é a frequência do campo magnético e $V_L > 0$ é a intensidade do laser, $d > 0$ é o comprimento de onda do laser, $\mu_0 \in \mathbb{R}$ é o potencial químico e $\lambda_{1D} \in \mathbb{R}$ é o parâmetro de interação entre as próprias partículas, sendo $\lambda_{1D} < 0$ se as forças são atrativas e $\lambda_{1D} > 0$ se as forças são repulsivas.

Em sua forma adimensional, a equação (2.1) pode ser escrita como

$$-\frac{d^2\varphi}{d\xi^2} + \xi^2 \varphi(\xi) + \lambda |\varphi(\xi)|^2 \varphi(\xi) - V_0 \cos^2(\alpha\xi) \varphi(\xi) = \mu \varphi(\xi). \quad (2.2)$$

Obtém-se a equação (2.2) considerando-se as seguintes variáveis adimensionais:

$$I = \sqrt{\hbar/m\omega}, \quad \xi = x/I, \quad \varphi(\xi) = \sqrt{I}\psi(x),$$

$$\mu = \frac{2\mu_0}{\hbar\omega}, \quad \lambda = \frac{2\lambda_{1D}}{I\hbar\omega}, \quad V_0 = \frac{2V_L}{\hbar\omega}, \quad \alpha = \frac{2\pi I}{d}.$$

Neste capítulo, vamos analisar a existência de ground states para a equação (2.2). Reparemos inicialmente que, se $\lambda = V_0 = 0$, a equação (2.2) é a conhecida *Equação de Hermite*, que admite um conjunto enumerável $\{\varphi_0, \varphi_1, \varphi_2, \dots\}$ de soluções da forma

$$\varphi_n(\xi) = H_n(\xi) e^{-\xi^2/2}, \quad n = 0, 1, 2, \dots,$$

onde H_n é o *Polinômio de Hermite* de grau n . As funções de Hermite φ_n formam um conjunto ortonormal completo do espaço $L^2(\mathbb{R})$. Essa propriedade decorre da Teoria Espectral para operadores auto-adjuntos compactos e indica que as funções de Hermite φ_n são as auto-funções do operador $L = -d^2/d\xi^2 + \xi^2$ para os correspondentes autovalores $\mu_n = n + 1$, $n = 0, 1, 2, \dots$. Em particular, temos o

Lema 2.1. *Seja*

$$\varphi_0(\xi) = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}} \exp(-\xi^2/2).$$

Então,

$$\int_{\mathbb{R}} |\varphi_0(\xi)|^2 d\xi = 1 \quad e \quad \min \left\{ \int_{\mathbb{R}} (|\psi'(\xi)|^2 + \xi^2 |\psi(\xi)|^2) d\xi; \int_{\mathbb{R}} |\psi(\xi)|^2 d\xi = 1 \right\} = 1. \quad (2.3)$$

Demonstração: É claro que $\|\varphi_0\|_{L^2(\mathbb{R})} = 1$, pois $\int_{\mathbb{R}} e^{-x^2} dx = \sqrt{\pi}$. A demonstração de que o mínimo na expressão (2.3) é atingido e vale 1 será provado no Apêndice A \square

Vamos provar a existência de *ground states* para a equação (2.2). Para isso, definimos o espaço de Hermite

$$X = \left\{ \psi \in H^1(\mathbb{R}); \int_{\mathbb{R}} [|\psi'(\xi)|^2 + \xi^2 |\psi(\xi)|^2] d\xi < +\infty \right\} \quad (2.4)$$

munido do produto interno

$$(\phi|\psi)_X := \int_{\mathbb{R}} [(\psi'(\xi)\phi'(\xi) + \xi^2 \psi(\xi)\phi(\xi))] d\xi$$

e norma associada, dada por

$$\|\psi\|_X^2 = \int_{\mathbb{R}} |\psi'(\xi)|^2 d\xi + \int_{\mathbb{R}} \xi^2 |\psi(\xi)|^2 d\xi.$$

Definimos também a “Energia” $E : X \rightarrow \mathbb{R}$ e a “Massa” $Q : X \rightarrow \mathbb{R}$ respectivamente, por:

$$E(\psi) = \int_{\mathbb{R}} |\psi'(\xi)|^2 d\xi + \int_{\mathbb{R}} \xi^2 |\psi(\xi)|^2 d\xi + \frac{\lambda}{2} \int_{\mathbb{R}} |\psi(\xi)|^4 d\xi - V_0 \int_{\mathbb{R}} \cos^2(\alpha\xi) |\psi(\xi)|^2 d\xi, \quad (2.5)$$

$$Q(\psi) = \int_{\mathbb{R}} |\psi(\xi)|^2 d\xi.$$

Então, definindo a variedade Σ_1 de X por

$$\Sigma_1 = \left\{ \psi \in X; Q(\psi) = 1 \right\},$$

podemos considerar o seguinte problema variacional: *determinar $\varphi_{min} \in \Sigma_1$ tal que*

$$E(\varphi_{min}) = \min \{ E(\psi); \psi \in \Sigma_1 \}.$$

Uma vez mostrado que existe uma tal função φ_{min} , o Teorema de Multiplicadores de Lagrange poderá ser aplicado, o que garantirá a existência de $\mu \in \mathbb{R}$ tal que $E'(\varphi_{min}) = \mu Q'(\varphi_{min})$, isto é, φ_{min} é solução de (2.2) com energia mínima.

Teorema 2.1. *Sejam $\lambda, V_0 \in \mathbb{R}$ dados. Então, existe $\psi_{min} \in \Sigma_1$ tal que*

$$E(\psi_{min}) = \min \{ E(\psi); \psi \in \Sigma_1 \} \quad (2.6)$$

Demonstração: Dividiremos a prova em 2 etapas.

Passo 1 : A energia E é limitada inferiormente em Σ_1 . De fato, do Lema 2.1 sabemos que $\|\psi\|_X^2 \geq 1$, para todo $\psi \in \Sigma_1$. Então, se $\lambda \geq 0$, temos, para todo $\psi \in \Sigma_1$:

$$\begin{aligned} E(\psi) &= \|\psi\|_X^2 + \frac{\lambda}{2} \int_{\mathbb{R}} |\psi(\xi)|^4 d\xi - V_0 \int_{\mathbb{R}} \cos^2(\alpha\xi) |\psi(\xi)|^2 d\xi \\ &\geq \|\psi\|_X^2 - |V_0| \int_{\mathbb{R}} |\cos^2(\alpha\xi)| |\psi(\xi)|^2 d\xi \\ &\geq \|\psi\|_X^2 - |V_0| \int_{\mathbb{R}} |\psi(\xi)|^2 d\xi \geq 1 - |V_0|. \end{aligned} \quad (2.7)$$

Portanto, a energia fica limitada inferiormente por $1 - |V_0|$ no caso repulsivo $\lambda \geq 0$.

Para analisar o caso atrativo ($\lambda < 0$), lembremos que a Desigualdade de Gagliardo-Nirenberg (veja (3)) nos garante que existe uma constante $c > 0$ tal que

$$\|\psi\|_4^4 \leq c \|\psi\|_2^3 \|\psi'\|_2, \quad \forall \psi \in H^1(\mathbb{R}), \quad (2.8)$$

onde $\|\cdot\|_4$ e $\|\cdot\|_2$ são as normas canônicas dos espaços $L^4(\mathbb{R})$ e $L^2(\mathbb{R})$, respectivamente. Assim, lembrando que $\|\psi\|_2 = 1$ se $\psi \in \Sigma_1$, podemos escrever

$$\begin{aligned} E(\psi) &= \|\psi\|_X^2 + \frac{\lambda}{2} \int_{\mathbb{R}} |\psi(\xi)|^4 d\xi - V_0 \int_{\mathbb{R}} \cos^2(\alpha\xi) |\psi(\xi)|^2 d\xi \\ &\geq \|\psi\|_X^2 + \frac{\lambda c}{2} \|\psi\|_2^3 \|\psi'\|_2 - |V_0| \\ &= \|\psi\|_X^2 - \frac{|\lambda|c}{2} \|\psi'\|_2 - |V_0|. \end{aligned} \quad (2.9)$$

Pela Desigualdade de Young, obtemos

$$\frac{|\lambda|c}{2} \|\psi'\|_2 \leq \frac{\lambda^2 c^2}{16} + \|\psi'\|_2^2. \quad (2.10)$$

Além disso,

$$\|\psi\|_X^2 = \|\psi'\|_2^2 + \int_{\mathbb{R}} \xi^2 |\psi(\xi)|^2 d\xi \geq \|\psi'\|_2^2 \quad (2.11)$$

Assim, de (2.9), (2.10) e (2.11) obtemos

$$E(\psi) \geq \|\psi\|_X^2 + \frac{\lambda c}{2} \|\psi\|_X - |V_0| = \|\psi\|_X^2 - \frac{|\lambda|c}{2} \|\psi\|_X - |V_0| \geq \frac{-\lambda^2 c^2}{16} - |V_0|, \quad (2.12)$$

e concluímos que a energia é limitada inferiormente também no caso atrativo.

Passo 2: O problema variacional (2.6) tem uma solução. De fato, seja

$$E_{min} = \inf \{ E(\psi) ; \psi \in \Sigma_1 \}.$$

Da etapa 1 e da definição de ínfimo, segue que existe uma sequência de funções minimizantes $\{\psi_n\}_{n \in \mathbb{N}}$ em Σ_1 , isto é,

$$\forall n \in \mathbb{N}, \exists \psi_n \in \Sigma_1 \text{ tal que } \lim_{n \rightarrow \infty} E(\psi_n) = E_{min}$$

Supondo que $\lambda \geq 0$, obtemos de (2.7) que a sequência é limitada, pois

$$E(\psi_n) \geq \|\psi_n\|_X^2 - |V_0| \quad \Rightarrow \quad \|\psi_n\|_X^2 \leq E(\psi_n) + |V_0|.$$

Por outro lado, se $\lambda < 0$, de (2.12) e da Desigualdade de Young, temos

$$\begin{aligned} \|\psi_n\|_X^2 &\leq E(\psi_n) - \frac{\lambda c}{2} \|\psi_n\|_X + |V_0| \\ &= E(\psi_n) + \frac{|\lambda|c}{2} \|\psi_n\|_X + |V_0| \\ &\leq E(\psi_n) + \frac{1}{2} \|\psi_n\|_X^2 + \frac{\lambda^2 c^2}{8} + |V_0|, \end{aligned}$$

de onde se conclui que

$$\frac{1}{2}\|\psi_n\|_X^2 \leq E(\psi_n) + \frac{\lambda^2 c^2}{8} + |V_0|$$

e, conseqüentemente, que $\{\psi_n\}$ é uma seqüência limitada em X . Como X é reflexivo, segue do Teorema de Banach-Alaoglu (veja (4)) que existe uma subsequência de ψ_n que converge para algum ψ_{min} na topologia fraca de X . Ou seja, $\psi_{n_k} \rightharpoonup \psi_{min}$. Para simplificar a notação, escreveremos ψ_n para denotar a subsequência.

Como a imersão $X \subset L^p(\mathbb{R})$ é compacta para $2 \leq p \leq \infty$ (veja Apêndice B), temos:

$$\begin{aligned} \lim_{n \rightarrow \infty} \int_{\mathbb{R}} |\psi_n(\xi)|^4 d\xi &= \int_{\mathbb{R}} |\psi_{min}(\xi)|^4 d\xi \\ \lim_{n \rightarrow \infty} \int_{\mathbb{R}} |\psi_n(\xi)|^2 d\xi &= \int_{\mathbb{R}} |\psi_{min}(\xi)|^2 d\xi \\ \lim_{n \rightarrow \infty} \int_{\mathbb{R}} \cos^2(\alpha\xi) |\psi_n(\xi)|^2 d\xi &= \int_{\mathbb{R}} \cos^2(\alpha\xi) |\psi_{min}(\xi)|^2 d\xi \end{aligned} \quad (2.13)$$

Como, por hipótese, $\psi_n \in \Sigma_1$ para todo $n \in \mathbb{N}$, (2.13) implica que $\psi_{min} \in \Sigma_1$. Além disso, como a norma $\|\cdot\|_X$ é semi-contínua inferiormente para a topologia fraca de X , temos:

$$\|\psi\|_X^2 \leq \liminf_{n \rightarrow \infty} \|\psi_n\|_X^2 \quad (2.14)$$

De (2.13) e (2.14), concluimos que $E(\psi_{min}) = E_{min}$ e ψ_{min} é solução de (2.6). \square

2.2 O Modelo Generalizado

Embora o modelo fisicamente relevante seja com a não-linearidade cúbica, os mesmos argumentos acima se aplicam para uma situação mais geral, onde a potência do termo não-linear é da forma $|\psi(\xi)|^p \psi(\xi)$, com $p \geq 0$. Como veremos a seguir, no caso repulsivo, isto é $\lambda > 0$, nenhuma restrição sobre a potência p se faz necessária para existência de *ground-states*. Entretanto, no caso atrativo $\lambda < 0$, se $p > 4$, veremos que a energia não é limitada inferiormente, de modo que não existe *ground states* para o problema. O caso limite $p = 4$ é bastante especial, pois como veremos adiante, existe um parâmetro $\lambda_0 < 0$ tal que o problema não admite solução de energia mínima para $\lambda \leq \lambda_0$. Esse fenômeno, quando analisado no caso tridimensional, está relacionado a uma certa instabilidade na formação do condensado, que se configura pelo fato de que, se o número de bósons que compõem o gás é maior que um certo valor crítico, ocorre uma explosão (*blow up*) no momento exato em que o condensado se forma.

Para analisarmos essa situação, consideremos a massa $Q : X \rightarrow \mathbb{R}$, a energia $E : X \rightarrow \mathbb{R}$ e a variedade $\Sigma_1 \subset X$, onde Q , X e Σ_1 são definidos no capítulo anterior e a energia é, neste caso, definida por

$$E(\psi) := \int_{\mathbb{R}} |\psi'(\xi)|^2 d\xi + \int_{\mathbb{R}} \xi^2 |\psi(\xi)|^2 d\xi + \frac{2\lambda}{p+2} \int_{\mathbb{R}} |\psi(\xi)|^{p+2} d\xi - V_0 \int_{\mathbb{R}} \cos^2(\alpha\xi) |\psi(\xi)|^2 d\xi \quad (2.15)$$

O problema variacional que define a existência de *ground-states* neste caso é: *determinar* $\psi_{min} \in \Sigma_1$ tal que

$$E(\psi_{min}) = \min\{E(\psi); \psi \in \Sigma_1\} \quad (2.16)$$

O seguinte resultado estabelece condições para a existência de solução para o problema variacional (2.16):

Teorema 2.2. *Sejam $p \geq 0$, $\lambda \in \mathbb{R}$ e $V_0 \in \mathbb{R}$ dados.*

- se $0 \leq p < 4$, o problema (2.16) admite uma solução, qualquer que seja $\lambda \in \mathbb{R}$;
- se $p > 4$ o problema (2.16) admite uma solução se (e somente se) $\lambda \geq 0$.
- se $p = 4$ existe $\lambda_0 < 0$ tal que o problema admite solução se $\lambda > \lambda_0$.

Demonstração: Repetindo os argumentos da demonstração do Teorema 2.1, analisemos inicialmente a limitação inferior da energia. No caso $\lambda \geq 0$, temos

$$E(\psi) \geq \|\psi\|_X^2 - |V_0| \geq 1 - |V_0|, \quad \forall \psi \in \Sigma_1.$$

Se $\lambda < 0$, temos

$$E(\psi) \geq \|\psi\|_X^2 - |V_0| - \frac{2|\lambda|}{p+2} \|\psi\|_{p+2}^{p+2}.$$

Pela Desigualdade de Gagliardo-Nirenberg, existe constante $C(p) > 0$ tal que

$$\|\psi\|_{p+2}^{p+2} \leq C(p) \|\psi'\|_2^{p/2} \|\psi\|_2^{(p+4)/2}. \quad (2.17)$$

Logo,

$$E(\psi) \geq \|\psi\|_X^2 - |V_0| - \frac{2C(p)|\lambda|}{p+2} \|\psi'\|_2^{p/2}, \quad \forall \psi \in \Sigma_1.$$

Pela Desigualdade de Hölder, temos

$$\beta \|\psi'\|_2^{p/2} \leq \frac{1}{\gamma} \beta^\gamma + \frac{1}{\delta} \|\psi'\|_2^{\delta p/2}, \quad (2.18)$$

onde $\delta > 1$ e $\gamma > 1$ são conjugados, isto é, $1/\delta + 1/\gamma = 1$. Assim, se $p < 4$, podemos escolher $\delta = 4/p$ e $\gamma = 4/(4-p)$, de modo que

$$E(\psi) \geq \|\psi\|_X^2 - |V_0| - \frac{4-p}{4} \left(\frac{2C(p)|\lambda|}{p+2} \right)^{\frac{4}{4-p}} - \frac{p}{4} \|\psi'\|_2^2, \quad \forall \psi \in \Sigma_1.$$

Portanto,

$$E(\psi) \geq \left(1 - \frac{p}{4}\right) \|\psi\|_X^2 - |V_0| - \frac{4-p}{4} \left(\frac{2C(p)|\lambda|}{p+2} \right)^{\frac{4}{4-p}}, \quad \forall \psi \in \Sigma_1. \quad (2.19)$$

de onde se conclui pelo Lema 2.1 que

$$E(\psi) \geq A := \left(1 - \frac{p}{4}\right) - |V_0| - \frac{4-p}{4} \left(\frac{2C(p)|\lambda|}{p+2} \right)^{\frac{4}{4-p}}, \quad \forall \psi \in \Sigma_1.$$

A desigualdade acima nos diz que a energia é limitada inferiormente se $p < 4$, sendo a constante A uma cota inferior.

