TESE DE
DOUTORADO

Expansão do virial e propriedades termodinâmicas de gases quânticos interagentes: uma abordagem via matriz - S

EDGAR MARCELINO DE CARVALHO NETO

CENTRO BRASILEIRO DE PESQUISAS FÍSICAS–CBPF

RIO DE JANEIRO, MARÇO DE 2013

Resumo

Esta tese visa utilizar um formalismo baseado numa formulação da Mecânica Estatística baseada na matriz S para estudar gases quânticos interagentes não - relativísticos.

Este formalismo é inspirado num resultado exato para uma dimensão obtido por meio do Ansatz de Beth Termodinâmico (Thermodinamical Beth Ansatz - TBA) e envolve uma expressão exata da energia livre em termos de elementos de matrizes conexos relacionados com a matriz S, porém é uma expansão de infinitos termos que não se sabe como calcular exatamente, contudo seus termos podem ser escritos com base numa diagramática que será explicada ao longo da tese e que terá interpretações interessantes.

Existe também uma aproximação para energia livre no formalismo, chamada aproximação de espuma, em que apenas processos de espalhamento de duas partículas são considerados. Esta aproximação pressupõe que o gás esteja bastante diluído e sobre temperaturas suficientemente altas.

Com a aproximação de espuma é possível obter uma expressão finita da energia livre em termos do kernel de dois corpos e de uma pseudo-energia que obedece uma equação integral. O resultado obtido se assemelha ao do gás ideal com a pseudo-energia no lugar da energia de cada partícula e a equação integral da pseudo-energia se assemelha a uma equação de Yang-Yang.

Neste trabalho é mostrado um método sistemático para obter os coeficientes do virial para um gás de bósons ou de férmions dentro e fora da aproximação de espuma, em dimensão arbitrária; bem como a influência de uma armadilha harmônica nos coeficientes do virial dentro da perspectiva da Aproximação de Densidade Local (Local Density Approximation - LDA).

Os quatro primeiros coeficientes do virial são estudados dentro da aproximação de espuma em uma, duas e três dimensões dentro do limite unitário tanto para bósons quanto para férmions, e apenas em três dimensões além do limite unitário. Alguns resultados obtidos ainda não tinham sido estudados na literatura, como a expansão do virial para bósons, e outros concordam com resultados obtidos por outros métodos. A expressão exata do terceiro coeficiente do virial é obtida em termos do kernel de dois e três corpos.

Também são obtidas algumas funções de escala e propriedades termodinâmicas para os gases em questão além do limite unitário, já que resultados no limite unitário com este método já existem na literatura. Um critério para transição de fase é estabelecido e o estudo do crossover BCS/BEC é feito por meio da obtenção do comportamento das temperaturas críticas em função do inverso do comprimento de espalhamento.

Abstract

This work uses a formalism based in a formulation of Statistichal Mechanics based on the S - matrix to study non - relativistic interacting quantum gases.

This formalism is inspired in a previous result obtained in one dimension with the use of the Thermodinamical Beth Ansatz - TBA, it involves an exact expression of the free energy written in terms of connected matrix elements related to the S - matrix. This expansion has an infinity number of terms and can't be exactly performed but these terms may be found with some specific diagrammatic rules with interesting interpretations.

There is also an approximate expression for the free energy, the approximation used is the so called foam approximation in which the only processes considered are two-body scattering. This approximation has the assumption that the gas is very diluted and the temperature is high. It provides a finity expression for the free energy which depends only of the two-body kernel.

The finity expression of the free energy in the foam approximation is similar to the ideal gas expression, but with a pseudo-energy instead of the energy. The pseudo-energy satisfies an integral equation quite similar to the usual Yang-Yang equations.

A sistematic method to obtain the virial coefficients is exposed here in and out of the foam approximation for arbitrary number of dimensions, it works for Bose and Fermi gases. The influence of an harmonic trap in the virial expansion is also studied using the Local Density Approximation - LDA.

The first four virial coefficients are obtained in the foam approximation for Bose and Fermi gases in one, two and three dimensions in the unitary limit. The same results are obtained in only three dimensions out of the unitary limit. Some new results are obtained as the virial expansion for a bosonic gas and others results are in agreement with other methods used in the literature. The exact expression of the third virial coefficient is obtained in terms of the two and three body kernels.

