

UFAL

INSTITUTO DE FÍSICA

PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM
FÍSICA

CONDENSAÇÃO DE BOSE-EINSTEIN EM CADEIAS COM ACOPLAMENTOS DE LONGO-ALCANCE

Delvis Bertrand Jorge de Barros

Universidade Federal de Alagoas

Campus A. C. Simões

Tabuleiro dos Martins

57.072-900 – Maceió - AL

Delvis Bertrand Jorge de Barros

**Condensação de Bose-Einstein em Cadeias com
Acoplamentos de Longo-Alcance**

Maceió

2014

Delvis Bertrand Jorge de Barros

Condensação de Bose-Einstein em Cadeias com Acoplamentos de Longo-Alcance

Dissertação de mestrado apresentada como parte das atividades para obtenção do título de mestre em Física da Matéria Condensada da Universidade Federal de Alagoas - UFAL, Instituto de Física.

Orientador:

Prof. Dr. Marcelo Leite Lyra

UNIVERSIDADE FEDERAL DE ALAGOAS

Maceió

2014

Catálogo na fonte
Universidade Federal de Alagoas
Biblioteca Central
Divisão de Tratamento Técnico
Bibliotecária Responsável: Dilma Maria dos Santos Cunha

B277c Barros, Delvis Bertrand Jorge de.
Condensação de Bose-Einstein em cadeias com acoplamentos de longo -
alcance / Delvis Bertrand Jorge de Barros. – 2014.
76 f. : il.

Orientador: Marcelo Leite Lyra.
Dissertação (Mestrado em Física) – Universidade Federal de Alagoas. Instituto
de Física. Maceió, 2014.

Bibliografia: f. 74-76.

1. Condensação de Bose - Einstein. 2. Transições de fase. 3. Dimensionalidade
efetiva. 4. Rede de ligação forte. 5. Escala de tamanhos finitos

CDU: 536.423.4



Universidade Federal de Alagoas

Instituto de Física

Programa de Pós Graduação em Física

BR 104 km 14. Campus A.C. Simões
Cidade Universitária
Tabuleiro dos Martins
57072-970 Maceió - AL, Brasil
FONE : (82) 3214-1423/FAX 3214-1645

**PARECER DA BANCA EXAMINADORA DE DEFESA DE
DISSERTAÇÃO DE MESTRADO**

***“Condensação de Bose-Einstein em Cadeias com
Acoplamentos de Longo-Alcance”.***

por

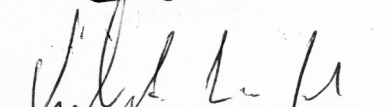
Delvis Bertrand Jorge de Barros

A Banca Examinadora composta pelos Marcelo Leite Lyra (orientador), do Instituto de Física da Universidade Federal de Alagoas, Francisco Anacleto Barros Fidelis de Moura, do Instituto de Física da Universidade Federal de Alagoas e Umberto Laino Fulco, do Departamento de Física da Universidade Federal do Rio Grande do Norte consideram o candidato aprovado com grau “A”.

Maceió, 20 de fevereiro de 2014


Prof. Dr. Marcelo Leite Lyra


Prof. Dr. Francisco Anacleto Barros Fidelis de Moura


Prof. Dr. Umberto Laino Fulco

AGRADECIMENTOS

Ao término deste trabalho, deixo aqui meus sinceros agradecimentos:

- à UFAL e à CAPES;
- ao professor Marcelo Leite Lyra, pela orientação e por me auxiliar nos questionamentos que tive ao decorrer do desenvolvimento desta dissertação;
- a todos os professores do Instituto de Física que tive contato durante o período do mestrado, por compartilharem de seus conhecimentos;
- à todos que direta ou indiretamente contribuíram para a realização deste trabalho;

RESUMO

Neste trabalho foram investigadas as propriedades críticas da transição de condensação de Bose-Einstein em um modelo de bósons não interagentes cujo hamiltoniano de uma partícula na aproximação de ligação forte (“tight-binding”) inclui acoplamentos de longo-alcance numa cadeia linear com condições periódicas de contorno. Os acoplamentos ao longo da cadeia são descritos por um termo cinético do hamiltoniano que é responsável pela mobilidade quântica das partículas (“quantum hopping”) e cuja amplitude decai com a distância entre dois sítios seguindo uma lei de potência com expoente característico α . Foi mostrado que a forma da densidade de estados no fundo da banda de energias possíveis para uma partícula depende fortemente de α . No regime de $1 < \alpha < 2$, a densidade de estados se anula no fundo da banda segundo uma lei de potência, um comportamento análogo ao apresentado por bósons em redes hipercúbicas de dimensão $d = 2/(\alpha - 1)$. Foram determinadas as propriedades críticas da transição de condensação de Bose-Einstein que ocorrem neste regime. Para isto, foi utilizada a hipótese de um único comprimento de escala e uma análise por tamanhos finitos do parâmetro de ordem, representado pela fração de partículas condensadas no estado fundamental. No regime de $3/2 < \alpha < 2$, os expoentes críticos estimados estão em bom acordo com aqueles que descrevem o comportamento crítico da transição em uma rede hipercúbica de dimensão equivalente. No regime $1 < \alpha < 3/2$, os expoentes obtidos através da hipótese de um único comprimento de escala são bastante distintos dos expoentes críticos em redes hipercúbicas. Este resultado indica que correções à hipótese de escala são necessárias para capturar corretamente os expoentes críticos neste regime, onde a dimensão efetiva do sistema é maior que a dimensão crítica acima da qual a transição tem um comportamento crítico descrito pela teoria de campo médio.

Palavras-chave: Condensação de Bose-Einstein. Transições de fase. Dimensionalidade Efetiva. Rede de Ligação Forte. Escala de Tamanhos Finitos.

ABSTRACT

In this work, we investigate the critical properties of the Bose-Einstein condensation transition in a model of non-interacting bosons whose one-particle hamiltonian in the tight-binding approximation includes long-range couplings in a linear chain with periodic boundary conditions. The couplings along the chain are described by a kinetic hopping term which is responsible by the quantum mobility of the particles and whose amplitude decays with the distance between the sites as a power-law with a characteristic exponent α . We show that the density of states in the vicinity of the lower band edge of the energy spectrum strongly depends on α . In the regime of $1 < \alpha < 2$, the density of states vanishes as a power-law, similar to the behavior found for bosons in hypercubic lattices with dimension $d = 2/(\alpha - 1)$. We determine the critical properties of the Bose-Einstein condensation transition that takes place in this regime using a hypothesis of a single characteristic length scale and a finite-size scaling analysis. In the regime of $3/2 < \alpha < 2$, the critical exponents are quite similar to those that characterize the transition in the corresponding hypercubic lattice. On the other hand, in the regime of $1 < \alpha < 3/2$, the exponents obtained from the single length scale hypothesis are quite distinct from those on the hypercubic lattice. This result indicates that the single length scale hypothesis can not correctly capture the critical exponents in the regime where the effective dimensionality of the model is above the upper critical dimension above which the transition has a mean-field critical behavior.

Key-words: Bose-Einstein Condensation. Phase Transitions. Effective Dimensionality. Tight-binding Network. Finite-size Scaling.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – Colisão de partículas clássicas.....	14
Figura 2 – Colisão de partículas quânticas.	17
Figura 3 – Células de energia	24
Figura 4 – Célula de bósons	24
Figura 5 – fugacidade do gás de bósons.....	41
Figura 6 – ρ_0 vs. $k_B T$	65
Figura 7 – ρ_0 vs. $k_B T$, $N = 512000$	65
Figura 8 – $\frac{\ln \frac{\rho_0}{(M)}}{\ln \frac{N}{M}}$ vs. $k_B T$	66
Figura 9 – $\frac{\zeta}{v}$	66
Figura 10 – $\frac{\zeta}{v}$ vs. α	67
Figura 11 – $\frac{1}{v}$	67
Figura 12 – v vs. α	68
Figura 13 – $\frac{c_V}{k_B}$, para $N = 512000$	71
Figura 14 – Colapso de dados.	71
Figura 15 – T_c vs. α	72
Figura 16 – d_{eff} vs. T_c	72

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	8
1.1	O Quinto Estado da Matéria	9
1.1.1	Realizações físicas	11
1.2	Efeitos da Dimensionalidade na BEC	12
1.3	Interações de Longo Alcance e Dimensão Efetiva	12
2	A ESTATÍSTICA DAS PARTÍCULAS IDÊNTICAS	14
2.1	Conceitos de Mecânica Quântica	15
2.2	Partículas Idênticas no Contexto Quântico	17
2.3	Operador Densidade	19
2.4	O ensemble microcanônico	21
2.5	O ensemble grande-canônico	27
2.6	Segunda Quantização e o Método dos Campos Quantizados	33
3	O CONDENSADO DE BOSE-EINSTEIN	38
3.1	Quebra de Simetria e Parâmetro de Ordem	43
3.2	Dimensionalidade e Expoentes Críticos	50
4	A BEC EM UMA REDE DE LIGAÇÃO FORTE COM ACOPLAMENTOS DE LONGO ALCANCE	61
4.1	Escala de Tamanhos Finitos	63
4.2	Resultados Obtidos	64
5	CONSIDERAÇÕES FINAIS	73
	REFERÊNCIAS	75

1 INTRODUÇÃO

É bem sabido que os átomos, apesar de conterem uma estrutura interna divisível, podem ser encarados como unidades gerais da matéria. Os chamados *estados fundamentais da matéria* podem ser descritos em função da temperatura do sistema.

Em altas temperaturas, a energia térmica de uma estrutura atômica pode ser tão grande, que chega a se aproximar ou até exceder a energia eletromagnética que une o núcleo do átomo à sua nuvem eletrônica. Isso pode fazer com que muitos elétrons sejam, por assim dizer, arrancados de suas posições relativas ao núcleo. O sistema passa a ter íons carregados positivamente, juntamente com os elétrons “arrancados”. No entanto, estes não estão livres. O campo eletromagnético ainda atua consideravelmente no sistema. Este enfrentamento entre as duas energias em consideração permite ao conjunto (elétrons + íons) efetuar movimentos coletivos de grande vigor e complexidade. Conjuntos assim são denominados de *plasma*.

É estimado que entre 95% e 99% da matéria bariônica (constituída por bárions, partículas convencionais, ou seja, prótons, nêutrons e elétrons) se encontra na forma de plasma. É possível encontrá-lo em estrelas, nebulosas e no espaço interestelar. O *vento solar*, responsável, entre outras coisas, pelo conhecido fenômeno das *auroras polares* (boreal e austral) é um exemplo de plasma que permeia todo o sistema solar. É possível até mesmo verificar este estado da matéria em lâmpadas fluorescentes, cujo princípio de funcionamento envolve a ionização do gás existente no interior das mesmas.

Em temperaturas menores do que a temperatura mínima para a formação do plasma, mas com energias térmicas superiores a energia de ligação interatômica, os átomos podem novamente ser tratados como unidades de partícula. Nesta configuração, estes possuem uma intensa dinâmica, o que implica em um alto nível de colisão entre os mesmos. Quanto menor a temperatura, menor será o nível de colisão existente. Isto pode implicar em uma diminuição do espaço onde um conjunto de átomos nestas condições se situa (o *volume* diminui). Se este conjunto estiver confinado em um recipiente fechado, por exemplo, o nível de colisões entre os átomos e as paredes do recipiente também passará a diminuir (a *pressão* diminui). As características descritas acima são as que definem o que macroscopicamente é denominado *gás*.

Exemplos de gases mais comuns na natureza são aqueles que permanecem neste estado a temperatura ambiente, como o hidrogênio, o oxigênio e o nitrogênio, facilmente encontrados na atmosfera.

Em níveis ainda menores de temperatura, a energia de ligação interatômica (ou intermolecular) se torna mais intensa. Os átomos (ou moléculas) passam a se agregar uns aos outros, mas ainda possuem dinâmica individual. Isto resulta em uma grande diminuição do volume e

consequente aumento da densidade da quantidade de matéria em análise. Esta configuração é conhecida macroscopicamente como *líquido*.

Os líquidos possuem propriedades interessantes. Em uma certa quantidade de líquido de um átomo ou molécula (a água, por exemplo), os elementos dispostos em sua superfície são atraídos ao interior do líquido. Isso minimiza a sua área superficial. Esta interação específica resulta na chamada *tensão superficial*. Além disso, quanto menor a temperatura, mais lentamente os elementos do líquido passam a se mover, o que acarreta na diminuição da chamada *fluidéz* do líquido.

Diminuindo ainda mais a temperatura, a dinâmica individual é reduzida, de modo que os elementos da amostra em análise começam a se unir uns aos outros, como uma grande rede. Assim, cada elemento possui uma posição relativa específica, que depende das posições específicas de cada um dos elementos contidos na amostra. Esta configuração é característica do que é chamado macroscopicamente de *sólido*.

Muitas vezes, estas posições seguem um nível de periodicidade. Quando isso acontece, o sólido também pode ser chamado de *crystal*. Os metais e os semi-condutores, por exemplo, são sólidos cristalinos em amplo estudo, por serem bastante úteis e necessários na indústria e na área da informática.

Em níveis menores de temperatura, próximos do zero absoluto, os átomos tendem a ter uma dinâmica praticamente nula. Para uma certa classe de partícula, chamada de *bóson*, estas condições podem acarretar em uma nova mudança de estado. Esta será descrita a seguir.

1.1 O Quinto Estado da Matéria

Nos primórdios da chamada Mecânica Quântica, Planck [1] propôs que a energia de radiação da luz ε está diretamente relacionada à sua frequência ν pela seguinte relação,

$$\varepsilon = h \cdot \nu, \quad (1.1)$$

onde

$$h = 1,346 \cdot 10^{-16} \text{ erg/grad}, \quad (1.2)$$

é uma constante universal, conhecida hoje como *constante de Planck*. Anos depois, Bose [2] propôs que esta descoberta poderia também ser explicada nos moldes da chamada Mecânica Estatística. Para isto, foi considerado que a energia presente em um sistema pode aumentar ou diminuir de modo discreto, através dos *quanta*, ou “pacotes” de energia. Assim foi proposto que, se existe radiação confinada em um dado volume V e sua energia total é E , esta pode ser

definida pela soma de todos os pacotes, em todas as frequências existentes dentro deste volume. No caso de, antes da análise, este volume absorver todos os comprimentos de onda existentes (o que é conhecido na literatura como “corpo negro”) a energia pode ser definida por

$$E = \sum_{s=0}^{\infty} N_s h \nu_s, \quad (1.3)$$

onde N_s é o número de pacotes de energia existentes no volume que possuem frequência ν_s . Pouco tempo depois, Einstein [3, 4] se utilizou dos conceitos estabelecidos por Bose e os aplicou no caso de um gás ideal. O segundo trabalho citado acima concluiu que, para uma dada temperatura, existe uma densidade máxima de moléculas que podem estar em agitação. Se esta densidade for excedida, as moléculas em excesso passarão a entrar em um estado sem movimento – uma “condensação” por assim dizer. Com a diminuição da temperatura, há um consequente aumento de partículas migrando para o estado de mais baixa energia do sistema. Isto implica em uma mudança considerável em suas propriedades termodinâmicas, o que caracteriza uma transição de fase. Esta passou a ser conhecida como *condensação de Bose-Einstein* (*Bose-Einstein Condensation*, BEC).

Mais de meio século após a teoria, Anderson et al. [5] conseguiram reproduzir o fenômeno em laboratório, em uma certa quantidade de vapor de átomos de Rubídio-87 confinados por campos magnéticos e resfriados a uma temperatura de cerca de 170 nK. Nestas condições, foi possível observar a BEC e a fase resultante do processo – o *condensado de Bose-Einstein*. Pouco tempo depois, Davis et al. [6] também conseguiram efetuar a BEC, mas desta vez em átomos de sódio e a uma temperatura ainda menor (aproximadamente 2 μ K). Este experimento rendeu aos pesquisadores envolvidos nos dois trabalhos um Prêmio Nobel de Física [7].

Uma explicação razoável sobre que acontece na BEC pode ser observada ao se analisar o chamado *princípio de incerteza de Heisenberg*. Este diz que quanto maior a precisão da posição de uma dada partícula, menor a precisão do seu comprimento de onda, e vice-versa. Assim, para que seja possível discriminar a posição exata das partículas de um sistema, é necessário que a distância mínima entre estas seja maior do que o comprimento de onda de suas vibrações térmicas. A medida que a temperatura diminui, as vibrações também diminuem e, consequentemente, seu comprimento de onda aumenta. A temperaturas muito baixas, este comprimento chega a um nível que elimina, por assim dizer, a definição da posição das partículas. Isto faz com que seja possível apenas se observar uma superposição de ondas, em que cada uma destas ondas corresponde a uma partícula. Chegando a uma temperatura muito próxima do zero absoluto, as partículas em análise passam a estar no mais baixo nível de energia, com um correspondente comprimento de onda máximo permitido. Assim, o sistema se encontra em ressonância. Não há mais a definição deste sistema como um conjunto de partículas. O que se observa é um sistema

cuja densidade é representada por uma onda macroscópica relativa ao estado fundamental de energia do mesmo. Esta configuração do sistema é exatamente o condensado de Bose-Einstein.

Existe algo importante nesta consideração que não pode ser ignorado. Nem todas as partículas existentes na natureza podem possuir o mesmo nível energético de forma simultânea. Assim, para que a BEC possa ser efetivamente obtida, é necessário que o sistema possa efetivamente entrar em ressonância. Partículas que permitem esta configuração são chamados de *bósons*, enquanto as que não permitem, de *férmions*. Estas serão analisadas com mais detalhes posteriormente neste trabalho.

1.1.1 Realizações físicas

Pouco tempo depois da sua concepção, alguns fenômenos foram descobertos e associados ao condensado de Bose-Einstein. Onnes [8] analisou propriedades físicas do mercúrio puro. Ele constatou, entre outras coisas, que

“A temperaturas muito baixas, tais como as obtidas pela evaporação do hélio sob pressão reduzida, a resistência [elétrica] se tornaria, nos limites da precisão experimental, nula.”

Este fenômeno passou a ser conhecido como *supercondutividade*.

Anos depois, Cooper [9] sugeriu que, devido a ação de vibrações da rede cristalina que forma um supercondutor dado (fônons) e ao campo eletromagnético existente, pares de elétrons passam a possuir uma ligação líquida. Isto ocorre mesmo com o efeito repulsivo do campo intrínseco a cada elétron. Por conta disso, estes pares foram denominados *pares de Cooper*.

Posteriormente, foi sugerido [10] que a interação dos fônons, na realidade, agiria sobre toda a rede de elétrons. Assim, elétrons livres estariam dispostos como pares de Cooper. Quando isto ocorre, há uma redução na energia de cada elétron em um par. Esta energia não é suficiente para formar um pacote. Não seria possível transferir energia dos elétrons livres para os átomos da rede nas possíveis colisões. Em termos simples, não haveriam colisões. O material seria então supercondutor. Esta teoria, conhecida como Teoria BCS, rendeu a seus autores o Prêmio Nobel de 1972 [11].

Algo interessante que foi observado nos estudos acima citados, é que os pares de Cooper, quando analisados em conjunto, possuem algumas propriedades inerentes aos bósons. De fato, para baixas temperaturas, uma quantidade finita de pares de Cooper em um dado sistema cai para o menor estado energético de forma simultânea, se comportando como um condensado de Bose-Einstein.

Um outro fenômeno associado ao condensado foi observado por Kaptza [12]. Em seu estudo, foi analisado uma quantidade de hélio líquido (He^4) a baixas temperaturas. Foi notado que, quando este fluido é resfriado a uma determinada temperatura, sua viscosidade sofre uma queda abrupta. Por conta deste fato, em analogia ao fenômeno da supercondutividade, o estado resultante foi denominado *superfluides*.

Não existe ainda uma explicação teórica conclusiva para explicar o comportamento dos superfluidos, mas estudos, como os de Tisza [13] e Sears et al. [14] comprovaram similaridades entre a transição de fase líquido–superfluido e a BEC. Além disso, Penrose e Onsager [15] estimaram que uma fração finita do He^4 possuía momento nulo. Isto sugere que a superfluides seja, de fato, uma manifestação que acompanha a condensação de Bose-Einstein.

1.2 Efeitos da Dimensionalidade na BEC

Existe uma importante relação entre a existência do condensado de Bose-Einstein e a dimensão do sistema ao qual este pode vir a existir. Em certos sistemas termodinâmicos, a transição de fase é caracterizada por uma “quebra de simetria espontânea” de uma de suas quantidades termodinâmicas. Como já foi observado na literatura [16, 17], isto é possível *apenas* quando a dimensão do sistema é maior do que 2. Para um gás ideal de bósons, como será observado neste estudo, estas características são válidas.

Nas proximidades das transições de fase em vários sistemas, as quantidades termodinâmicas são regidas pelos chamados *expoentes críticos*. Além disso, existe, nesta região, uma dependência destas quantidades com o tamanho do sistema. A *hipótese de escala* aborda relações entre estas variáveis. Basicamente, estas relações, conhecidas como *leis de escala*, podem depender, ou não, da dimensionalidade do sistema. Já se observou [18] que, para dimensões maiores do que 4, as relações que dependem da dimensionalidade não obedecem diretamente as relações já amplamente conhecidas para o caso da BEC. Este problema foi solucionado por se efetuar determinadas considerações ao sistema, neste regime. Assim, existe uma diferença no comportamento da transição para o condensado de Bose-Einstein quando a dimensão do sistema está entre 2 e 4 e quando esta é maior do que 4.

1.3 Interações de Longo Alcance e Dimensão Efetiva

Um sistema pode ser avaliado pela sua topologia e pela interação existente entre os seus elementos. Se um dado elemento do sistema interage apenas com elementos nas proximidades, o sistema possui uma *interação de curto alcance*. Já a *interação de longo alcance* se dá quando elementos do sistema conseguem interagir, mesmo a longas distâncias.

Algo relevante ocorre, no que diz respeito a dimensionalidade destes dois tipos de sistema. Existem muitas definições possíveis para a dimensão de um sistema físico. Uma destas está relacionada a forma como a energia total depende de sua dimensão linear. Em sistemas com interações de curto alcance, esta dimensão coincide com a dimensão topológica da rede. Entretanto, em sistemas com interações de longo alcance estas duas quantidades podem ser bastante distintas e, portanto, o alcance efetivo das interações pode influenciar no comportamento crítico do sistema.

Este trabalho tem como objetivo analisar o comportamento da BEC em um sistema onde o Hamiltoniano de uma partícula contém termos de longo alcance que decaem com uma potência da distância. O expoente que caracteriza a lei de decaimento dos acoplamentos de longo alcance permite variar a dimensão efetiva associada à lei de escala da energia do sistema. Serão desenvolvidos cálculos analíticos e numéricos para caracterizar a transição de Condensação de Bose-Einstein neste modelo. Além disso, será determinada a dependência dos expoentes críticos que governam o comportamento de escala de algumas quantidades físicas relevantes em função do alcance dos acoplamentos de longo alcance.

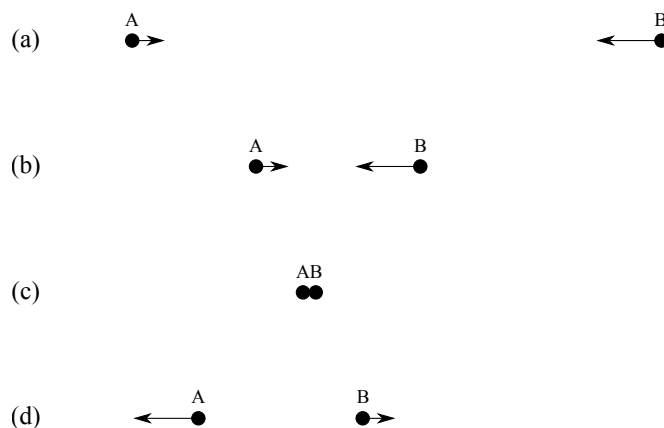
Este trabalho está organizado da seguinte forma: No capítulo seguinte serão revisadas as principais características de sistemas quânticos de partículas idênticas. O capítulo 3 será destinado a uma descrição detalhada do fenômeno da transição de Bose-Einstein em um gás ideal em três dimensões, como também da dependência dos expoentes críticos com a dimensão topológica do sistema. O capítulo 4 constitui a contribuição inédita desta dissertação, onde serão determinadas as propriedades críticas da transição de condensação de Bose-Einstein em um sistema onde o Hamiltoniano de uma partícula pode ser representado no limite de forte ligação (“tight-binding”). Será considerado um sistema de dimensão topológica unitária, mas com um termo cinético de longo alcance que decai com uma potência da distância. Uma análise de escala de tamanhos finitos será analisada, a fim de caracterizar o comportamento crítico associado com a transição de condensação que ocorre para acoplamentos suficientemente longos.