Para provar que o problema não admite solução se $\lambda < 0$ e $p > 4$, consideremos a função $\phi_k \in \Sigma_1$ definida, para $k > 0$, por

$$\phi_k(\xi) := \sqrt[4]{\frac{2k}{\pi}} \exp(-k\xi^2)$$

e calculemos a energia $E(\phi_k)$ definida em (2.15). Então, por (C.1) (veja Apêndice C), temos

$$\begin{aligned} \|\phi_k\|_X^2 &= \frac{(4k^2 + 1)}{4k}, \\ \|\phi_k\|_{p+2}^{p+2} &= \sqrt{\frac{2}{p+2}} \left(\frac{2k}{\pi}\right)^{p/4}, \\ \int_{\mathbb{R}} \cos^2(\alpha\xi) |\phi_k(\xi)|^2 d\xi &= \frac{1}{2} \left(1 + \exp\left(-\frac{\alpha^2}{2k}\right)\right). \end{aligned} \quad (2.20)$$

Assim, temos:

$$E(\phi_k) = k + \frac{1}{4k} + A_p \lambda k^{p/4} - \frac{V_0}{2} \left(1 + \exp\left(-\frac{\alpha^2}{2k}\right)\right), \quad (2.21)$$

onde

$$A_p = \frac{2\sqrt{2}2^{p/4}}{(p+2)^{3/2}\pi^{p/4}}.$$

Então,

$$E_{\min}(\lambda) \leq E(\phi_k) \leq k + \frac{1}{4k} + A_p \lambda k^{p/4} + |V_0|$$

e vemos que se $p > 4$ e $\lambda < 0$,

$$\lim_{k \rightarrow +\infty} \left(k + \frac{1}{4k} + A_p \lambda k^{p/4}\right) = -\infty.$$

Por outro lado, se $p = 4$, então

$$E(\phi_k) = (1 + A_4 \lambda) k + \frac{1}{4k} - \frac{V_0}{2} \left(1 + \exp\left(-\frac{\alpha^2}{2k}\right)\right),$$

onde $A_4 = 2/3\sqrt{3}\pi$, de modo que $E(\phi_k) \rightarrow -\infty$ quando $k \rightarrow +\infty$ se $\lambda < -3\pi\sqrt{3}/2$.

Uma vez mostrada a limitação inferior da energia, os argumentos da etapa 2 da demonstração do Teorema 2.1 se aplicam, visto que a imersão $X \subset L^q(\mathbb{R})$ é compacta, para qualquer $q \geq 2$, e, assim, concluímos a demonstração. \square

3 A energia mínima como função de λ

Neste capítulo, vamos analisar a dependência da energia E mínima, assim como a do correspondente parâmetro (potencial químico) μ , em função do coeficiente λ de interação entre as partículas. Para que esta dependência fique evidenciada, vamos denotar:

$$E_{min}(\lambda) = \min\{E_\lambda(\psi); \psi \in \Sigma_1\}, \quad (3.1)$$

onde E_λ é o funcional energia definido em (2.15). Vamos considerar também

$$\mathcal{G}_\lambda = \{\psi \in \Sigma_1; E_\lambda(\psi) = E_{min}(\lambda)\}$$

o conjunto dos correspondentes estados estacionários. O Teorema 2.2 garante que E_{min} está bem definida como uma função de $\lambda \in \mathbb{R}$ se $0 \leq p < 4$ e $\lambda > 0$ se $p \geq 4$. É fácil ver que ela é estritamente crescente. De fato, para $h > 0$ e $\psi_{h+\lambda} \in \mathcal{G}_{h+\lambda}$, temos:

$$E_{min}(\lambda) \leq E_\lambda(\psi_{h+\lambda}) = E_{min}(\lambda + h) - \frac{2h}{p+2} \|\psi_{h+\lambda}\|_{p+2}^{p+2} < E_{min}(\lambda + h) \quad (3.2)$$

Proposição 3.1. *A função $E_{min}(\lambda)$ é estritamente crescente, côncava e tal que*

$$\lim_{\lambda \rightarrow \pm\infty} E_{min}(\lambda) = \pm\infty \quad (3.3)$$

Para a prova desta proposição, necessitamos do seguinte lema:

Lema 3.1. *Sejam $a, b \in \mathbb{R}$, $a < b$, com $a > 0$ se $p \geq 4$. Então o conjunto $\cup_{a \leq \lambda \leq b} \mathcal{G}_\lambda$ é limitado em X . Mais precisamente, existe uma constante $C_{a,b} > 0$ tal que*

$$\|\psi\|_X \leq C_{a,b}, \quad \forall \psi \in \bigcup_{a \leq \lambda \leq b} \mathcal{G}_\lambda$$

Demonstração:(do Lema 3.1): Seja $\lambda \in [a, b]$ e $\psi_\lambda \in \mathcal{G}_\lambda$. Então

$$E_{min}(b) \geq E_{min}(\lambda) = E_\lambda(\psi) \geq \|\psi_\lambda\|_X^2 + \frac{2\lambda}{p+2} \|\psi_\lambda\|_{p+2}^{p+2} - |V_0|.$$

pois $\cos^2(\alpha\xi) \leq 1$ e $\psi \in \Sigma_1$. Se $\lambda \geq 0$, então $\|\psi\|_X^2 \leq E_{min}(b) + |V_0|$. Se $\lambda < 0$ (o que implica $a < 0$, por hipótese, e então $p < 4$), segue da desigualdade (2.19) que

$$E_{min}(b) \geq \left(1 - \frac{p}{4}\right) \|\psi\|_X^2 - |V_0| - \frac{4-p}{4} \left(\frac{2C(p)|a|}{p+2}\right)^{\frac{4}{4-p}}, \quad (3.4)$$

de onde se conclui que

$$\|\psi\|_X^2 \leq \left(1 - \frac{p}{4}\right)^{-1} \left(E_{min}(b) + |V_0| + \frac{4-p}{4} \left(\frac{2C(p)|a|}{p+2}\right)^{\frac{4}{4-p}}\right) =: C_{a,b}^2 \quad \square$$

Demonstração:(da Proposição 3.1) Vamos fazer a demonstração supondo $0 \leq p < 4$. O caso $p \geq 4$ é análogo. Mostremos primeiramente que E_{min} é uma função contínua em λ . Com $h > 0$, segue de (3.2) que

$$E_{min}(\lambda) \leq \liminf_{h \rightarrow 0^+} E_{min}(\lambda + h) \quad (3.5)$$

Por outro lado, dado $\psi \in \mathcal{G}_\lambda$ e $h \in \mathbb{R}$, segue das definições de \mathcal{G}_λ que

$$\begin{aligned} E_{\lambda+h}(\psi) &= \int_{\mathbb{R}} |\psi'(\xi)|^2 d\xi + \int_{\mathbb{R}} \xi^2 |\psi|^2 d\xi + \frac{2(\lambda+h)}{p+2} \int_{\mathbb{R}} |\psi(\xi)|^{p+2} d\xi \\ &\quad - V_0 \int_{\mathbb{R}} \cos^2(\alpha\xi) |\psi(\xi)|^2 d\xi = E_{min}(\lambda) + \frac{2h}{p+2} \|\psi\|_{p+2}^{p+2}. \end{aligned} \quad (3.6)$$

De (3.6) obtemos

$$E_{min}(\lambda + h) \leq E_{min}(\lambda) + \frac{2h}{p+2} \|\psi_\lambda\|_{p+2}^{p+2}, \quad \forall h \in \mathbb{R}, \quad (3.7)$$

de onde segue que

$$\limsup_{h \rightarrow 0} E_{min}(\lambda + h) \leq E_{min}(\lambda). \quad (3.8)$$

De (3.5) e (3.8), concluimos que

$$\lim_{h \rightarrow 0^+} E_{min}(\lambda + h) = E_{min}(\lambda) \quad (3.9)$$

Para analisar o limite quando $h \rightarrow 0^-$, seja $h < 0$ e $\psi \in \mathcal{G}_{\lambda+h}$. Então,

$$E_{min}(\lambda) \leq E_\lambda(\psi) = E_{min}(\lambda + h) - \frac{2h}{p+2} \|\psi\|_{p+2}^{p+2}, \quad (3.10)$$

de modo que, usando a Desigualdade de Gagliardo-Nirenberg, obtemos

$$E_{min}(\lambda) \leq E_{min}(\lambda + h) - \frac{2hC(p)}{p+2} \|\psi\|_X^{p/2}.$$

Escolhendo $a \in \mathbb{R}$ tal que $a < \lambda + h < \lambda$, segue do Lema (3.1) que existe uma constante $C_{a,\lambda}$ tal que

$$E_{min}(\lambda) \leq E_{min}(\lambda + h) - \frac{2hC(p)}{p+2} C_{a,\lambda}. \quad (3.11)$$

A desigualdade acima nos permite escrever

$$\liminf_{h \rightarrow 0^-} E_{min}(\lambda + h) \geq E_{min}(\lambda). \quad (3.12)$$

Então, de (3.8) e (3.12), obtemos

$$\lim_{h \rightarrow 0^-} E_{min}(\lambda + h) = E_{min}(\lambda) \quad (3.13)$$

que, juntamente com (3.9) e (3.13), nos permite concluir que E_{min} é uma função contínua.

Para provar que E_{min} é uma função côncava, basta verificar que (3.7) implica a seguinte desigualdade:

$$E_{min}(\lambda + h) + E_{min}(\lambda - h) - 2E_{min}(\lambda) \leq 0, \quad \lambda, h \in \mathbb{R}.$$

O que prova a concavidade de E_{min} , segundo a definição original de J. L. W. V. Jensen (5, 6).

Para provar (3.3), considere $\psi_k \in \mathcal{G}_k$, $k \in \mathbb{N}$. Então, usando (3.2) e (3.6) com $h = 1$, obtemos

$$\frac{2}{p+2} \|\psi_{k+1}\|_{p+2}^{p+2} \leq E_{min}(k+1) - E_{min}(k) \leq \frac{2}{p+2} \|\psi_k\|_{p+2}^{p+2}, \quad \forall k \in \mathbb{N}$$

Portanto, para todo $n \in \mathbb{N}$, temos

$$\frac{2}{p+2} \sum_{k=1}^{n+1} \|\psi_k\|_{p+2}^{p+2} \leq E_{min}(n+1) - E_{min}(0) \leq \frac{2}{p+2} \sum_{k=0}^n \|\psi_k\|_{p+2}^{p+2}. \quad (3.14)$$

Suponha, por absurdo, que exista uma constante positiva C tal que $E_{min}(\lambda) \leq C$ para todo $\lambda \in \mathbb{R}$. Neste caso, segue da primeira desigualdade (3.14) que a série $\sum_{k=1}^{\infty} \|\psi_k\|_{p+2}^{p+2}$ é convergente, o que implica que a sequência $\{\psi_k\}_k$ converge para zero em $L^{p+2}(\mathbb{R})$. Repetindo os argumentos utilizados na prova do Teorema 2.2, concluímos que a sequência $\{\psi_k\}_k$ é limitada em X . Então, passando a uma subsequência se necessário, temos que $\{\psi_k\}_k$ converge fracamente em X para uma $\psi \in X$. Como a imersão $X \subset L^q(\mathbb{R})$, ($q \geq 2$), é compacta (vide o Apêndice B), $\psi_k \rightharpoonup \psi$ em $L^{p+2}(\mathbb{R})$, o que implica $\psi = 0$. Além disso, a compacidade de X em $L^2(\mathbb{R})$ nos garante que $\psi_k \rightharpoonup \psi$ também em $L^2(\mathbb{R})$. Mas isso acarreta uma contradição, pois $\|\psi_k\|_2 = 1$ para todo k . Como o mesmo argumento vale para $\psi_{-k} \in \mathcal{G}_{-k}$, $k \in \mathbb{N}$, neste caso usando a segunda desigualdade em (3.14), vemos que $E_{min} \rightarrow -\infty$ quando $\lambda \rightarrow -\infty$. \square

Corolário 3.1. *Seja $\psi_i \in \mathcal{G}_{\lambda_i}$, $i = 1, 2$. Se $\lambda_1 < \lambda_2$, então*

$$\|\psi_2\|_{p+2} \leq \|\psi_1\|_{p+2}$$

Demonstração: De (3.2) e (3.6) segue que

$$\frac{2}{p+2} \|\psi_2\|_{p+2}^{p+2} \leq \frac{E_{min}(\lambda_2) - E_{min}(\lambda_1)}{\lambda_2 - \lambda_1} \leq \frac{2}{p+2} \|\psi_1\|_{p+2}^{p+2}. \quad \square$$

No que se refere ao potencial químico μ como função do parâmetro de interação λ , não há uma caracterização variacional que nos permita repetir os argumentos usados na prova da Proposição 3.1 acima. Entretanto, é fácil ver que multiplicando ambos os lados da equação (2.2) por $\psi_\lambda \in \mathcal{G}_\lambda$, obtemos a fórmula:

$$\mu(\psi_\lambda) = E_{min}(\lambda) + \frac{2\lambda}{p+2} \int_{\mathbb{R}} |\psi_\lambda(\xi)|^{p+2} d\xi. \quad (3.15)$$

Sem uma caracterização precisa sobre as funções do conjunto \mathcal{G}_λ , não é claro que tenhamos uma única função $\mu_{min}(\lambda)$. Entretanto, segue de (3.1) e (3.15) que

$$\lim_{\lambda \rightarrow \pm\infty} \mu(\psi_\lambda) = \pm\infty, \quad \forall \psi_\lambda \in \mathcal{G}_\lambda.$$

Uma descrição de propriedades dos conjuntos \mathcal{G}_λ (no caso $p = 2$) é dada pelo seguinte resultado (veja Teorema 2.5 em (2)), cuja demonstração foge ao escopo desta dissertação.

Teorema 3.1. *Sejam $\lambda, V_0, \mu \in \mathbb{R}$.*

1. *Se $\psi \in H^1(\mathbb{R})$ é uma solução de (2.2), então $\psi \in C^2(\mathbb{R})$ e, para todo $\delta \in (0, 1)$, existe $C(\delta) > 0$ tal que*

$$|\psi(\xi)| \leq C(\delta) \exp[-\delta\xi^2/2], \quad \forall \xi \in \mathbb{R}.$$

Além disso, se $\lambda > 0$ e $\mu < 1 - |V_0|$, a desigualdade acima é satisfeita para $\delta = 1$.

2. *Se $\lambda \geq 0$, existe uma única função positiva e par $\psi_{min} \in \Sigma_1$ tal que*

$$\mathcal{G}_\lambda = \{e^{i\theta}\psi_{min}; \theta \in \mathbb{R}\}.$$

3. *Se $V_0 = 0$, então existe uma função positiva e par $\psi_{min} \in \mathcal{G}_\lambda$ tal que $\xi \mapsto \psi_{min}(\xi)$ é decrescente no intervalo $[0, +\infty)$. Em particular, $\psi_{min}(0) = \max\{\psi_{min}(\xi); \xi \in \mathbb{R}\}$.*

O primeiro item do teorema acima nos diz que qualquer solução de (2.2) decai no infinito como uma gaussiana. O segundo item nos permite definir $\mu_{min}(\lambda)$, visto que, para $\lambda \geq 0$

$$\|\psi_\lambda\|_4 = \|\psi_{min}\|_4, \quad \forall \psi_\lambda \in \mathcal{G}_\lambda.$$

Para $\lambda < 0$ não sabemos se existe uma única função real $\psi_{min} \in \mathcal{G}_\lambda$. Nesse sentido, seria interessante provar que, mesmo sem unicidade, todas as funções de \mathcal{G}_λ têm a mesma norma L^4 , o que nos garantiria a boa definição de $\mu_{min}(\lambda)$ no caso $\lambda < 0$.