Scaling functions and thermodynamical properties are studied out of the unitary limit, because results in the unitary limit already exist in the literature with this method. A criteria for phase transition is defined and the BCS/BEC crossover is studied.

Agradecimentos

Gostaria primeiramente de agradecer a Deus por tudo que já experimentei nesta vida e pela oportunidade de prestar esta contribuição para sociedade. Em seguida gostaria de agradecer a minha família por todo amor, carinho e apoio com o qual sempre pude contar e em especial a minha mãe, que sei que é a pessoa que mais me ama e me apóia no mundo e a minha falecida avó (vovó Marieta) que junto com minha mãe foram as pessoas mais relevantes na minha formação como pessoa. Gostaria de prestar homenagem ao meu querido e falecido primo Carlos Marques (Cacau) pelos bons momentos que tivemos juntos e desejar muita paz na sua nova jornada.

Sou muito grato a todos os professores e orientadores que tive nesta vida e devo a eles muitas das minhas realizações, frequentemente me espelho neles e sempre os admirei bastante. Em particular gostaria de agradecer ao professor Roditi, nunca imaginei que me sentiria tão bem e a vontade de trabalhar com uma pessoa como aconteceu com ele que é capaz de aliar muita competência e eficiência com uma serenidade e paciência inabaláveis; aos professores Daniel Barci, Sebastião Alves dias e José A Helatel por sua boa vontade e cursos de excelente nível que contribuíram muito para minha formação atual, bem como conversas e discussões esclarecedoras.

Aos meus amigos, que são poucos mas com os quais sempre pude contar e me apoiaram sempre, apesar de todas as minhas chatices (que todos sabem são muitas!) e aos meus colegas que de alguma forma contribuíram para meu desenvolvimento acadêmico.

Sumário

Lista de Tabelas

Lista de Figuras

Introdução

O interesse da comunidade pela área de átomos frios apresentou um crescimento considerável nos últimos anos, isto pode ser atribuído especialmente a dois fatores: o aumento da precisão dos experimentos que vem sido feitos nos últimos anos [1, 2, 3, 4, 5, 6] e ao desenvolvimento de métodos teóricos cada vez mais capazes de reproduzir os dados experimentais, dentre os quais se destacam os métodos de simulação Monte - Carlo [7, 8, 9, 10].

O objetivo desta tese é o estudo de gases quânticos com interação, tanto bosônicos como fermiônicos. Desde o século passado importantes contribuições científicas têm ocorrido nesta área que inicialmente permaneceu um pouco enigmática, basta dizer que após os trabalhos de Bose em 1920 sobre a estatística das partículas bosônicas, apenas cinco anos depois em 1925 Abert Einstein previu teoricamente a existência do condensado de Bose - Einstein [34], mas somente em 1995 o primeiro condensado de Bose - Einstein foi obtido experimentalmente [35].

Como será dito mais a frente: a natureza superfluida do ^4He foi rapidamente associada a condensação de Bose - Einstein. De fato hoje não apenas a superfluidez mas também a supercondutividade são em vários casos descritos pela famosa teoria BCS (Bardeen - Cooper - Schrieffer) na qual partículas fermiônicas se acoplam em pares de Cooper formando um ente bosônico, que por sua vez pode sofrer condensação de Bose - Einstein. Deste modo uma boa compreensão do gás quântico pode proporcionar também uma melhor compreensão da superfluidez e da supercondutividade, que são importantes não apenas para um melhor entendimento da natureza mas também e principalmente para a evolução tecnológica por motivos óbvios.

Voltando mais uma vez a parte experimental: os experimentos de Ressonância de Feshbach, originalmente usados em Física Nuclear [52], se mostraram uma boa alternativa experimental para o estudo de átomos frios, com eles é possível regular o comprimento de espalhamento e naturalmente a interação entre as partículas num processo multicanal, regulando um campo magnético externo. Com estes experimentos é possível se obter para o gás de bósons uma temperatura crítica na qual o comprimento de espalhamento diverge para um certo valor da constante de acoplamento de modo que logo abaixo deste valor o gás se apresenta como um condensado de Bose - Einstein (BEC). Estes experimentos apresentam alta precisão e uma grande avalanche de dados experimentais tem aparecido nos últimos anos de modo que mais uma vez vale ressaltar: são necessários métodos teóricos para reproduzi-los.