2 A ESTATÍSTICA DAS PARTÍCULAS IDÊNTICAS

Durante grande parte da história da Física como ciência, a *Mecânica Clássica* foi utilizada para descrever a natureza de maneira analítica. Segundo a linha de raciocínio defendida por este estudo, seria possível definir precisamente todas as características mecânicas de uma dada partícula, quer seja esta isolada, quer sendo parte de um sistema. Isto seria possível através da medição de seis parâmetros, a saber, suas posições e seus momentos nas três dimensões do espaço. A obtenção destes parâmetros poderia ser obtida em qualquer instante de tempo. O ato de medir em si não influenciaria em nada na precisão destes parâmetros.

Note um exemplo simples de uso da Mecânica Clássica: um sistema de duas partículas idênticas. Suponha que existam duas partículas *A* e *B* exatamente iguais, feitas do mesmo material. Num tempo inicial dado, estas partículas são definidas pelos parâmetros iniciais $\{\vec{r}_{A0}, \vec{p}_{A0}\}$ e $\{\vec{r}_{B0}, \vec{p}_{B0}\}$, respectivamente. Supondo, por exemplo, que estes parâmetros indiquem uma colisão entre as partículas, é possível descrever com precisão onde cada uma destas estará situada no espaço antes, durante e depois da colisão (Figura 1).

Figura 1: Exemplo de uma colisão de duas partículas idênticas, do ponto de vista da Mecânica Clássica. (a) corresponde a medida feita no tempo inicial, enquanto que (b), (c) e (d) correspondem a medidas em momentos antes, durante e depois da colisão.



Fonte: Ilustrado pelo autor.

Com este nível de precisão, a teoria clássica se mostrou aceitável para descrever a dinâmica das partículas e dos corpos, e ainda é assim para fenômenos macroscópicos. No entanto, no início do século XX, com estudos que envolviam entidades de natureza microscópica, como a luz e o átomo, isto mudou. Não era possível descrever posição e momento de uma partícula no mundo microscópico, se fosse utilizada a base teórica existente na época. Estava então armado o cenário para o surgimento de uma nova e revolucionária concepção analítica da natureza – a *Mecânica Quântica*. Para isto, conceitos matemáticos sofisticados foram criados. Estes, juntamente com seus paradigmas básicos, serão apresentados a seguir.

2.1 Conceitos de Mecânica Quântica

Nos termos da Mecânica Clássica, é possível prever o comportamento de uma partícula em qualquer instante de tempo, se forem observados os parâmetros de todos os elementos do sistema. Na Mecânica Quântica, isto não é assim. É possível que uma dada partícula possa vir a estar situada em qualquer lugar do espaço, com qualquer momento. No entanto, é possível estimar as probabilidades relativas a estes parâmetros. Assim, a probabilidade de um dado parâmetro n (posição ou momento) estar situado entre os valores a e b é dada por¹

$$P([a, b]) = \int_a^b P(n)dn. \quad (2.1)$$

Neste momento, é necessário que se defina uma importante grandeza, a *amplitude de probabilidade*, que é basicamente um número complexo definido como sendo igual ao módulo quadrado de $P(n)$. Dirac [19] estabeleceu uma notação especial para manipular esta grandeza – a chamada *notação bra-ket* (ou *notação de Dirac*). De modo que a amplitude de probabilidade neste caso é escrita, nesta notação, como

$$\langle n | \psi \rangle, \quad (2.2)$$

onde $|\psi\rangle$ corresponde ao estado inicial da partícula e $|n\rangle$ corresponde ao estado final, onde a partícula possuirá o parâmetro dado igual a n . Juntamente com o que foi exposto acima, é possível definir, nos termos da notação de Dirac, que

$$P(n) \equiv |\langle n | \psi \rangle|^2 = \langle n | \psi \rangle \langle n | \psi \rangle^*. \quad (2.3)$$

Sabe-se que, dada uma probabilidade P_i de um evento i ocorrer em um sistema, a soma de todas as probabilidades possíveis relacionadas a este sistema é dada por

$$\sum_{i=1}^N P_i = 1. \quad (2.4)$$

Para um contínuo de probabilidades, o somatório é substituído por uma integral. Assim

$$\int_{-\infty}^{\infty} P(n)dn = 1. \quad (2.5)$$

Utilizando a definição da eq. (2.3), nota-se que

$$\int_{-\infty}^{\infty} \langle n | \psi \rangle \langle n | \psi \rangle^* dn = 1. \quad (2.6)$$

¹Este estudo não tem como foco a análise da evolução temporal de um sistema quântico e, portanto, serão estudados exemplos do comportamento de sistemas num dado tempo específico.

Suponha que uma partícula no estado $|\psi\rangle$ possa se deslocar para o estado $|\varphi\rangle$, mas antes, esta possa passar por um estado $|n\rangle$ de parâmetro n qualquer. A amplitude de probabilidade ϕ_1 desta partícula passar por um estado $|a\rangle$ ou por um estado $|b\rangle$ é dada pela soma das amplitudes, ou seja

$$\phi_1 = \langle a|\psi\rangle + \langle b|\psi\rangle. \quad (2.7)$$

Note que as duas possibilidades tem o mesmo comportamento final – a partícula chega ao estado $|\varphi\rangle$ – ou seja, estas possuem *estados finais indistinguíveis*. Do contrário, seria necessário que se somasse as suas probabilidades, e não suas amplitudes. Além disso, a amplitude de probabilidade ϕ_2 desta partícula passar por um estado $|n\rangle$ e chegar ao estado $|\varphi\rangle$ é dada pelo produto

$$\phi_2 = \langle \varphi|n\rangle \langle n|\psi\rangle. \quad (2.8)$$

Assim, a amplitude de probabilidade de uma partícula sair do estado $|\psi\rangle$ para o estado $|\varphi\rangle$, independente do estado intermediário, é dado por

$$\langle \varphi|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \langle \varphi|n\rangle \langle n|\psi\rangle dn. \quad (2.9)$$

Se o estado final for igual ao inicial, a amplitude é dada por

$$\langle \psi|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \langle \psi|n\rangle \langle n|\psi\rangle dn. \quad (2.10)$$

Nesta situação, o estado final já é conhecido, por ser justamente o estado inicial. Observou-se, através de vários experimentos como, a título de exemplo, o experimento feito por Gerlach e Stern [20], que

$$\langle \psi|\psi\rangle = 1. \quad (2.11)$$

Assim, relacionando as duas últimas equações com a eq. (2.6), é possível concluir que

$$\langle \psi|\varphi\rangle = \langle \varphi|\psi\rangle^*. \quad (2.12)$$

Na eq. (2.10), é possível observar características de um produto vetorial na amplitude de probabilidades. Este é um dos fatores que torna possível que um dado estado possa ser tratado como um vetor na Mecânica Quântica. Este estado passará então a ser chamado, neste estudo, de *vetor de estado*. Além disso, como $\langle n|\psi\rangle$ depende de n , que pode ter qualquer valor real, é possível encarar a amplitude de probabilidade, neste caso, como uma função. Assim, se define

$$\psi(n) \equiv \langle n|\psi\rangle, \quad (2.13)$$

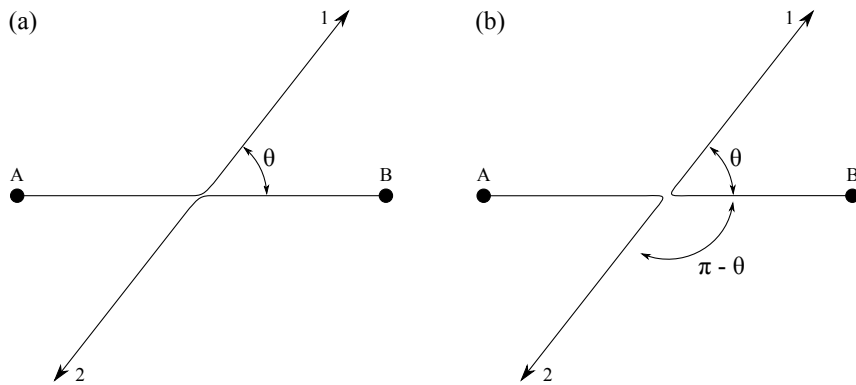
onde $\psi(n)$ é conhecida como *função de onda*, por geralmente poder ser representada por uma

função que descreve uma onda complexa.

2.2 Partículas Idênticas no Contexto Quântico

Agora é possível, nos termos da Mecânica Quântica, analisar o problema descrito no início deste capítulo. Sejam duas partículas idênticas, do ponto de vista quântico, A e B espalhadas afim de que colidam entre si². Considerando que o espalhamento de partículas seja independente do ângulo polar ϕ , após a colisão, estas se afastarão em direções opostas 1 e 2, com um ângulos azimutais θ e $\pi - \theta$. Como as partículas são indistinguíveis, existe duas situações em que uma configuração como esta é possível, conforme se nota na figura 2.

Figura 2: Exemplo de uma colisão de duas partículas idênticas, do ponto de vista da Mecânica Quântica.



Fonte: Adaptado de [21]

Seja a amplitude de probabilidade da primeira situação $f(\theta)$, e da segunda, $e^{i\delta}f(\pi - \theta)$. A exponencial é um fator de fase arbitrário, que não influencia em nada na probabilidade, se esta última amplitude fosse considerada isoladamente. A amplitude total será então a soma das amplitudes das duas situações. O fator de fase se torna importante agora, e a indistinguilidade das partículas ajuda na determinação do valor deste. O mesmo fator de fase que permutaria as partículas de posição as permutaria de volta as suas posições originais. Isto é conhecido como *simetria de permutação*. Como consequência, se duas aplicações do fator de fase resgam a situação inicial, então

$$\begin{aligned} e^{2i\delta} &= 1 \\ e^{i\delta} &= \pm 1. \end{aligned} \quad (2.14)$$

Utilizando a notação de Dirac para as amplitudes analisadas e com os resultados encontrados

²Note que, se estas partículas forem eletrizadas (dois elétrons, por exemplo), não haverá uma efetiva colisão, devido às interações coulombianas.

acima, duas possíveis amplitudes de probabilidade totais podem ser encontradas. São estas

$$\langle 1|a\rangle\langle 2|b\rangle + \langle 1|b\rangle\langle 2|a\rangle \quad (2.15)$$

$$\langle 1|a\rangle\langle 2|b\rangle - \langle 1|b\rangle\langle 2|a\rangle. \quad (2.16)$$

Como a determinação do fator de fase não tem relação com a trajetória das partículas, nem com o ângulo que estas fazem entre si após a colisão, este resultado é válido para quaisquer configurações iniciais.

Na natureza, existem duas classes de partículas, que obedecem cada uma das duas amplitudes de probabilidade observadas acima. As que obedecem a eq. (2.15) são chamadas de *bósons*, enquanto que as que obedecem a eq. (2.16) são chamadas de *férmions*. Como exemplo, entre as partículas elementares, os elétrons, os neutrinos e os bárions são férmions, enquanto que os fótons e os mésons são bósons.

Um fator interessante sobre o comportamento destes dois tipos de partículas é observado para o caso de uma colisão onde os estados finais são iguais. Para o caso dos bósons, se $|1\rangle = |2\rangle$, a amplitude total é

$$\langle 1|a\rangle\langle 1|b\rangle + \langle 1|b\rangle\langle 1|a\rangle = 2\langle 1|a\rangle\langle 1|b\rangle. \quad (2.17)$$

Existe então uma probabilidade em que os dois bósons ocupam o mesmo estado. Se este procedimento fosse feito com mais partículas, seria possível observar que a amplitude final seria análoga. Assim, a conclusão disso é que *dois ou mais bósons podem ocupar um mesmo estado*.

No caso dos férmions, à mesma situação, a amplitude total é

$$\langle 1|a\rangle\langle 1|b\rangle - \langle 1|b\rangle\langle 1|a\rangle = 0. \quad (2.18)$$

Neste caso, *não é possível que dois férmions ocupem um mesmo estado*. Este fato foi observado por Pauli [22] e é uma consequência do chamado *princípio de exclusão de Pauli*.

Com as classes de partículas já definidas, surge uma questão: como observar o comportamento de uma grande quantidade de bósons, ou de férmions? Essa é uma das questões que a Mecânica Estatística se propõe a responder. Para isso, alguns conceitos devem ser definidos.

2.3 Operador Densidade

Uma função de onda $\psi(x)$ pode ser expressa como uma superposição linear de um conjunto completo de funções de onda ortonormais $\{\phi_n(x)\}$, ou seja,

$$\psi(x) = \langle x|\psi\rangle = \sum_n \langle x|\phi_n\rangle \langle \phi_n|\psi\rangle = \sum_n c_n \phi_n(x), \quad (2.19)$$

onde c_n é uma função real dependente do tempo, que representa a projeção da função de onda em uma das funções de onda do conjunto. Num conjunto de partículas, conhecido na Mecânica Estatística como *ensemble*, cada uma das partículas pode apresentar diferentes estados iniciais $\{|\Psi_m\rangle\}$. Esses estados também podem ser descritos como superposições do conjunto $\{\phi_n\}$.

Na Mecânica Quântica, grandezas como energia e entropia são representadas por operadores e são conhecidas como *observáveis*. Estes possuem um conjunto de valores permitidos, que são representados matematicamente pelos autovalores do operador associado. O índice n na eq. (2.19) tem como limite a quantidade total de valores permitidos do observável em consideração. Obviamente, um observável A tem como autovetores os membros do conjunto $\{\phi_n\}$. Assim

$$A|\phi_n\rangle = a_n|\phi_n\rangle. \quad (2.20)$$

O valor esperado de A , ou seja, o resultado médio de um grande número de medições do observável, em um instante de tempo dado, pode ser descrito por

$$\sum_n a_n P(a_n), \quad (2.21)$$

onde

$$P(a_n) = |\langle \phi_n|\psi\rangle|^2 \quad (2.22)$$

é a probabilidade de A ter ϕ_n como autovalor. Assim

$$\begin{aligned} \sum_n a_n |\langle \phi_n|\psi\rangle|^2 &= \sum_n \langle \psi|\phi_n\rangle a_n \langle \phi_n|\psi\rangle \\ &= \sum_n \langle \psi|A|\phi_n\rangle \langle \phi_n|\psi\rangle \\ &= \langle \psi|A|\psi\rangle \\ &= \sum_n \sum_m \langle \psi|\phi_n\rangle \langle \phi_n|A|\phi_m\rangle \langle \phi_m|\psi\rangle \\ &= \sum_n \sum_m \langle \phi_m|\psi\rangle \langle \psi|\phi_n\rangle \langle \phi_n|A|\phi_m\rangle \\ &= \sum_n \sum_m \langle \phi_m|\phi_n\rangle \langle \phi_n|A|\phi_m\rangle. \end{aligned} \quad (2.23)$$

Como uma medição em laboratório não pode ser efetuada instantaneamente, mas sim

em um determinado espaço de tempo, o valor esperado $\langle A \rangle$ da medição é dado pela média temporal do resultado acima, ou seja

$$\langle A \rangle = \sum_n \sum_m \overline{\langle \phi_m | \phi_n \rangle} \langle \phi_n | A | \phi_m \rangle. \quad (2.24)$$

Definindo $\rho_{mn} \equiv \overline{\langle \phi_m | \phi_n \rangle}$ e reescrevendo a equação acima,

$$\begin{aligned} \langle A \rangle &= \sum_n \sum_m \rho_{mn} \langle \phi_n | A | \phi_m \rangle \\ &= \sum_n \sum_m \rho_{mn} a_m \langle \phi_n | \phi_m \rangle \\ &= \sum_n \sum_m \rho_{mn} a_m \delta_{mn} \\ &= \sum_n \rho_{nn} a_n \\ &= \sum_n \rho_{nn} \langle \phi_n | A | \phi_n \rangle. \end{aligned} \quad (2.25)$$

O conjunto $\{\rho_{mn}\}$ forma a matriz do operador relativo a densidade de elementos em cada um dos estados do observável em análise. Este operador é conhecido como o *operador densidade* ρ do valor esperado. Assim, a equação acima pode ser reescrita como

$$\begin{aligned} \sum_n \rho_{nn} \langle \phi_n | A | \phi_n \rangle &= \sum_n \langle \phi_n | \rho | \phi_n \rangle \langle \phi_n | A | \phi_n \rangle \\ &= \sum_n \langle \phi_n | \rho A | \phi_n \rangle. \end{aligned} \quad (2.26)$$

É possível determinar, neste momento, o seguinte postulado:

Postulado das fases aleatórias

$$\rho_{mn} = 0, \text{ se } m \neq n. \quad (2.27)$$

Assim, é mais apropriado definir $\rho_{nn} \equiv \rho_n$. Se o operador for observado como uma matriz diagonal, a equação acima pode ser escrita como

$$\langle A \rangle = \text{Tr}(\rho A), \quad (2.28)$$

onde o traço pode ser definido como a soma dos termos da diagonal da matriz.

2.4 O ensemble microcanônico

Na Mecânica Estatística, o estado de um sistema pode ser determinado por se especificar as características $\{\vec{r}, \vec{p}\}$ de todas as suas N partículas. Para isto, se define um espaço $6N$ -dimensional, conhecido como *espaço de fase*. Um ponto existente neste espaço define um estado do sistema, e é chamado de *ponto representativo*. No entanto, numa situação real, como a de um gás mantido sobre certas condições macroscópicas, existe não apenas um estado, mas uma coleção (ensemble) de estados. Isto pode ser representado por uma distribuição de pontos no espaço de fase Γ , caracterizado por uma função densidade $\rho(p, r, t)$. Assim, o número de pontos representativos em Γ , em uma região infinitesimal $d^{3N}p d^{3N}r$, num instante de tempo t é definida por

$$\rho(p, r, t) d^{3N}p d^{3N}r. \quad (2.29)$$

Com a abordagem feita na seção anterior, é possível definir esta densidade, para ensembles quânticos, por cada um dos membros do operador densidade, representados pelos termos ρ_n que formam a diagonal da sua matriz relativa.

Outro postulado da Mecânica Estatística Quântica deve ser estabelecido:

Postulado da igual probabilidade a priori Quando um sistema macroscópico se encontra em equilíbrio termodinâmico, o seu estado pode ser qualquer estado que satisfaça as condições macroscópicas do sistema, com igual probabilidade.

Assim, todos os sistemas isolados com uma dada temperatura T , volume V , e com energias entre E e $E + \Delta E$ pertencem a um mesmo conjunto, denominado de *ensemble microcanônico*. No contexto quântico, é possível sumarizar estas ideias dizendo que

$$\rho_n = \begin{cases} \text{Constante, se } E < E_n < E + \Delta E; \\ 0, \text{ caso contrário.} \end{cases} \quad (2.30)$$

O conjunto $\{E_n\}$ pode ser definido como conjunto de autovalores de energia do sistema. Assim, o número de pontos representativos na região em análise é exatamente o número de estados termodinâmicos nos quais a energia se encontra entre E e $E + \Delta E$. Este pode ser definido como

$$\Gamma(E) \equiv \sum_n \rho_n = \text{Tr}(\rho). \quad (2.31)$$

O espectro $\{E_n\}$ possui valores discretos. No entanto, a variação entre os seus autoestados é de ordem microscópica. Em sistemas macroscópicos, $\{E_n\}$ praticamente forma um contínuo.

A grandeza termodinâmica associada a $\Gamma(E)$ é a chamada *entropia*, que pode ser defi-

nida, neste contexto, como

$$S(E, V) \equiv k_B \ln \Gamma(E), \quad (2.32)$$

onde

$$k_B = 1,38 \times 10^{-16} \text{ m}^2 \text{ kg s}^{-2} \text{ K}^{-1}$$

é a conhecida *constante universal de Boltzmann*.

A energia de um sistema quântico pode ser definida pelo seu hamiltoniano. No caso de um gás ideal de partículas idênticas, este valor é dado pela soma da energia cinética de todas as suas N partículas. Matematicamente falando,

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{P}_i \cdot \mathbf{P}_i}{2m}, \quad (2.33)$$

onde \mathbf{P}_i representa o operador momento da i -ésima partícula. Para uma única partícula, as energias possíveis podem ser definidas pelos seus autovalores, ou *níveis de energia*, que são dados por

$$\varepsilon_p = \frac{p^2}{2m}. \quad (2.34)$$

onde

$$p^2 = \mathbf{p} \cdot \mathbf{p}$$

e \mathbf{p} é o autovalor do momento associado. A equação dos operadores associados à equação acima é

$$\varepsilon_p u(\mathbf{x}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 u(\mathbf{x}). \quad (2.35)$$

Unindo as duas últimas equações

$$\nabla^2 u(\mathbf{x}) = -\frac{p^2}{\hbar^2} u(\mathbf{x}). \quad (2.36)$$

A solução pode ser dada por

$$u(\mathbf{x}) = C e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{x}}. \quad (2.37)$$

Utilizando a técnica de separação de variáveis e condições de contorno periódicas ($u_{x_i}(x_i + L) = u_{x_i}(x_i)$), se obtém a seguinte relação

$$\begin{aligned} \frac{p_i}{\hbar} L &= 2n_i \pi \\ p_i &= \frac{2\pi \hbar}{L} n_i, \end{aligned} \quad (2.38)$$

onde o índice i é relativo à coordenada em análise e $L \equiv V^{1/3}$. Assim

$$\mathbf{p} = \frac{2\pi \hbar}{L} \mathbf{n}, \quad (2.39)$$

onde \mathbf{n} é um vetor cujos componentes pertencem exclusivamente ao conjunto dos números inteiros.

Definindo $\{n_p\}$ como o conjunto de números de partículas com cada um dos momentos existentes no sistema, é fácil ver que

$$N = \sum_p n_p \quad (2.40)$$

e

$$E = E\{n_p\} = \sum_p \varepsilon_p n_p. \quad (2.41)$$

Tendo em vista as considerações feitas na seção 2.2, para partículas idênticas, é possível concluir que

$$n_p = \begin{cases} 0, 1, 2, \dots, & \text{para bósons;} \\ 0, 1, & \text{para férmions.} \end{cases} \quad (2.42)$$

Uma maneira de estimar o valor de $\Gamma(E)$, é por dividir o espectro de energias em grupos, ou células. O número de partículas n_i do i -ésimo grupo é a soma de todos os números de partículas de cada um dos g_i níveis energéticos do grupo. Seja $W\{n_i\}$ definido como o número de estados correspondente a um determinado conjunto $\{n_i\}$ que satisfaça as condições

$$N = \sum_i n_i \quad (2.43)$$

e

$$E = \sum_i \varepsilon_i n_i, \quad (2.44)$$

onde ε_i é a média energética da i -ésima célula. O número total de estados do sistema passa então a ser definido por

$$\Gamma(E) = \sum_{\{n_i\}} W\{n_i\}. \quad (2.45)$$

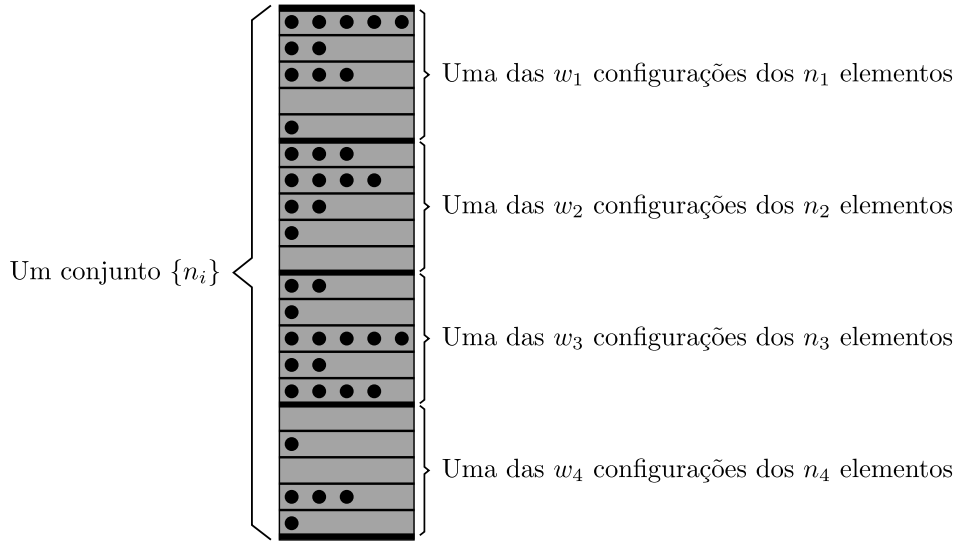
É necessário então estimar o valor de $W\{n_i\}$ para gases compostos de bósons ou de férmions. Para isso, é preciso encontrar a quantidade w_i de maneiras em que as n_i partículas podem estar dispostas na i -ésima célula. Sendo isto efetuado para todos os membros do conjunto $\{n_i\}$, é fácil concluir que

$$W\{n_i\} = \prod_j w_j. \quad (2.46)$$

Algumas das últimas definições dadas acima podem ser observadas de forma intuitiva na figura 3.

A discriminação do valor de $\Gamma(E)$ agora se restringe a determinação do valor de w_i . Este valor dependerá do tipo de interação energética de cada tipo de partícula (bóson ou fér-

Figura 3: Diagrama das células de energia, com uma disposição possível. No caso em consideração, $N = 40$, $\{n_i\} = \{11, 10, 14, 5\}$ e $\{g_i\} = \{5\}$.