4 Um método para aproximações da energia mínima

A impossibilidade de se determinar a energia mínima e o correspondente potencial químico como função explícita do parâmetro de interação λ tem suscitado a necessidade de se obter métodos de aproximação eficazes, necessidade esta justificada pela quantidade de artigos publicados sobre o assunto. Neste capítulo vamos apresentar um novo método para uma aproximação dessas funções (veja (2)). Em seguida, estudaremos o método para uma situação mais geral, considerando uma potência p para o termo não-linear.

4.1 Caso Cúbico

4.1.1 As fórmulas exatas no caso cubico

Consideremos inicialmente $\{\varphi_\lambda(\xi)\}_{\lambda \in \mathbb{R}}$ uma família de funções em Σ_1 tal que $\lambda \rightarrow \varphi_\lambda$ seja uma curva diferenciável em X . Então,

$$\frac{d}{d\lambda} \int_{\mathbb{R}} |\varphi_\lambda(\xi)|^2 d\xi = 2 \int_{\mathbb{R}} \varphi_\lambda(\xi) \frac{d}{d\lambda} \varphi_\lambda(\xi) d\xi = 0, \quad \forall \lambda \in \mathbb{R}. \quad (4.1)$$

Como o funcional E_λ que define a energia é diferenciável em X , segue da regra da cadeia que $\lambda \rightarrow E_\lambda(\varphi_\lambda)$ é também uma função diferenciável e

$$\frac{d}{d\lambda} E_\lambda(\varphi_\lambda) = \left\langle E'_\lambda(\varphi_\lambda) \left| \frac{d}{d\lambda} \varphi_\lambda \right\rangle + \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}} |\varphi_\lambda(\xi)|^4 d\xi, \quad (4.2)$$

onde $\langle | \rangle$ detona o produto de dualidade entre X e seu dual X^* .

Daqui em diante vamos supor que, para qualquer $\lambda \in \mathbb{R}$, podemos escolher um estado estacionário $\psi_\lambda \in \mathcal{G}_\lambda$ tal que $\lambda \rightarrow \psi_\lambda$ define uma curva diferenciável em X . Então,

$$E_{min}(\lambda) := \int_{\mathbb{R}} |\psi'_\lambda(\xi)|^2 d\xi + \int_{\mathbb{R}} \xi^2 |\psi_\lambda(\xi)| + \frac{\lambda}{2} \int_{\mathbb{R}} |\psi_\lambda(\xi)|^4 d\xi - V_0 \int_{\mathbb{R}} \cos^2(\alpha\xi) |\psi_\lambda(\xi)|^2 d\xi$$

é uma função diferenciável na variável λ . Como $E'_\lambda(\psi_\lambda) = \mu\psi_\lambda$, de (4.1) e (4.2) temos

$$\frac{d}{d\lambda} E_{min}(\lambda) = \mu \left\langle \psi_\lambda, \frac{d}{d\lambda} \psi_\lambda \right\rangle + \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}} |\psi_\lambda(\xi)|^4 d\xi = \frac{1}{2} \|\psi_\lambda\|_4^4, \quad (4.3)$$

e pelo Teorema Fundamental do Cálculo,

$$E_{min}(\lambda) = E_{min}(0) + \frac{1}{2} \int_0^\lambda \|\psi_s\|_4^4 ds. \quad (4.4)$$

Por outro lado, se definirmos $\mu_{min}(\lambda) := \mu(\psi_\lambda)$, segue de (3.15), com $p = 2$, que

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\lambda}\mu_{min}(\lambda) &= \frac{d}{d\lambda}E_{min}(\lambda) + \frac{d}{d\lambda} \left(\frac{\lambda}{2} \int_{\mathbb{R}} |\psi_\lambda(\xi)|^4 d\xi \right) \\ &= \frac{1}{2}\|\psi_\lambda\|_4^4 + \frac{1}{2}\|\psi_\lambda\|_4^4 + \frac{\lambda}{2} \frac{d}{d\lambda} \|\psi_\lambda\|_4^4 \\ &= \|\psi_\lambda\|_4^4 + \frac{\lambda}{2} \frac{d}{d\lambda} \|\psi_\lambda\|_4^4 \end{aligned} \quad (4.5)$$

Integrando em λ , obtemos a fórmula

$$\begin{aligned} \mu_{min}(\lambda) - \mu_{min}(0) &= \int_0^\lambda \|\psi_s\|_4^4 ds + \int_0^\lambda \frac{s}{2} \frac{d}{ds} \|\psi_s\|_4^4 ds \\ &= \int_0^\lambda \|\psi_s\|_4^4 ds + \left[\frac{s}{2} \|\psi_s\|_4^4 \right]_0^\lambda - \int_0^\lambda \frac{1}{2} \|\psi_s\|_4^4 ds \\ &= \frac{\lambda}{2} \|\psi_\lambda\|_4^4 + \frac{1}{2} \int_0^\lambda \|\psi_s\|_4^4 ds \end{aligned}$$

Logo,

$$\mu_{min}(\lambda) = \mu_{min}(0) + \frac{1}{2} \left(\lambda \|\psi_\lambda\|_4^4 + \int_0^\lambda \|\psi_s\|_4^4 ds \right) \quad (4.6)$$

Observe que, de (3.15), temos $E_{min}(0) = \mu_{min}(0)$. Além disso, se $V_0 = 0$, então segue do Lema 2.1 que $E_{min}(0) = \mu_{min}(0) = 1$. Enfatizamos aqui que as fórmulas (4.4) e (4.6) expressam a energia mínima E_{min} e seu correspondente potencial químico μ_{min} como funções de λ . Porém, as fórmulas obtidas dependem explicitamente da norma $L^4(\mathbb{R})$ do estado estacionário ψ_λ , que não pode ser calculada explicitamente. Entretanto, utilizando (4.3), podemos relacionar as funções $E_{min}(\lambda)$ e $\mu_{min}(\lambda)$ através de uma fórmula que não apresenta a dependência explícita de ψ_λ . É o que provaremos no resultado que segue.

Proposição 4.1. *Para todo $\lambda \in \mathbb{R}$, vale a identidade:*

$$E_{min}(\lambda) = \frac{1}{\lambda} \int_0^\lambda \mu_{min}(s) ds \quad (4.7)$$

Demonstração: De (4.3) e (4.6), temos

$$\frac{d}{d\lambda}\mu_{min}(\lambda) = 2 \frac{d}{d\lambda}E_{min}(\lambda) + \lambda \frac{d^2}{d\lambda^2}E_{min}(\lambda), \quad (4.8)$$

que podemos reescrever sob a forma

$$\frac{d}{d\lambda}\mu_{min}(\lambda) = \frac{d}{d\lambda} (\lambda E'_{min}(\lambda) + E_{min}(\lambda)).$$

Integrando a identidade acima de 0 a λ e observando que $E_{min}(0) = \mu_{min}(0)$, obtemos

$$\mu_{min}(\lambda) = \lambda E'_{min}(\lambda) + E_{min}(\lambda) = \frac{d}{d\lambda} (\lambda E'_{min}(\lambda)).$$

Integrando novamente, obtemos (4.7). \square

As fórmulas (4.4) e (4.6) podem ser usadas para se obter aproximações explícitas para as funções $E_{min}(\lambda)$ e seu correspondente potencial químico $\mu_{min}(\lambda)$. Para isso, podemos escolher funções testes apropriadas que forneçam curvas diferenciáveis em Σ_1 e com as quais possamos obter boas aproximações para as funções E_{min} e μ_{min} .

4.1.2 As fórmulas aproximadas no caso cúbico

Motivados pelo decaimento visto no item 1 do Teorema 3.1, consideraremos como funções teste $\phi_k \in \Sigma_1$ as gaussianas definidas por

$$\phi_k(\xi) := \left(\frac{2k}{\pi}\right)^{1/4} \exp(-k\xi^2).$$

Com base nas fórmulas exatas obtidas acima, podemos calcular $E_\lambda(\phi_k)$. Pela definição do funcional energia, temos

$$E_\lambda(\phi_k) = \|\phi_k\|_X^2 + \frac{\lambda}{2} \|\phi_k\|_4^4 - V_0 \int_{\mathbb{R}} \cos^2(\alpha\xi) |\phi_k(\xi)|^2 d\xi.$$

Considerando as identidades em (2.20), obtemos

$$E_\lambda(\phi_k) = \frac{(4k^2 + 1)}{4k} + \frac{\lambda}{2} \sqrt{\frac{k}{\pi}} - \frac{V_0}{2} \left(1 + \exp\left(-\frac{\alpha^2}{2k}\right)\right).$$

É fácil ver que

$$\lim_{k \rightarrow 0} E_\lambda(\phi_k) = \lim_{k \rightarrow +\infty} E_\lambda(\phi_k) = +\infty, \quad \forall \lambda \in \mathbb{R}. \quad (4.9)$$

Portanto, existe $k(\lambda) > 0$ tal que

$$E_\lambda(\phi_{k(\lambda)}) \leq E_\lambda(\phi_k), \quad \forall k > 0.$$

Podemos então considerar a função $\varphi_\lambda(\xi) = \phi_{k(\lambda)}(\xi)$ como uma aproximação para os verdadeiros *ground states* e calcular aproximações para a energia e potencial químico usando as fórmulas (4.4) e (4.6) na curva $\{\varphi_\lambda\}_{\lambda \in \mathbb{R}}$ de X .

O ponto de mínimo absoluto de $k \mapsto E_\lambda(\phi_k)$ satisfaz, a equação

$$\frac{dE_\lambda(\phi_k)}{dk} = 1 - \frac{1}{4k^2} + \frac{\lambda}{4} \frac{1}{\sqrt{k\pi}} - \frac{V_0\alpha^2}{4k^2} \exp\left(-\frac{\alpha^2}{2k}\right) = 0,$$

ou equivalentemente,

$$k^{3/2} \left(k^{1/2} + \frac{\lambda}{4\sqrt{\pi}}\right) - \frac{V_0\alpha^2}{4} \exp\left(-\frac{\alpha^2}{2k}\right) = \frac{1}{4} \quad (4.10)$$

Vamos então introduzir as seguintes fórmulas aproximadas:

$$\begin{cases} E_{app}(\lambda) &= E_{min}(0) + \frac{1}{2} \int_0^\lambda \|\varphi_s\|_4^4 ds, \\ \mu_{app}(\lambda) &= \mu_{min}(0) + \frac{1}{2} \left(\lambda \|\varphi_\lambda\|_4^4 + \int_0^\lambda \|\varphi_s\|_4^4 ds \right), \end{cases} \quad (4.11)$$

onde, neste caso,

$$\varphi_\lambda(\xi) = \phi_{k(\lambda)}(\xi) = \left(\frac{2k(\lambda)}{\pi}\right)^{1/4} \exp(-k(\lambda)\xi^2). \quad (4.12)$$

Como já sabemos de (2.20) que $\|\phi_k\|_4^4 = \sqrt{\frac{k(\lambda)}{\pi}}$, obtemos as fórmulas:

$$\begin{cases} E_{app}(\lambda) = E_{min}(0) + \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \int_0^\lambda \sqrt{k(s)} ds, \\ \mu_{app}(\lambda) = \mu_{min}(0) + \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \left(\lambda \sqrt{k(\lambda)} + \int_0^\lambda \sqrt{k(s)} ds \right). \end{cases} \quad (4.13)$$

Derivando as expressões em (4.11), obtemos:

$$\begin{cases} \frac{d}{d\lambda} E_{app}(\lambda) = \frac{1}{2} \|\varphi_\lambda\|_4^4, \\ \frac{d}{d\lambda} \mu_{app}(\lambda) = \|\varphi_\lambda\|_4^4 + \frac{\lambda}{2} \frac{d}{d\lambda} \|\varphi_\lambda\|_4^4. \end{cases}$$

Assim, podemos repetir os argumentos na demonstração da Proposição 4.1 para concluir que

$$\frac{d}{d\lambda} \mu_{app}(\lambda) = 2 \frac{d}{d\lambda} E_{app}(\lambda) + \lambda \frac{d^2}{d\lambda^2} E_{app}(\lambda)$$

e conseqüentemente

$$E_{app}(\lambda) = \frac{1}{\lambda} \int_0^\lambda \mu_{app}(s) ds. \quad (4.14)$$

A fórmula (4.14) é idêntica à que obtivemos na Proposição 4.1 e permite que se calcule uma das funções aproximadas caso tenhamos calculado a outra. Por exemplo, se de algum modo conseguirmos o desenvolvimento de Taylor de uma das funções, os coeficientes de Taylor da outra ficam determinados. De fato, suponhamos que

$$E_{app}(\lambda) = \sum_{k=0}^{\infty} E_k \lambda^k, \quad \mu_{app}(\lambda) = \sum_{k=0}^{\infty} \mu_k \lambda^k.$$

Então, formalmente

$$\sum_{k=0}^{\infty} E_k \lambda^k = \frac{1}{\lambda} \sum_{k=0}^{\infty} \int_0^\lambda \mu_k s^k ds = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\mu_k}{k+1} \lambda^k,$$

de onde se conclui que $\mu_k = (k+1)E_k$ para todo $k \in \mathbb{N}$, lembrando que $E_0 = \mu_0 = E_{app}(0)$.

Vale aqui observar que os cálculos formais acima são corretos para λ nos compactos do intervalo de convergência das séries, visto que nos compactos a convergência é uniforme e, assim, podemos permutar a integral e o somatório.

4.1.3 Análise do caso $V_0 = 0$

Um situação relativamente simples (onde podemos efetuar os cálculos mencionados acima) se dá quando o potencial óptico não está presente ($V_0 = 0$). Nesse caso, denotando $\sigma = \sqrt{k}$, (4.10) toma a forma da equação polinomial

$$f(\sigma) = \sigma^4 + \frac{\lambda \sigma^3}{4\sqrt{\pi}} = \frac{1}{4} \quad (4.15)$$

e fica fácil ver que a equação (4.15) tem solução $\sigma(\lambda)$ única (veja Figura 1 a seguir).

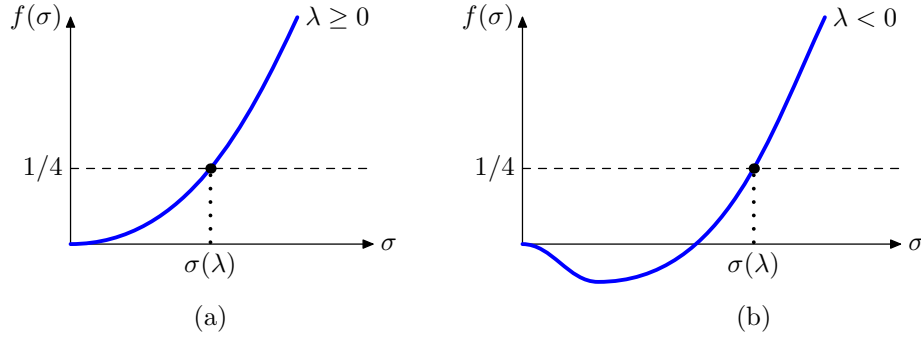


Figura 1 – Gráficos da função $f(\sigma)$; em (a) $\lambda \geq 0$ e em (b) $\lambda < 0$.

Lema 4.1. *Seja $\sigma : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ tal que $\sigma(\lambda)$ é a única raiz de (4.15). Então $\sigma \in C^\infty(\mathbb{R})$ é positiva, estritamente decrescente, convexa e satisfaz as seguintes propriedades:*

$$\sigma(0) = \frac{\sqrt{2}}{2} \quad \lim_{\lambda \rightarrow -\infty} \sigma(\lambda) = +\infty, \quad \lim_{\lambda \rightarrow +\infty} \sigma(\lambda) = 0.$$

Mais precisamente,

$$\begin{cases} \sigma(\lambda) \sim -\frac{\lambda}{4\sqrt{\pi}} & \text{quando } \lambda \rightarrow -\infty, \\ \sigma(\lambda) \sim \left(\frac{\sqrt{\pi}}{\lambda}\right)^{1/3} & \text{quando } \lambda \rightarrow +\infty. \end{cases}$$

Demonstração: Consideremos a função polinomial

$$f(\sigma) = \sigma^4 + \frac{\lambda}{4\sqrt{\pi}}\sigma^3, \quad \sigma \in [0, +\infty).$$

É fácil ver que:

- se $\lambda \geq 0$, então $f(\sigma) \leq \sigma^4$, para todo $\sigma \geq 0$;
- se $\lambda < 0$, então $f(\sigma) \leq \left(1 + \frac{\lambda}{4\sqrt{\pi}}\right) \max\{\sigma^4, \sigma^3\}$, para todo $\sigma \geq 0$.