Este trabalho apresenta uma ferramenta teórica para explorar estes tipos de sistema, o qual foi baseado na solução exata em uma dimensão do problema por meio do famoso Ansatz de Beth Termodinâmico - TBA [22]; contudo em dimensão maior que um o sistema em questão não é integrável e a impossibilidade de se fatorizar a matriz S inviabiliza a obtenção de uma solução exata por este método.

No formalismo aqui apresentado existe uma expressão exata da energia livre em termos de elementos de matrizes conexos de um operador obtido a partir do operador associado a matriz S, esta expressão possui uma representação diagramática mas envolve uma soma de infinitos termos que não se consegue calcular exatamente, de fato mesmo os elementos de matrizes conexos não são fáceis de se calcular. Para resolver este dilema é feita uma aproximação válida para temperaturas suficientemente altas e baixas densidades na qual se consideram apenas processos de dois corpos; nesta aproximação a energia livre apresenta numa expressão finita em termos do kernel de dois corpos, o qual pode ser calculado exatamente, e de uma pseudo-energia que satisfaz uma equação integral similar a equação de Yang - Yang em [22].

Nesta tese este formalismo é usado para calcular os coeficientes do virial para um gás quântico interagente, resultados são obtidos tanto para bósons quanto para férmions em uma, duas e três dimensões; dentro e fora do chamado limite unitário, que será explicado mais adiante. As propriedades termodinâmicas são obtidas fora do limite untário e o estudo do crossover BCS/BEC é feito para o caso fermiônico tridimensional. Muitos dos resultados aqui aparecem em [27] e apresentam boa concordância, considerando os limites adequados, com os resultados obtidos em [24] no limite unitário.

No primeiro capítulo desta tese são discutidos conceitos básicos fundamentais para compreensão do assunto em questão e até mesmo de parte desta introdução: primeiro é discutido o conceito de indistinguibilidade das partículas e o porquê de existirem partículas bosônicas e fermiônicas; depois é feita a solução do gás ideal quântico de Bose e de Fermi, a definição do que é a condensação de Bose - Einstein e por quais motivos ela é típica de sistemas bosônicos; na subseção seguinte é feita uma disgressão meramente conceitual e desprovida de detalhamento matemático sobre a teoria BCS, sua importância para os gases quânticos e como ela e a condensação de Bose-Einstein são importantes para outros tópicos de grande interesse da Física contemporânea como a superfluidez e a supercondutividade; no fim do capítulo são feitas algumas explicações sobre os experimentos de Ressonância de Feshbach e sua importância para o trabalho feito nesta tese. Este capítulo é rico em discussões conceituais e históricas e sem grande detalhamento matemático.

Diferente do capítulo anterior, o segundo capítulo é um capítulo razoavelmente denso onde os detalhes matemáticos são mostrados com alguma minúcia; nele é mostrada uma formulação da Mecânica Estatística baseada na matriz S. Esta formulação pode ser encontrada em [13], e é a partir dela que o formalismo desta tese é construído.

O terceiro capítulo também é rico em detalhamento matemático e nele é mostrado o formalismo utilizado nesta tese para estudar o sistema em questão: gases quânticos interagentes. Primeiramente é mostrada uma expansão exata da energia livre, depois como esta expansão pode ser vista com o auxílio de regras diagramáticas e a interpretação destas regras; posteriormente é feita uma construção matemática baseada em métodos funcionais, similar ao que acontece corriqueiramente em Teoria Quântica de Campos, na qual a energia livre é obtida por meio da minimização de um funcional; na subseção seguinte é mostrada a aproximação de espuma e como ela determina o funcional mencionado anteriormente, com isto acha-se uma expressão exata para a energia livre em termos do kernel de dois corpos e uma equação integral que pode ser resolvida numericamente.