Fonte: Ilustrado pelo autor.

mion).

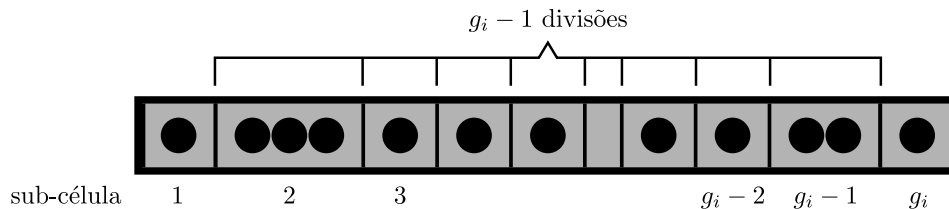
Para gases de bósons, como já visto (seção 2.2), cada nível energético pode abrigar um número qualquer de partículas. Intuitivamente, observando a figura 4, a quantidade de disposições dos bósons na célula pode ser dada por

$$w_i = \binom{n_i + g_i - 1}{n_i} = \frac{(n_i + g_i - 1)!}{n_i! (g_i - 1)!}. \quad (2.47)$$

Assim

$$W\{n_i\} = \prod_i w_i = \prod_i \frac{(n_i + g_i - 1)!}{n_i! (g_i - 1)!}, \text{ para gases de bósons.} \quad (2.48)$$

Figura 4: Diagrama da i -ésima célula, contendo n_i bósons e g_i níveis de energia (ou sub-células).



Fonte: Adaptado de [23].

Para gases de férmions, cada nível energético se restringe a ter apenas uma partícula. Portanto, a quantidade de disposições dos férmions na célula é exatamente igual ao coeficiente

binomial de g_i e n_i :

$$w_i = \binom{g_i}{n_i} = \frac{g_i!}{n_i!(g_i - n_i)!}. \quad (2.49)$$

Assim

$$W\{n_i\} = \prod_i w_i = \prod_i \frac{g_i!}{n_i!(g_i - n_i)!}, \text{ para gases de f\u00e9rmions.} \quad (2.50)$$

Como a maneira de contabilizar os elementos em cada tipo de g\u00e1s \u00e9 diferente, cada um deve ser tratado com um tipo de estat\u00edstica distinta. Para os b\u00f3sons, esta \u00e9 conhecida como *estat\u00edstica de Bose-Einstein*. J\u00e1 para os f\u00e9rmions, \u00e9 chamada de *estat\u00edstica de Fermi-Dirac*.³

Seria bastante invi\u00e1vel tentar discriminar $\Gamma(E)$ com os valores encontrados para $W\{n_i\}$. No entanto, \u00e9 poss\u00edvel efetuar uma boa aproxima\u00e7\u00e3o, utilizando o chamado *m\u00e9todo dos multiplicadores de Lagrange*, que \u00e9 definido por:

$$\delta [\ln W\{\bar{n}_i\}] - \delta \left(\alpha \sum_i \bar{n}_i + \beta \sum_i \varepsilon_i \bar{n}_i \right) = 0, \quad (2.51)$$

onde $\{\bar{n}_i\}$ \u00e9 o conjunto de n\u00famero de part\u00edculas em cada c\u00e9lula que maximiza $W\{n_i\}$. Em um sistema com grande quantidade de part\u00edculas,

$$\Gamma(E) \approx W\{\bar{n}_i\}. \quad (2.52)$$

Para b\u00f3sons, da eq. (2.48), observa-se que, considerando que $g_i \gg 1$

$$\begin{aligned} \ln W\{n_i\} &\approx \sum_i \ln \frac{(n_i + g_i)!}{n_i! g_i!} \\ &= \sum_i \ln (n_i + g_i)! - \sum_i \ln n_i! - \sum_i \ln g_i! \\ &= \sum_i (n_i + g_i) \ln (n_i + g_i) - n_i \ln n_i - g_i \ln g_i, \end{aligned} \quad (2.53)$$

Onde foi utilizada a conhecida *aproxima\u00e7\u00e3o de Stirling*:

$$\ln n! \approx n \ln n - n. \quad (2.54)$$

Assim, pode se dizer que

$$\delta [\ln W\{\bar{n}_i\}] \approx \sum_i \left[\ln \left(\frac{\bar{n}_i + g_i}{\bar{n}_i} \right) \right] \delta \bar{n}_i. \quad (2.55)$$

³Geralmente, em estudos assim, \u00e9 tamb\u00e9m analisada a chamada *estat\u00edstica de Maxwell-Boltzmann*. Esta consiste em analisar conjunto de part\u00edculas que n\u00e3o podem ser caracterizadas pela simetria de permuta\u00e7\u00e3o. Pode incluir b\u00f3sons, f\u00e9rmions e outros tipos de part\u00edculas, simultaneamente. Tal sistema nunca foi encontrado na natureza. No entanto, o comportamento termodin\u00e2mico de sistemas bos\u00f4nicos e fermi\u00f4nicos a altas temperaturas se aproxima da descrita por esta estat\u00edstica.

Comparando a equação acima com a eq. (2.51), se conclui que

$$\begin{aligned}
 \sum_i \left[\ln \left(\frac{\bar{n}_i + g_i}{\bar{n}_i} \right) - \alpha - \beta \varepsilon_i \right] \delta \bar{n}_i &= 0 \\
 \ln \left(\frac{\bar{n}_i + g_i}{\bar{n}_i} \right) &= \alpha + \beta \varepsilon_i \\
 \frac{\bar{n}_i + g_i}{\bar{n}_i} &= e^{\alpha + \beta \varepsilon_i} \\
 g_i &= \bar{n}_i \left(e^{\alpha + \beta \varepsilon_i} - 1 \right) \\
 \bar{n}_i &= \frac{g_i}{e^{\alpha + \beta \varepsilon_i} - 1}.
 \end{aligned} \tag{2.56}$$

Definindo $z \equiv e^{-\alpha}$, tem-se

$$\bar{n}_i = \frac{g_i}{z^{-1} e^{\beta \varepsilon_i} - 1} \text{ (bósons).} \tag{2.57}$$

Considerando que $\bar{n}_i = g_i \bar{n}_p$, se conclui que

$$\bar{n}_p = \frac{1}{z^{-1} e^{\beta \varepsilon_p} - 1} \text{ (bósons).} \tag{2.58}$$

Desenvolvendo o mesmo método para gases de férmions, é possível concluir que

$$\bar{n}_i = \frac{g_i}{z^{-1} e^{\beta \varepsilon_i} + 1} \text{ (férmions)} \tag{2.59}$$

e

$$\bar{n}_p = \frac{1}{z^{-1} e^{\beta \varepsilon_p} + 1} \text{ (férmions).} \tag{2.60}$$

Combinando as equações (2.32), (2.52) e (2.53), a entropia de um sistema bosônico é dada por

$$\begin{aligned}
 \frac{S}{k_B} &= \sum_i (\bar{n}_i + g_i) \ln (\bar{n}_i + g_i) - \bar{n}_i \ln \bar{n}_i - g_i \ln g_i \\
 &= \sum_i \bar{n}_i \ln \left(\frac{\bar{n}_i + g_i}{\bar{n}_i} \right) + g_i \ln \left(\frac{\bar{n}_i + g_i}{g_i} \right) \\
 &= \sum_i \bar{n}_i \ln \left(1 + \frac{g_i}{\bar{n}_i} \right) + g_i \ln \left(1 + \frac{\bar{n}_i}{g_i} \right) \text{ (bósons).}
 \end{aligned} \tag{2.61}$$

Analogamente,

$$\frac{S}{k_B} = \sum_i \bar{n}_i \ln \left(\frac{g_i}{\bar{n}_i} - 1 \right) - g_i \ln \left(1 - \frac{\bar{n}_i}{g_i} \right) \text{ (férmions).} \tag{2.62}$$

Com a eq. (2.57), a entropia para bósons tem sua forma mais explícita:

$$\begin{aligned} \frac{S}{k_B} &= \sum_i g_i \left[\left(\frac{1}{z^{-1}e^{\beta\varepsilon_i} - 1} \right) \ln \left(z^{-1}e^{\beta\varepsilon_i} \right) + \ln \left(\frac{z^{-1}e^{\beta\varepsilon_i}}{z^{-1}e^{\beta\varepsilon_i} - 1} \right) \right] \\ &= \sum_i g_i \left[\frac{\beta\varepsilon_i - \ln z}{z^{-1}e^{\beta\varepsilon_i} - 1} - \ln \left(1 - ze^{-\beta\varepsilon_i} \right) \right] \text{ (bósons)}. \end{aligned} \quad (2.63)$$

Analogamente,

$$\frac{S}{k_B} = \sum_i g_i \left[\frac{\beta\varepsilon_i - \ln z}{z^{-1}e^{\beta\varepsilon_i} + 1} - \ln \left(1 + ze^{-\beta\varepsilon_i} \right) \right] \text{ (férmions)}. \quad (2.64)$$

2.5 O ensemble grande-canônico

Até o momento, foi considerado que o sistema termodinâmico em análise estava isolado. No entanto, estes tipos de sistemas não podem ser reproduzidos com perfeição em laboratório. Tampouco é possível estimar o número total de partículas. Os parâmetros que podem ser controlados efetivamente, nestes casos, são a temperatura e o volume do sistema. Para isto, na estatística que deve ser proposta, o número de partículas dependerá das condições externas do sistema. O conjunto que obedece a estes princípios é denominado de *ensemble grande-canônico*.

Neste ensemble, o espaço de fase é expandido para qualquer número de partículas. Assim, a distribuição de pontos representativos será caracterizada pela densidade $\rho(p, r, N)$. Para estimar o seu valor, considere dois sistemas em contato térmico, com energias E e E' . Seja então assumido que as partículas são compartilhadas entre os dois sistemas, mas que o número de partículas N do primeiro sistema é muito menor do que o número N' do segundo. Estes formam um sistema isolado, em que os volumes dos dois sistemas, V e V' , são constantes, com energia total definida entre $E_{(0)}$ e $E_{(0)} + \Delta E_{(0)}$. Pode-se definir que

$$E_{(0)} = E + E' \quad (2.65)$$

e

$$N_{(0)} = N + N'. \quad (2.66)$$

A probabilidade de um estado específico, na posição r e com momento p , ser encontrado no sistema menor está diretamente relacionado a $\rho(p, r, N)_V$. O subscrito indica que esta densidade é dada para um volume específico (no caso, V). Isto ocorre independentemente do estado do sistema maior. Assim, existe uma relação entre a densidade de pontos representativos do sistema menor e o número total de estados do sistema maior. Se o volume do conjunto de sistemas for

muito grande, a seguinte relação é válida:

$$\rho(p, r, N)_V = \frac{\Gamma_{N(0)-N}(E(0) - E)}{\Gamma_{N(0)}(E(0))}, \quad (2.67)$$

onde $\Gamma_N(E)$ tem a mesma interpretação física de $\Gamma(E)$, mas passa a também depender do número de partículas do sistema. Com a definição dada pela eq. (2.32), e com métodos de aproximação, é possível concluir que

$$\begin{aligned} k_B \ln \Gamma_{N(0)-N}(E(0) - E) &= S(E(0) - E, N(0) - N) \\ &\approx S(E(0), N(0)) - E \left[\frac{\partial S}{\partial E'} \right]_{N', V, E' = E(0)} - N \left[\frac{\partial S}{\partial N'} \right]_{E', V, N' = N(0)} \end{aligned} \quad (2.68)$$

Existe um lema matemático que diz que, para uma relação funcional do tipo $f(x, y, z) = 0$, a seguinte relação é válida:

$$\left(\frac{\partial x}{\partial y} \right)_z \left(\frac{\partial y}{\partial z} \right)_x \left(\frac{\partial z}{\partial x} \right)_y = -1. \quad (2.69)$$

Como $S(E, N) \Rightarrow f(S, E, N) = 0$, se observa que:

$$\left[\frac{\partial S}{\partial N'} \right]_{E', V} = - \left[\frac{\partial S}{\partial E'} \right]_{N', V} \left[\frac{\partial E'}{\partial N'} \right]_{S, V}. \quad (2.70)$$

Uma das conclusões vindas da chamada *primeira lei da termodinâmica* é que

$$\left(\frac{\partial S}{\partial E} \right)_V = \frac{1}{T}. \quad (2.71)$$

E válido, neste momento, definir

$$\mu \equiv \left[\frac{\partial E'}{\partial N'} \right]_{S, V}, \quad (2.72)$$

onde μ é conhecido como *potencial químico*, um parâmetro relacionado, entre outras coisas, ao equilíbrio das reações químicas. Note que este é inversamente proporcional à quantidade de partículas no sistema.

Unindo então as últimas equações acima,

$$\begin{aligned} \ln \Gamma_{N(0)-N}(E(0) - E) &\approx \frac{S(E(0))}{k_B} - \frac{E}{k_B T} + \frac{N\mu}{k_B T} \\ \Gamma_{N(0)-N}(E(0) - E) &\approx \Gamma_{N(0)}(E(0)) e^{-\frac{E}{k_B T}} e^{\frac{N\mu}{k_B T}}. \end{aligned} \quad (2.73)$$

Considerando que $H(p, r, N_1) = E$ é o hamiltoniano do menor sistema, é possível concluir que,

$$\rho(p, r, N)_V = e^{-\frac{H(p, r, N)}{k_B T}} e^{\frac{N\mu}{k_B T}}. \quad (2.74)$$

Neste momento, é apropriado definir

$$\beta = \frac{1}{k_B T} \quad (2.75)$$

e

$$z = e^{\beta \mu}, \quad (2.76)$$

onde z é denominado *fugacidade*, o nível de fuga, por assim dizer, das partículas do sistema em consideração. Com isso, a eq. (2.74) pode ser escrita como

$$\rho(p, r, N)_V = e^{-\beta H(p, r, N)} z^N. \quad (2.77)$$

Considere o mesmo problema, porém dando aos sistemas a possibilidade de mudarem o seu volume, desde que

$$V_{(0)} = V + V' \quad (2.78)$$

e

$$V \ll V'. \quad (2.79)$$

O processo matemático é muito similar. No entanto, a aproximação de $\Gamma_{N_{(0)}-N, V_{(0)}-V}(E_{(0)} - E)$ é acrescida de $-V \left[\frac{\partial S}{\partial V'} \right]_{E', N, V'=V_{(0)}}$. Mas,

$$\left[\frac{\partial S}{\partial V'} \right]_{E', N} = - \left[\frac{\partial S}{\partial E'} \right]_{V', N} \left[\frac{\partial E'}{\partial V'} \right]_{S, N}.$$

Uma outra conclusão vinda da primeira lei da termodinâmica diz que

$$\left(\frac{\partial E}{\partial V} \right)_S = -P. \quad (2.80)$$

Onde P é a *pressão* do sistema. Assim, prosseguindo com o desenvolvimento, é fácil concluir que

$$\rho(p, r, N) = e^{-\beta H(p, r, N)} e^{-\beta PV} z^N = e^{-\beta PV} \rho(p, r, N)_V \quad (2.81)$$

para qualquer volume dado. De maneira análoga, utilizando as conclusões da seção 2.3, é apropriado utilizar algo equivalente no contexto quântico, ou seja

$$\rho = e^{-\beta H} e^{-\beta PV} z^N = e^{-\beta PV} [\rho]_V. \quad (2.82)$$

Observando a eq. (2.33) e a eq. (2.34), seus autovalores passam a possuir então a seguinte relação:

$$\rho_n = e^{-\beta E_n} e^{-\beta PV} z^N = e^{-\beta PV} [\rho_n]_V. \quad (2.83)$$

O ensemble grande-canônico vem a ser o total de todos os pontos representativos do

espaço de fase de todos os sistemas com temperatura T e volume V . Para partículas idênticas:

$$Z(z, V, T) = \sum_{N=0}^{\infty} \sum_n [\rho_n]_V = \sum_{N=0}^{\infty} z^N \sum_n e^{-\beta E_n}. \quad (2.84)$$

Os autoestados de energia também podem ser discriminados pelos conjuntos $\{n_p\}$. Desta maneira, a equação acima se torna

$$Z(z, V, T) = \sum_{N=0}^{\infty} z^N \sum_{\{n_p\}} e^{-\beta E\{n_p\}}. \quad (2.85)$$

Utilizando as equações (2.43) e (2.44), é possível encontrar uma expressão mais adequada:

$$\begin{aligned} Z(z, V, T) &= \sum_{N=\sum_p n_p=0}^{\infty} z^N \sum_{\{n_p\}} e^{-\beta \sum_p \varepsilon_p n_p} \\ &= \sum_{N=\sum_p n_p=0}^{\infty} z^N \sum_{\{n_p\}} e^{-\beta \sum_p \varepsilon_p n_p} \\ &= \sum_{N=\sum_p n_p=0}^{\infty} \sum_{\{n_p\}} \prod_p \left(z e^{-\beta \varepsilon_p} \right)^{n_p} \\ &= \sum_{N=\sum_p n_p=0}^{\infty} \sum_{\{n_p\}} \prod_p \left(z e^{-\beta \varepsilon_p} \right)^{n_p}. \end{aligned} \quad (2.86)$$

Os primeiros dois somatórios acima são equivalentes ao conjunto de somatórios de todos os valores possíveis para cada n_p , ou seja:

$$\begin{aligned} Z(z, V, T) &= \sum_{n_0} \sum_{n_1} \sum_{n_2} \dots \left[\left(z e^{-\beta \varepsilon_0} \right)^{n_0} \left(z e^{-\beta \varepsilon_1} \right)^{n_1} \left(z e^{-\beta \varepsilon_2} \right)^{n_2} \dots \right] \\ &= \sum_{n_0} \left[\left(z e^{-\beta \varepsilon_0} \right)^{n_0} \right] \sum_{n_1} \left[\left(z e^{-\beta \varepsilon_1} \right)^{n_1} \right] \sum_{n_2} \left[\left(z e^{-\beta \varepsilon_2} \right)^{n_2} \right] \dots \\ &= \prod_p \sum_{n_p} \left[\left(z e^{-\beta \varepsilon_p} \right)^{n_p} \right]. \end{aligned} \quad (2.87)$$

Como estão sendo somados todos os conjuntos $\{n_p\}$ para todos os valores de N , é possível afirmar, sem perda, que

$$Z(z, V, T) = \prod_p \sum_n \left[\left(z e^{-\beta \varepsilon_p} \right)^n \right], \quad (2.88)$$

onde

$$n = \begin{cases} 0, 1, 2, \dots, & \text{para bósons;} \\ 0, 1, & \text{para férmions.} \end{cases} \quad (2.89)$$

Assim, a equação para o ensemble grande-canônico para partículas idênticas é dado por

$$Z(z, V, T) = \begin{cases} \prod_p \frac{1}{1 - ze^{-\beta\varepsilon_p}}, & \text{para bósons;} \\ \prod_p (1 + ze^{-\beta\varepsilon_p}), & \text{para férmions.} \end{cases} \quad (2.90)$$

Unindo as equações (2.83) e (2.84), observa-se que

$$\begin{aligned} Z(z, V, T) &= e^{\beta PV} \underbrace{\sum_{N=0}^{\infty} \sum_n \rho_n}_1 \\ \ln Z(z, V, T) &= \beta PV = \frac{PV}{k_B T}. \end{aligned} \quad (2.91)$$

Para partículas idênticas:

$$\frac{PV}{k_B T} = \begin{cases} \ln \left(\prod_p \frac{1}{1 - ze^{-\beta\varepsilon_p}} \right) = -\sum_p \ln \left(1 - ze^{-\beta\varepsilon_p} \right), & \text{para bósons;} \\ \ln \left(\prod_p (1 + ze^{-\beta\varepsilon_p}) \right) = \sum_p \ln \left(1 + ze^{-\beta\varepsilon_p} \right), & \text{para férmions.} \end{cases} \quad (2.92)$$

O valor médio de um observável pode ser dado pela eq. (2.28), para o ensemble grande-canônico, ou seja

$$\begin{aligned} \langle A \rangle = \text{Tr}(\rho A) &= \sum_{N=0}^{\infty} \sum_n \rho_n a_n \\ &= \frac{e^{-\beta PV} \sum_{N=0}^{\infty} \sum_n [\rho_n]_V a_n}{e^{-\beta PV} \underbrace{\sum_{N=0}^{\infty} \sum_n [\rho_n]_V}_{Z(z, V, T)}} \\ &= \frac{1}{Z(z, V, T)} \sum_{N=0}^{\infty} \sum_n [\rho_n]_V a_n \\ &= \frac{\text{Tr}([\rho]_V A)}{Z(z, V, T)} = \frac{\text{Tr}(Az^N e^{-\beta H})}{Z(z, V, T)}. \end{aligned} \quad (2.93)$$

Assim, o valor médio de N vem a ser

$$\begin{aligned} \langle N \rangle &= \frac{\text{Tr}(Nz^N e^{-\beta E_n})}{Z(z, V, T)} \\ &= \frac{\text{Tr}(z \frac{\partial}{\partial z} z^N e^{-\beta E_n})}{Z(z, V, T)} = \frac{z \frac{\partial}{\partial z} \text{Tr}(z^N e^{-\beta E_n})}{Z(z, V, T)} \\ &= \frac{z \frac{\partial}{\partial z} Z(z, V, T)}{Z(z, V, T)} = z \frac{\partial}{\partial z} \ln Z(z, V, T). \end{aligned} \quad (2.94)$$

Para partículas idênticas:

$$\langle N \rangle \equiv N = \begin{cases} z \frac{\partial}{\partial z} \left(-\sum_p \ln \left(1 - ze^{-\beta \varepsilon_p} \right) \right) = \sum_p \frac{ze^{-\beta \varepsilon_p}}{1 - ze^{-\beta \varepsilon_p}} = \sum_p \frac{1}{z^{-1} e^{\beta \varepsilon_p} - 1}, & \text{para bósons;} \\ z \frac{\partial}{\partial z} \left(\sum_p \ln \left(1 + ze^{-\beta \varepsilon_p} \right) \right) = \sum_p \frac{ze^{-\beta \varepsilon_p}}{1 + ze^{-\beta \varepsilon_p}} = \sum_p \frac{1}{z^{-1} e^{\beta \varepsilon_p} + 1}, & \text{para férmions.} \end{cases} \quad (2.95)$$

Unindo isso a eq. (2.40), é possível concluir que

$$n_p = \langle n_p \rangle = \begin{cases} \frac{1}{z^{-1} e^{\beta \varepsilon_p} - 1}, & \text{para bósons;} \\ \frac{1}{z^{-1} e^{\beta \varepsilon_p} + 1}, & \text{para férmions.} \end{cases} \quad (2.96)$$

Isto corresponde às mesmas conclusões obtidas na análise do ensemble microcanônico (veja as equações (2.58) e (2.60)).

Retomando a eq. (2.38) para sistemas muito grandes em relação à variação de momento, é possível afirmar que

$$dp_i > \Delta p_i, \quad (2.97)$$

onde

$$\Delta p_i = \frac{2\pi\hbar}{L} = \frac{h}{L}. \quad (2.98)$$

É fácil ver então que

$$\begin{aligned} f(p)d^3p &\leftarrow \sum_{p=0}^{d^3p} f(p)\Delta^3p = \left(\frac{h}{L}\right)^3 \sum_{p=0}^{d^3p} f(p) \\ \frac{h^3}{V} \sum_{p=0}^{d^3p} f(p) &\rightarrow f(p)d^3p \\ \sum_{p=0}^{d^3p} f(p) &\rightarrow \frac{V}{h^3} f(p)d^3p. \end{aligned} \quad (2.99)$$

Assim, se conclui nestes casos que

$$\sum_p f(p) \rightarrow \frac{V}{h^3} \int f(p)d^3p. \quad (2.100)$$

Isto pode ser aplicado às equações (2.92) e (2.95), de modo que, para férmions:

$$\begin{aligned} \frac{P}{k_B T} &= \frac{1}{h^3} \int d^3p \ln \left(1 + ze^{-\beta \varepsilon_p} \right) \\ &= \frac{1}{h^3} \int_0^\pi d\theta \sin \theta \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\infty dp p^2 \ln \left(1 + ze^{-\beta \varepsilon_p} \right) \\ &= \frac{4\pi}{h^3} \int_0^\infty dp p^2 \ln \left(1 + ze^{-\beta \frac{p^2}{2m}} \right) \end{aligned} \quad (2.101)$$

e

$$\begin{aligned}
\frac{N}{V} = \frac{1}{v} &= \frac{1}{h^3} \int d^3p \frac{1}{z^{-1} e^{\beta \varepsilon_p} + 1} \\
&= \frac{1}{h^3} \int_0^\pi d\theta \sin \theta \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\infty dp \frac{p^2}{z^{-1} e^{\beta \varepsilon_p} + 1} \\
&= \frac{4\pi}{h^3} \int_0^\infty dp \frac{p^2}{z^{-1} e^{\beta \frac{p^2}{2m}} + 1}.
\end{aligned} \tag{2.102}$$

Para bósons, existem alguns elementos adicionais que devem ser observados. Estas considerações, que são a base para a análise do gás ideal de bósons, serão observadas no capítulo 3 desta dissertação. Antes disso, porém, são necessárias mais algumas definições.