Como $f(\sigma(\lambda)) = 1/2$, segue que $\sigma(\lambda) > 0$. Além disso, como $\sigma(\lambda)$ é definida implicitamente através de f , a regularidade C^∞ é consequência imediata do Teorema da Função Implícita.

Derivando a equação (4.15) em relação a λ , obtemos

$$(16\sqrt{\pi}\sigma(\lambda) + 3\lambda)\sigma'(\lambda) = -\sigma(\lambda) < 0.$$

Assim, para provar que $\sigma(\lambda)$ é decrescente, basta mostrar que

$$16\sqrt{\pi}\sigma(\lambda) + 3\lambda > 0, \quad \forall \lambda \in \mathbb{R} \quad (4.16)$$

De fato, se $\lambda \geq 0$, a desigualdade é óbvia. Se $\lambda < 0$, então (veja Figura 1(b)) $\sigma(\lambda) > -\lambda/4\sqrt{\pi}$, o que implica

$$4\sqrt{\pi}\sigma(\lambda) > -\lambda \quad \Rightarrow \quad 12\sqrt{\pi}\sigma(\lambda) + 3\lambda > 0.$$

Portanto,

$$\sigma'(\lambda) = \frac{-\sigma(\lambda)}{16\sqrt{\pi}\sigma(\lambda) + 3\lambda} < 0. \quad (4.17)$$

Para mostrar que $\sigma(\lambda)$ é uma função convexa, observemos que

$$\sigma''(\lambda) = 3 \frac{\sigma(\lambda) - \lambda\sigma'(\lambda)}{(16\sqrt{\pi}\sigma(\lambda) + 3\lambda)^2}, \quad \forall \lambda \in \mathbb{R}. \quad (4.18)$$

Como $\sigma'(\lambda) < 0$ para todo $\lambda \in \mathbb{R}$, vemos que $\sigma''(\lambda) > 0$ se $\lambda \geq 0$. Por outro lado, se $\lambda < 0$, temos de (4.17),

$$\sigma(\lambda) - \lambda\sigma'(\lambda) = \sigma(\lambda) \left(1 + \frac{\lambda}{16\sqrt{\pi}\sigma(\lambda) + 3\lambda} \right)$$

Logo, para concluir, basta mostrar que

$$1 + \frac{\lambda}{16\sqrt{\pi}\sigma(\lambda) + 3\lambda} > 0.$$

De fato,

$$\frac{\lambda}{16\sqrt{\pi}\sigma(\lambda) + 3\lambda} > -1 \quad \Leftrightarrow \quad 16\sqrt{\pi} + 3\lambda > -\lambda \quad \Leftrightarrow \quad \sigma(\lambda) > -\frac{\lambda}{4\sqrt{\pi}},$$

e temos a conclusão, pois $\sigma(\lambda) > -\lambda/4\sqrt{\pi}$ no caso $\lambda < 0$ (veja Figura ??). Logo, $\sigma''(\lambda) > 0$ para todo $\lambda \in \mathbb{R}$ e, portanto, σ é função convexa.

Para analisar o comportamento assintótico de $\sigma(\lambda)$, observemos inicialmente que,

$$\frac{\lambda}{4\sqrt{\pi}}\sigma(\lambda)^3 \leq \sigma(\lambda)^4 + \frac{\lambda}{4\sqrt{\pi}}\sigma(\lambda)^3 = \frac{1}{4}$$

de onde se conclui facilmente que

$$0 \leq \sigma(\lambda) \leq \left(\frac{\sqrt{\pi}}{\lambda} \right)^{1/3}, \quad \forall \lambda > 0. \quad (4.19)$$

Em particular, $\sigma(\lambda) \rightarrow 0$ quando $\lambda \rightarrow +\infty$ e, para λ suficientemente grande, temos $\sigma(\lambda)^4 < \sigma(\lambda)^3$, de modo que

$$\sigma(\lambda)^3 \left(1 + \frac{\lambda}{4\sqrt{\pi}} \right) > \frac{1}{4} \quad \Rightarrow \quad \sigma(\lambda) > \left(\frac{\sqrt{\pi}}{4\sqrt{\pi} + \lambda} \right)^{1/3} \quad (4.20)$$

As desigualdades (4.19) e (4.20) expressam que $\sigma(\lambda)$ se comporta como $1/\lambda^{1/3}$ quando $\lambda \rightarrow \infty$.

Para analisar o caso $\lambda < 0$, consideremos os pontos $\underline{\sigma}(\lambda)$ e $\bar{\sigma}(\lambda)$ como na Figura 2 a seguir, isto é, $\underline{\sigma}(\lambda)$ é a raiz da equação $f(\sigma) = 0$ e $\bar{\sigma}(\lambda)$ é a abscissa do ponto onde a reta tangente ao gráfico de f em $(\underline{\sigma}(\lambda), 0)$ intercepta a reta $y = 1/4$.

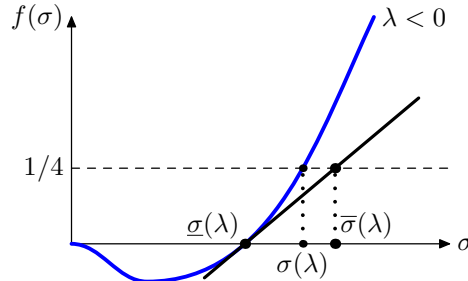


Figura 2 – Ilustração dos pontos $\underline{\sigma}(\lambda)$ e $\bar{\sigma}(\lambda)$.

Calculando os valores de $\underline{\sigma}(\lambda)$ e $\bar{\sigma}(\lambda)$:

$$f(\sigma) = 0 \iff \sigma^3 \left(\sigma + \frac{\lambda}{4\sqrt{\pi}} \right) = 0 \iff \sigma = 0 \text{ ou } \sigma = -\frac{\lambda}{4\sqrt{\pi}}.$$

Logo,

$$\underline{\sigma}(\lambda) = -\frac{\lambda}{4\sqrt{\pi}}.$$

Como

$$f'(\underline{\sigma}(\lambda)) = -\frac{\lambda^3}{4^3\pi\sqrt{\pi}},$$

a equação da reta tangente no ponto $(\underline{\sigma}(\lambda), 0)$ é:

$$y = -\frac{\lambda^3}{4^3\pi\sqrt{\pi}}(\sigma - \underline{\sigma}(\lambda)),$$

de onde se conclui que

$$\bar{\sigma}(\lambda) = -\left(\frac{\lambda}{4\sqrt{\pi}} + \frac{16\pi\sqrt{\pi}}{\lambda^3} \right).$$

Portanto, se $\lambda < 0$, temos

$$-\frac{\lambda}{4\sqrt{\pi}} \leq \sigma(\lambda) \leq -\left(\frac{\lambda}{4\sqrt{\pi}} + \frac{16\pi\sqrt{\pi}}{\lambda^3} \right) \quad (4.21)$$

Das desigualdes (4.19) e (4.21), concluímos a prova do Lema. \square

Vale aqui observar que sendo f uma função analítica, o Teorema da Função Implícita nos garante (veja Teorema 4.1 e Corolário 4.1, a seguir) que a única solução $\sigma(\lambda)$ é função analítica na variável λ e, portanto, pode ser expressa como série de Taylor:

$$\sigma(\lambda) = \sum_{k=0}^{\infty} \sigma_k \lambda^k.$$

Teorema 4.1. *Teorema da Função Implícita de Hildebrandt e Graves [(7)].*

Suponha que:

1. o mapa $F : U(x_0, y_0) \subseteq X \times Y \rightarrow Z$ está bem definido em uma vizinhança aberta de $U(x_0, y_0)$, e $F(x_0, y_0) = 0$, onde X , Y , e Z são espaços de Banach sobre um corpo $\mathbb{K} = \mathbb{R}$ ou \mathbb{C} ;
2. F_y existe como uma derivada parcial, no sentido de Fréchet, em $U(x_0, y_0)$, e além disso $F_y(x_0, y_0) : Y \rightarrow Z$ é bijetiva.;
3. F e F_y são contínuas em (x_0, y_0) .

Então o seguinte é verdade:

1. *Existência e unicidade:* Existem números positivos r_0 e r tais que, para todo $x \in X$ satisfazendo $\|x - x_0\| \leq r_0$, existe exatamente um $y(x) \in Y$ tal que $\|y(x) - y_0\| \leq r$ e $F(x, y(x)) = 0$.
2. *Construção da solução:* A sequência $(y_n(x))$ de sucessivas aproximações, definidas por $y_0(x) \equiv y_0$, e $y_{n+1}(x) = y_n(x) - F_y(x_0, y_0)^{-1}F(x, y_n(x))$, converge para a solução $y(x)$, quando $n \rightarrow \infty$, para todos os pontos $x \in X$ satisfazendo $\|x - x_0\| \leq r_0$.
3. *Diferenciabilidade:* Se F é de classe C^m , $1 \leq m \leq \infty$, na vizinhança de (x_0, y_0) , então $y(\cdot)$ é também de classe C^m na vizinhança de x_0 .

Demonstração:

Ver [(8)]

Corolário 4.1. *Se F é analítica em (x_0, y_0) , então a solução $y(\cdot)$ é analítica em x_0 .*

Demonstração:

Ver [(8)]

Uma questão importante seria determinar o raio de convergência da série que, conjecturamos, deve ser infinito.

Como consequência do Lema 4.1, podemos verificar que $E_{app}(\lambda)$ satisfaz as propriedades gerais de $E_{min}(\lambda)$ demonstradas na Proposição 3.1. Mais precisamente:

Corolário 4.2. *A função $E_{app}(\lambda)$ definida em (4.13), é de classe C^∞ , estritamente crescente e côncava em \mathbb{R} . Além disso,*

$$\begin{aligned} E_{app}(\lambda) &\sim -\lambda^2, \text{ quando } \lambda \rightarrow -\infty, \\ E_{app}(\lambda) &\sim \lambda^{2/3}, \text{ quando } \lambda \rightarrow +\infty \end{aligned}$$

Demonstração: Usando a notação $\sigma(\lambda) = \sqrt{k(\lambda)}$, temos de (4.13) no caso $V_0 = 0$,

$$E_{app}(\lambda) = 1 + \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \int_0^\lambda \sigma(s) ds. \quad (4.22)$$

Então, do Lema 4.1 temos

$$E'_{app}(\lambda) = \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \sigma(\lambda) > 0, \quad E''_{app}(\lambda) = \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \sigma'(\lambda) < 0, \quad \forall \lambda \in \mathbb{R}.$$

Além disso, segue facilmente de (4.19) e (4.20) que existem constantes positivas A_1 e A_2 tais que, para λ suficientemente grande,

$$A_1 \left(\frac{1}{\lambda}\right)^{1/3} \leq \sigma(\lambda) \leq A_2 \left(\frac{1}{\lambda}\right)^{1/3}, \quad (4.23)$$

de onde se obtém, após integrar de 0 a λ , o comportamento assintótico de $E_{app}(\lambda)$ quando $\lambda \rightarrow +\infty$.

De modo análogo, das desigualdades em (4.21), temos que existem constantes positivas B_1 e B_2 tais que, para $-\lambda$ suficientemente grande,

$$-B_1 \lambda \leq \sigma(\lambda) \leq -B_2 \lambda, \quad (4.24)$$

com o que concluímos a demonstração. \square

Com argumentos semelhantes, podemos obter informações qualitativas importantes sobre $\mu_{app}(\lambda)$ que, espera-se, possam ajudar a entender o comportamento de $\mu_{min}(\lambda)$. Mais precisamente:

Proposição 4.2. *A função $\mu_{app}(\lambda)$ definida em (4.13), é de classe C^∞ , estritamente crescente e côncava em \mathbb{R} . Além disso,*

$$\begin{aligned} \mu_{app}(\lambda) &\sim -\lambda^2, \quad \text{quando } \lambda \rightarrow -\infty, \\ \mu_{app}(\lambda) &\sim \lambda^{2/3}, \quad \text{quando } \lambda \rightarrow +\infty \end{aligned}$$

Demonstração: Usando a notação $\sigma(\lambda) = \sqrt{k(\lambda)}$, temos de (4.13) no caso $V_0 = 0$,

$$\mu_{app}(\lambda) = 1 + \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \left(\lambda \sigma(\lambda) + \int_0^\lambda \sigma(s) ds \right). \quad (4.25)$$

Então, usando (4.17), obtemos

$$\mu'(\lambda) = \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \left(2\sigma(\lambda) + \lambda \sigma'(\lambda) \right) = \frac{\sigma(\lambda)}{2\sqrt{\pi}} \left(2 - \frac{\lambda}{16\sqrt{\pi}\sigma(\lambda) + 3\lambda} \right). \quad (4.26)$$

É óbvio que $\mu'(\lambda) > 0$ se $\lambda < 0$. Por outro lado, se $\lambda \geq 0$, então

$$32\sqrt{\pi}\sigma(\lambda) + 6\lambda > \lambda \quad \Rightarrow \quad \frac{\lambda}{16\sqrt{\pi}\sigma(\lambda) + 3\lambda} < 2,$$

de onde se conclui por (4.26) que $\mu'(\lambda) > 0$.

Além disso, derivando na expressão (4.26) em relação a λ , temos

$$\mu''(\lambda) = \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \left(3\sigma'(\lambda) + \lambda\sigma''(\lambda) \right).$$

Portanto, é evidente que $\mu''(\lambda) < 0$ se $\lambda \leq 0$. Observe que por (4.18), temos

$$3\sigma'(\lambda) + \lambda\sigma''(\lambda) = 3\sigma'(\lambda) + 3 \frac{\lambda\sigma(\lambda) - \lambda^2\sigma'(\lambda)}{(16\sqrt{\pi}\sigma(\lambda) + 3\lambda)^2}.$$

Portanto,

$$\mu''(\lambda) < 0 \iff \sigma'(\lambda) < \frac{\lambda^2\sigma'(\lambda) - \lambda\sigma(\lambda)}{(16\sqrt{\pi}\sigma(\lambda) + 3\lambda)^2}$$

ou equivalentemente,

$$\left(1 - \frac{\lambda^2}{(16\sqrt{\pi}\sigma(\lambda) + 3\lambda)^2} \right) \sigma'(\lambda) < - \frac{\lambda\sigma(\lambda)}{(16\sqrt{\pi}\sigma(\lambda) + 3\lambda)^2}. \quad (4.27)$$

Como o lado direito de (4.27) é negativo se $\lambda > 0$ e $\sigma'(\lambda) < 0$, basta que mostremos que

$$\frac{\lambda^2}{(16\sqrt{\pi}\sigma(\lambda) + 3\lambda)^2} < 1, \quad \forall \lambda > 0.$$

para concluir que μ_{app} é côncava em \mathbb{R} . De fato, como $16\sqrt{\pi}\sigma(\lambda) + 3\lambda > \lambda > 0$, segue que

$$\frac{\lambda^2}{(16\sqrt{\pi}\sigma(\lambda) + 3\lambda)^2} < \frac{1}{9} < 1.$$

Para analisar o comportamento assintótico de $\mu_{app}(\lambda)$, observe que

$$\mu_{app}(\lambda) = E_{app}(\lambda) + \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \lambda\sigma(\lambda), \quad \forall \lambda \in \mathbb{R}.$$

Então, pelo Corolário 4.2 é suficiente estimar o termo $\lambda\sigma(\lambda)$. Tendo em vista as estimativas (4.23) e (4.24), temos,

$$\begin{aligned} A_1\lambda^{2/3} &\leq \lambda\sigma(\lambda) \leq A_2\lambda^{2/3}, \quad \forall \lambda \gg 1 \\ -B_1\lambda^2 &\leq \sigma(\lambda) \leq -B_2\lambda^2 \quad \forall \lambda \ll -1. \end{aligned}$$

e a demonstração está concluída. \square

Observação: Os comportamentos assintóticos da energia $E_{app}(\lambda)$ e do potencial químico $\mu_{app}(\lambda)$ descritos pelo Corolário 4.2 e pela Proposição 4.3 são condizentes com as estimativas de $E_{min}(\lambda)$ e $\mu_{min}(\lambda)$ obtidas por argumentos de caráter físico, conhecidas como *estimativas de Thomas-Fermi* (veja (9)).