Com o formalismo já estabelecido, no quarto capítulo é mostrada a ação para gases quânticos bosônicos e fermiônicos e sobre ela são aplicadas as técnicas usuais do grupo de renormalização, são achados então os pontos fixos da teoria e um esboço do diagrama de fases é mostrado para dimensão um, dois e três. Depois é calculada a amplitude de dois corpos renormalizada, a seção de choque, o comprimento de espalhamento e finalmente o kernel de dois corpos e a matriz S da teoria. Posteriormente é definido o conceito do limite unitário, sua importância e as adaptações sobre este conceito feitas aqui, o kernel de dois corpos renormalizado no limite unitário é então achado. No final do capítulo são definidas algumas funções de escala com base no comportamento da teoria livre e como elas podem ser úteis durante a aplicação dos métodos numéricos relacionados com a aproximação de espuma.

No quinto capítulo é mostrado como se obter os coeficientes do virial com o presente formalismo. Os quatro primeiros coeficientes são obtidos na aproximação de espuma em três dimensões dentro e fora do limite unitário, e em uma e duas dimensões no limite unitário. A influência de uma armadilha harmônica sobre os coeficientes do virial é estudada com o uso da Aproximação de

Densidade Local - LDA e em particular é considerado o efeito de uma armadilha hamônica gaussiana anisotrópica. É mostrado também como obter uma expressão exata para o terceiro coeficiente do virial em termos do kernel de dois e três corpos (além da aproximação de espuma). Finalmente dentro da aproximação de espuma são obtidas as propriedades termodinâmicas e o estudo do crossover BEC/BCS é feito após se definir adequadamente os critérios de transição de fase para bósons e férmions com base nos resultados numéricos obtidos.

Por último são mostradas as conclusões e perspectivas futuras decorrentes deste trabalho.

Capítulo 1

Um pouco de história e panorama geral

Antes de expor o formalismo utilizado e obter os resultados, este capítulo visa apresentar um pouco da história por trás dos experimentos e das teorias que estão relacionados com o presente trabalho, bem como uma breve discussão sobre alguns resultados teóricos elementares (como a solução do gás ideal quântico) e como eles podem motivar a existência de campos de pesquisas bem atuais. Também é feita uma breve discussão sobre as teorias e métodos experimentais utilizados e como os parâmetros ajustados no experimento se relacionam com a teoria que será exposta aqui.

Este é um capítulo introdutório que visa contextualizar o leitor historicamente com a área de pesquisa deste trabalho, com as idéias teóricas básicas por trás dos fenômenos de interesse e com os métodos experimentais utilizados neste campo de estudo. Alguns conceitos e resultados teóricos são brevemente discutidos.

Primeiramente será apresentada uma breve discussão histórica e conceitual sobre o conceito de indistinguibilidade de partículas; depois será apresentada a solução do gás quântico, a condensação de Bose-Einsein e como esta pode ser vista teoricamente dentro do simples modelo do gás ideal; posteriormente uma breve disgressão sobre a teria BCS e sua importância para alguns sistemas físicos é feita; por último são dadas algumas explicações sobre o experimento de Ressonância de Feshbach, sua importância e sua relação com o crossover BCS/BEC, bem como outras aplicações.

1.1 A indistinguibilidade das partículas

Como é sabido hoje em dia, pelo menos até o presente momento, existem essencialmente dois tipos de partícula no Universo: os bósons e os férmions. A diferença fundamental entre eles é que os férmions obedecem o chamado Princípio de Exclusão de Pauli e os bósons não, mas isso será explicado mais adiante.

Uma maneira razoável de se começar a entender o porquê destes dois tipos de partícula é pensar na importância de se considerar a indistinguibilidade de partículas idênticas na Mecânica Quântica, isto simplesmente quer dizer que dadas duas partículas idênticas 1 e 2 (mesma massa e caracterizadas pelos mesmos números quânticos: spin, hipercarga, ...) em dois estados específicos A e B, o estado global do sistema é o mesmo se 1 estiver no estado A e 2 no B ou se 1 estiver no estado B e 2 no A. A generalização para mais partículas é óbvia.

Este princípio de indistinguibilidade das partículas se traduz matematicamente da seguinte forma, o quadrado da norma da função de onda de um conjunto de partículas idênticas deve ser invariante pela permutação das partículas. Isto sugere várias maneiras de definir a função de onda de partículas idênticas: produto das funções de uma partícula, antideterminante das funções de uma partícula e os determinantes de Slater. Em todo o caso para manter esta invariância pela permutação a permutação só pode mudar a função de onda por uma fase ou um sinal, a discussão aqui será restrita ao sinal.