2.6 Segunda Quantização e o Método dos Campos Quantizados

Voltando à Mecânica Quântica, um estado possível do sistema também pode ser determinado por um vetor de estado que possui como parâmetros os elementos do conjunto $\{n_p\}$. Esta é a base da chamada *segunda quantização*. Assim, o vetor é definido como

$$|n_1, n_2, n_3, \dots, n_p, \dots\rangle. \tag{2.103}$$

Dois casos especiais são o vetor que representa o vácuo,

$$|\mathbf{0}\rangle \equiv |0, 0, 0, \dots, 0, \dots\rangle \tag{2.104}$$

e o vetor que representa uma partícula isolada no estado, e com energia ε_p ,

$$|\phi_p\rangle \equiv |0, 0, 0, \dots, n_p = 1, \dots\rangle. \tag{2.105}$$

Note que ambos os estados são normalizados.

É interessante definir alguns operadores que possam manipular o estado em questão. O primeiro destes, a_p^\dagger , é responsável por aumentar o número de partículas com energia ε_p , ou seja

$$a_p^\dagger |n_1, n_2, n_3, \dots, n_p, \dots\rangle \propto |n_1, n_2, n_3, \dots, n_p + 1, \dots\rangle. \tag{2.106}$$

Com os estados especiais, é possível definir que

$$a_p^\dagger |\mathbf{0}\rangle = |\phi_p\rangle. \tag{2.107}$$

Então,

$$\begin{aligned}
 1 = \langle \mathbf{0} | \mathbf{0} \rangle &= \langle \phi_p | \phi_p \rangle = [\langle \mathbf{0} | a_p] [a_p^\dagger | \mathbf{0} \rangle] \\
 &= \langle \mathbf{0} | [a_p a_p^\dagger | \mathbf{0} \rangle] = \langle \mathbf{0} | [a_p a_p^\dagger | \mathbf{0} \rangle] \\
 &= \langle \mathbf{0} | a_p | \phi_p \rangle \\
 | \mathbf{0} \rangle &= a_p | \phi_p \rangle.
 \end{aligned} \tag{2.108}$$

Assim, é possível concluir que a_p é responsável por diminuir o número de partículas com energia ε_p , ou seja

$$a_p |n_1, n_2, n_3, \dots, n_p, \dots\rangle \propto |n_1, n_2, n_3, \dots, n_p - 1, \dots\rangle. \tag{2.109}$$

Também se postula que

$$a_p | \phi_{p'} \rangle = 0, \text{ se } p \neq p', \tag{2.110}$$

o que implica que

$$a_p | \mathbf{0} \rangle = 0. \tag{2.111}$$

Combinando as equações (2.108) e (2.110), se conclui que

$$a_p | \phi_{p'} \rangle = \delta_{pp'} | \mathbf{0} \rangle. \tag{2.112}$$

Para estabelecer a condição de simetria neste tratamento, a seguinte situação se mostra válida. Se duas partículas, com momentos p e p' , colidem, como já visto (seção 2.2), estas podem (bósons) ou não (férmions) passar a um mesmo momento final. Assim, as duas situações iniciais possíveis neste caso podem ser definidas pelos vetores

$$| \phi_p \phi_{p'} \rangle \equiv a_p^\dagger | \phi_{p'} \rangle \tag{2.113}$$

e

$$| \phi_{p'} \phi_p \rangle \equiv a_{p'}^\dagger | \phi_p \rangle. \tag{2.114}$$

Assim, a amplitude de probabilidades é dada por

$$\langle \psi | \phi_p \phi_{p'} \rangle + \langle \psi | \phi_{p'} \phi_p \rangle = \begin{cases} 2 \langle \psi | \phi_p \phi_{p'} \rangle & (\text{bósons}) \\ 0 & (\text{férmions}), \end{cases} \tag{2.115}$$

onde $|\psi\rangle$ corresponde ao estado final da colisão. Desenvolvendo a relação acima, observa-se

que, no primeiro caso,

$$\begin{aligned}
\langle \psi | a_p^\dagger | \phi_{p'} \rangle + \langle \psi | a_{p'}^\dagger | \phi_p \rangle &= 2 \langle \psi | a_{p'}^\dagger | \phi_p \rangle \\
\langle \psi | a_p^\dagger a_{p'}^\dagger | \mathbf{0} \rangle + \langle \psi | a_{p'}^\dagger a_p^\dagger | \mathbf{0} \rangle &= 2 \langle \psi | a_{p'}^\dagger a_p^\dagger | \mathbf{0} \rangle \\
a_p^\dagger a_{p'}^\dagger + a_{p'}^\dagger a_p^\dagger &= 2 a_{p'}^\dagger a_p^\dagger \\
a_p^\dagger a_{p'}^\dagger - a_{p'}^\dagger a_p^\dagger &= 0 \text{ (bósons)}.
\end{aligned} \tag{2.116}$$

No segundo caso,

$$\begin{aligned}
\langle \psi | a_p^\dagger | \phi_{p'} \rangle + \langle \psi | a_{p'}^\dagger | \phi_p \rangle &= 0 \\
\langle \psi | a_p^\dagger a_{p'}^\dagger | \mathbf{0} \rangle + \langle \psi | a_{p'}^\dagger a_p^\dagger | \mathbf{0} \rangle &= 0 \\
a_p^\dagger a_{p'}^\dagger + a_{p'}^\dagger a_p^\dagger &= 0 \text{ (férmions)}.
\end{aligned} \tag{2.117}$$

Como os operadores estão relacionados com a quantidade de partículas em cada um dos níveis energéticos, será apropriado existir uma relação entre estes e o operador n_p . Para isto, note que

$$\begin{aligned}
\langle \mathbf{0} | [a_p, a_p^\dagger] | \mathbf{0} \rangle &= \langle \mathbf{0} | (a_p a_p^\dagger - a_p^\dagger a_p) | \mathbf{0} \rangle \\
&= \langle \mathbf{0} | a_p a_p^\dagger | \mathbf{0} \rangle - \underbrace{\langle \mathbf{0} | a_p^\dagger a_p | \mathbf{0} \rangle}_0 \\
&= \langle \phi_p | \phi_p \rangle = 1 \\
[a_p, a_p^\dagger] &= 1.
\end{aligned} \tag{2.118}$$

Assim, para um vetor arbitrário,

$$\begin{aligned}
|n_1, n_2, \dots, n_p, \dots\rangle &= |n_1, \mathbf{0}, \dots, n_p = 0, \dots\rangle + |0, n_2, \dots, n_p = 0, \dots\rangle + \dots \\
&= \underbrace{a_1^\dagger \dots a_1^\dagger}_{n_1-1 \text{ vezes}} |\phi_1\rangle + \underbrace{a_2^\dagger \dots a_2^\dagger}_{n_2-1 \text{ vezes}} |\phi_2\rangle + \dots + \underbrace{a_p^\dagger \dots a_p^\dagger}_{n_p-1 \text{ vezes}} |\phi_p\rangle + \dots
\end{aligned} \tag{2.119}$$

Para um dado fator da soma acima, quando se aplica o operador $N_p = a_p^\dagger a_p$

$$\begin{aligned}
N_p \left(\underbrace{a_p^\dagger \cdots a_p^\dagger}_{n_p-1 \text{ vezes}} |\phi_p\rangle \right) &= a_p^\dagger a_p \left(\underbrace{a_p^\dagger \cdots a_p^\dagger}_{n_p-1 \text{ vezes}} |\phi_p\rangle \right) \\
&= a_p^\dagger a_p^\dagger a_p \left(\underbrace{a_p^\dagger \cdots a_p^\dagger}_{n_p-2 \text{ vezes}} |\phi_p\rangle \right) + \left(\underbrace{a_p^\dagger \cdots a_p^\dagger}_{n_p-1 \text{ vezes}} |\phi_p\rangle \right) \\
&= a_p^\dagger a_p^\dagger a_p^\dagger a_p \left(\underbrace{a_p^\dagger \cdots a_p^\dagger}_{n_p-3 \text{ vezes}} |\phi_p\rangle \right) + 2 \left(\underbrace{a_p^\dagger \cdots a_p^\dagger}_{n_p-1 \text{ vezes}} |\phi_p\rangle \right) \\
&\vdots \\
&= \underbrace{a_p^\dagger \cdots a_p^\dagger}_{n_p-1 \text{ vezes}} a_p a_p^\dagger |\phi_p\rangle + (n_p - 2) \left(\underbrace{a_p^\dagger \cdots a_p^\dagger}_{n_p-1 \text{ vezes}} |\phi_p\rangle \right) \\
&= \underbrace{a_p^\dagger \cdots a_p^\dagger}_{n_p \text{ vezes}} a_p |\phi_p\rangle + (n_p - 1) \left(\underbrace{a_p^\dagger \cdots a_p^\dagger}_{n_p-1 \text{ vezes}} |\phi_p\rangle \right) \\
&= n_p \left(\underbrace{a_p^\dagger \cdots a_p^\dagger}_{n_p-1 \text{ vezes}} |\phi_p\rangle \right). \tag{2.120}
\end{aligned}$$

Assim, o operador N_p é exatamente o observável relativo ao número de partículas com um dado momento p . De modo que é possível definir, baseado nas equações (2.40) e (2.41), que

$$N_{op} = \sum_p a_p^\dagger a_p \tag{2.121}$$

e

$$H = \sum_p \varepsilon_p a_p^\dagger a_p, \tag{2.122}$$

onde N_{op} é o operador relativo a N .

A probabilidade de uma partícula “alterar seu nível energético”, por assim dizer, pode ser dado por

$$\begin{aligned}
&\langle n_1, n_2, \dots, n_p, \dots, n_{p'} + 1, \dots | n_1, n_2, \dots, n_p - 1, \dots, n_{p'}, \dots \rangle = \\
&= \langle n_1, n_2, \dots, n_p, \dots, n_{p'}, \dots | a_p^\dagger a_{p'} | n_1, n_2, \dots, n_p, \dots, n_{p'}, \dots \rangle \equiv \langle a_p^\dagger a_{p'} \rangle. \tag{2.123}
\end{aligned}$$

Até este momento, a discriminação das partículas idênticas foi dada pelos seus momentos. No entanto, esta discriminação também pode ser estabelecida tendo como parâmetro

as suas posições relativas. Isto pode ser desenvolvido através do chamado *método dos campos quantizados*.

Define-se que um operador $\psi(\mathbf{r})$ é dado pela seguinte transformação:

$$\psi(\mathbf{r}) \equiv \sum_p a_p u_p(\mathbf{r}) \quad (2.124)$$

e, analogamente,

$$\psi^\dagger(\mathbf{r}) \equiv \sum_p a_p^\dagger u_p^*(\mathbf{r}), \quad (2.125)$$

onde $u_p(\mathbf{r})$ e $u_p^*(\mathbf{r})$ são funções ortonormais, ou seja

$$\sum_p u_p^*(\mathbf{r}') u_p(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}). \quad (2.126)$$

É válido escolher

$$u_p(\mathbf{r}) \equiv \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}}. \quad (2.127)$$

Assim, pela eq. (2.123), é possível concluir que

$$\langle \psi^\dagger(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}') \rangle = \frac{1}{V} \sum_p \sum_{p'} e^{i(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r} - \mathbf{p}'\cdot\mathbf{r}')} \langle a_p^\dagger a_{p'} \rangle \quad (2.128)$$

é a probabilidade de uma partícula desaparecer da posição \mathbf{r} e surgir na posição \mathbf{r}' .

Todas estas considerações se mostram válidas e importantes para o estudo da BEC, como será observado a seguir.

3 O CONDENSADO DE BOSE-EINSTEIN

Basicamente, o *gás ideal* é uma idealização do comportamento termodinâmico de gases altamente diluídos. Seus parâmetros mais importantes são a *pressão* P , o *volume* V e o *número de partículas* N . Para um gás ideal de bósons, considerações similares às feitas no capítulo anterior se mostram necessárias. No entanto, para as equações (2.92) e (2.95), quando $z \rightarrow 1$, o termo dos somatórios onde $p = 0$ se tornam, respectivamente

$$-\ln(1 - e^0) = \infty \quad (3.1)$$

e

$$\frac{1}{e^0 - 1} = \pm\infty. \quad (3.2)$$

Tendo isto em vista, antes de aplicar o tratamento matemático da eq. (2.100), se mostra necessário extrair disto o termo onde $p = 0$. Assim

$$\begin{aligned} \frac{P}{k_B T} &= -\frac{1}{h^3} \int d^3 p \ln(1 - ze^{-\beta \epsilon_p}) - \frac{1}{V} \ln(1 - z) \\ &= -\frac{1}{h^3} \int_0^\pi d\theta \sin \theta \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\infty dp p^2 \ln(1 - ze^{-\beta \epsilon_p}) - \frac{1}{V} \ln(1 - z) \\ &= -\frac{4\pi}{h^3} \int_0^\infty dp p^2 \ln\left(1 - ze^{-\beta \frac{p^2}{2m}}\right) - \frac{1}{V} \ln(1 - z) \end{aligned} \quad (3.3)$$

e

$$\begin{aligned} \frac{N}{V} = \frac{1}{v} &= \frac{1}{h^3} \int d^3 p \frac{1}{z^{-1} e^{\beta \epsilon_p} - 1} + \frac{1}{V} \frac{1}{z^{-1} - 1} \\ &= \frac{1}{h^3} \int_0^\pi d\theta \sin \theta \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\infty dp \frac{p^2}{z^{-1} e^{\beta \epsilon_p} - 1} + \frac{1}{V} \frac{z}{1 - z} \\ &= \frac{4\pi}{h^3} \int_0^\infty dp \frac{p^2}{z^{-1} e^{\beta \frac{p^2}{2m}} - 1} + \frac{1}{V} \frac{z}{1 - z}. \end{aligned} \quad (3.4)$$

Neste momento, é interessante introduzir a seguinte relação:

$$g_n(z) \equiv \sum_{l=1}^{\infty} \frac{z^l}{l^n}. \quad (3.5)$$

Para $n = 5/2$ e $n = 3/2$, a equação acima apresenta resultados úteis. Assim, para o primeiro

caso, note que

$$\begin{aligned}
-\frac{4}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty dx x^2 \ln(1 - ze^{-ax^2}) &= -\frac{4}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty dx x^2 \left(-\sum_{l=1}^\infty \frac{z^l e^{-lax^2}}{l} \right) \\
&= \frac{4}{\sqrt{\pi}} \sum_{l=1}^\infty \frac{z^l}{l} \int_0^\infty dx x^2 e^{-lax^2} \\
&= -\frac{4}{\sqrt{\pi}} \sum_{l=1}^\infty \frac{z^l}{al} \frac{\partial}{\partial l} \int_0^\infty dx e^{-lax^2} \\
&= -\frac{4}{\sqrt{\pi}} \sum_{l=1}^\infty \frac{z^l}{al} \frac{\partial}{\partial l} \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{al}} \\
&= -2 \sum_{l=1}^\infty \frac{z^l}{al} \left(-\frac{1}{2a^{1/2}} \frac{1}{l^{3/2}} \right) \\
&= \frac{1}{a^{3/2}} \sum_{l=1}^\infty \frac{z^l}{l^{5/2}} = \frac{g_{5/2}(z)}{a^{3/2}}. \tag{3.6}
\end{aligned}$$

Derivando a expressão acima:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial z} \left[-\frac{4}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty dx x^2 \ln(1 - ze^{-ax^2}) \right] &= \frac{\partial}{\partial z} \left[\frac{1}{a^{3/2}} \sum_{l=1}^\infty \frac{z^l}{l^{5/2}} \right] \\
-\frac{4}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty dx x^2 \frac{\partial}{\partial z} \ln(1 - ze^{-ax^2}) &= \frac{1}{a^{3/2}} \sum_{l=1}^\infty \frac{1}{l^{5/2}} \frac{\partial z^l}{\partial z} \\
\frac{4}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty dx x^2 \frac{e^{-ax^2}}{1 - ze^{-ax^2}} &= \frac{1}{a^{3/2}} \sum_{l=1}^\infty \frac{z^{l-1}}{l^{3/2}} \\
\frac{4}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty dx x^2 \frac{e^{-ax^2}}{1 - ze^{-ax^2}} &= \frac{1}{a^{3/2}} \frac{1}{z} \sum_{l=1}^\infty \frac{z^l}{l^{3/2}} \\
\frac{4}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty dx x^2 \frac{1}{z^{-1}e^{ax^2} - 1} &= \frac{1}{a^{3/2}} \sum_{l=1}^\infty \frac{z^l}{l^{3/2}} = \frac{g_{3/2}(z)}{a^{3/2}}. \tag{3.7}
\end{aligned}$$

Aplicando estas relações às equações (3.3) e (3.4), se conclui que

$$\begin{aligned}
\frac{P}{k_B T} &= \left(\frac{2m\pi}{\beta h^2} \right)^{3/2} g_{5/2}(z) - \frac{1}{V} \ln(1 - z) \\
\frac{P}{k_B T} &= \frac{g_{5/2}(z)}{\lambda^3} - \frac{1}{V} \ln(1 - z) \tag{3.8}
\end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned}
\frac{1}{v} &= \left(\frac{2m\pi}{\beta h^2} \right)^{3/2} g_{3/2}(z) + \frac{1}{V} \frac{z}{1 - z} \\
\frac{1}{v} &= \frac{g_{3/2}(z)}{\lambda^3} + \frac{1}{V} \frac{z}{1 - z}, \tag{3.9}
\end{aligned}$$

onde

$$\lambda = \left(\frac{\beta \hbar^2}{2m\pi} \right)^{1/2} = \sqrt{\frac{2\pi\hbar^2}{mk_B T}}. \quad (3.10)$$

Este valor é da ordem do chamado comprimento de onda de de Broglie, com energia térmica $k_B T$. Por isso, este é chamado de *comprimento de onda térmico*.

Para que o valor de $\frac{1}{v}$ seja satisfeito, é necessário que

$$0 \leq z \leq 1. \quad (3.11)$$

No caso limite ($z = 1$),

$$g_{3/2}(1) = \sum_{l=1}^{\infty} \frac{1}{l^{3/2}} = \zeta\left(\frac{3}{2}\right) = 2,612\dots, \quad (3.12)$$

onde $\zeta(x)$ é a chamada *função zeta de Riemann*. Assim, é fácil ver que no intervalo em análise,

$$g_{3/2}(z) \leq 2.612\dots \quad (3.13)$$

Sabendo que, observando a eq. (2.96)

$$\langle n_0 \rangle = \frac{z}{1-z}, \quad (3.14)$$

é possível chegar a seguinte conclusão:

$$\frac{\langle n_0 \rangle}{V} = \frac{1}{v} - \frac{g_{3/2}(z)}{\lambda^3}. \quad (3.15)$$

Isto implica que este valor é positivo quando a temperatura e o volume específico são tais que

$$\frac{\lambda^3}{v} > g_{3/2}(1). \quad (3.16)$$

Ser $\frac{\langle n_0 \rangle}{V}$ positivo significa que uma fração finita das partículas do gás de bósons se encontra no estado fundamental ϵ_0 . Como foi explicado no início, esta situação caracteriza a chamada *condensação de Bose-Einstein*.

Com a conclusão acima, é possível estabelecer a chamada *temperatura crítica* T_c para um determinado valor de v . Esta é exatamente a temperatura máxima onde ainda é possível que

haja a BEC. Em suma,

$$\begin{aligned}
 \lambda_c^3 &= v g_{3/2}(1) \\
 \left(\frac{2\pi\hbar^2}{mk_B T_c} \right)^{3/2} &= v g_{3/2}(1) \\
 \frac{mk_B T_c}{2\pi\hbar^2} &= \frac{1}{[v g_{3/2}(1)]^{2/3}} \\
 T_c &= \frac{2\pi\hbar^2}{mk_B [v g_{3/2}(1)]^{2/3}}.
 \end{aligned} \tag{3.17}$$

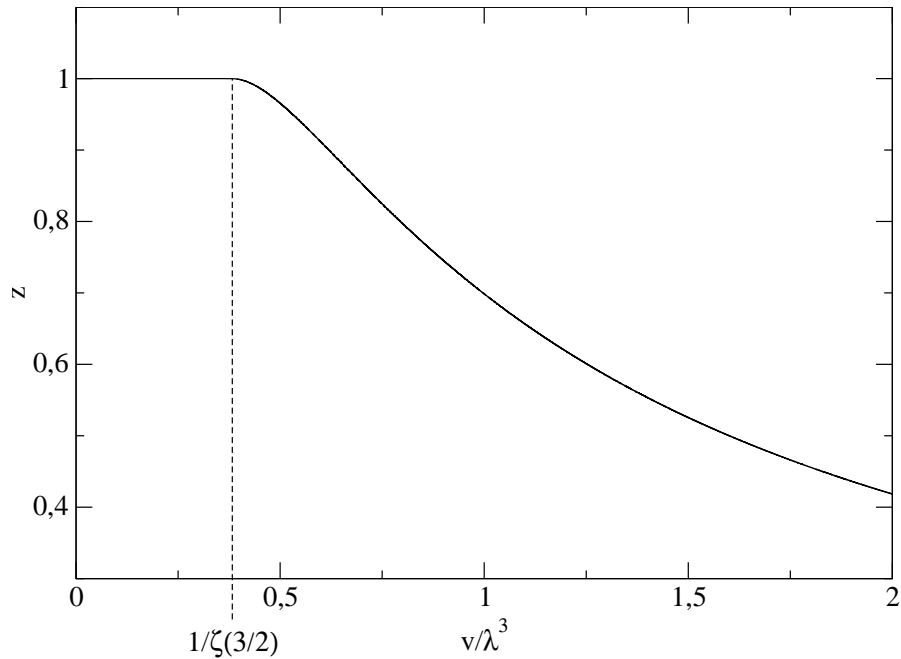
Similarmente, é também possível obter o volume crítico v_c :

$$v_c = \frac{\lambda}{g_{3/2}(1)}. \tag{3.18}$$

É possível determinar, numericamente, o valor da fugacidade z em função de T e de v para grandes volumes. Isso pode ser observado na figura 5. Assim, quando $V \rightarrow \infty$

$$z = \begin{cases} 1 & , \text{ se } \frac{\lambda^3}{v} \geq g_{3/2}(1); \\ \text{o resultado de } g_{3/2}(z) = \frac{\lambda^3}{v} & , \text{ se } \frac{\lambda^3}{v} \leq g_{3/2}(1). \end{cases} \tag{3.19}$$

Figura 5: Gráfico da fugacidade de um gás ideal de bósons, para $V \rightarrow \infty$.



Fonte: Adaptado de [23].

Rescrevendo a eq. (3.15), observa-se que

$$\begin{aligned}\frac{\langle n_0 \rangle}{V} &= \frac{N}{V} - \frac{g_{3/2}(z)}{\lambda^3} \\ \frac{\langle n_0 \rangle}{N} &= 1 - g_{3/2}(z) \frac{v}{\lambda^3}.\end{aligned}\quad (3.20)$$

Assim, a partir da eq. (3.19), é possível concluir que

$$\frac{\langle n_0 \rangle}{N} = \begin{cases} 1 - \frac{g_{3/2}(1)v}{\lambda^3} = 1 - \frac{\lambda_c^3}{\lambda^3} = 1 - \left(\frac{T}{T_c}\right)^{3/2} = 1 - \frac{v}{v_c}, & \text{se } \frac{\lambda^3}{v} \geq g_{3/2}(1); \\ 1 - \frac{\lambda^3}{v} \frac{v}{\lambda^3} = 1 - 1 = 0 & \text{se } \frac{\lambda^3}{v} \leq g_{3/2}(1). \end{cases}\quad (3.21)$$

o que está de acordo com os conceitos da BEC (seção 1.1).