4.1.4 Exemplos numéricos

Na referência (2), foram utilizados desenvolvimentos de Taylor para comparar a aproximação μ_{app} com resultados obtidos via solução numérica da equação de Gross-Pitaevskii (2.2). Nesta seção vamos resolver numericamente o problema de valor inicial dado pela equação (4.17) para calcular, da mesma maneira, o potencial químico μ_{app} .

A figura 3 abaixo mostra o gráfico de $\sigma(\lambda)$ para $\lambda \in [-10, 10]$, obtida pela solução numérica, via o método de Newton usual, do problema de valor inicial

$$\frac{d\sigma}{d\lambda} = -\frac{\sigma}{16\sqrt{\pi}\sigma + 3\lambda}, \quad \sigma(0) = \sqrt{2}/2$$

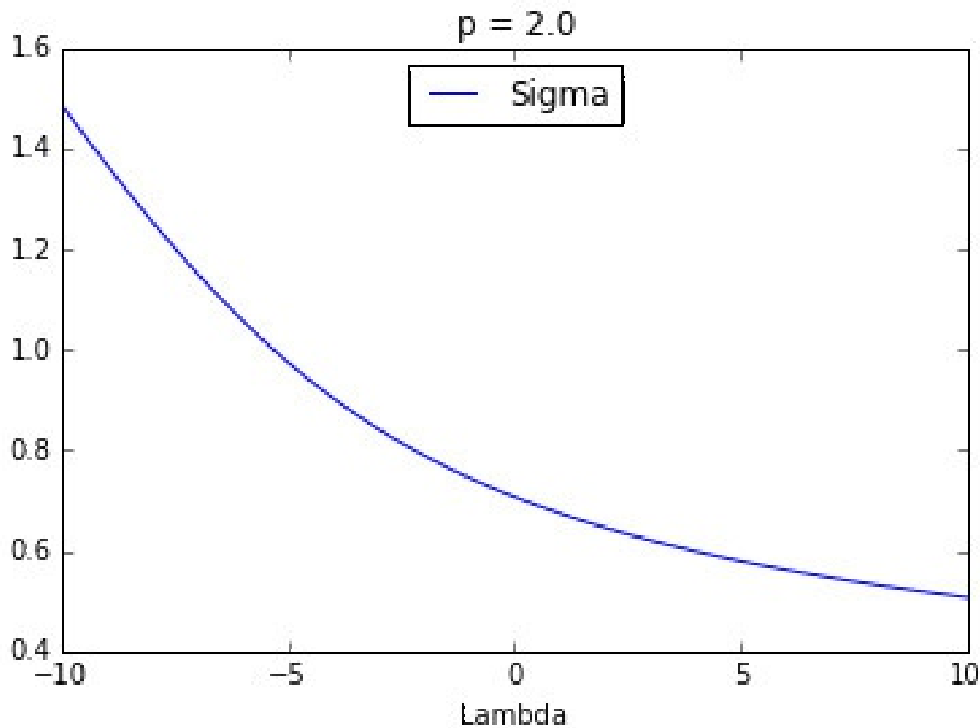


Figura 3: Gráfico da função $\lambda \rightarrow \sigma(\lambda)$, caso cúbico.

A figura a seguir mostra o gráfico de $\mu_{app}(\lambda)$ para $\lambda \in [-10, 10]$, obtido pela integração numérica de $\mu_{app}(\lambda)$ de acordo com a fórmula (4.11)

$$\mu_{app}(\lambda) = 1 + \frac{1}{2} \left(\lambda \|\varphi_\lambda\|_4^4 + \int_0^\lambda \|\varphi_s\|_4^4 ds \right)$$

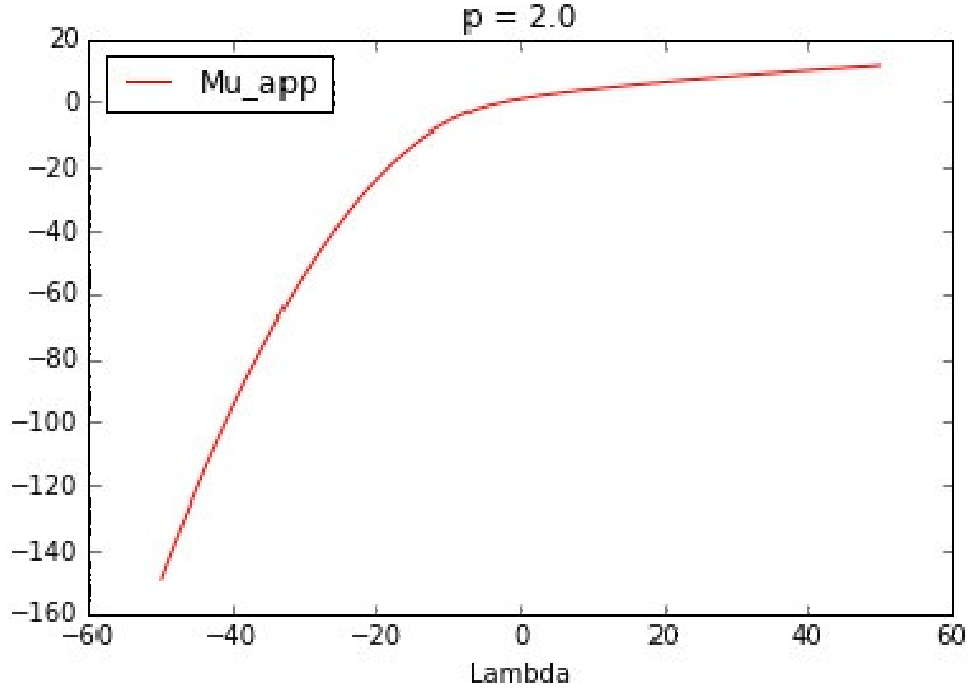


Figura 4: Gráfico da função $\lambda \rightarrow \mu_{app}(\lambda)$, caso cúbico.

Comparando-se o gráfico da Figura 4 acima com os apresentados no artigo de referência (2), verifica-se a coincidência numérica dos resultados.

4.2 Caso Geral

4.2.1 As fórmulas exatas no caso geral

No caso geral, as equações (4.1) e (4.2) tomam a forma

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\lambda} Q(\varphi_\lambda) &= 2 \int_{\mathbb{R}} \varphi_\lambda(\xi) \frac{d}{d\lambda} \varphi_\lambda(\xi) d\xi = 0, \\ \frac{d}{d\lambda} E_\lambda(\varphi_\lambda) &= \langle E'_\lambda(\varphi_\lambda) | \frac{d}{d\lambda} \varphi_\lambda \rangle + \frac{2}{p+2} \int_{\mathbb{R}} |\varphi_\lambda(\xi)|^{p+2} d\xi, \end{aligned} \quad (4.28)$$

onde $\langle | \rangle$ denota o produto dual entre X e seu dual X^* .

Suponhamos que podemos escolher um estado estacionário $\psi_\lambda \in \mathcal{G}_\lambda$, para qualquer $\lambda \in \mathbb{R}$ no caso $0 \leq p < 4$ e para qualquer $\lambda > 0$ no caso $p \geq 4$, tal que $\lambda \rightarrow \psi_\lambda$ define uma curva diferenciável em X . Então

$$E_{min}(\lambda) = \int_{\mathbb{R}} |\psi'_\lambda(\xi)|^2 d\xi + \int_{\mathbb{R}} \xi^2 |\psi_\lambda(\xi)|^2 + \frac{2\lambda}{p+2} \int_{\mathbb{R}} |\psi_\lambda(\xi)|^{p+2} d\xi - V_0 \int_{\mathbb{R}} \cos^2(\alpha\xi) |\psi_\lambda(\xi)|^2 d\xi$$

é um funcional diferenciável como função de λ . Como $E'_\lambda(\psi_\lambda) = 2\mu\psi_\lambda$, segue de (4.28),

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\lambda}E_{min}(\lambda) &= \left\langle 2\mu\psi_\lambda(\xi), \frac{d}{d\lambda}\psi \right\rangle + \frac{2}{p+2} \int_{\mathbb{R}} |\psi_\lambda(\xi)|^{p+2} d\xi \\ &= \frac{2}{p+2} \int_{\mathbb{R}} |\psi_\lambda(\xi)|^{p+2} d\xi \\ &= \frac{2}{p+2} \|\psi_\lambda\|_{p+2}^{p+2} \end{aligned} \quad (4.29)$$

Pelo Teorema Fundamental do Cálculo,

$$E_{min}(\lambda) = E_{min}(0) + \frac{2}{p+2} \int_0^\lambda \|\psi_s\|_{p+2}^{p+2} ds. \quad (4.30)$$

Por outro lado, se definirmos $\mu_{min}(\lambda) := \mu(\psi_\lambda)$, segue de (3.15) que

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\lambda}\mu_{min}(\lambda) &= \frac{d}{d\lambda}E_{min}(\lambda) + \frac{d}{d\lambda} \left(\frac{p\lambda}{p+2} \int_{\mathbb{R}} |\psi_\lambda(\xi)|^{p+2} d\xi \right) \\ &= \frac{2}{p+2} \|\psi_\lambda\|_{p+2}^{p+2} + \frac{p}{p+2} \|\psi_\lambda\|_{p+2}^{p+2} + \frac{p\lambda}{p+2} \frac{d}{d\lambda} \|\psi_\lambda\|_{p+2}^{p+2} \\ &= \|\psi_\lambda\|_{p+2}^{p+2} + \frac{p\lambda}{p+2} \frac{d}{d\lambda} \|\psi_\lambda\|_{p+2}^{p+2}. \end{aligned} \quad (4.31)$$

Integrando em λ , obtemos a fórmula

$$\mu_{min}(\lambda) = \mu_{min}(0) + \frac{1}{p+2} \left(p\lambda \|\psi_\lambda\|_{p+2}^{p+2} + 2 \int_0^\lambda \|\psi_s\|_{p+2}^{p+2} ds \right). \quad (4.32)$$

Repare que, de (3.15), temos $E_{min}(0) = \mu_{min}(0)$. Além disso, se $V_0 = 0$, segue do Lema 2.1 que $E_{min}(0) = \mu_{min}(0) = 1$.

Observação: Como no caso cúbico, as fórmulas (4.30) e (4.32) expressam a energia mínima E_{min} e o correspondente potencial químico μ_{min} como funções de λ , mas dependem explicitamente da norma L^{p+2} do estado estacionário ψ_λ , que não se tem explicitamente. No caso cúbico obtivemos uma identidade simples entre essas duas funções que não envolvem ψ_λ , dadas pela fórmula (4.7). Esta fórmula também vale no caso geral. De fato, temos de (4.29) e (4.31),

$$\frac{d}{d\lambda}\mu_{min}(\lambda) = \frac{p+2}{2} \frac{d}{d\lambda}E_{min}(\lambda) + \frac{p\lambda}{2} \frac{d^2}{d\lambda^2}E_{min}(\lambda).$$

Com isso temos que, para todo $\lambda \in \mathbb{R}$, vale a identidade:

$$\mu_{min}(\lambda) = E_{min}(\lambda) + \frac{p\lambda}{2} \frac{d}{d\lambda}E_{min}(\lambda) \quad (4.33)$$

4.2.2 As fórmulas aproximadas no caso geral

Consideraremos as funções teste $\phi_k \in \Sigma_1$ definidas como

$$\phi_k(\xi) := \sqrt[4]{\frac{2k}{\pi}} \exp(-k\xi^2)$$

e calculemos a energia $E_\lambda(\phi_k)$ definida em (2.15). Como vimos no Capítulo 3,

$$E_\lambda(\phi_k) = k + \frac{1}{4k} + A_p \lambda k^{p/4} - \frac{V_0}{2} \left(1 + \exp\left(-\frac{\alpha^2}{2k}\right) \right), \quad (4.34)$$

onde

$$A_p = \frac{2\sqrt{2}2^{p/4}}{(p+2)^{3/2}\pi^{p/4}},$$

Fixado $p \geq 0$, vemos que

$$\lim_{k \rightarrow 0^+} E_\lambda(\phi_k) = +\infty, \quad \forall \lambda \in \mathbb{R}.$$

$$\lim_{k \rightarrow +\infty} E_\lambda(\phi_k) = \begin{cases} +\infty & \text{se } \lambda \geq 0; \\ +\infty & \text{se } \lambda \in \mathbb{R} \text{ e } p < 4; \\ -\infty & \text{se } \lambda < 0 \text{ e } p > 4. \end{cases}$$

No caso $p = 4$, denominado caso crítico, observamos que

$$\lim_{k \rightarrow +\infty} E_\lambda(\phi_k) = \begin{cases} -\infty & \text{se } \lambda < -1/A_4 = -3\pi\sqrt{3}/2; \\ +\infty & \text{se } \lambda > -1/A_4 = -3\pi\sqrt{3}/2. \end{cases}$$

Portanto, nas situações em que os limites acima valem $+\infty$, isto é, os casos em que a função $k \mapsto E_\lambda(\phi_k)$ é coerciva, podemos encontrar $k(\lambda) > 0$ tal que

$$E_\lambda(\phi_{k(\lambda)}) = \min\{E_\lambda(\phi_k); k \in (0, +\infty)\}.$$

Nesses casos, $k(\lambda)$ deve satisfazer a equação:

$$\frac{dE_\lambda(\phi_k)}{dk} = 1 - \frac{1}{4k^2} + \frac{p}{4}A_p\lambda k^{\frac{p}{4}-1} - \frac{V_0\alpha^2}{4k^2} \exp\left(-\frac{\alpha^2}{2k}\right) = 0,$$

isto é,

$$k^2 + \frac{p}{4}A_p\lambda k^{\frac{p}{4}+1} - \frac{V_0\alpha^2}{4} \exp\left(-\frac{\alpha^2}{2k}\right) = \frac{1}{4} \quad (4.35)$$

4.2.3 Análise do caso geral com $V_0 = 0$

Na hipótese em que $V_0 = 0$, o lado esquerdo de (4.35) nos casos em que há a coercividade, define uma função $f(k)$ que tem as mesmas características apresentadas no problema com $p = 2$. Portanto, com argumentos análogos podemos obter as propriedades da solução $k(\lambda)$ da equação. De fato, se considerarmos $\sigma = \sqrt{k}$, então (4.35) toma a forma

$$\sigma^4 + \frac{p}{4}A_p\lambda\sigma^{\frac{p}{2}+2} = \frac{1}{4}. \quad (4.36)$$

Consideremos a função $f : (0, +\infty) \rightarrow \mathbb{R}$ definida por

$$f(\sigma) = \sigma^4 + B_p\lambda\sigma^{\frac{p}{2}+2},$$

onde

$$B_p = \frac{p}{4} A_p = \left(\frac{p\sqrt{2}}{2(p+2)^{3/2}} \right) \left(\frac{2}{\pi} \right)^{p/4}.$$

Se $0 \leq p < 4$, a função f se comporta como nas Figuras ?? e ?? e a equação (4.36) admite uma única solução $\sigma(\lambda)$. Em particular, para $\lambda < 0$, a raiz positiva da equação $f(\sigma) = 0$ é $\underline{\sigma}(\lambda) = [-B_p\lambda]^{2/(4-p)}$.

Lema 4.2. *Seja $0 \leq p < 4$ e $\sigma : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ tal que $\sigma(\lambda)$ é a solução de (4.36). Então $\sigma \in C^\infty(\mathbb{R})$ é estritamente decrescente, satisfaz as seguintes propriedades:*

$$\sigma(0) = \frac{\sqrt{2}}{2} \quad \lim_{\lambda \rightarrow -\infty} \sigma(\lambda) = +\infty, \quad \lim_{\lambda \rightarrow +\infty} \sigma(\lambda) = 0.$$

Mais precisamente,

$$\begin{cases} \sigma(\lambda) \sim (-\lambda B_p)^{2/(4-p)} & \text{quando } \lambda \rightarrow -\infty, \\ \sigma(\lambda) \sim \left(\frac{1}{4B_p\lambda} \right)^{2/(p+4)} & \text{quando } \lambda \rightarrow +\infty. \end{cases} \quad (4.37)$$

Além disso, é convexa para $p \in [2, 4]$, para todo λ ; e existe λ_c tal que é convexa em $(\lambda_c, +\infty)$, para $p \in [0, 2)$.

Demonstração: Como $f(\sigma(\lambda)) = 1/4$, segue que $\sigma(\lambda) > 0$ para todo $\lambda \in \mathbb{R}$. Além disso, como $\sigma(\lambda)$ é definida implicitamente através de f , a regularidade C^∞ é consequência imediata do Teorema da Função Implícita. Derivando a equação (4.36) em relação a λ , encontramos

$$4\sigma(\lambda)^3\sigma'(\lambda) + \left(\frac{p}{2} + 2 \right) B_p\lambda\sigma(\lambda)^{\frac{p}{2}+1}\sigma'(\lambda) + B_p\sigma(\lambda)^{\frac{p}{2}+2} = 0,$$

de onde se obtém

$$\sigma'(\lambda) = \frac{-B_p\sigma(\lambda)}{4\sigma(\lambda)^{2-\frac{p}{2}} + \left(\frac{p}{2} + 2 \right) B_p\lambda}. \quad (4.38)$$

Se $\lambda \geq 0$, é claro que $\sigma'(\lambda) < 0$. Para concluir que a função $\lambda \mapsto \sigma(\lambda)$ é estritamente decrescente, basta mostrar que

$$4\sigma(\lambda)^{2-\frac{p}{2}} + \left(\frac{p}{2} + 2 \right) B_p\lambda > 0, \quad \forall \lambda < 0. \quad (4.39)$$

De fato, como para todo $\lambda < 0$ tem-se $\sigma(\lambda) > \underline{\sigma}(\lambda)$, segue que

$$\begin{aligned} 4\sigma(\lambda)^{2-\frac{p}{2}} + \left(\frac{p}{2} + 2 \right) B_p\lambda &> 4\underline{\sigma}(\lambda)^{2-\frac{p}{2}} + \left(\frac{p}{2} + 2 \right) B_p\lambda \\ &> 4\underline{\sigma}(\lambda)^{2-\frac{p}{2}} + 4B_p\lambda \\ &= 4\underline{\sigma}(\lambda)^{\frac{p}{2}+2} f(\underline{\sigma}(\lambda)) = 0. \end{aligned} \quad (4.40)$$

Portanto

$$\sigma'(\lambda) = \frac{-B_p\sigma(\lambda)}{4\sigma(\lambda)^{2-\frac{p}{2}} + \left(\frac{p}{2} + 2 \right) B_p\lambda} < 0, \quad \forall \lambda \in \mathbb{R} \quad (4.41)$$

e concluímos que σ é uma função estritamente decrescente.

Para analisar o comportamento assintótico de σ , observemos inicialmente que

$$B_p \lambda \sigma(\lambda)^{2+(p/2)} \leq \sigma^4(\lambda) + B_p \lambda \sigma(\lambda)^{2+\frac{p}{2}} = \frac{1}{4}$$

Logo, para $\lambda > 0$, obtemos

$$0 \leq \sigma(\lambda) \leq \frac{1}{4B_p \lambda^{2/(p+4)}} \quad (4.42)$$

Em particular, $\sigma(\lambda) \rightarrow 0$ quando $\lambda \rightarrow +\infty$. Para λ suficientemente grande, temos $\sigma^4(\lambda) < \sigma(\lambda)^{2+(p/2)}$, de modo que, de (4.36),

$$\sigma(\lambda)^{2+\frac{p}{2}} (1 + \lambda B_p) > \frac{1}{4},$$

o que implica

$$\sigma(\lambda) > \left(\frac{1}{4 + 4\lambda B_p} \right)^{\frac{2}{p+4}} \quad (4.43)$$

Das desigualdades (4.42) e (4.43) concluímos que σ se comporta como $\left(\frac{1}{4B_p \lambda} \right)^{\frac{2}{p+4}}$ quando $\lambda \rightarrow \infty$.

Para provar o caso $\lambda < 0$, observe que (veja Figura ??) $\underline{\sigma}(\lambda) < \sigma(\lambda) < \bar{\sigma}(\lambda)$, onde, neste caso,

$$\underline{\sigma}(\lambda) = [-B_p \lambda]^{\frac{2}{4-p}} \quad \text{e} \quad \bar{\sigma}(\lambda) = \underline{\sigma}(\lambda) + \frac{1}{4f'(\underline{\sigma}(\lambda))} \quad (4.44)$$

e

$$f'(\underline{\sigma}(\lambda)) = 4(-B_p \lambda)^{\frac{6}{4-p}} + \left(2 + \frac{p}{2}\right) (-B_p \lambda)^{\frac{2+p}{4-p}}.$$

Para $p < 4$ é claro que $f'(\underline{\sigma}(\lambda)) \rightarrow 0$ quando $\lambda \rightarrow -\infty$, de onde se conclui o comportamento assintótico em (4.37).

Vejamos agora a convexidade de $\sigma(\lambda)$. Derivando a expressão (4.38), obtemos

$$\sigma'' = \frac{[(4 - 2p)B_p \sigma^{2-(p/2)} - \left(\frac{p}{2} + 2\right) B_p^2 \lambda] \sigma' + \left(\frac{p}{2} + 2\right) B_p^2 \sigma}{[4\sigma^{2-(p/2)} + \left(\frac{p}{2} + 2\right) B_p \lambda]^2} \quad (4.45)$$

Por conseguinte, basta verificar para quais valores de p o numerador em (4.45) é estritamente positivo, isto é,

$$[(4 - 2p)B_p \sigma^{2-(p/2)} - \left(2 + \frac{p}{2}\right) B_p^2 \lambda] \sigma' + \left(2 + \frac{p}{2}\right) B_p^2 \sigma > 0. \quad (4.46)$$

Substituindo em (4.46) a expressão (4.41), obtemos $\sigma'' > 0$ se, e somente se,

$$\frac{[(4 - 2p)\sigma^{2-(p/2)} - \left(\frac{p}{2} + 2\right) B_p \lambda]}{[4\sigma^{2-(p/2)} + \left(\frac{p}{2} + 2\right) B_p \lambda]} (-B_p \sigma) + \left(2 + \frac{p}{2}\right) B_p \sigma > 0.$$

Segue de (4.39) que a desigualdade acima é equivalente a

$$4(1 + p)\sigma^{2-\frac{p}{2}} > \left(\frac{p}{2} + 2\right) \left(\frac{p}{2} + 3\right) (-\lambda B_p). \quad (4.47)$$

Multiplicando por $\sigma^{\frac{p}{2}+2}$ e usando (4.36), vemos que (4.47) é equivalente a:

$$\sigma^4(\lambda) \left[4(p+1) - \left(\frac{p}{2}+2\right) \left(\frac{p}{2}+3\right) \right] + \frac{1}{4} \left(\frac{p}{2}+2\right) \left(\frac{p}{2}+3\right) > 0 \quad (4.48)$$

De modo que, como $\sigma \geq 0$, (4.48) se verifica para p satisfazendo $4(1+p) \geq \left(\frac{p}{2}+2\right) \left(\frac{p}{2}+3\right)$, isto é, para todo $p \in [2, 4]$, ou,

$$\sigma^4(\lambda) < \frac{-\frac{1}{4} \left(\frac{p}{2}+2\right) \left(\frac{p}{2}+3\right)}{\left[4(p+1) - \left(\frac{p}{2}+2\right) \left(\frac{p}{2}+3\right)\right]} = C_p > 0, \text{ para } p \in [0, 2)$$

Como $\lim_{\lambda \rightarrow -\infty} \sigma(\lambda) = +\infty$, $\lim_{\lambda \rightarrow +\infty} \sigma(\lambda) = 0$ e σ é estritamente decrescente, segue que existe um único λ_c tal que $\sigma^4(\lambda_c) = C_p$. Logo σ é convexa para $\lambda \in (\lambda_c, +\infty)$ e $p \in [0, 2)$ e a prova está concluída. \square

Com base nas propriedades descritas no Lema 4.2, podemos analisar as propriedades das funções $E_{app}(\lambda)$ e $\mu_{app}(\lambda)$, que no caso $V_0 = 0$ são definidas por

$$\begin{cases} E_{app}(\lambda) = 1 + \frac{2}{p+2} \int_0^\lambda \|\varphi_s\|_{p+2}^{p+2} ds, \\ \mu_{app}(\lambda) = 1 + \frac{1}{p+2} \left(p\lambda \|\varphi_\lambda\|_{p+2}^{p+2} + 2 \int_0^\lambda \|\varphi_s\|_{p+2}^{p+2} ds \right), \end{cases} \quad (4.49)$$

onde as funções aproximantes φ_λ , $\lambda \in \mathbb{R}$, são definidas por

$$\varphi_\lambda(\xi) = \phi_{k(\lambda)}(\xi) = \sqrt[4]{\frac{2k(\lambda)}{\pi}} \exp(-k(\lambda)\xi^2). \quad (4.50)$$

Como vimos anteriormente, segue do Apêndice C que

$$\|\phi_k\|_{p+2}^{p+2} = \sqrt{\frac{2}{p+2}} \left(\frac{2k}{\pi}\right)^{p/4},$$

de modo que, substituindo em (4.49), obtemos

$$E_{app}(\lambda) = 1 + \frac{2^{(p+6)/4}}{\pi^{p/4}(p+2)^{3/2}} \int_0^\lambda k(s)^{\frac{p}{4}} ds = 1 + A_p \int_0^\lambda k(s)^{\frac{p}{4}} ds. \quad (4.51)$$

Derivando as expressões em (4.49), obtemos:

$$\begin{cases} \frac{d}{d\lambda} E_{app}(\lambda) = \frac{2}{p+2} \|\varphi_\lambda\|_{p+2}^{p+2}, \\ \frac{d}{d\lambda} \mu_{app}(\lambda) = \|\varphi_\lambda\|_{p+2}^{p+2} + \frac{p\lambda}{p+2} \frac{d}{d\lambda} \|\varphi_\lambda\|_{p+2}^{p+2}. \end{cases}$$

Assim, podemos repetir os argumentos do caso exato para concluir que

$$\frac{d}{d\lambda} \mu_{app}(\lambda) = \frac{p+2}{2} \frac{d}{d\lambda} E_{app}(\lambda) + \frac{p\lambda}{2} \frac{d^2}{d\lambda^2} E_{app}(\lambda) \quad (4.52)$$

e consequentemente

$$\mu_{app}(\lambda) = E_{app}(\lambda) + \frac{p\lambda}{2} \frac{d}{d\lambda} E_{app}(\lambda) \quad (4.53)$$

Segue do Lema 4.2 que, também no caso geral, E_{app} satisfaz as propriedades gerais de E_{min} . Mais precisamente:

Corolário 4.3. A função E_{app} definida em (4.49) é de classe C^∞ , estritamente crescente e côncava em \mathbb{R} e tem o seguinte comportamento assintótico:

$$\begin{cases} E_{app}(\lambda) \sim \lambda^{4/(p+4)} & \text{quando } \lambda \rightarrow +\infty. \\ E_{app}(\lambda) \sim -(-\lambda)^{4/(4-p)} & \text{quando } \lambda \rightarrow -\infty, \end{cases}$$

Demonstração: Temos de (4.51),

$$E_{app}(\lambda) = 1 + A_p \int_0^\lambda \sigma(s)^{p/2} ds$$

e fica claro que

$$E'_{app}(\lambda) = A_p \sigma(\lambda)^{\frac{p}{2}} > 0 \quad \text{e} \quad E''_{app}(\lambda) = \frac{pA_p}{2} \sigma(\lambda)^{\frac{p}{2}-1} \sigma'(\lambda) < 0, \quad \forall \lambda \in \mathbb{R}. \quad (4.54)$$

De (4.37), temos $\sigma(\lambda) = O(1/\lambda)^{2/(p+4)}$ quando $\lambda \rightarrow +\infty$. Logo

$$E_{app}(\lambda) = O\left(\int_0^\lambda \sigma(s)^{p/2} ds\right) = O\left(\int_0^\lambda s^{\frac{p}{p+4}} ds\right) = O\left(\lambda^{\frac{4}{p+4}}\right).$$

Por outro lado, para $\lambda \rightarrow -\infty$, temos $\sigma(\lambda) = O((- \lambda)^{2/(4-p)})$ e, conseqüentemente,

$$E_{app}(\lambda) = O\left(\int_0^\lambda (-s)^{p/(4-p)} ds\right) = O\left(-\int_0^{-\lambda} t^{p/(4-p)} dt\right) = O\left(-(-\lambda)^{\frac{4}{4-p}}\right),$$

e assim concluímos a prova. \square

Analisemos agora as principais propriedades da função $\mu_{app}(\lambda)$.

Proposição 4.3. A função μ_{app} definida em (4.49) é de classe C^∞ , estritamente crescente e

$$\begin{cases} \mu_{app}(\lambda) \sim \lambda^{4/(p+4)} & \text{quando } \lambda \rightarrow +\infty. \\ \mu_{app}(\lambda) \sim -(-\lambda)^{4/(4-p)} & \text{quando } \lambda \rightarrow -\infty, \end{cases}$$

Além disso, μ_{app} é côncava para todo λ em \mathbb{R} e qualquer que seja $0 \leq p < 4$.

Demonstração: Decorre diretamente de (4.52) e (4.54) que

$$\mu'_{app}(\lambda) = \left(\frac{p+2}{2}\right) A_p \sigma(\lambda)^{\frac{p}{2}} + \frac{\lambda p^2 A_p}{8} \sigma(\lambda)^{\frac{p}{2}-1} \sigma'(\lambda) = \sigma(\lambda)^{\frac{p}{2}} A_p \left(\frac{p+2}{2} + \frac{\lambda p^2 \sigma'(\lambda)}{8\sigma(\lambda)}\right)$$

e conclui-se que $\mu'_{app}(\lambda) > 0$ para todo $\lambda < 0$, visto que $\sigma'(\lambda) < 0$.

Para analisar o caso $\lambda > 0$, vamos substituir $\sigma'(\lambda)$ na expressão acima pela fórmula obtida em (4.38), isto é,

$$\mu'_{app}(\lambda) = A_p \sigma(\lambda)^{\frac{p}{2}} \left(\frac{p+2}{2} - \frac{\lambda B_p p^2}{8(4\sigma(\lambda)^{2-\frac{p}{2}} + (\frac{p}{2} + 2) B_p \lambda)} \right). \quad (4.55)$$

Então, $\mu'_{app}(\lambda) > 0$ se, e somente se,

$$\frac{\lambda}{8} \frac{p^2 B_p}{[4\sigma(\lambda)^{2-\frac{p}{2}} + ((p/2) + 2) B_p \lambda]} < \frac{p+2}{2}.$$

Segue de (4.39) que a inequação acima é equivalente a

$$0 < 16(p+2)\sigma^{2-\frac{p}{2}} + (p^2 + 12p + 16)B_p\lambda$$

que é evidentemente verdadeira para $\lambda > 0$. Portanto, $\mu_{app}(\lambda)$ é função estritamente crescente em \mathbb{R} , qualquer que seja $p \in [0, 4)$.

Para analisar o comportamento assintótico de μ_{app} , observe que

$$\mu_{app}(\lambda) = E_{app}(\lambda) + \lambda \frac{p}{2} A_p \sigma(\lambda)^{\frac{p}{2}}.$$

e, para $\lambda \rightarrow +\infty$, $\lambda \sigma(\lambda)^{p/2} = \lambda O(\lambda^{-p/(p+4)}) = O(\lambda^{4/(p+4)})$. Com argumento análogo obtemos também o comportamento assintótico no caso para $\lambda \rightarrow -\infty$.

Para analisar a concavidade de μ_{app} , considerando as fórmulas (4.52) e (4.54) obtemos (veja os detalhes no Apêndice D)

$$\begin{aligned} \mu''_{app}(\lambda) &= \\ &= \frac{A_p p \sigma' \sigma^{\frac{p}{2}-1} \left[(3p+4) B_p^2 \lambda^2 \left(\frac{p}{2} + 2 \right) + \lambda B_p \sigma^{2-\frac{p}{2}} (2p^2 + 40p + 32) + 32(p+1) \sigma^{4-p} \right]}{4 \left[4\sigma^{2-\frac{p}{2}} + \left(\frac{p}{2} + 2 \right) B_p \lambda \right]^2}. \end{aligned}$$

Utilizando (4.36) obtemos:

$$\begin{aligned} \mu''_{app}(\lambda) &= \\ &= R(p, \sigma) \left[\left(\frac{1}{4} - \sigma^4(\lambda) \right) \left[\left(\frac{p}{2} + 2 \right) B_p \lambda \sigma^{-\frac{p}{2}-2} (3p+4) + \sigma^{-p} (2p^2 + 40p + 32) \right] + 32(p+1) \sigma^{4-p} \right]. \end{aligned}$$

Onde

$$R(p, \sigma) = \frac{A_p p \sigma' \sigma^{\frac{p}{2}-1}}{4 \left[4\sigma^{2-\frac{p}{2}} + \left(\frac{p}{2} + 2 \right) B_p \lambda \right]^2}$$

Então, usando (4.39), vemos que

$$\mu''_{app}(\lambda) < \frac{A_p p \sigma' \sigma^{\frac{p}{2}-1} \left[\sigma^{4-p} (-2p^2 + 4p + 16) + 4\sigma^{-p} (2p^2 + 28p + 16) \right]}{4 \left[4\sigma^{2-\frac{p}{2}} + \left(\frac{p}{2} + 2 \right) B_p \lambda \right]^2}$$

Como $\sigma(\lambda) > 0$, $\sigma'(\lambda) < 0$, pra todo $\lambda \in \mathbb{R}$, e levando em conta (4.39), concluímos que $\mu''_{app}(\lambda) < 0$ para todo $\lambda \in \mathbb{R}$ e $p \in [0, 4)$. Assim, concluímos a prova da proposição. \square

4.2.4 Exemplos numéricos - caso geral

Os gráficos a seguir correspondem à função $\mu_{app}(\lambda)$, para $\lambda \in [-30, 30]$, para os seguintes valores de $p = 1.5, p = 2.0$ (caso cúbico), $p = 2.5, p = 3.0$ e $p = 3.5$.