Para o caso onde não existe o condensado de Bose-Einstein ($\lambda^3/v \leq g_{3/2}(1)$), de acordo com a eq. (3.19),

$$g_{3/2}(z) = \frac{\lambda^3}{v},\quad (3.22)$$

o que implica que

$$\frac{g_{3/2}(z)}{g_{3/2}(1)} = \frac{v_c}{v} = \left(\frac{T_c}{T}\right)^{3/2}.\quad (3.23)$$

Também se mostra válido o tratamento da eq. (3.8). Para isso, é interessante notar que

$$\frac{\ln(1-z)}{V} = 0, \text{ se } V \rightarrow \infty.\quad (3.24)$$

Para $v > v_c$, que é equivalente a segunda condição da eq. (3.19), $\ln(1-z)$ assume valores finitos. Isto faz com que, nestes casos, a equação acima seja óbvia. Quando $v < v_c$, é possível concluir, a partir da eq. (3.21), que

$$\begin{aligned}\frac{\langle n_0 \rangle}{N} &= 1 - \frac{v}{v_c} \\ \frac{z}{1-z} &= \frac{V}{v} \left(1 - \frac{v}{v_c}\right) \\ \frac{1}{1-z} &= V \underbrace{\frac{1}{z} \left(\frac{1}{v} - \frac{1}{v_c}\right)}_{\approx \text{constante}} \\ \frac{1}{1-z} &\propto V \\ \frac{\ln(1-z)}{V} &\propto \frac{\ln(1-z)}{\frac{1}{1-z}} \rightarrow \frac{1}{\frac{1}{1-z}} = 1 - z = 0,\end{aligned}\quad (3.25)$$

onde foi aplicada, na última parte, a conhecida regra de L'Hospital. Com esta informação, é

possível ver que

$$\frac{P}{k_B T} = \begin{cases} \frac{g_{5/2}(z)}{\lambda^3} & , \text{ se } v > v_c; \\ \frac{g_{5/2}(1)}{\lambda^3} & , \text{ se } v < v_c; \end{cases} \quad (3.26)$$

onde $g_{5/2}(1) = \zeta\left(\frac{5}{2}\right) = 1,342\dots$

3.1 Quebra de Simetria e Parâmetro de Ordem

Supondo que, em um dado sistema, os bósons permaneçam em seus níveis energéticos. Isto quer dizer que, neste caso,

$$\langle a_p^\dagger a_{p'} \rangle = \delta_{pp'} \langle a_p^\dagger a_p \rangle = \delta_{pp'} \langle n_p \rangle. \quad (3.27)$$

Assim, a eq. (2.128) se torna

$$\begin{aligned} \langle \psi^\dagger(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}') \rangle &= \frac{1}{V} \sum_p \sum_{p'} e^{i(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r} - \mathbf{p}'\cdot\mathbf{r}')} \delta_{pp'} \langle n_p \rangle \\ &= \frac{1}{V} \sum_p e^{i\mathbf{p}\cdot(\mathbf{r} - \mathbf{r}')} \langle n_p \rangle \\ &= \frac{\langle n_0 \rangle}{V} + \frac{1}{V} \sum_{p \neq 0} e^{i\mathbf{p}\cdot(\mathbf{r} - \mathbf{r}')} \langle n_p \rangle. \end{aligned} \quad (3.28)$$

Para $V \rightarrow \infty$, pela eq. (2.100),

$$\langle \psi^\dagger(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}') \rangle = \frac{\langle n_0 \rangle}{V} + \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3 p e^{i\mathbf{p}\cdot(\mathbf{r} - \mathbf{r}')} \langle n_p \rangle. \quad (3.29)$$

É sabido que

$$\int d^3 p e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}} \langle n_p \rangle \propto e^{-r}. \quad (3.30)$$

Assim, quando $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \rightarrow \infty$, o segundo termo da eq. (3.29) se anula. Com isso, se conclui que

$$\langle \psi^\dagger(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}') \rangle \xrightarrow{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \rightarrow \infty} \frac{\langle n_0 \rangle}{V}. \quad (3.31)$$

Penrose e Onsager [15] propuseram um critério geral para a relação acima, que pode ser descrito pela relação:

$$\langle \psi^\dagger(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}') \rangle \xrightarrow{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \rightarrow \infty} \langle \psi^\dagger(\mathbf{r}) \rangle \langle \psi(\mathbf{r}') \rangle. \quad (3.32)$$

O valor médio de $\psi(\mathbf{r})$ pode ser determinado através das equações (2.76) e (2.93):

$$\langle \psi(\mathbf{r}) \rangle = \frac{\text{Tr}(\psi(\mathbf{r}) e^{-\beta(H - \mu N)})}{Z(z, V, T)} = \frac{1}{Z(z, V, T)} \sum_{N=0}^{\infty} \sum_n \psi(\mathbf{r}) e^{-\beta(E_n - \mu N)}. \quad (3.33)$$

Define-se a seguinte funcional:

$$H'[\psi] = H - \mu N_{op}, \quad (3.34)$$

onde a dependência com $\psi(\mathbf{r})$ pode ser facilmente observada, tendo em vista as definições da seção 2.6.

Em sistemas onde $V \rightarrow \infty$, é possível que partículas passem a estar dispostas em diferentes níveis energéticos, de modo que a diferença $E_n - \mu N$ seja *a mesma* para diversos estados. Isto quer dizer que, nesta situação, $H'[\psi]$ se torna degenerado.

Se observa que, para cada possível número de partículas, o sistema pode possuir qualquer uma das energias totais permitidas. Assim, o valor médio pode ser então dado por

$$\langle \psi(\mathbf{r}) \rangle = \frac{1}{Z(z, V, T)} \sum_n \sum_{N=0}^{\infty} \psi(\mathbf{r}) e^{-\beta(E'_n[\psi])}. \quad (3.35)$$

Define-se então

$$\psi(\mathbf{r}) = |\psi(\mathbf{r})| e^{i\alpha}, \quad (3.36)$$

onde a fase α é um número real diferente para cada valor de N . Assim, como consequência,

$$\sum_{N=0}^{\infty} \rightarrow \int_0^{2\pi} d\alpha. \quad (3.37)$$

Pela degenerescência, a seguinte relação é válida:

$$H'[\psi] = H'[\psi e^{i\alpha}]. \quad (3.38)$$

Esta relação é um resultado da chamada *simetria global de calibre*. Deste modo,

$$\langle \psi(\mathbf{r}) \rangle = \frac{1}{Z(z, V, T)} \sum_n |\psi(\mathbf{r})| e^{-\beta(E'_n[\psi])} \int_0^{2\pi} d\alpha e^{i\alpha} = 0. \quad (3.39)$$

Tendo em vista as equações (3.31) e (3.32), se este resultado fosse correto, não seria possível a existência de bósons no estado fundamental. Consequentemente, o condensado de Bose-Einstein não existiria, o que não é verdade.

Para resolver este problema, se diz que existe, para determinadas temperaturas, uma *quebra de simetria espontânea*. Um sistema que se assemelha a este é o da magnetização espontânea de ferromagnetos. Neste caso, é a média do momento magnético $\langle M \rangle$ que se anula. Para resolver este paradoxo, diz-se que o sistema passa a sofrer a ação de um campo magnético externo H de direção arbitrária, mas fixa. Assim, é adicionado ao hamiltoniano a energia referente a este campo, $-MH$. A média é obtida no limite em que $H \rightarrow 0$.

Em analogia com esta situação, para inserir a quebra de simetria no hamiltoniano, basta

que o sistema “sofra a ação”, por assim dizer, de “pseudo-campos”, $\mathbf{v}(\mathbf{r})$ e $\mathbf{v}^*(\mathbf{r})$, relativos a cada um dos operadores $\psi(\mathbf{r})$ e $\psi^\dagger(\mathbf{r})$, respectivamente. Assim, define-se:

$$\begin{aligned}
H''[\psi, \mathbf{v}] &= H - \mu N_{op} - \int d^3 r \left[\psi(\mathbf{r}) \mathbf{v}(\mathbf{r}) + \psi^\dagger(\mathbf{r}) \mathbf{v}^*(\mathbf{r}) \right] \\
&= H - \mu N_{op} - \frac{1}{\sqrt{V}} \int d^3 r \sum_p \left[a_p \mathbf{v}_p e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}} + a_p^\dagger \mathbf{v}_p^* e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}} \right] \\
&= H - \mu N_{op} - \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_p \left[a_p \mathbf{v}_p \underbrace{\int d^3 r e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}}}_{V\delta_{0p}} + a_p^\dagger \mathbf{v}_p^* \underbrace{\int d^3 r e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}}}_{V\delta_{p0}} \right] \\
&= H - \mu N_{op} - \sqrt{V} \left[a_0 \mathbf{v}_0 + a_0^\dagger \mathbf{v}_0^* \right]. \tag{3.40}
\end{aligned}$$

Dizendo que

$$\begin{aligned}
\psi_p &= \frac{a_p}{\sqrt{V}} \\
\psi_p^\dagger &= \frac{a_p^\dagger}{\sqrt{V}}
\end{aligned} \tag{3.41}$$

se conclui que

$$H''[\psi, \mathbf{v}] = H - \mu N_{op} - V \left[\psi_0 \mathbf{v}_0 + \psi_0^\dagger \mathbf{v}_0^* \right]. \tag{3.42}$$

Assim, o valor médio pode ser dado por

$$\begin{aligned}
\langle \psi(\mathbf{r}) \rangle &= \lim_{v_0 \rightarrow 0} \lim_{V \rightarrow \infty} \frac{1}{Z(z, V, T)} \sum_{N=0}^{\infty} \sum_n \psi(\mathbf{r}) e^{-\beta(E_n - \mu N - V[\psi_0 \mathbf{v}_0 + \psi_0^\dagger \mathbf{v}_0^*])} \\
\int d^3 r e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}} \langle \psi_p \rangle &= \lim_{v_0 \rightarrow 0} \lim_{V \rightarrow \infty} \frac{1}{Z(z, V, T)} \sum_{N=0}^{\infty} \sum_n \int d^3 r e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}} \psi_p e^{-\beta(E_n - \mu N - V[\psi_0 \mathbf{v}_0 + \psi_0^\dagger \mathbf{v}_0^*])} \\
\int d^3 r e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}} \langle \psi_p \rangle &= \lim_{v_0 \rightarrow 0} \lim_{V \rightarrow \infty} \int d^3 r e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}} \frac{1}{Z(z, V, T)} \sum_{N=0}^{\infty} \sum_n \psi_p e^{-\beta(E_n - \mu N - V[\psi_0 \mathbf{v}_0 + \psi_0^\dagger \mathbf{v}_0^*])} \\
\langle \psi_p \rangle &= \lim_{v_0 \rightarrow 0} \lim_{V \rightarrow \infty} \frac{1}{Z(z, V, T)} \sum_{N=0}^{\infty} \sum_n \psi_p e^{-\beta(E_n - \mu N - V[\psi_0 \mathbf{v}_0 + \psi_0^\dagger \mathbf{v}_0^*])} \equiv \Psi_p. \tag{3.43}
\end{aligned}$$

Analogamente,

$$\Psi_p^* \equiv \lim_{v_0 \rightarrow 0} \lim_{V \rightarrow \infty} \frac{1}{Z(z, V, T)} \sum_{N=0}^{\infty} \sum_n \psi_p^\dagger e^{-\beta(E_n - \mu N - V[\psi_0 \mathbf{v}_0 + \psi_0^\dagger \mathbf{v}_0^*])}. \tag{3.44}$$

Gunton e Buckingham [24] denominaram Ψ_p e Ψ_p^* , em analogia com o caso da magnetização espontânea, de *momentos de Bose* (ou momentos de Bose por unidade de volume). Note que, para altas temperaturas, os momentos de Bose são irrelevantes, pois são aproximadamente equivalentes aos resultados obtidos sem o pseudo-campo. No entanto, para temperaturas muito baixas, βv_0 (e, conseqüentemente, βv_0^\dagger) passa a ter valores relevantes. Em outras palavras, com este tratamento matemático, o condensado de Bose-Einstein efetivamente aparece a

baixas temperaturas.

Na Mecânica Estatística, quando o sistema possui uma quebra de simetria a baixas temperaturas, o parâmetro associado a esta quebra é denominado *parâmetro de ordem*. Este parâmetro deve ser uma quantidade termodinâmica *extensiva*, ou seja, deve depender da quantidade de partículas em análise. No caso em consideração, $V\Psi_0$, chamado de *momento total de Bose* possui estas características. Também são extensivas a quantidade $V\Psi_0^*$, o número de partículas N e o próprio volume V . O parâmetro de ordem sempre está associado a uma quantidade termodinâmica *intensiva*, independente da quantidade de partículas. É fácil ver que, no caso em análise, v_0 , v_0^* , μ e $-P$ possuem este papel.

A temperatura crítica pode ser então definida como a temperatura limite onde o parâmetro de ordem passa a ser relevante. Nas proximidades de T_c , este passa a ser a única quantidade termodinâmica importante. Na Mecânica Estatística, o *trabalho* pode ser definido pela seguinte transformação infinitesimal:

$$dW = -\sum_i Y_i dX_i, \quad (3.45)$$

onde Y_i é uma quantidade intensiva, e X_i , extensiva. Para um gás de Bose,

$$dW = PdV - \mu dN - v_0 d(V\Psi_0) - v_0^* d(V\Psi_0^*). \quad (3.46)$$

Definindo a forma infinitesimal da primeira lei da termodinâmica,

$$dU = TdS - dW, \quad (3.47)$$

e sabendo que

$$U \equiv E_n, \quad (3.48)$$

se estabelece a conhecida relação de Gibbs-Duhem:

$$\begin{aligned} d(\mu N - V [\psi_0 v_0 + \psi_0^\dagger v_0^*]) &= TdS - PdV - \mu dN - v_0 d(V\Psi_0) - v_0^* d(V\Psi_0^*) \\ VdP &= SdT + Nd\mu + V\Psi_0 dv_0 + V\Psi_0^* dv_0^* \\ dP &= sdT + \rho d\mu + \Psi_0 dv_0 + \Psi_0^* dv_0^* \end{aligned} \quad (3.49)$$

, onde $s = S/V$ e $\rho = N/V$. Assim

$$s = \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_{\mu, v_0}, \quad (3.50)$$

$$\rho = \left(\frac{\partial P}{\partial \mu} \right)_{T, v_0} \quad (3.51)$$

e

$$\Psi_0 = \left(\frac{\partial P}{\partial \mathbf{v}_0} \right)_{T, \mu}. \quad (3.52)$$

Associando as equações (2.121), (2.122) e (3.42), o hamiltoniano do sistema se torna

$$H''[\psi, \mathbf{v}] = \sum_p (\varepsilon_p - \mu) a_p^\dagger a_p - \sqrt{V} \left[a_0 \mathbf{v}_0 + a_0^\dagger \mathbf{v}_0^* \right]. \quad (3.53)$$

É possível efetuar uma mudança de base, através de transformações canônicas:

$$\begin{aligned} b_0 &= a_0 - \sqrt{V} \frac{\mathbf{v}_0^*}{\varepsilon_0 - \mu} \\ b_0^\dagger &= a_0^\dagger - \sqrt{V} \frac{\mathbf{v}_0}{\varepsilon_0 - \mu} \\ b_p &= a_p, \text{ se } p \neq 0 \\ b_p^\dagger &= a_p^\dagger, \text{ se } p \neq 0. \end{aligned} \quad (3.54)$$

Assim,

$$H''[\psi, \mathbf{v}] = \sum_p (\varepsilon_p - \mu) b_p^\dagger b_p - V \frac{\mathbf{v}_0^* \mathbf{v}_0}{\varepsilon_0 - \mu}. \quad (3.55)$$

Comparando as equações (2.93) e (3.44), o ensemble grande-canônico passa a ser

$$Z(\mu, V, T) = \text{Tr} \left(e^{-\beta \left[\sum_p (\varepsilon_p - \mu) b_p^\dagger b_p - V \frac{\mathbf{v}_0^* \mathbf{v}_0}{\varepsilon_0 - \mu} \right]} \right) = e^{\beta V \frac{\mathbf{v}_0^* \mathbf{v}_0}{\varepsilon_0 - \mu}} \text{Tr} \left(e^{-\beta \sum_p (\varepsilon_p - \mu) b_p^\dagger b_p} \right). \quad (3.56)$$

Considerando que, por serem transformações canônicas, pode-se concluir que

$$b_p^\dagger b_p = 0, 1, 2, \dots \quad (3.57)$$

a associação do ensemble com as equações (2.34) e (2.91) resulta na seguinte equação para a pressão:

$$\begin{aligned} P &= \lim_{V \rightarrow \infty} \left[-\frac{\mathbf{v}_0^* \mathbf{v}_0}{\mu} + \frac{1}{\beta V} \ln \text{Tr} \left(e^{-\beta \sum_p (\frac{p^2}{2m} - \mu) b_p^\dagger b_p} \right) \right] \\ &= -\frac{\mathbf{v}_0^* \mathbf{v}_0}{\mu} + \lim_{V \rightarrow \infty} \left[\frac{1}{\beta V} \ln \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{\{b_p^\dagger b_p\}} \left(e^{-\beta \sum_p (\frac{p^2}{2m} - \mu) b_p^\dagger b_p} \right) \right]. \end{aligned} \quad (3.58)$$

Comparando este resultado com a eq. (2.85), e realizando um procedimento análogo, tem-se que

$$P = -\frac{\mathbf{v}_0^* \mathbf{v}_0}{\mu} - \lim_{V \rightarrow \infty} \left[\frac{1}{\beta V} \sum_p \ln \left(1 - e^{-\beta (\frac{p^2}{2m} - \mu)} \right) \right]. \quad (3.59)$$

Até este momento, foi considerado que as partículas se encontravam em um espaço tridimensional. Porém, os ultimos resultados, envolvendo o momento, podem ser aplicados

a uma dimensão arbitrária d qualquer. Assim, se efetua uma transformação análoga a da eq. (2.100):

$$\sum_p f(p) \rightarrow \frac{V}{h^d} \int f(p) d^d p. \quad (3.60)$$

Então,

$$\begin{aligned} P &= -\frac{v_0^* v_0}{\mu} - \frac{1}{\beta h^d} \lim_{V \rightarrow \infty} \int d^d p \ln \left(1 - e^{-\beta(\frac{p^2}{2m} - \mu)} \right) \\ &= -\frac{v_0^* v_0}{\mu} - \frac{1}{\beta h^d} \lim_{V \rightarrow \infty} \int d^d p \left[-\sum_{l=1}^{\infty} \frac{e^{-\beta(\frac{p^2}{2m} - \mu)l}}{l} \right] \\ &= -\frac{v_0^* v_0}{\mu} + \frac{1}{\beta h^d} \sum_{l=1}^{\infty} \frac{e^{\beta \mu l}}{l} \lim_{V \rightarrow \infty} \int d^d p e^{-\beta \frac{p^2}{2m} l} \\ &= -\frac{v_0^* v_0}{\mu} + \frac{1}{\beta h^d} \sum_{l=1}^{\infty} \frac{e^{\beta \mu l}}{l} \left[\int_0^{\infty} d p e^{-\beta \frac{p^2}{2m} l} \right]^d \\ &= -\frac{v_0^* v_0}{\mu} + \frac{1}{\beta (2\pi \hbar)^d} \sum_{l=1}^{\infty} \frac{e^{\beta \mu l}}{l} \left[\frac{2m\pi}{\beta l} \right]^{\frac{d}{2}} \\ &= -\frac{v_0^* v_0}{\mu} + \frac{1}{\beta} \left[\frac{m}{2\pi \hbar^2 \beta} \right]^{\frac{d}{2}} \sum_{l=1}^{\infty} \frac{e^{\beta \mu l}}{l^{\frac{d}{2}+1}}. \end{aligned} \quad (3.61)$$

Com as equações (3.5) e (3.10), conclui-se que

$$P = -\frac{v_0^* v_0}{\mu} + \frac{k_B T}{\lambda^d} g_{\frac{d}{2}+1} \left(e^{\frac{\mu}{k_B T}} \right). \quad (3.62)$$

Assim as quantidades extensivas se tornam

$$\frac{s}{k_B} = \frac{1}{\lambda^d} \left[\left(\frac{d}{2} + 1 \right) g_{\frac{d}{2}+1} \left(e^{\frac{\mu}{k_B T}} \right) - \frac{\mu}{k_B T} g_{\frac{d}{2}} \left(e^{\frac{\mu}{k_B T}} \right) \right], \quad (3.63)$$

$$\rho = \frac{v_0^* v_0}{\mu^2} + \frac{1}{\lambda^d} g_{\frac{d}{2}} \left(e^{\frac{\mu}{k_B T}} \right) \quad (3.64)$$

e

$$\Psi_0 = -\frac{v_0^*}{\mu}. \quad (3.65)$$

Unindo as duas últimas equações,

$$\rho = \Psi_0^* \Psi_0 + \frac{1}{\lambda^d} g_{\frac{d}{2}} \left(e^{-\Psi_0^* k_B T} \right). \quad (3.66)$$

Mas,

$$\Psi_0^* \Psi_0 = \langle \psi_0^\dagger | \psi_0 \rangle = \frac{\langle a_0^\dagger | a_0 \rangle}{V} = \frac{\langle a_0^\dagger a_0 \rangle}{V} = \frac{\langle n_0 \rangle}{V}. \quad (3.67)$$

Assim, a equação para ρ pode ser reescrita como

$$\frac{N}{V} = \frac{\langle n_0 \rangle}{V} + \frac{1}{\lambda^d} g_{\frac{d}{2}} \left(e^{-\frac{\nu_0^*}{\Psi_0 k_B T}} \right). \quad (3.68)$$

Relembrando o fato de que o tratamento matemático considera que $\nu_0 \rightarrow 0$, é possível estabelecer T_c como a temperatura mínima para que não existam partículas no estado fundamental. Assim,

$$\frac{N}{V} = \frac{1}{\lambda_c^d} g_{\frac{d}{2}}(1) = \frac{1}{\lambda_c^d} \zeta \left(\frac{d}{2} \right). \quad (3.69)$$

A função zeta de Riemann possui a seguinte propriedade:

$$\zeta(s) \text{ converge, se } s > 1. \quad (3.70)$$

Por conta disso,

$$\begin{aligned} \rho &= \frac{1}{\lambda_c^d} \zeta \left(\frac{d}{2} \right), \text{ para } d > 2 \\ \lambda_c^d &= \frac{1}{\rho} \zeta \left(\frac{d}{2} \right), \text{ para } d > 2. \end{aligned} \quad (3.71)$$

Por fim, a eq. (3.68) se torna (para $d > 2$)

$$\begin{aligned} 1 &= \frac{1}{\rho} \frac{\langle n_0 \rangle}{V} + \frac{\lambda_c^d}{\lambda^d} \frac{g_{\frac{d}{2}} \left(e^{\frac{\mu}{k_B T}} \right)}{\zeta \left(\frac{d}{2} \right)} \\ 1 &= \frac{1}{\rho} \frac{\langle n_0 \rangle}{V} + \left(\frac{T}{T_c} \right)^{\frac{d}{2}} \frac{g_{\frac{d}{2}} \left(e^{\frac{\mu}{k_B T}} \right)}{\zeta \left(\frac{d}{2} \right)}. \end{aligned} \quad (3.72)$$

Pode-se ver que, para $T < T_c$, a quantidade de bósons no estado fundamental passa a ser relevante.

Sem perda de generalidade, é possível considerar que ν_0 é um número real. Assim, a equação acima pode ser reescrita como

$$\begin{aligned} 1 &= \frac{1}{\rho} \frac{\Psi_0^2}{V} + \left(\frac{T}{T_c} \right)^{\frac{d}{2}} \frac{g_{\frac{d}{2}} \left(e^{\frac{\mu}{k_B T}} \right)}{\zeta \left(\frac{d}{2} \right)} \\ \frac{g_{\frac{d}{2}} \left(e^{\frac{\mu}{k_B T}} \right)}{\zeta \left(\frac{d}{2} \right)} &= \left(\frac{T_c}{T} \right)^{\frac{d}{2}} \left(1 - \frac{\Psi_0^2}{\rho} \right). \end{aligned} \quad (3.73)$$

É interessante definir

$$G_d(x) = 1 - \frac{g_{\frac{d}{2}}(e^x)}{\zeta \left(\frac{d}{2} \right)}, \quad (3.74)$$

que, por consequência, possui a seguinte função inversa

$$G'_d(z) = x, \text{ onde } G_d(x) = z. \quad (3.75)$$

Assim

$$G'_d(z) = -\frac{\mu}{k_B T} = \frac{v_0}{\Psi_0 k_B T} \quad (3.76)$$

e

$$z = 1 - \left(\frac{T_c}{T}\right)^{\frac{d}{2}} \left(1 - \frac{\Psi_0^2}{\rho}\right). \quad (3.77)$$

É também interessante definir uma quantidade adimensional para a temperatura:

$$t = \frac{T}{T_c} - 1. \quad (3.78)$$

Sabe-se que, pelas equações (3.65) e (3.67),

$$\frac{\langle n_0 \rangle}{V} = -\frac{v_0 \Psi_0}{\mu}. \quad (3.79)$$

Se $v_0 \rightarrow 0$, se conclui que

$$\begin{cases} \mu \ll 1; \Psi_0 \gg 1, \text{ para } t < 0 \\ \mu \gg 1; \Psi_0 \ll 1, \text{ para } t > 0. \end{cases} \quad (3.80)$$

Assim, na temperatura crítica, os valores de t , μ e Ψ_0 também se anulam, e a seguinte aproximação é válida:

$$\frac{v_0}{\Psi_0 k_B T_c} \approx G'_d \left(\frac{\Psi_0^2}{\rho} + \frac{d}{2} t \right). \quad (3.81)$$

3.2 Dimensionalidade e Expoentes Críticos

Reescrevendo a eq. (3.74), tem-se

$$G_d(x) = \frac{g_{\frac{d}{2}}(e^0) - g_{\frac{d}{2}}(e^x)}{\zeta\left(\frac{d}{2}\right)}. \quad (3.82)$$

A função $g_\sigma(e^x)$ tem sua forma integral definida em [25] como sendo,

$$g_\sigma(e^x) = \frac{1}{\Gamma(\sigma)} \int_0^\infty \frac{r^{\sigma-1}}{e^{r+x} - 1} dr. \quad (3.83)$$

Assim,

$$\begin{aligned} G_d(x) &= \frac{1}{\Gamma\left(\frac{d}{2}\right) \zeta\left(\frac{d}{2}\right)} \int_0^\infty \left(\frac{r^{\frac{d}{2}-1}}{e^r - 1} - \frac{r^{\frac{d}{2}-1}}{e^{r+x} - 1} \right) dr \\ &= \frac{e^x - 1}{\Gamma\left(\frac{d}{2}\right) \zeta\left(\frac{d}{2}\right)} \underbrace{\int_0^\infty \frac{e^r r^{\frac{d}{2}-1}}{(e^r - 1)(e^{r+x} - 1)} dr}_{I_{\frac{d}{2}}(x)}. \end{aligned} \quad (3.84)$$

Para $d > 4$, a integral $I_{\frac{d}{2}}(x)$ converge. Além disso, considerando que $x \rightarrow 0$, $e^x \approx 1 + x$. Assim:

$$G_d(x) \propto x, \text{ para } d > 4. \quad (3.85)$$

Se $d \leq 4$, $I_{\frac{d}{2}}(x)$ diverge. Então, considerando que, para $x < \delta$ e $\delta \ll 1$,

$$e^r \approx 1 + r \Rightarrow e^r r^{\frac{d}{2}-1} \approx r^{\frac{d}{2}-1}, \text{ se } 2 < d \leq 4, \quad (3.86)$$

se mostra necessário o seguinte tratamento matemático:

$$I_{\frac{d}{2}}(x) = \int_0^\delta \frac{r^{\frac{d}{2}-1}}{r(r+x)} dr + \int_\delta^\infty \frac{e^r r^{\frac{d}{2}-1}}{(e^r - 1)(e^{r+x} - 1)} dr. \quad (3.87)$$

Definindo $r' = r/x$, tem-se que

$$I_{\frac{d}{2}}(x) = x^{\frac{d}{2}-2} \left(\int_0^{\frac{\delta}{x}} \frac{r'^{\frac{d}{2}-2}}{r'+1} dr' + \int_{\frac{\delta}{x}}^\infty \frac{e^{xr'} r'^{\frac{d}{2}-1}}{(e^{xr'} - 1)(e^{x(r'+1)} - 1)} dr' \right). \quad (3.88)$$

Para $x \rightarrow 0$, a segunda integral se anula. Para $2 < d < 4$ a primeira integral acima converge, de modo que

$$I_{\frac{d}{2}}(x) \propto x^{\frac{d}{2}-2}, \text{ para } 2 < d < 4. \quad (3.89)$$

Por fim,

$$G_d(x) \propto x^{\frac{d}{2}-1}, \text{ para } 2 < d < 4. \quad (3.90)$$

Especificamente, para $d = 4$, a integral se torna

$$I_2(x) = \int_0^{\frac{\delta}{x}} \frac{1}{r'+1} dr' = \ln\left(\frac{\delta}{x} + 1\right) = \ln\left(\frac{1}{x}\right) + \ln(\delta + x) \approx \ln\left(\frac{1}{x}\right). \quad (3.91)$$

Assim,

$$G_4(x) \propto x \ln\left(\frac{1}{x}\right), \text{ para } d = 4. \quad (3.92)$$

Com estes resultados, e considerando que

$$\begin{aligned}
x &\propto y \ln\left(\frac{1}{y}\right) \\
y &= C \frac{x}{\ln\left(\frac{1}{y}\right)} \\
y &= C \frac{x}{\ln\left(\frac{1}{C \frac{x}{\ln\left(\frac{1}{y}\right)}}\right)} = C \frac{x}{\ln\left(\frac{1}{x}\right) + \ln\left(\frac{\ln\left(\frac{1}{y}\right)}{C}\right)} \approx C \frac{x}{\ln\left(\frac{1}{x}\right)} \\
y &\propto \frac{x}{\ln\left(\frac{1}{x}\right)}, \text{ se } y \rightarrow 0,
\end{aligned} \tag{3.93}$$

se conclui, a partir da eq. (3.75), que

$$G'_d(z) \propto \begin{cases} z^{\frac{2}{d-2}} & , \text{ para } 2 < d < 4 \\ \frac{z}{\ln\left(\frac{1}{z}\right)} & , \text{ para } d = 4 \\ z & , \text{ para } d > 4. \end{cases} \tag{3.94}$$

Nas proximidades da temperatura crítica, a eq. (3.81) é válida, de modo que

$$\frac{\nu_0}{\Psi_0 k_B T_c} \propto \begin{cases} \left(\frac{\Psi_0^2}{\rho} + \frac{d}{2}t\right)^{\frac{2}{d-2}} & , \text{ para } 2 < d < 4 \\ \frac{\frac{\Psi_0^2}{\rho} + 2t}{\ln\left[\left(\frac{\Psi_0^2}{\rho} + 2t\right)^{-1}\right]} & , \text{ para } d = 4 \\ \frac{\Psi_0^2}{\rho} + \frac{d}{2}t & , \text{ para } d > 4. \end{cases} \tag{3.95}$$

A dependência entre o crescimento ν_0 e o de Ψ_0 pode ser determinada através de uma grandeza termodinâmica denominada *susceptibilidade*. Para uma dada temperatura, esta pode ser definida como

$$\chi = k_B T \left(\frac{\partial \Psi_0}{\partial \nu_0} \right)_T. \tag{3.96}$$

A partir da eq. (3.27), a chamada *função de correlação* é definida como

$$C_{pp'} = \langle \psi_p^\dagger \psi_{p'} \rangle = \frac{\langle n_p \rangle}{V} \delta_{pp'}. \tag{3.97}$$

Esta função define, neste caso, o grau de influência existente entre os bósons. A sua transformada é dada por

$$C(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \sum_p \sum_{p'} C_{pp'} e^{i(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - \mathbf{p}' \cdot \mathbf{r}')}. \tag{3.98}$$

Assim,

$$C(\mathbf{r}) = C(\mathbf{r} - \mathbf{0}) = \sum_p \sum_{p'} C_{pp'} e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r})} = \sum_p \sum_{p'} \frac{\langle n_p \rangle}{V} \delta_{pp'} e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r})} = \sum_p \frac{\langle n_p \rangle}{V} e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r})}. \quad (3.99)$$

Utilizando a eq. (3.60), tem-se que

$$C(\mathbf{r}) = \langle n_0 \rangle e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{0} \cdot \mathbf{r})} + \frac{1}{h^d} \int d^d p \langle n_p \rangle e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r})} = \Psi_0^2 + \frac{1}{h^d} \int d^d p \frac{e^{\frac{i}{\hbar}(pr \cos \phi)}}{e^{\beta \left(\frac{p^2}{2m} - \mu \right)} - 1}. \quad (3.100)$$

A chamada *função adimensional de correlação* é dada por

$$g(\mathbf{r}) = \frac{\lambda^d}{(4\pi)^{\frac{d}{2}}} [C(\mathbf{r}) - \Psi_0^2] = \frac{\lambda^d}{(4\pi)^{\frac{d}{2}}} \frac{1}{h^d} \int d^d p \frac{e^{\frac{i}{\hbar}(pr \cos \phi)}}{e^{\beta \left(\frac{p^2}{2m} - \mu \right)} - 1}. \quad (3.101)$$

Escrevendo a equação acima em coordenadas n-esféricas, tem-se que

$$g(\mathbf{r}) = \frac{\lambda^d}{(4\pi)^{\frac{d}{2}}} \frac{1}{h^d} \frac{2\pi^{\frac{d-1}{2}}}{\Gamma\left(\frac{d-1}{2}\right)} \int_0^\infty dp \frac{p^{d-1}}{e^{\beta \left(\frac{p^2}{2m} - \mu \right)} - 1} \int_0^\pi d\phi e^{\frac{i}{\hbar}(pr \cos \phi)} \sin^{d-2} \phi. \quad (3.102)$$

Com $x = \frac{pr}{\hbar}$, a equação acima pode ser escrita como

$$g(\mathbf{r}) = \frac{\lambda^d}{(4\pi)^{\frac{d}{2}}} \frac{1}{(2\pi)^d r^d} \frac{2\pi^{\frac{d-1}{2}}}{\Gamma\left(\frac{d-1}{2}\right)} \int_0^\infty dx \frac{x^{d-1}}{e^{\beta \left(\frac{x^2 \hbar^2}{2mr^2} - \mu \right)} - 1} \int_0^\pi d\phi e^{ix \cos \phi} \sin^{d-2} \phi. \quad (3.103)$$

Uma das definições da chamada *função de Bessel de primeiro tipo* é dada pela seguinte integral:

$$J_\nu(z) = \frac{\left(\frac{z}{2}\right)^\nu}{\pi^{\frac{1}{2}} \Gamma\left(\nu + \frac{1}{2}\right)} \int_0^\pi e^{iz \cos \phi} \sin^{2\nu} \phi d\phi, \text{ se } \Re(\nu) > -\frac{1}{2} \text{ e } |\arg z| < \pi. \quad (3.104)$$

Se $\nu = \frac{d}{2} - 1$ e $z = x$, a equação acima se torna

$$J_{\frac{d}{2}-1}(x) = \frac{\left(\frac{x}{2}\right)^{\frac{d}{2}-1}}{\pi^{\frac{1}{2}} \Gamma\left(\frac{d-1}{2}\right)} \int_0^\pi e^{ix \cos \phi} \sin^{d-2} \phi d\phi. \quad (3.105)$$

Sabendo disto, a eq. (3.103) se torna

$$g(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{d}{2}}} \frac{\lambda^d}{(4\pi)^{\frac{d}{2}} r^d} \int_0^\infty dx \frac{x^{\frac{d}{2}} J_{\frac{d}{2}-1}(x)}{e^{\beta \left(\frac{x^2 \hbar^2}{2mr^2} - \mu \right)} - 1}. \quad (3.106)$$

Por fim, definindo $R = \frac{2\sqrt{\pi}r}{\lambda}$ e

$$\xi = (-\beta\mu)^{-\frac{1}{2}}, \quad (3.107)$$

onde ξ é conhecido como *comprimento de correlação*, se conclui que

$$g(r) \propto R^{-d} \int_0^\infty \frac{x^{\frac{d}{2}} J_{\frac{d}{2}-1}(x)}{e^{\frac{x^2}{R^2} + \frac{1}{\xi^2}} - 1} dx. \quad (3.108)$$

Como, devido à condição

$$\frac{x^2}{R^2} + \frac{1}{\xi^2} \ll 1, \quad (3.109)$$

a seguinte aproximação é válida:

$$g(r) \propto R^{2-d} \int_0^\infty \frac{x^{\frac{d}{2}} J_{\frac{d}{2}-1}(x)}{x^2 + \frac{R^2}{\xi^2}} dx. \quad (3.110)$$

Definindo $t = x \frac{\xi}{R}$ e $u = \frac{R}{\xi}$, tem-se que

$$\begin{aligned} \int_0^\infty \frac{x^{\frac{d}{2}} J_{\frac{d}{2}-1}(x)}{x^2 + \frac{R^2}{\xi^2}} dx &= \left(\frac{R}{\xi} \right)^{\frac{d}{2}-1} \int_0^\infty \frac{\frac{\xi^{\frac{d}{2}+1}}{R^{\frac{d}{2}+1}} x^{\frac{d}{2}} J_{\frac{d}{2}-1}(x)}{\frac{\xi^2}{R^2} x^2 + 1} dx \\ &= \left(\frac{R}{\xi} \right)^{\frac{d}{2}-1} \int_0^\infty \frac{t^{\frac{d}{2}} J_{\frac{d}{2}-1}(ut)}{t^2 + 1} dt \\ &= \left(\frac{R}{\xi} \right)^{\frac{d}{2}-1} K_{\frac{d}{2}-1}(u) = \left(\frac{R}{\xi} \right)^{\frac{d}{2}-1} K_{\frac{d}{2}-1} \left(\frac{R}{\xi} \right), \end{aligned} \quad (3.111)$$

onde foi utilizada uma transformada de Hankel e $K_n(x)$ é uma função de Bessel de terceiro tipo modificada. Assim,

$$g(r) \propto R^{2-d} \left(\frac{R}{\xi} \right)^{\frac{d}{2}-1} K_{\frac{d}{2}-1} \left(\frac{R}{\xi} \right). \quad (3.112)$$

Nas proximidades de T_c , muitas quantidades termodinâmicas apresentam singularidades. A natureza destas singularidades pode ser descrita através dos chamados *expoentes críticos*. As definições destes expoentes podem ser sumarizadas na tabela 1.

O expoente β pode ser obtido pela eq (3.95), considerando que $v_0 = 0$. Nas três possibilidades, uma parte das soluções pode ser dada pela equação

$$\begin{aligned} \frac{\Psi_0^2}{\rho} &= -\frac{d}{2}t \\ \Psi_0 &= \pm \left(-\rho \frac{d}{2}t \right)^{\frac{1}{2}}, \text{ para } t < 0, \end{aligned} \quad (3.113)$$

o que indica que, se $t \rightarrow 0^-$,

$$\Psi_0 \propto t^{\frac{1}{2}}. \quad (3.114)$$

Tabela 1: Tabela dos expoentes críticos e suas respectivas quantidades relacionadas.

Expoente crítico	Quantidade termodinâmica
$\hat{\alpha}$	$c_v \propto t ^{-\hat{\alpha}}$
β	$\Psi_0 \propto t ^\beta$
γ	$\chi \propto t ^{-\gamma}$
δ	$v_0 \propto \Psi_0^\delta$
$\hat{\nu}$	$\xi \propto t ^{-\hat{\nu}}$
η	$g(r) \propto R^{-(d-2+\eta)}$

O expoente δ também pode ser obtido pela eq (3.95), para $t = 0$, ou seja,

$$v_0 \propto \begin{cases} \Psi_0 \Psi_0^{2\frac{2}{d-2}} = \Psi_0^{\frac{d+2}{d-2}} & , \text{ para } 2 < d < 4 \\ \Psi_0 \frac{\Psi_0^2}{\ln[\Psi_0^{-1}]} = \frac{\Psi_0^3}{\ln[\Psi_0^{-1}]} = \Psi_0^{3_l} & , \text{ para } d = 4 \\ \Psi_0 \Psi_0^2 = \Psi_0^3 & , \text{ para } d > 4, \end{cases} \quad (3.115)$$

onde se define x_l pela seguinte relação

$$f^{x_l} \equiv \frac{f^x}{\ln[f^{-1}]} \quad (3.116)$$

O expoente γ pode ser obtido por se utilizar a eq. (3.96), de modo que

$$\chi \propto \begin{cases} \left[\frac{d+2}{d-2} \left(\Psi_0^{\frac{d+2}{d-2}} \rho^{-\frac{2}{d-2}} \right) + \left(\frac{d}{2} t \right)^{\frac{2}{d-2}} \right]^{-1} & , \text{ para } 2 < d < 4 \\ \frac{\left(\ln \left[\left(\frac{\Psi_0^2}{\rho} + 2t \right)^{-1} \right] \right)^2}{\left(\frac{3\Psi_0^2}{\rho} + 2t \right) \ln \left[\left(\frac{\Psi_0^2}{\rho} + 2t \right)^{-1} \right] - \frac{2\Psi_0^2}{\rho}} & , \text{ para } d = 4 \\ \left[\frac{3\Psi_0^2}{\rho} + \frac{d}{2} t \right]^{-1} & , \text{ para } d > 4. \end{cases} \quad (3.117)$$

Para $t \rightarrow 0^+$, $\Psi_0 = 0$, de modo que

$$\chi \propto \begin{cases} t^{-\frac{2}{d-2}} & , \text{ para } 2 < d < 4 \\ \frac{\ln[t^{-1}]}{t} = t^{-1_l} & , \text{ para } d = 4 \\ t^{-1} & , \text{ para } d > 4. \end{cases} \quad (3.118)$$

O expoente \hat{v} pode ser extraído ao se unir as equações (3.65), (3.107) e (3.95). Assim,

$$(1+t)\xi^{-2} \propto \begin{cases} \left(\frac{\Psi_0^2}{\rho} + \frac{d}{2}t\right)^{\frac{2}{d-2}} & , \text{ para } 2 < d < 4 \\ \frac{\frac{\Psi_0^2}{\rho} + 2t}{\ln\left[\left(\frac{\Psi_0^2}{\rho} + 2t\right)^{-1}\right]} & , \text{ para } d = 4 \\ \frac{\Psi_0^2}{\rho} + \frac{d}{2}t & , \text{ para } d > 4. \end{cases} \quad (3.119)$$

Para $t \rightarrow 0^+$, $t \ll 1$, de modo que a equação acima se torna

$$\xi \propto \begin{cases} \left(t^{\frac{2}{d-2}}\right)^{-\frac{1}{2}} = t^{-\frac{1}{d-2}} & , \text{ para } 2 < d < 4 \\ \left(\frac{t}{\ln[t^{-1}]}\right)^{-\frac{1}{2}} = t^{-\frac{1}{2}}(1) & , \text{ para } d = 4 \\ t^{-\frac{1}{2}} & , \text{ para } d > 4. \end{cases} \quad (3.120)$$

O expoente $\hat{\alpha}$ pode ser encontrado ao se definir a seguinte energia livre (por unidade de volume):

$$\mathcal{F}(\rho, v_0, T) = P(\mu, v_0, T) - \rho\mu. \quad (3.121)$$

Utilizando a eq. (3.49), tem-se que

$$\begin{aligned} d(\mathcal{F} + \rho\mu) &= sdT + \rho d\mu + \Psi_0 dv_0 + \Psi_0^* dv_0^* \\ d\mathcal{F} + \mu d\rho + \rho d\mu &= sdT + \rho d\mu + \Psi_0 dv_0 + \Psi_0^* dv_0^* \\ d\mathcal{F} &= sdT + \mu d\rho + \Psi_0 dv_0 + \Psi_0^* dv_0^*. \end{aligned} \quad (3.122)$$

Por fim,

$$s = \left(\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial T}\right)_{\rho, v_0}. \quad (3.123)$$

O calor específico a volume constante pode então ser descrito como

$$c_v = T \left(\frac{\partial s}{\partial T}\right)_{\rho} = T \left(\frac{\partial^2 \mathcal{F}}{\partial T^2}\right)_{\rho, v_0}. \quad (3.124)$$

Utilizando a chamada transformação de Mellin na eq. (3.5) (para $z = e^{-x}$), é possível

encontrar a seguinte relação:

$$\begin{aligned}
 \mathcal{G}_n(e^{-k}) &= \int_0^{\infty} x^{k-1} g_n(e^{-x}) dx \\
 &= \int_0^{\infty} x^{k-1} \sum_{l=1}^{\infty} \frac{e^{-xl}}{l^n} dx \\
 &= \sum_{l=1}^{\infty} \frac{1}{l^n} \int_0^{\infty} e^{-xl} x^{k-1} dx.
 \end{aligned}
 \tag{3.125}$$

Com $y = xl$, a equação acima se torna

$$\mathcal{G}_n(e^{-k}) = \sum_{l=1}^{\infty} \frac{1}{l^{n+k}} \int_0^{\infty} e^{-y} y^{k-1} dy = \zeta(n+k) \Gamma(k).
 \tag{3.126}$$

Efetuando a transformação inversa, se conclui que

$$\begin{aligned}
 g_n(e^{-x}) &= \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} x^{-k} \mathcal{G}_n(e^{-k}) dk \\
 &= \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} x^{-k} \zeta(n+k) \Gamma(k) dk.
 \end{aligned}
 \tag{3.127}$$

$\Gamma(k)$ possui polos em $k = m$, onde $m = 1, 2, \dots$, com resíduo $\frac{(-1)^m}{m!}$. Já $\zeta(n+k)$ possui um polo em $k = 1 - n$, com resíduo 1. Assim,

$$g_n(e^{-x}) = \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(-1)^m}{m!} x^m \zeta(n-m) + x^{-1+n} \Gamma(1-n).
 \tag{3.128}$$

Unindo este resultado às equações (3.62) e (3.121), a energia livre se torna

$$\mathcal{F} = -\frac{v_0^2}{\mu} + \frac{1}{\beta \lambda^d} \left(\sum_{m=1}^{\infty} \frac{(-1)^m}{m!} (-\beta \mu)^m \zeta\left(\frac{d}{2} + 1 - m\right) + (-\beta \mu)^{\frac{d}{2}} \Gamma\left(-\frac{d}{2}\right) \right) + \frac{\rho}{\beta} (-\beta \mu).
 \tag{3.129}$$

Aplicando também as equações (3.71) e (3.107), se observa que

$$\begin{aligned}
\mathcal{F} &= -\frac{v_0^2}{\mu} + \frac{1}{\beta\lambda^d} \left(\sum_{m=1}^{\infty} \frac{(-1)^m}{m!} \xi^{-2m} \zeta \left(\frac{d}{2} + 1 - m \right) + \xi^{-d} \Gamma \left(-\frac{d}{2} \right) \right) + \frac{1}{\beta\lambda_c^d} \zeta \left(\frac{d}{2} \right) \xi^{-2} \\
&= -\frac{v_0^2}{\mu} + \frac{1}{\beta\lambda^d} \left(\sum_{m=2}^{\infty} \frac{(-1)^m}{m!} \xi^{-2m} \zeta \left(\frac{d}{2} + 1 - m \right) + \xi^{-d} \Gamma \left(-\frac{d}{2} \right) - \xi^{-2} \zeta \left(\frac{d}{2} \right) \right) \\
&\quad + \frac{1}{\beta\lambda_c^d} \zeta \left(\frac{d}{2} \right) \xi^{-2} \\
&= -\frac{v_0^2}{\mu} + \frac{1}{\beta\lambda^d} \left(\sum_{m=2}^{\infty} \frac{(-1)^m}{m!} \xi^{-2m} \zeta \left(\frac{d}{2} + 1 - m \right) + \xi^{-d} \Gamma \left(-\frac{d}{2} \right) \right) \\
&\quad + \frac{1}{\beta\lambda^d} \left(\frac{\lambda^d}{\lambda_c^d} - 1 \right) \xi^{-2} \zeta \left(\frac{d}{2} \right). \tag{3.130}
\end{aligned}$$

Assim, é possível concluir que

$$\mathcal{F} = \frac{v_0^2}{\mu} + \frac{1}{\beta\lambda^d} \left(A\xi^{-d} + B\xi^{-2}t + C\xi^{-4} + \dots \right). \tag{3.131}$$

Onde A, B, C, \dots são funções independentes de ξ . Nas proximidades do ponto crítico ($t \rightarrow 0$), só passam a ser relevantes os termos de maior ordem. É possível notar que

$$\xi^{-2}t = t^{2\hat{\nu}+1} = \begin{cases} t^{\frac{d}{d-2}} & , \text{ para } 2 < d < 4 \\ t^{1_l+1} & , \text{ para } d = 4 \\ t^2 & , \text{ para } d > 4, \end{cases} \tag{3.132}$$

$$\xi^{-4} = t^{4\hat{\nu}} = \begin{cases} t^{\frac{4}{d-2}} & , \text{ para } 2 < d < 4 \\ t^{2(1_l)} & , \text{ para } d = 4 \\ t^2 & , \text{ para } d > 4 \end{cases} \tag{3.133}$$

e

$$\xi^{-d} = t^{d\hat{\nu}} = \begin{cases} t^{\frac{d}{d-2}} & , \text{ para } 2 < d < 4 \\ t^{2(1_l)} & , \text{ para } d = 4 \\ t^{\frac{d}{2}} & , \text{ para } d > 4. \end{cases} \tag{3.134}$$

Os termos restantes possuem valores desprezíveis sob estas condições. Note que cada um dos termos acima, dependendo da dimensionalidade, passa a ser o termo mais relevante. O calor

específico então passa a ser

$$c_v \propto \left(A't^{d\hat{v}-2} + B't^{2\hat{v}-1} + C't^{4\hat{v}-2} \right) = \begin{cases} \left((A' + B')t^{\frac{4-d}{d-2}} + C't^{\frac{2}{d-2}} \right) & , \text{ para } 2 < d < 4 \\ \left((A' + C')t^{2(0_l)} + B't^{0_l} \right) & , \text{ para } d = 4 \\ \left(A't^{\frac{d-4}{2}} + B' + C' \right) & , \text{ para } d > 4. \end{cases} \quad (3.135)$$

Para se determinar o expoente crítico, é necessário se determinar a singularidade dominante de c_v , através da relação

$$\frac{\partial^m c_v}{\partial t^m} \propto t^{-\hat{\alpha}-m}. \quad (3.136)$$

O termo que passa a divergir na derivada m -ésima será o termo dominante. No primeiro caso, excetuando-se nos casos em que $\frac{4-d}{d-2}$ resulta em um inteiro positivo, este será o primeiro termo. No terceiro caso, já na primeira derivada, o segundo termo se anula, restando que apenas o primeiro, após sucessivas derivadas, passe a divergir. No segundo caso, o expoente do primeiro termo é praticamente nulo, de modo que este termo pode ser considerado constante.