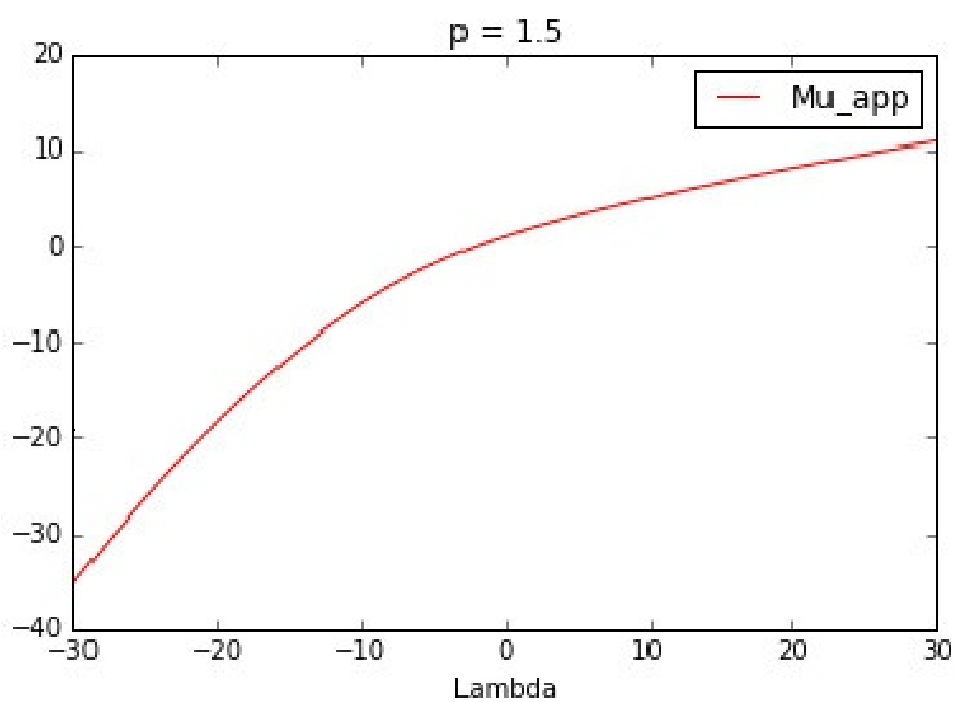


Figura 5: Gráfico da função $\lambda \rightarrow \mu_{app}(\lambda)$, caso $p = 1.5$.

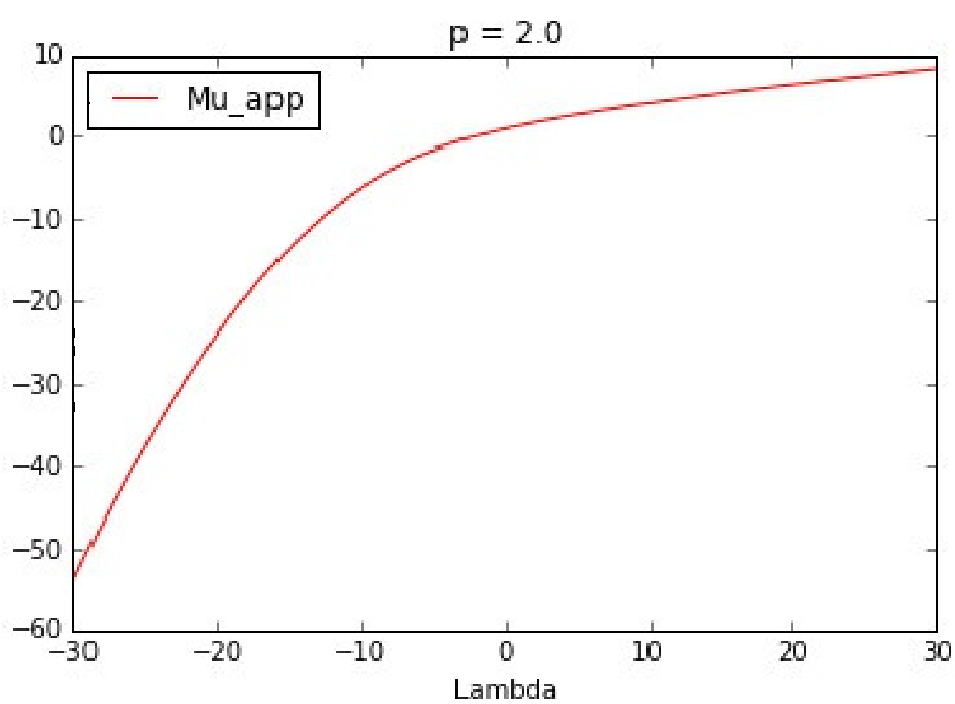


Figura 6: Gráfico da função $\lambda \rightarrow \mu_{app}(\lambda)$, caso $p = 2.0$.

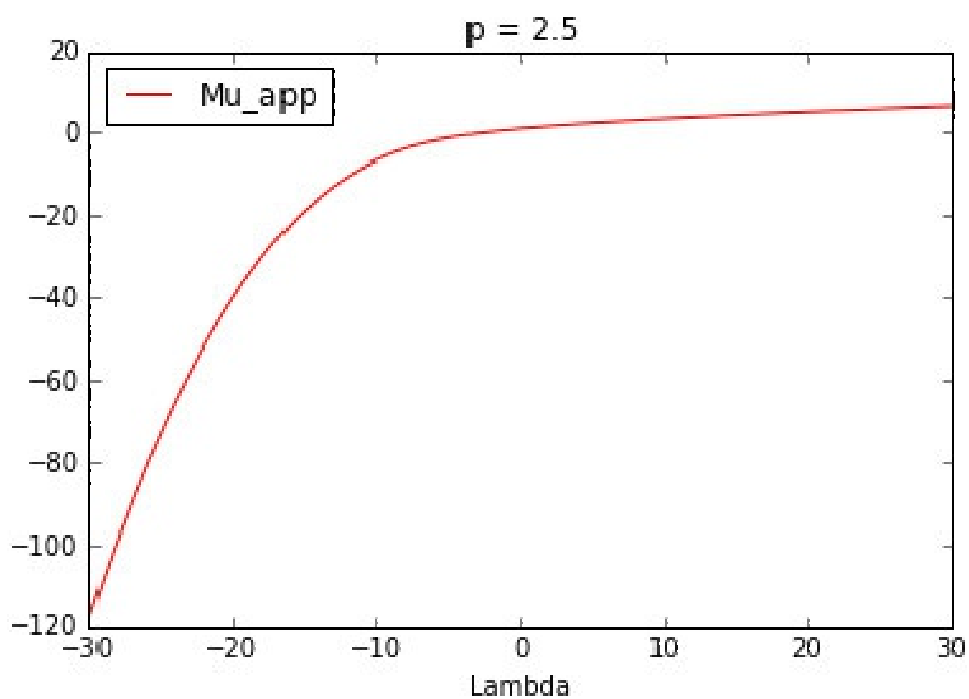


Figura 7: Gráfico da função $\lambda \rightarrow \mu_{app}(\lambda)$, caso $p = 2.5$

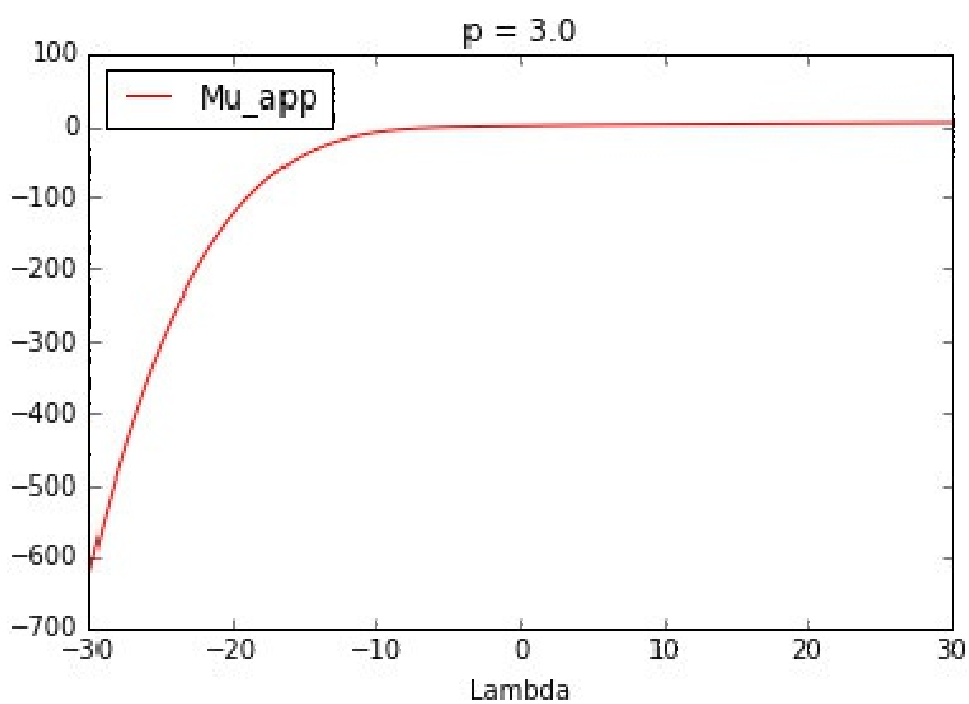
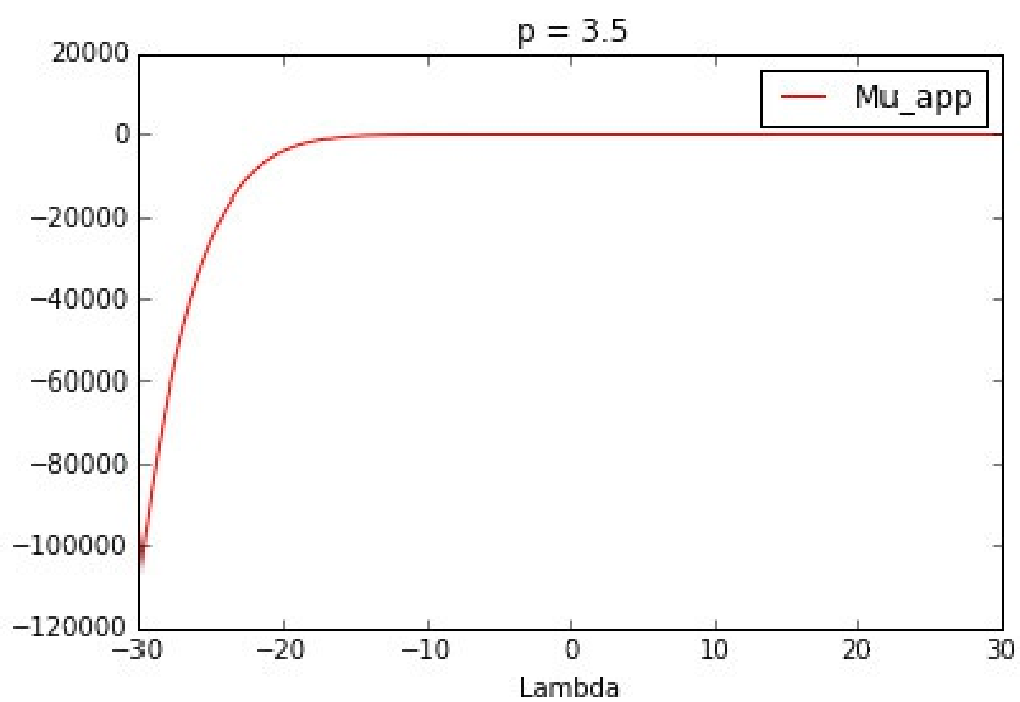


Figura 8: Gráfico da função $\lambda \rightarrow \mu_{app}(\lambda)$, caso $p = 3.0$

Figura 9: Gráfico da função $\lambda \rightarrow \mu_{app}(\lambda)$, caso $p = 3.5$

Apêndices

APÊNDICE A – Prova do Lema 2.1

Neste apêndice vamos provar o Lema 2.1. É claro que a função $\varphi_0(\xi) = \pi^{-1/4} \exp(-\xi^2/2)$ verifica a condição $\|\varphi_0\|_2^2 = 1$. É claro também que $L\varphi_0 = \varphi_0$. Portanto, φ_0 é autovetor de L associado ao autovalor $\mu = 1$. Além disso, retomando a prova do Teorema 2.1 no caso $\lambda = 0$, concluímos que existe $\phi_* \in \Sigma_1$, $\phi_* \neq 0$, tal que

$$\|\phi_*\|_X^2 = \min\{\|\phi\|_X^2; \phi \in \Sigma_1\}.$$

Pelo Teorema dos Multiplicadores de Lagrange, existe $\lambda_* \in \mathbb{R}$ tal que

$$-\phi_*''(\xi) + \xi^2\phi_*(\xi) = \lambda_*\phi_*(\xi), \quad \forall \xi \in \mathbb{R}.$$

Portanto, ϕ_* é autovetor de L correspondente ao valor λ_* . Observe que se multiplicarmos a equação acima por ϕ_* e integrarmos por partes em \mathbb{R} , obtemos

$$\|\phi_*\|_X^2 = \lambda_*$$

Assim, para concluir a prova do Lema, basta mostrar que $\phi_* = \varphi_0$, pois isso implica que $\lambda_* = 1$. Para isso, consideremos a equação $-\phi'' + \xi^2\phi = \mu\phi$, a qual pode ser re-escrita na forma

$$\phi'' + (2p + 1 - \xi^2)\phi = 0, \tag{A.1}$$

pela substituição $\mu = 2p + 1$. Considerando a mudança de variáveis $\psi(\xi) = \phi(\xi) \exp(\xi^2/2)$, a equação (A.1) se escreve na forma

$$\psi'' - 2\xi\psi' + 2p\psi = 0, \tag{A.2}$$

Sendo esta uma equação linear de segunda ordem de primeira espécie com coeficientes variáveis, podemos buscar soluções na forma de séries de potências:

$$\psi(x) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k x^k.$$

Substituindo formalmente a série de potências acima na equação (A.2), obtemos a seguinte recorrência para os coeficientes a_n :

$$a_{n+2} = -\frac{2(p-n)}{(n+1)(n+2)}a_n, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

Dessa fórmula de recorrência, obtém-se os coeficientes:

$$\begin{aligned} a_{2k} &= \frac{(-1)^k 2^k}{k!} p(p-2)(p-4) \cdots (p-2k) \\ a_{2k+1} &= \frac{(-1)^k 2^k}{k!} (p-1)(p-3) \cdots (p-2k-1) \end{aligned} \tag{A.3}$$

Assim, para cada $p \in \mathbb{R}$, temos duas soluções linearmente independentes (observe que se p é inteiro positivo, uma das soluções acima é polinomial):

$$\begin{aligned}\psi_{p,par}(\xi) &= \sum_{k=0}^{\infty} a_{2k} \xi^{2k}, \\ \psi_{p,impar}(\xi) &= \sum_{k=0}^{\infty} a_{2k+1} \xi^{2k+1},\end{aligned}\tag{A.4}$$

Desfazendo a mudança de variáveis e voltando à formulação original, obtemos soluções da forma

$$\phi_p(\xi) = \psi(\xi)_{p,par} \exp(-\xi^2/2), \quad \phi_p(\xi) = \psi(\xi)_{p,impar} \exp(-\xi^2/2)$$

Logo, se provarmos que as soluções ϕ acima estão em $L^2(\mathbb{R})$ se, e somente se, p é inteiro não-negativo, podemos concluir a prova, pois o primeiro autovalor de (A.1) corresponde à escolha $p = 0$, isto é, $\lambda_* = 1$.