O expoente η pode ser obtido através da eq. (3.112). Para $t \rightarrow 0$, ξ diverge, de modo que, neste caso,

$$g(r) \propto R^{2-d}. \quad (3.137)$$

Se isto for comparado com a relação existente na tabela 1, se conclui que η é nulo.

Todos os resultados obtidos para os expoentes estão sumarizados na tabela 2.

Tabela 2: Tabela dos expoentes críticos obtidos para o gás ideal de Bose, conforme a sua dimensionalidade.

Expoente crítico	$2 < d < 4$	$d = 4$	$d > 4$
$\hat{\alpha}$	$-\frac{4-d}{d-2}$	-0_l	$-\frac{d-4}{2}$
β	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$
γ	$\frac{2}{d-2}$	1_l	1
δ	$\frac{d+2}{d-2}$	3_l	3
\hat{v}	$\frac{1}{d-2}$	$\frac{1}{2}(1_l)$	$\frac{1}{2}$
η	0	0	0

Uma outra variável que pode ser relacionada à dimensionalidade do sistema em questão é a chamada *densidade de estados*, ω . Esta está relacionada ao espaço Γ e é definida pela relação

$$\omega_d(\varepsilon) = \frac{d\Omega_d(\varepsilon)}{d\varepsilon_p}, \quad (3.138)$$

onde

$$\Omega_d(p) = \frac{1}{h^d} \int d^d r d^d p = \left(\frac{L}{h}\right)^d \int d^d p = C_n \left(\frac{L}{h}\right)^d \int_0^p p^{d-1} dp. \quad (3.139)$$

Diferenciando, tem-se que

$$d\Omega_d(p) = C_n \left(\frac{L}{h}\right)^d p^{d-1} dp. \quad (3.140)$$

Mas

$$p = (2m\varepsilon)^{\frac{1}{2}} \Rightarrow dp = \frac{1}{2}(2m)^{\frac{1}{2}} \varepsilon^{-\frac{1}{2}} d\varepsilon. \quad (3.141)$$

Assim,

$$\begin{aligned} d\Omega_d(p) &= C_n \left(\frac{L}{h}\right)^d (2m)^{\frac{d}{2}} \varepsilon^{\frac{d}{2}-1} d\varepsilon \\ \frac{d\Omega_d(p)}{d\varepsilon} &= C_n \left(\frac{L}{h}\right)^d (2m)^{\frac{d}{2}} \varepsilon^{\frac{d}{2}-1}. \end{aligned} \quad (3.142)$$

Por fim, se conclui que

$$\omega_d(\varepsilon) \propto \varepsilon^{\frac{d}{2}-1}. \quad (3.143)$$

Isto quer dizer que é possível obter os expoentes críticos para a BEC, simplesmente por se definir a densidade de estados do sistema ao qual o gás de bósons está sujeito. Esta informação será consideravelmente útil para o exemplo de caso que será analisado a seguir.

4 A BEC EM UMA REDE DE LIGAÇÃO FORTE COM ACOPLAMENTOS DE LONGO ALCANCE

Neste capítulo, será considerado um gás ideal de bósons restritos a se moverem ao longo de uma cadeia unidimensional com condições periódicas de contorno. O Hamiltoniano para uma partícula será escrito na aproximação de ligação forte ("tight-binding"), onde cada sítio representa uma região em torno da qual a partícula tem maior probabilidade de ser encontrada. Esta rede discreta de posições pode ser gerada, por exemplo, através de feixes ópticos. As partículas têm energias de ligação idênticas em cada sítio. O salto quântico entre sítios distantes é permitido e sua amplitude de probabilidade decai com uma lei de potência. Este Hamiltoniano pode ser definido como:

$$H = \sum_n \varepsilon |n\rangle \langle n| - \sum_{r=|m-n|=1}^{N/2} h(r) |n\rangle \langle m|, \quad (4.1)$$

onde

$$h(r) = \frac{t}{r^\alpha}, \quad (4.2)$$

N é o número de sítios da cadeia e $|n\rangle$ representa o sítio n na representação de Wannier. Os autoestados de uma partícula são soluções harmônicas da forma

$$|\psi_k\rangle \propto \sum_n e^{ikn} |n\rangle, \quad (4.3)$$

onde $|\psi_k\rangle$ é um autovetor do Hamiltoniano. Substituindo esta expressão no hamiltoniano, é possível obter facilmente a relação de dispersão como sendo:

$$E_k = \varepsilon - 2t \sum_{r=1}^{N/2} \frac{\cos kr}{r^\alpha}, \quad (4.4)$$

onde $k = 2\pi(i-1)/N$ e $i = 1, 2, \dots, N$.

A densidade de estados no limite termodinâmico é definida como

$$\omega(E) = \frac{1}{2\pi} \left(\frac{dE}{dk} \right)^{-1} = \frac{1}{2\pi} \left(2t \sum_{r=1}^{\infty} \frac{\sin kr}{r^{\alpha-1}} \right)^{-1}. \quad (4.5)$$

É possível mostrar que para $\alpha > 2$, a densidade de estados nas proximidades da energia do estado fundamental E_0 comporta-se como $\omega(E) \propto (E - E_0)^{-1/2}$. Para $\alpha = 2$, a densidade de estados aproxima-se a um valor constante no fundo da banda. Para $1 < \alpha < 2$, a densidade de estados anula-se no fundo da banda com um expoente dado por $\omega(E) \propto (E - E_0)^{(2-\alpha)/(\alpha-1)}$. Para menores valores de α a energia do estado fundamental é divergente.

Todas as auto-energias podem ser deslocadas uniformemente sem qualquer influência nas propriedades físicas do sistema. Fazendo este deslocamento ser tal que $E_0 = 0$, e comparando o regime de $1 < \alpha < 2$ com a eq. (3.143), é possível definir uma relação entre α e uma dimensionalidade espectral efetiva do gás de bósons inserido numa rede de forte ligação. Portanto,

$$\begin{aligned}\frac{d}{2} - 1 &= \frac{2 - \alpha}{\alpha - 1} \\ d &= \frac{2}{\alpha - 1}.\end{aligned}\quad (4.6)$$

O intervalo em que esta relação é válida, para a dimensionalidade, pode ser dado da seguinte maneira:

$$\begin{aligned}1 < \alpha < 2 \\ 0 < \alpha - 1 < 1 \\ 1 < \frac{1}{\alpha - 1} < \infty \\ 2 < \frac{2}{\alpha - 1} < \infty.\end{aligned}\quad (4.7)$$

Assim,

$$d > 2 \quad (4.8)$$

Isto significa que é possível encontrar os expoentes críticos dos três casos alistados na tabela 2, quando $1 < \alpha < 2$.

Se $2 < d < 4$,

$$\begin{aligned}2 < \frac{2}{\alpha - 1} < 4 \\ 1 < \frac{1}{\alpha - 1} < 2 \\ \frac{1}{2} < \alpha - 1 < 1 \\ \frac{3}{2} < \alpha < 2.\end{aligned}\quad (4.9)$$

Obviamente,

$$1 < \alpha < \frac{3}{2}, \text{ para } d > 4 \quad (4.10)$$

e

$$\alpha = \frac{3}{2}, \text{ para } d = 4. \quad (4.11)$$

A tabela 2 pode então ser reescrita, tendo α como variável principal (tabela 3).

Tabela 3: Tabela dos expoentes críticos estimados para o gás ideal de Bose, para uma rede de forte ligação com interação de longo alcance.

Expoente crítico	$1 < \alpha < \frac{3}{2}$	$\alpha = \frac{3}{2}$	$\frac{3}{2} < \alpha < 2$
$\hat{\alpha}$	$-\frac{2\alpha-3}{1-\alpha}$	-0_l	$-\frac{2\alpha-3}{2-\alpha}$
β	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$
γ	1	1_l	$\frac{1-\alpha}{\alpha}$
δ	3	3_l	$\frac{\alpha}{2-\alpha}$
$\hat{\nu}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}(1_l)$	$\frac{\alpha-1}{4-2\alpha}$
η	0	0	0

4.1 Escala de Tamanhos Finitos

Em toda a discussão sobre gases de bósons e a BEC, analisada no capítulo anterior, foram considerados sistemas de grandes dimensões – praticamente *infinitos*. Para desenvolvimentos numéricos, isto não é aplicável. Uma maneira de suprimir este problema é através de uma das teorias mais utilizadas para estimar expoentes críticos em transições de fase – A teoria da *escala de tamanhos finitos* (finite-size scaling).

Será assumido que nas proximidades da transição existe apenas uma escala de comprimento relevante associada ao comprimento de correlação. Esta teoria, portanto, estabelece que a dependência do parâmetro de ordem com a temperatura e o tamanho do sistema pode ser escrita como:

$$\rho_0(T, N) = N^{-\zeta/\nu} h \left[|T - T_c| N^{\frac{1}{\nu}} \right], \quad (4.12)$$

onde $\zeta = 2\beta$ e $\nu = \hat{\nu}d$. Supondo que se conheça os valores de ρ_0 para diversos tamanhos de rede, a razão entre uma densidade dada e a densidade da maior rede, $\rho_0^{(M)}$ é dada por

$$\begin{aligned} \frac{\rho_0}{\rho_0^{(M)}} &= \frac{N^{-\zeta/(\hat{\nu}d)} h \left[|T - T_c| N^{1/(\hat{\nu}d)} \right]}{N_M^{-\zeta/(\hat{\nu}d)} h \left[|T - T_c| N_M^{1/(\hat{\nu}d)} \right]} \\ \ln \frac{\rho_0}{\rho_0^{(M)}} &= -\frac{\zeta}{\hat{\nu}d} \ln \frac{N}{N_M} + \ln \frac{h \left[|T - T_c| N^{1/(\hat{\nu}d)} \right]}{h \left[|T - T_c| N_M^{1/(\hat{\nu}d)} \right]} \\ \frac{\ln \frac{\rho_0}{\rho_0^{(M)}}}{\ln \frac{N}{N_M}} &= -\frac{\zeta}{\hat{\nu}d} + \frac{\ln \frac{h \left[|T - T_c| N^{1/(\hat{\nu}d)} \right]}{h \left[|T - T_c| N_M^{1/(\hat{\nu}d)} \right]}}{\ln \frac{N}{N_M}}. \end{aligned} \quad (4.13)$$

Em $T = T_c$, definindo $\nu = \hat{\nu}d$, a relação acima se torna

$$\frac{\ln \frac{\rho_0}{\rho_0^{(M)}}}{\ln \frac{N}{NM}} \Big|_{T=T_c} = \frac{\zeta}{\nu} + \frac{\ln \frac{h[0]}{h[0]}}{\ln \frac{N}{NM}} = -\frac{\zeta}{\nu}. \quad (4.14)$$

Assim, é possível definir, através deste tratamento, a temperatura crítica para um dado valor de $\frac{\zeta}{\nu}$. Este valor pode ser então definido através da relação

$$\rho_0(T = T_c, N) \propto N^{-\frac{\zeta}{\nu}}. \quad (4.15)$$

Uma outra estimativa útil também pode ser obtida através da eq. (4.12). Note que

$$\ln \rho_0(T, N) = -\frac{\zeta}{\nu} \ln N + \ln h \left[|T - T_c| N^{\frac{1}{\nu}} \right]. \quad (4.16)$$

definindo $g[x] \equiv \ln h[x]$ e derivando a equação acima, tem-se que

$$\frac{d}{dt} \ln \rho_0(T, N) = N^{\frac{1}{\nu}} g' \left[|T - T_c| N^{\frac{1}{\nu}} \right]. \quad (4.17)$$

Assim, se conclui que

$$\frac{d}{dt} \ln \rho_0(T = T_c, N) \propto N^{\frac{1}{\nu}}. \quad (4.18)$$

4.2 Resultados Obtidos

Para este trabalho, os valores de ρ_0 foram obtidos numericamente, através do seguinte algoritmo:

1. Se estabelecem os valores de α e N ;
2. Os autovalores de energia são estabelecidos através da relação

$$\frac{E_i - \varepsilon}{t} = -2 \sum_{r=1}^{N/2} \frac{1}{r^\alpha} \cos \frac{2\pi(i-1)r}{N}, i = 1, 2, \dots, N; \quad (4.19)$$

3. localiza-se E_0/t e se definem as variações ΔE_i através da relação

$$\frac{\Delta E_i}{t} = \frac{E_i - E_0}{t} = \frac{E_i - \varepsilon}{t} - \frac{E_0 - \varepsilon}{t}; \quad (4.20)$$

4. define-se $\beta' = t\beta = 0$ e o seu valor máximo, β'_M ;
5. A fugacidade z é determinada ao se encontrar, através do método da bipartição, o zero da função

$$f(z) = \sum_{i=1}^N \left(\frac{1}{z^{-1} e^{\beta' \frac{\Delta E_i}{t}} - 1} - N \right); \quad (4.21)$$

6. A fração de partículas condensadas no estado fundamental (parâmetro de ordem) é estabelecida através da relação

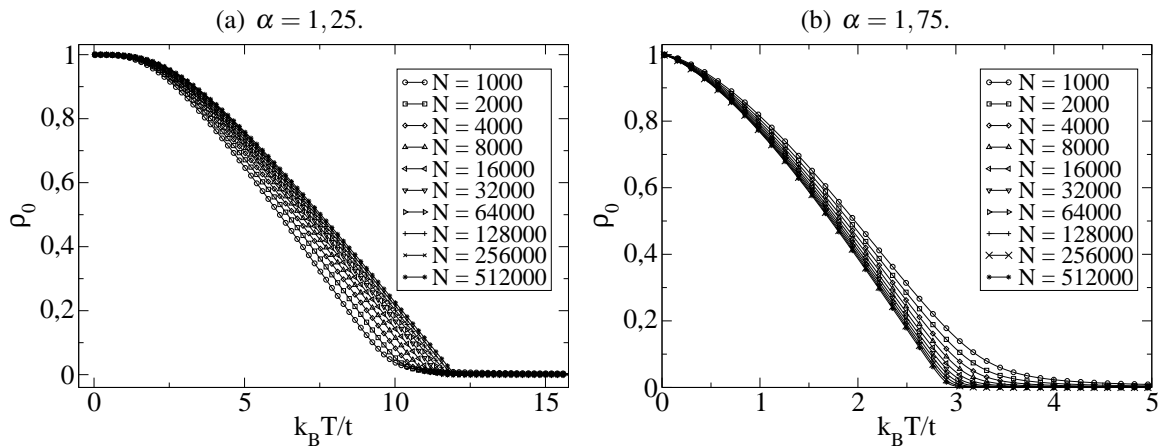
$$\rho_0 = \frac{1}{N z^{-1} - 1}; \quad (4.22)$$

7. os valores de β' e ρ_0 são armazenados;

8. se $\beta' = \beta'_M$, fim do algoritmo. Se não, volte ao passo 5, com $\beta' = \beta' + \Delta\beta'$

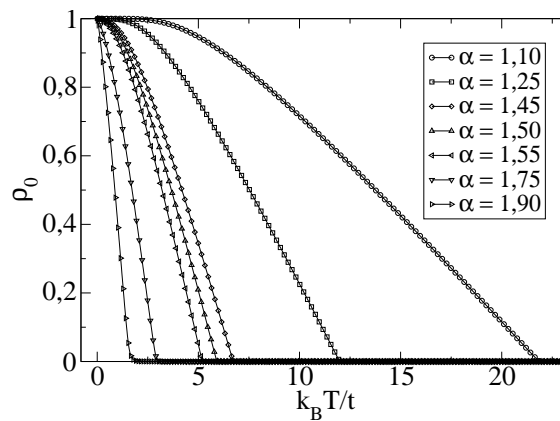
Alguns dos resultados obtidos podem ser observados na figura 6. Também foram colocados juntos, apenas para fins de comparação, os resultados das maiores redes obtidas, em diversos valores de α (Figura 7). A determinação de T_c , através da eq. (4.14), pode ser observada na figura 8.

Figura 6: Gráficos da densidade de partículas no condensado de Bose-Einstein.



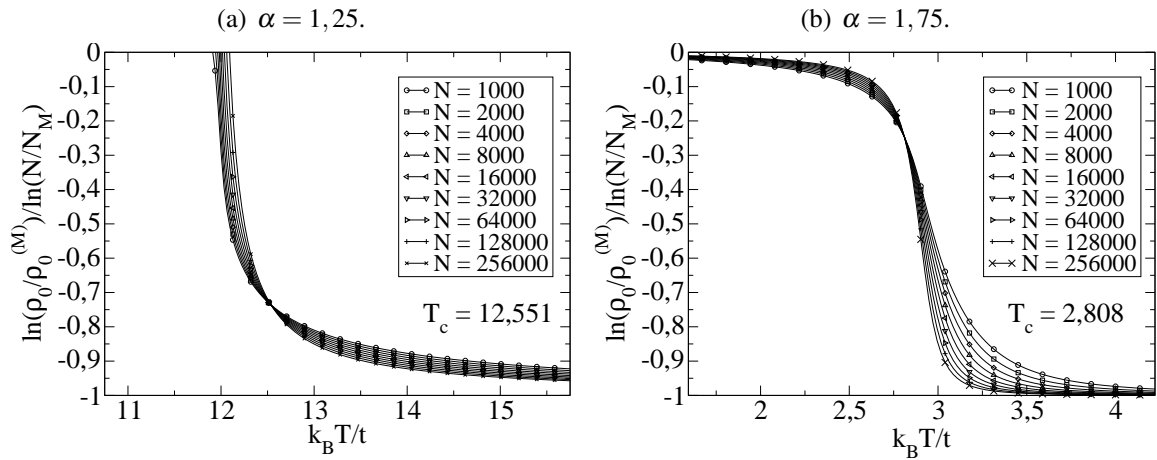
Fonte: Ilustrado pelo autor.

Figura 7: Gráfico da densidade de partículas no condensado de Bose-Einstein, para $N = 512000$.



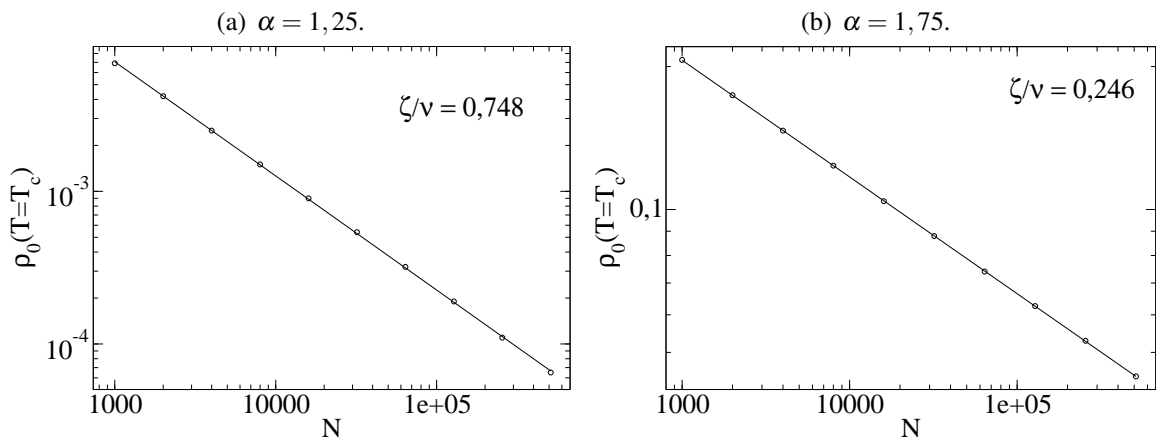
Fonte: Ilustrado pelo autor.

Figura 8: Gráfico relativo a obtenção da temperatura crítica.



Fonte: Ilustrado pelo autor.

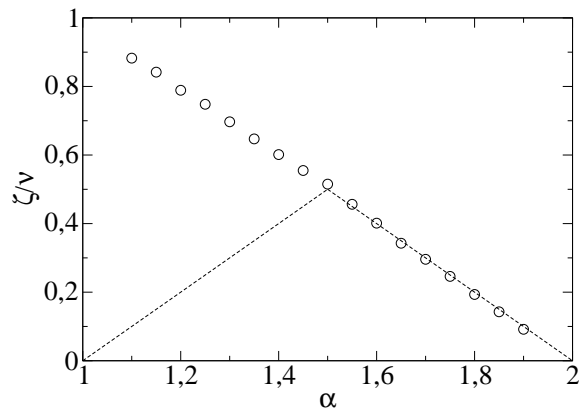
Gráficos relativos à eq. (4.15) podem ser observados na figura 9. Os resultados obtidos para o expoente $\frac{\zeta}{\nu}$, para cada valor de α analisado podem ser vistos na figura 10. É possível observar que os resultados obtidos para este expoente equivalem à estimativa teórica para uma rede hipercúbica de dimensão equivalente à dimensão espectral para o regime de $\alpha > 1,5$ ($2 < d < 4$). Para dimensões espectrais $d > 4$, o presente modelo apresenta um comportamento de escala distinto.

Figura 9: Gráfico da densidade crítica para vários valores de N .

Fonte: Ilustrado pelo autor.

Gráficos relativos à eq. (4.18) podem ser observados na figura 11. Os resultados obtidos para o expoente ν , para cada valor de α analisado podem ser vistos na figura 12. Os valores se aproximam dos valores para uma rede hipercúbica de dimensão equivalente à dimensão espectral do presente modelo, exceto na região próxima de $\alpha = 1,5$. Esta diferença

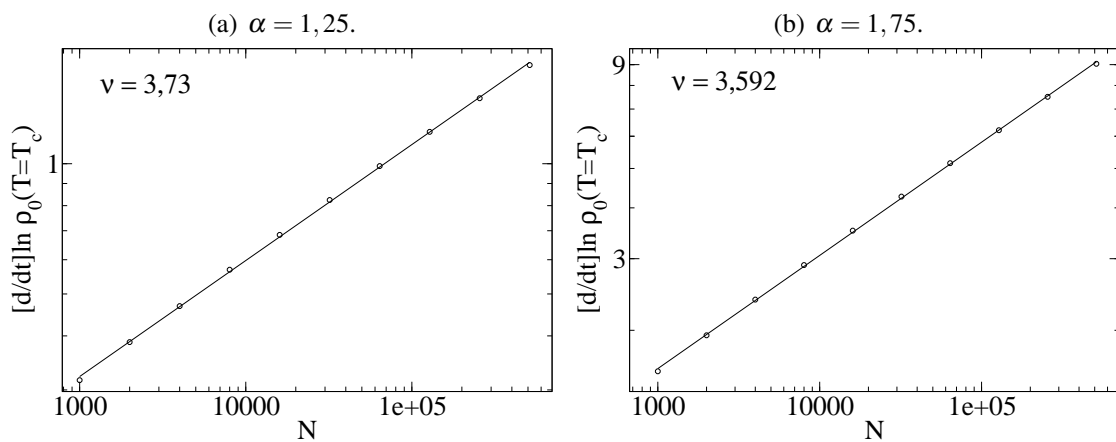
Figura 10: Gráfico do expoente $\frac{\zeta}{\nu}$ para vários valores de α . A linha tracejada representa a estimativa teórica para uma rede hipercúbica de dimensão equivalente.



Fonte: Ilustrado pelo autor.

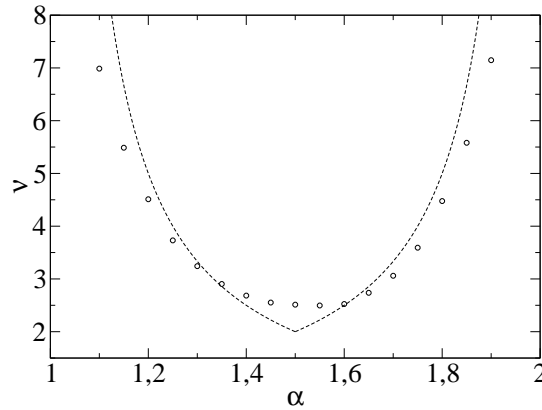
pode estar relacionada a correções de escala que, em geral, são muito fortes em sistemas com acoplamentos de longo alcance.

Figura 11: Gráfico de $\frac{d}{dt} \ln \rho_0(T, N)$ na temperatura crítica para vários valores de N .



Fonte: Ilustrado pelo autor.

Figura 12: Gráfico do expoente ν para vários valores de α . A linha tracejada representa a estimativa teórica para uma rede hipercúbica de dimensão espectral equivalente.



Fonte: Ilustrado pelo autor.

O calor específico também foi estimado. Note que o número total de partículas não varia com a temperatura. Assim,

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial N}{\partial \beta} &= 0 \\
 \sum_p \frac{\partial n_p}{\partial \beta} &= 0 \\
 \sum_p \frac{\partial}{\partial \beta} \left(\frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_p - \mu)} - 1} \right) &= 0 \\
 - \sum_p \frac{(\varepsilon_p - \mu - \beta \frac{\partial \mu}{\partial \beta}) e^{\beta(\varepsilon_p - \mu)}}{(e^{\beta(\varepsilon_p - \mu)} - 1)^2} &= 0 \\
 - \sum_p \frac{(\varepsilon_p - \mu) e^{\beta(\varepsilon_p - \mu)}}{(e^{\beta(\varepsilon_p - \mu)} - 1)^2} + \beta \frac{\partial \mu}{\partial \beta} \sum_p \frac{e^{\beta(\varepsilon_p - \mu)}}{(e^{\beta(\varepsilon_p - \mu)} - 1)^2} &= 0 \\
 \beta \frac{\partial \mu}{\partial \beta} \sum_p \frac{e^{\beta(\varepsilon_p - \mu)}}{(e^{\beta(\varepsilon_p - \mu)} - 1)^2} &= \sum_p \frac{(\varepsilon_p - \mu) e^{\beta(\varepsilon_p - \mu)}}{(e^{\beta(\varepsilon_p - \mu)} - 1)^2} \\
 \beta \frac{\partial \mu}{\partial \beta} &= \frac{\sum_p \frac{(\varepsilon_p - \mu) e^{\beta(\varepsilon_p - \mu)}}{(e^{\beta(\varepsilon_p - \mu)} - 1)^2}}{\sum_{p'} \frac{e^{\beta(\varepsilon_{p'} - \mu)}}{(e^{\beta(\varepsilon_{p'} - \mu)} - 1)^2}}. \quad (4.23)
 \end{aligned}$$

Efetando um tratamento similar à energia interna do sistema,

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial U}{\partial \beta} &= \sum_p \varepsilon_p \frac{\partial n_p}{\partial \beta} \\
 &= \sum_p \varepsilon_p \frac{\partial}{\partial \beta} \left(\frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_p - \mu)} - 1} \right) \\
 &= - \sum_p \varepsilon_p \frac{(\varepsilon_p - \mu - \beta \frac{\partial \mu}{\partial \beta}) e^{\beta(\varepsilon_p - \mu)}}{(e^{\beta(\varepsilon_p - \mu)} - 1)^2}.
 \end{aligned} \tag{4.24}$$

Unindo as duas equações, tem-se que

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial U}{\partial \beta} &= - \sum_p \varepsilon_p \frac{\left(\varepsilon_p - \mu - \frac{\sum_{p'} \frac{(\varepsilon_{p'} - \mu) e^{\beta(\varepsilon_{p'} - \mu)}}{(e^{\beta(\varepsilon_{p'} - \mu)} - 1)^2}}{\sum_{p''} \frac{e^{\beta(\varepsilon_{p''} - \mu)}}{(e^{\beta(\varepsilon_{p''} - \mu)} - 1)^2}} \right) e^{\beta(\varepsilon_p - \mu)}}{(e^{\beta(\varepsilon_p - \mu)} - 1)^2} \\
 &= - \sum_p \varepsilon_p \frac{(\varepsilon_p - \mu) e^{\beta(\varepsilon_p - \mu)}}{(e^{\beta(\varepsilon_p - \mu)} - 1)^2} + \sum_p \varepsilon_p \frac{\left(\frac{\sum_{p'} \frac{(\varepsilon_{p'} - \mu) e^{\beta(\varepsilon_{p'} - \mu)}}{(e^{\beta(\varepsilon_{p'} - \mu)} - 1)^2}}{\sum_{p''} \frac{e^{\beta(\varepsilon_{p''} - \mu)}}{(e^{\beta(\varepsilon_{p''} - \mu)} - 1)^2}} \right) e^{\beta(\varepsilon_p - \mu)}}{(e^{\beta(\varepsilon_p - \mu)} - 1)^2}.
 \end{aligned} \tag{4.25}$$

Mas, note que

$$\begin{aligned}
 \frac{e^{\beta(\varepsilon_p - \mu)}}{(e^{\beta(\varepsilon_p - \mu)} - 1)^2} &= \frac{e^{\beta(\varepsilon_p - \mu)} \left(e^{-\frac{\beta}{2}(\varepsilon_p - \mu)} \right)^2}{\left(e^{\frac{\beta}{2}(\varepsilon_p - \mu)} - e^{-\frac{\beta}{2}(\varepsilon_p - \mu)} \right)^2} \\
 &= \frac{1}{\left(e^{\frac{\beta}{2}(\varepsilon_p - \mu)} - e^{-\frac{\beta}{2}(\varepsilon_p - \mu)} \right)^2} \\
 &= \frac{1}{4 \sinh^2 \left(\frac{\beta}{2}(\varepsilon_p - \mu) \right)}.
 \end{aligned} \tag{4.26}$$

Assim, definindo $y_p = \frac{\beta}{2}(\varepsilon_p - \mu) = \frac{1}{2}(\beta\varepsilon_p - \ln z)$,

$$\begin{aligned}
\frac{\partial U}{\partial \beta} &= -\sum_p \varepsilon_p \frac{(\varepsilon_p - \mu)}{4 \sinh^2(y_p)} + \sum_p \left(\frac{\varepsilon_p}{4 \sinh^2(y_p)} \frac{\sum_{p'} \frac{(\varepsilon_{p'} - \mu)}{4 \sinh^2(y_{p'})}}{\frac{1}{4} \sum_{p''} \sinh^{-2}(y_{p''})} \right) \\
&= -\sum_p \varepsilon_p \frac{(\varepsilon_p - \mu)}{4 \sinh^2(y_p)} + \frac{\sum_{p'} \frac{(\varepsilon_{p'} - \mu)}{4 \sinh^2(y_{p'})}}{\frac{1}{4} \sum_{p''} \sinh^{-2}(y_{p''})} \sum_p \frac{\varepsilon_p}{4 \sinh^2(y_p)} \\
&= -\sum_p \frac{\varepsilon_p^2}{4 \sinh^2(y_p)} + \frac{\sum_{p'} \frac{\varepsilon_{p'}}{4 \sinh^2(y_{p'})} \sum_p \frac{\varepsilon_p}{4 \sinh^2(y_p)}}{\frac{1}{4} \sum_{p''} \sinh^{-2}(y_{p''})} + \\
&\quad + \mu \left(\sum_p \frac{\varepsilon_p}{4 \sinh^2(y_p)} - \frac{\sum_{p'} \frac{1}{4} \sinh^{-2}(y_{p'}) \sum_p \left(\frac{\varepsilon_p}{4 \sinh^2(y_p)} \right)}{\frac{1}{4} \sum_{p''} \sinh^{-2}(y_{p''})} \right) \\
&= \frac{1}{4} \left(-\sum_p \varepsilon_p^2 \sinh^{-2}(y_p) + \frac{[\sum_p \varepsilon_p \sinh^{-2}(y_p)]^2}{\sum_{p''} \sinh^{-2}(y_{p''})} \right). \tag{4.27}
\end{aligned}$$

Portanto, o calor específico a volume constante pode ser definido como

$$\frac{c_V}{k_B} = -\frac{\beta^2}{N} \left(\frac{\partial U}{\partial \beta} \right)_V = \frac{\beta^2}{4N} \left(\sum_p \varepsilon_p^2 \sinh^{-2}(y_p) - \frac{[\sum_p \varepsilon_p \sinh^{-2}(y_p)]^2}{\sum_{p''} \sinh^{-2}(y_{p''})} \right). \tag{4.28}$$

Para se obter este resultado numericamente, é necessário realizar a seguinte mudança no algoritmo já citado:

6. O calor específico é obtido, a partir da eq. (4.28). Para se adequar às variáveis do algoritmo, manipulações matemáticas similares são efetuadas, de modo que

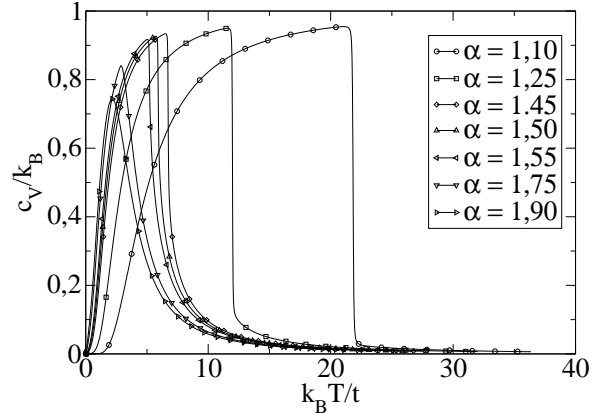
$$\frac{c_V}{k_B} = \frac{\beta'^2}{4N} \left(\sum_i \left(\frac{E_i - \varepsilon}{t} \right)^2 \sinh^{-2}(y_i) - \frac{[\sum_i \frac{E_i - \varepsilon}{t} \sinh^{-2}(y_i)]^2}{\sum_{i'} \sinh^{-2}(y_{i'})} \right) \tag{4.29}$$

7. os valores de β' e $\frac{c_V}{k_B}$ são armazenados;

Os resultados obtidos por esta consideração para diversos valores de α podem ser visualizados na figura 13. Note que, para $0 < \alpha < 1,5$ ($d > 4$), o calor específico passa a ter um comportamento descontínuo. Isto pode ser comparado com a estimativa teórica. Conforme a tabela 3, no intervalo acima, $\hat{\alpha} > 0$. Nestas condições, o calor específico possui uma descontinuidade em $t = 0$, como se esperava. Também se pode observar que, para $1,5 < \alpha < 1,67$, os resultados indicam uma descontinuidade em sua derivada. Da mesma maneira, isto está de

acordo com a estimativa teórica. Nestas condições, $-1 < \hat{\alpha} < 0$, o que faz com que o calor específico possua exatamente sua derivada descontínua em $t = 0$.

Figura 13: Gráfico do calor específico a volume constante, para vários valores de α .



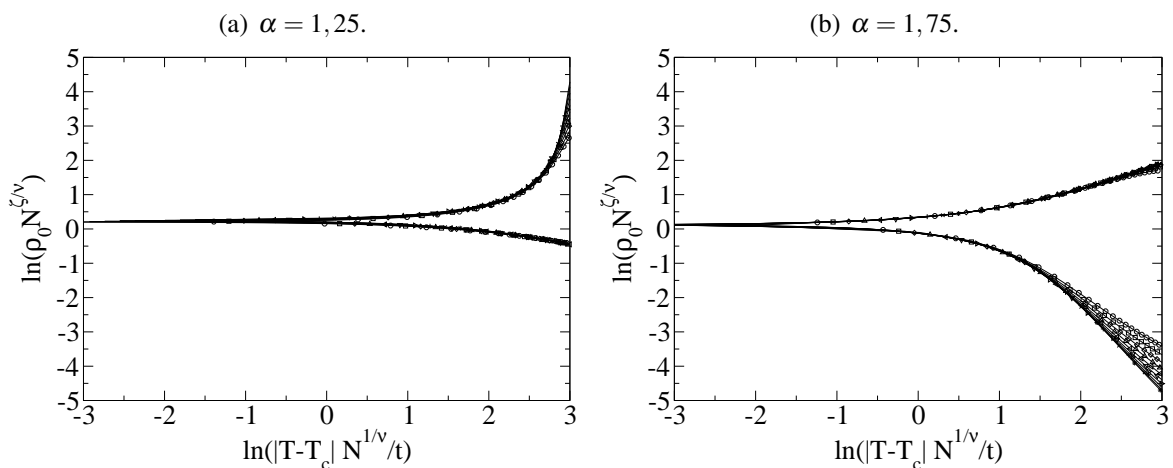
Fonte: Ilustrado pelo autor.

A partir da eq. (4.12), para um dado α , é possível colapsar os resultados, para todos os valores de N . Note que, na região da transição,

$$h[x] = \rho_0(T, N) N^{\frac{\zeta}{v}}, \text{ com } x = |T - T_c| N^{1/v} \quad (4.30)$$

é uma função que possuirá sempre o mesmo comportamento, independentemente do tamanho da rede. Os resultados deste colapso podem ser observados na figura 14.

Figura 14: Gráfico do colapso dos resultados para as densidades ρ_0 em vários tamanhos de rede.



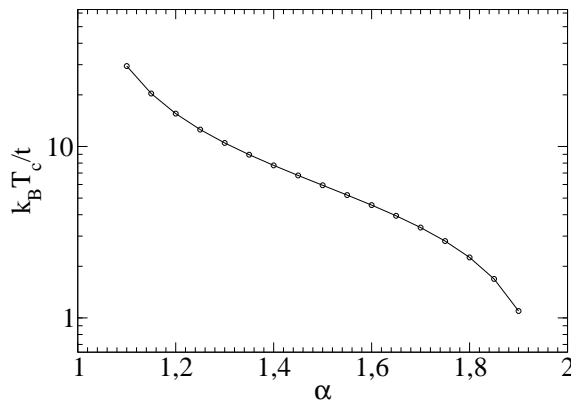
Fonte: Ilustrado pelo autor.

É possível observar que, para $\alpha = 1,75$, o colapso não se mostra efetivo. Isto corrobora com o fato de que, para $\alpha > 1,5$, o expoente ζ/v encontrado pelo método numérico utilizado

neste estudo não é compatível com a estimativa teórica.

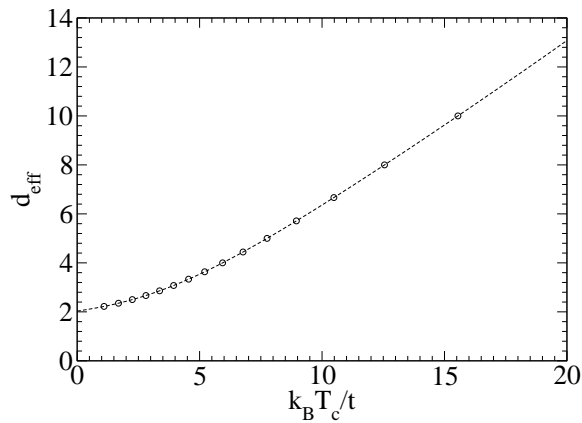
Por fim, as temperaturas críticas em função de α podem ser visualizadas na figura 15. É possível observar que, quando T_c é disposto em escala logarítmica, os valores encontrados formam uma curva característica. Utilizando a eq. (4.6), e trocando os eixos coordenados, é possível estabelecer a relação existente entre a dimensão efetiva d_{eff} e T_c . Isto pode ser visto na figura 16. Através de uma regressão não-linear sobre a curva resultante, é possível observar que a BEC ocorre somente quando o sistema possui dimensão efetiva maior do que 2, como era esperado.

Figura 15: Gráfico da temperatura crítica para vários valores de α .



Fonte: Ilustrado pelo autor.

Figura 16: Gráfico da dimensão efetiva para diferentes temperaturas críticas.



Fonte: Ilustrado pelo autor.

5 CONSIDERAÇÕES FINAIS

Nesta dissertação, foi analisado o comportamento crítico da transição de condensação de Bose-Einstein em uma cadeia linear com acoplamentos de longo alcance que decaem com uma potência α da distância. A densidade de estados nas proximidades do estado fundamental apresenta um comportamento do tipo lei de potência que se assemelha ao observado em sistemas com interações de curto alcance com dimensão $d_{eff} = 2/(\alpha - 1)$ para $1 < \alpha < 2$.

O espectro de energias do Hamiltoniano foi analiticamente determinado em cadeias de tamanho finito. No contexto do ensemble grande-canônico, usamos o espectro exato de energias possíveis para uma partícula, para obter a fração de partículas condensadas no estado fundamental que representa o parâmetro de ordem da transição de condensação de Bose-Einstein. Após uma análise de escala por tamanho finito, foram obtidas a temperatura de transição e os expoentes relevantes que caracterizam sua classe de universalidade para diferentes valores do expoente α que caracterizam o alcance dos acoplamentos. Dois comportamentos foram observados. No primeiro, quando a dimensão efetiva se encontra entre 2 e 4, isto é, para $3/2 < \alpha < 2$, todos os expoentes numericamente obtidos coincidem com os valores conhecidos na literatura para sistemas homogêneos com acoplamentos de curto alcance numa rede hipercúbica de dimensão d_{eff} . Isto foi corroborado pelo colapso das curvas do parâmetro de ordem, mediante o tratamento feito com os expoentes obtidos numericamente.

Quando a dimensão efetiva é maior do que 4, isto é, no regime de $1 < \alpha < 3/2$ os expoentes obtidos pela análise de escala de tamanhos finitos diferem daqueles observados em uma rede hipercúbica de dimensão d_{eff} . A inconsistência se dá particularmente para o expoente $\frac{\zeta}{\nu}$, que governa a dependência do parâmetro de ordem com a dimensão linear do sistema na transição. Este resultado indica que, neste regime, estes dois modelos não são equivalentes do ponto de vista de suas classes de universalidade. Apesar dos dois modelos apresentarem a mesma lei de potência que caracteriza o comportamento da densidade de estados nas proximidades do estado fundamental, estes devem apresentar diferentes comportamentos de escala do gap entre o estado fundamental e o primeiro estado excitado quando o acoplamento torna-se de muito longo alcance. Isto justificaria a diferença nos expoentes críticos que governam a transição de condensação de Bose-Einstein nestes dois modelos. Uma segunda alternativa diz respeito à validade da hipótese de que apenas um único comprimento de escala deva ser utilizado para obtenção dos expoentes críticos. Acima da dimensão crítica superior $d = 4$ que delimita o início de um regime onde o comportamento crítico usualmente satisfaz a previsão da teoria de campo médio, um segundo comprimento característico pode ser necessário para descrever a dependência do parâmetro de ordem com a temperatura e o tamanho do sistema. Isto teria impacto na medida numérica dos expoentes através da análise de escala de tamanhos finitos aqui desenvolvida.

Como proposta de continuidade do presente trabalho, seria importante fazer uma análise de escala comparativa do gap de energia no fundo da banda para o presente modelo bem como em uma rede hipercúbica de dimensão d . Uma análise de escala incluindo dois comprimentos característicos também poderia revelar a presença de correções à teoria de escala tradicional. Adicionalmente, seria interessante desenvolver argumentos analíticos que permitam obter os expoentes críticos do presente modelo nos dois regimes de alcance dos acoplamentos. Se espera que os resultados apresentados neste trabalho possam motivar desenvolvimentos futuros ao longo destas direções.

REFERÊNCIAS

- [1] PLANCK, M. Ueber das gesetz der energieverteilung im normalspectrum. *Annalen der physik*, Wiley Online Library, v. 309, n. 3, p. 553–563, 1901.
- [2] BOSE, S. N. Plancks gesetz und lichtquantenhypothese. *Z. phys*, Springer, v. 26, n. 3, p. 178, 1924.
- [3] EINSTEIN, A. Quantentheorie des einatomigen idealen gases. *Preuss. Acad. Wiss. Berl. Berlin Sitz*, v. 22, p. 261–267, 1924.
- [4] EINSTEIN, A. Quantentheorie des einatomigen idealen gases, zweite abhandlung, sitzungsber. *Kgl. Preuss. Akad. Wiss*, v. 1, p. 3–14, 1925.
- [5] ANDERSON, M. H. et al. Observation of bose-einstein condensation in a dilute atomic vapor. *science*, American Association for the Advancement of Science, v. 269, n. 5221, p. 198–201, 1995.
- [6] DAVIS, K. et al. Bose-einstein condensation in a gas of sodium atoms. *Physical Review Letters*, APS, v. 75, n. 22, p. 3969, 1995.
- [7] CORNELL, E. A.; KETTERLE, W.; WIEMAN, C. E. The nobel prize in physics 2001. 2001.
- [8] ONNES, H. K. Further experiments with liquid helium. c. on the change of electric resistance of pure metals at very low temperatures etc. iv. the resistance of pure mercury at helium temperatures. In: *KNAW, Proceedings*. [S.l.: s.n.], 1911. v. 13, p. 1274–1276.
- [9] COOPER, L. N. Bound electron pairs in a degenerate fermi gas. *Phys. Rev.*, American Physical Society, v. 104, p. 1189–1190, Nov 1956.
- [10] BARDEEN, J.; COOPER, L. N.; SCHRIEFFER, J. R. Microscopic theory of superconductivity. *Phys. Rev.*, American Physical Society, v. 106, p. 162–164, Apr 1957.
- [11] THE Nobel Prize in Physics 1972. In: NOBEL Media AB 2013. Nobelprize.org, 1972. Disponível em: <http://www.nobelprize.org/nobel_prizes/physics/laureates/1972/>. Acesso em: 26 Nov. 2013.
- [12] KAPTZA, P. Viscosity of liquid helium below the λ -point. *Nature*, v. 141, p. 74, 1938.
- [13] TISZA, L. Transport phenomena in helium ii. *Nature*, v. 141, p. 913, 1938.
- [14] SEARS, V. F. et al. Neutron-scattering determination of the momentum distribution and the condensate fraction in liquid ^4He . *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 49, p. 279–282, Jul 1982.
- [15] PENROSE, O.; ONSAGER, L. Bose-einstein condensation and liquid helium. *Phys. Rev.*, American Physical Society, v. 104, p. 576–584, Nov 1956.
- [16] HOHENBERG, P. C. Existence of long-range order in one and two dimensions. *Phys. Rev.*, American Physical Society, v. 158, p. 383–386, Jun 1967.

- [17] MERMIN, N. D.; WAGNER, H. Absence of ferromagnetism or antiferromagnetism in one- or two-dimensional isotropic heisenberg models. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 17, p. 1133–1136, Nov 1966.
- [18] HALL, C. K. Scaling in the ideal bose gas. *Journal of Statistical Physics*, Kluwer Academic Publishers-Plenum Publishers, v. 13, n. 2, p. 157–172, 1975. ISSN 0022-4715.
- [19] DIRAC, P. A. M. A new notation for quantum mechanics. *Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, v. 35, p. 416, 1939.
- [20] GERLACH, W.; STERN, O. Das magnetische Moment des Silberatoms. *Zeitschrift fur Physik*, v. 9, p. 353–355, dez. 1922.
- [21] FEYNMAN, R. et al. *Lições de física de Feynman: edição definitiva*. [S.l.]: Bookman, 2008. (Lições de física de Feynman: edição definitiva, v. 3). ISBN 9788577802579.
- [22] PAULI, W. Über den Zusammenhang des Abschlusses der Elektronengruppen im Atom mit der Komplexstruktur der Spektren. *Zeitschrift fur Physik*, v. 31, p. 765–783, fev. 1925.
- [23] HUANG, K. *Statistical mechanics*. [S.l.]: Wiley, 1987. ISBN 9780471815181.
- [24] GUNTON, J. D.; BUCKINGHAM, M. J. Condensation of the ideal bose gas as a cooperative transition. *Phys. Rev.*, American Physical Society, v. 166, p. 152–158, Feb 1968.
- [25] ROBINSON, J. E. Note on the bose-einstein integral functions. *Phys. Rev.*, American Physical Society, v. 83, p. 678–679, Aug 1951. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.83.678>>.
- [26] GRIFFITHS, D. *Mecânica quântica*. [S.l.]: Pearson Prentice Hall, 2011. ISBN 9788576059271.
- [27] SAKURAI, J.; NAPOLITANO, J.; DAHMEN, S. *Mecânica quântica Moderna*. [S.l.]: Bookman, 2013. ISBN 9788565837095.
- [28] COHEN-TANNOUDJI, C.; DIU, B.; LALOE, F. *Quantum Mechanics*. [S.l.]: Wiley, 1991. (Quantum Mechanics, v. 1). ISBN 9780471164333.
- [29] COHEN-TANNOUDJI, C.; DIU, B.; LALOE, F. *Quantum Mechanics*. [S.l.]: Wiley, 1992. (Quantum Mechanics, v. 2). ISBN 9780471569527.
- [30] FITZPATRICK, R. *The Physics of Plasmas*. 2. ed. [S.l.]: Lulu, 2008.
- [31] HEWITT, P. *Física Conceitual*. [S.l.]: Bookman, 2002. ISBN 9788536300405.
- [32] REIF, F. *Fundamentals of Statistical and Thermal Physics*. [S.l.]: Waveland Press, 2009. ISBN 9781478610052.
- [33] PRIVMAN, V. *Finite Size Scaling and Numerical Simulation of Statistical Systems*. [S.l.]: World Scientific Publishing Company, Incorporated, 1990. ISBN 9789810237967.
- [34] ESTADOS estranhos da matéria: condensação de Bose-Einstein. CFTC – Centro de Física Teórica e Computacional, Universidade de Lisboa. Disponível em: <<http://cftc.ci.ii.fc.ul.pt/PRISMA/capitulos/capitulo3/modulo2/>>. Acesso em: 26 nov. 2013.

[35] SUPERCONDUTIVIDADE, A. Seara da Ciência, Universidade Federal do Ceará. Disponível em: <<http://cftc.cii.fc.ul.pt/PRISMA/capitulos/capitulo3/modulo2/>>. Acesso em: 26 nov. 2013.