Suponhamos então $p \in \mathbb{N}$. Neste caso.

$$\phi_p(\xi) = H_p(\xi) e^{-\xi^2/2},$$

onde H_p é um polinômio de grau p . Pela regra de L'Hôpital é fácil ver que

$$\lim_{|\xi| \rightarrow \infty} \frac{H_p(\xi)}{e^{\xi^2/2}} = 0.$$

Logo, existe $M > 0$ tal que $H_p(\xi) < e^{-\xi^2/2}$, para todo $|\xi| \geq M$, de modo que

$$\int_{\mathbb{R}} |\phi_p(\xi)|^2 d\xi < \int_{-M}^M |\phi_p(\xi)|^2 d\xi + \int_{|\xi| \geq M} e^{-\xi^2} d\xi < \infty.$$

Por outro lado, para mostrar que $p \notin \mathbb{N}$ implica $\phi_p \notin L^2(\mathbb{R})$, consideremos o caso par (o caso ímpar é análogo). Neste caso, $\psi_{p,par}(\xi)$ não é um polinômio. Temos então,

$$\psi_{p,par}(\xi) = a_0 - a_2 \xi^2 + a_4 \xi^4 - \dots, \quad e^{\xi^2/2} = b_0 + b_2 \xi^2 + b_4 \xi^4 + \dots,$$

onde

$$\begin{cases} a_{2k} &= \frac{(-1)^k 2^k}{k!} p(p-2)(p-4) \cdots (p-2k-2), \\ b_{2k} &= \frac{1}{2^k k!}. \end{cases}\tag{A.5}$$

Observando que

$$\alpha_k = \frac{a_{2k+2}}{a_{2k}} = -\frac{2(p-2k)}{(2k+1)(2k+2)}, \quad \beta_k = \frac{b_{2k+2}}{b_{2k}} = \frac{1}{2(k+1)},$$

vemos que $\alpha_k > 0$ se $2k > p$ e

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\alpha_k}{\beta_k} = 2.$$

Logo, existe $k_0 \in \mathbb{N}$ (que podemos supor maior que p), tal que $\alpha_k/\beta_k > 3/2$, para todo $k \geq k_0$. Portanto,

$$\frac{a_{2k_0+2n}}{b_{2k_0+2n}} > \left(\frac{3}{2}\right)^n \frac{a_{2k_0}}{b_{2k_0}}, \quad \forall n \in \mathbb{N}.$$

Assim, para algum $n_0 > 1$ temos

$$\frac{a_{2k_0+2n}}{b_{2k_0+2n}} > \left(\frac{3}{2}\right)^n \frac{a_{2k_0}}{b_{2k_0}} > 2, \quad \forall n \geq n_0. \quad (\text{A.6})$$

Denotando $N = k_0 + n_0$, podemos escrever

$$\psi_{p,par}(\xi) - e^{\xi^2/2}(\xi) = \sum_{k=0}^{N-1} (a_{2k} - b_{2k})x^{2k} + \sum_{k=N}^{\infty} (a_{2k} - b_{2k})x^{2k}.$$

De (A.6) segue da equação acima:

$$\psi_{p,par}(\xi) - e^{\xi^2/2}(\xi) > P_N(\xi) + \sum_{k=N}^{\infty} (b_{2k})x^{2k} = Q_N(\xi) + e^{\xi^2/2},$$

onde P_N e Q_N são polinômios de grau N . Portanto

$$\lim_{|\xi| \rightarrow \infty} \left(\psi_{p,par}(\xi) - e^{\xi^2/2}(\xi) \right) = +\infty,$$

o que implica que $\psi_{p,par}(\xi) > e^{\xi^2/2}(\xi)$ para $|\xi|$ suficientemente grande. Logo, $\phi_p(\xi) > 1$ para $|\xi|$ suficientemente grande, de onde se pode concluir que $\phi_p \notin L^2(\mathbb{R})$

APÊNDICE B – Compacidade da Imersão

$X \subset L^p(\mathbb{R})$

Vamos agora apresentar uma demonstração da compacidade da imersão $X \subset L^p(\mathbb{R})$, $p \geq 2$. Procedendo como em (??), para $0 \leq p < 4$, tome u uma função qualquer em X e $R > 0$, temos

$$\int_{|x| \geq R} |u(x)|^p dx \leq R^{-2} \leq R^{-2} \int_{|x| \geq R} |xu|^2 |u(x)|^{p-2} \leq R^{-2} \|u\|_X^2 \|u^{p-2}\|_\infty \quad (\text{B.1})$$

Tome agora $\{u_n\}_n$ sequência em X tal que $\|u_n\|_X < M$, $\forall n, x$. De (B.1) e da Desigualdade de Hölder

$$\begin{aligned} \int_{|x| \geq R} |u_n(x) - u_m(x)|^p dx &\leq 2^{p-1} (\|u_n\|_p^p + \|u_m\|_p^p) \\ &\leq 2^{p-1} R^{-2} (\|u_n\|_X^{2p} \|u_n^{p-2}\|_\infty^p + \|u_m\|_X^{2p} \|u_m^{p-2}\|_\infty^p) \\ &\leq \frac{2^{p-1} M^{2p}}{R^2} (\|u_n^{p-2}\|_\infty^p + \|u_m^{p-2}\|_\infty^p) =: R^{-2} C_1 \end{aligned}$$

Segue que

$$\int_{|x| \geq R} |u_n(x) - u_m(x)|^p dx \leq R^{-2} C_1 \quad (\text{B.2})$$

Por outro lado, do Teorema de Rellich–Kondrachov, temos que $H^1(|x| < R)$ é compactamente imerso em $L^p(|x| < R)$. Logo, como $X \subset H^1(\mathbb{R})$, e a restrição de u à Bola de raio R e centro em zero é uma função de $H^1(|x| < R)$, existe uma subsequência $\{u_{n_k}\}_k$ de $\{u_n\}_n$, tal que, $\forall \varepsilon > 0$, $\exists k_0$ tal que

$$\int_{|x| \leq R} |u_{n_k}(x) - u_{m_k}(x)|^p dx < \varepsilon, \quad \forall k > k_0 \quad (\text{B.3})$$

Assim, de (B.2) e (B.3), vemos que, $\forall \varepsilon > 0$ podemos escolher R e k suficientemente grandes, de forma que $\|u_{n_k} - u_{m_k}\|_p^p < \varepsilon$. Logo $\{u_{n_k}\}_k$ é sequência de Cauchy, e como $L^p(\mathbb{R})$ é espaço completo, temos que a sequência $\{u_{n_k}\}_k$ converge. Isso mostra a compacidade $X \subset L^p(\mathbb{R})$.

APÊNDICE C – Cálculo de Integrais Especiais

Neste Apêndice vamos mostrar que, se $\alpha \in \mathbb{R}$ e $c > 0$, valem as seguintes fórmulas:

$$\int_{\mathbb{R}} \exp(-c\xi^2) d\xi = \sqrt{\frac{\pi}{c}}, \quad \int_{\mathbb{R}} \xi^2 \exp(-c\xi^2) d\xi = \frac{1}{2c} \sqrt{\frac{\pi}{c}} \quad (\text{C.1})$$

e

$$\int_{\mathbb{R}} \cos^2(\alpha x) \exp(-cx^2) dx = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{c}} \left(1 + \exp\left(-\frac{\alpha^2}{c}\right) \right). \quad (\text{C.2})$$

Usando o Teorema de Fubini e coordenadas polares, obtemos

$$\begin{aligned} \left(\int_{\mathbb{R}} \exp(-c\xi^2) d\xi \right)^2 &= \iint_{\mathbb{R}^2} \exp(-c(x^2 + y^2)) dx dy \\ &= \int_0^{2\pi} \int_0^\infty e^{-cr^2} r dr d\theta = 2\pi \int_0^\infty e^{-cr^2} r dr = \frac{\pi}{c} \end{aligned}$$

Além disso, formalmente (veja [(??)] para a justificativa), temos:

$$\frac{d}{dc} \int_{\mathbb{R}} \exp(-c\xi^2) d\xi = \int_{\mathbb{R}} \frac{\partial}{\partial c} \exp(-c\xi^2) d\xi = - \int_{\mathbb{R}} \xi^2 \exp(-c\xi^2) d\xi.$$

Logo,

$$\int_{\mathbb{R}} \xi^2 \exp(-c\xi^2) d\xi = - \frac{d}{dc} \sqrt{\frac{\pi}{c}} = \frac{1}{2c} \sqrt{\frac{\pi}{c}}.$$

Para provar (C.2), observemos primeiramente que

$$\int_{\mathbb{R}} \cos^2(\alpha x) \exp(-cx^2) dx = \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}} \exp(-cx^2) dx + \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}} \cos(2\alpha x) \exp(-cx^2) dx. \quad (\text{C.3})$$

Como

$$\cos(2\alpha x) = \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \frac{(2\alpha x)^{2k}}{(2k)!}, \quad \forall x \in \mathbb{R},$$

temos

$$\int_{\mathbb{R}} \cos(2\alpha x) \exp(-cx^2) dx = \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \frac{(2\alpha)^{2k}}{(2k)!} \int_{\mathbb{R}} x^{2k} \exp(-cx^2) dx. \quad (\text{C.4})$$

Observe agora que

$$\frac{d^k}{dc^k} \exp(-cx^2) = (-1)^k x^{2k} \exp(-cx^2), \quad \forall x \in \mathbb{R}, \quad \forall c > 0,$$

de modo que

$$\frac{d^k}{dc^k} \int_{\mathbb{R}} \exp(-cx^2) dx = \int_{\mathbb{R}} \frac{\partial^k}{\partial c^k} \exp(-cx^2) dx = \int_{\mathbb{R}} (-1)^k x^{2k} \exp(-cx^2) dx.$$

Mas

$$\int_{\mathbb{R}} \exp(-cx^2) dx = \sqrt{\frac{\pi}{c}},$$

de modo que

$$\begin{aligned} \frac{d}{dc} \int_{\mathbb{R}} \exp(-cx^2) dx &= \sqrt{\pi} \left(\frac{1}{2}\right) c^{-3/2}, \\ \frac{d^2}{dc^2} \int_{\mathbb{R}} \exp(-cx^2) dx &= \sqrt{\pi} \left(\frac{3}{2^2}\right) c^{-5/2}, \\ \frac{d^3}{dc^3} \int_{\mathbb{R}} \exp(-cx^2) dx &= \sqrt{\pi} \left(\frac{3 \times 5}{2^3}\right) c^{-7/2}, \\ &\vdots \quad \quad \quad \vdots \quad \quad \quad \vdots, \\ \frac{d^k}{dc^k} \int_{\mathbb{R}} \exp(-cx^2) dx &= \sqrt{\pi} \left(\frac{3 \times 5 \times \dots \times (2k-1)}{2^k}\right) c^{-(2k+1)/2}. \end{aligned}$$

Multiplicando-se o numerador e o denominador na última expressão acima por

$$2 \times 4 \times \dots \times 2k = 2^k k!,$$

obtemos

$$\frac{3 \times 5 \times \dots \times (2k-1)}{2^k} = \frac{(2k)!}{2^{2k} k!}.$$

Logo

$$\int_{\mathbb{R}} x^{2k} \exp(-cx^2) dx = \sqrt{\pi} \frac{(2k)!}{2^{2k} k!} c^{-(2k+1)/2} = \sqrt{\frac{\pi}{c}} \left(\frac{(2k)!}{c^k 2^{2k} k!}\right).$$

Substituindo em (C.4) obtemos

$$\int_{\mathbb{R}} \cos(2\alpha x) \exp(-cx^2) dx = \sqrt{\frac{\pi}{c}} \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \frac{1}{k!} \left(\frac{\alpha^2}{c}\right)^k = \sqrt{\frac{\pi}{c}} \exp(-\alpha^2/c). \quad (\text{C.5})$$

De (C.3) e (C.5), obtemos finalmente

$$\int_{\mathbb{R}} \cos^2(\alpha x) \exp(-cx^2) dx = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{c}} \left(1 + \exp\left(-\frac{\alpha^2}{c}\right)\right),$$

como queríamos mostrar.

APÊNDICE D – Cálculo da expressão

$$\mu''_{app}(\lambda)$$

A partir das identidades (4.52) e (4.54), obtemos

$$\mu''_{app}(\lambda) = \frac{A_p p \sigma' \sigma^{\frac{p}{2}-1}}{2} (p+1) + \frac{\lambda p^2 A_p \sigma^{\frac{p}{2}-2}}{4} \left[\left(\frac{p}{2} - 1 \right) (\sigma)^2 + \sigma \sigma'' \right] \quad (D.1)$$

Para entendermos melhor o comportamento de μ_{app} faremos alguns calculos preliminares. Começemos reescrevendo $\sigma \sigma''$, utilizando (4.38) e (4.45)

$$\sigma \sigma'' = \frac{\left[(4-2p) B_p \sigma^{2-\frac{p}{2}} - \left(\frac{p}{2} + 2 \right) B_p^2 \lambda \right] \sigma' \sigma + \left(\frac{p}{2} + 2 \right) B_p^2 \sigma^2}{\left[4\sigma^{2-\frac{p}{2}} + \left(\frac{p}{2} + 2 \right) B_p \lambda \right]^2} \quad (D.2)$$

Ou seja,

$$\sigma \sigma'' = \frac{\left[\left(\frac{p}{2} + 2 \right) B_p^2 \lambda - (4-2p) B_p \sigma^{2-\frac{p}{2}} \right] (\sigma')^2}{4\sigma^{2-\frac{p}{2}} + \left(\frac{p}{2} + 2 \right) B_p \lambda} + \left(\frac{p}{2} + 2 \right) (\sigma')^2 \quad (D.3)$$

Utilizando (D.3) e reagrupando os termos, e lembrando (4.38), vemos que

$$\left(\frac{p}{2} - 1 \right) (\sigma')^2 + \sigma \sigma'' = -B_p \sigma' \sigma \frac{\left[(p+2) \left(\frac{p}{2} + 2 \right) B_p \lambda + \sigma^{2-\frac{p}{2}} 6p \right]}{\left[4\sigma^{2-\frac{p}{2}} + \left(\frac{p}{2} + 2 \right) B_p \lambda \right]^2} \quad (D.4)$$

Substituindo (D.4) em (D.1), e reordenando os termos, conseguimos

$$\begin{aligned} \mu''_{app}(\lambda) &= \\ &= \frac{A_p p \sigma' \sigma^{\frac{p}{2}-1} \left[(3p+4) B_p^2 \lambda^2 \left(\frac{p}{2} + 2 \right) + \lambda B_p \sigma^{2-\frac{p}{2}} (2p^2 + 40p + 32) + 32(p+1) \sigma^{4-p} \right]}{4 \left[4\sigma^{2-\frac{p}{2}} + \left(\frac{p}{2} + 2 \right) B_p \lambda \right]^2}. \end{aligned}$$

Referências

- 1 One-dimensional cubic-quintic Gross-Pitaevskii equation for Bose-Einstein condensates in a trap potential, Trallero-Giner, C., Cicolatti, R., Liew-Timothy, The European Physical Journal D, Vol. 67, No. 7, 1–7, 2013. Citado na página 3.
- 2 Bose-Einstein condensates in optical lattices: Mathematical analysis and analytical approximate formulae, Cicolatti, R., López Gondar, J., Trallero-Giner, C., Physica D: Nonlinear Phenomena, Vol. 241, No. 7 755–763, 2012. Citado 7 vezes nas páginas 8, 9, 3, 13, 14, 24 e 25.
- 3 On elliptic partial differential equation, Nirenberg, L., Springer, 2011. Citado na página 6.
- 4 Functional analysis, Sobolev spaces and partial differential equations, Brezis, H., Springer, 2011. Citado na página 7.
- 5 Encyclopedic dictionary of mathematics, Itô, K., MIT Press, Vol. 1, 1993, Citado na página 12.
- 6 Sur les fonctions convexes et les inégalités entre les valeurs moyennes, Jensen, J. L. W. V., Acta Mathematica, Vol. 30, No. 1, 175–193, 1906. Citado na página 12.
- 7 Implicit functions and their differentials in general analysis, Hildebrandt, T.H., Graves, L.M., Transactions of the American Mathematical Society, Vol. 29, No. 1, 127–153, 1927. Citado na página 21.
- 8 Nonlinear Functional Analysis and Its Applications: Fixed point theorems, Zeidler, E., 1985. Citado na página 21.
- 9 Formal analytical solutions for the Gross-Pitaevskii equation, Trallero-Giner, C. Drake-Perez, J. C., López-Richard, V., Birman, J. L., Physica D: Nonlinear Phenomena, Vol. 237, No. 18, 2342–2352, 2008. Citado na página 23.