Um caso interessante a ser considerado é quando a permutação de duas partículas muda o sinal da função de onda (diz-se então que a função é antissimétrica), o que é construído por meio dos determinantes de Slater. Neste caso a função de onda naturalmente se anula quando duas partículas ocupam o mesmo estado, pois uma permutação de duas partículas no mesmo estado implicará que a função de onda é igual a ela mesma com o sinal trocado e como o Espaço de Hilbert é definido sobre um corpo, e portanto sobre um domínio de integridade, a função de onda naturalmente se anulará.

Sendo assim funções de onda antissimétricas descrevem partículas que não podem ocupar o mesmo estado, este princípio de que duas partículas idênticas descritas por funções antissimétricas não podem ocupar o mesmo estado se chama Princípio de Exclusão de Pauli. Este tipo de partícula e suas propriedades estatísticas foram amplamente estudados por Fermi e por isso estas partículas se chamam férmions.

Se as partículas entretanto não forem descritas por funções antissimétricas, elas não sofrem nenhuma restrição e portanto o Princípio de Exclusão de Pauli não é válido. Este tipo de partícula e suas propriedades estatísticas foram amplamente estudados por Bose em meados de 1920 e por isso essas partículas se chamam bósons.

Dentro da perspectiva mais abrangente da Teoria Quântica de Campos - TQC, é possível ainda provar que bósons sempre possuem spin inteiro e férmions spin semi-inteiro. Este resultado é chamado de Teorema de Spin-Estatística e é de se esperar que ele só possa ser visto na TQC, pois na Mecânica Quântica o spin é colocado a mão sem nenhum princípio fundamental para concordar com as raias espectrais produzidas pelo efeito Zeeman.

A carga de spin corresponde a carga de Noether do Boost de Lorentz e portanto não poderia ser explicada por uma teoria não relativística como a Mecânica Quântica.

1.2 O gás ideal quântico e a condensação de Bose-Einstein

Em 1925 Albert Eisntein previu a possibilidade do fenômeno de Condensação de Bose-Einstein [34] que será mostrado a seguir dentro da perspectiva de um gás ideal. O primeiro condensado de Bose - Einstein foi feito em 1995 [35], desde então inúmeros exemplos deste condensado foram obtidos com átomos alcalinos e outros elementos [36, 37, 38, 39, 40, 41, 42, 43, 44, 45] e também com moléculas [46, 47, 48, 49].

Ainda antes de 1995, em 1938, treze anos depois da previsão teórica de Einstein; Pyotr Kaptisa, John Allen e Don Misener descobriram a natureza superfluida do ^4He a temperaturas inferiores a 2,17K, a qual foi rapidamente associada a condensação de Bose -Einstein. Hoje se sabe que o ^4He sofre uma espécie de condensação de Bose - Einstein (uma divergência do número de ocupação do estado fundamental) a temperatura de 3,14K que é a chamada transição λ que separa as fases Hélio I e Hélio II; contudo o ^4He, por ser um líquido, não é um exemplo genuíno de um condensado de Bose - Einstein, este só foi obtido experimentalmente em 1995. O nome transição λ se deve a forma da curva do gráfico do calor específico contra temperatura, mostrado na figura (1.1), na figura (1.2) é mostrado o rico diagrama de fases do ^4He no gráfico da pressão contra temperatura.

Dentro do formalismo de Boltzmann-Gibbs da Mecânica Estatística, usando o ensemble grande-canônico, o grande potencial de um conjunto de bósons é dado por:

$$\Xi = \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{n_i, n_1+n_2+\ldots=N} e^{-\beta[(E_1-\mu_1)n_1+(E_2-\mu_2)n_2+\ldots]} = \sum_{n_1=0}^{\infty} \cdots \sum_{n_N=0}^{\infty} \prod_i e^{-\beta[(E_1-\mu_1)n_1+(E_2-\mu_2)n_2+\ldots]} =$$
$$\prod_i \sum_{n_i=0}^{\infty} e^{-\beta(E_i-\mu_i)n_i} = \prod_i \frac{1}{1-e^{-\beta(E_i-\mu_i)}} \Rightarrow \Xi = \prod_i \frac{1}{1-e^{-\beta(E_i-\mu_i)}}. \quad (1.1)$$

Dentro deste ensemble o número médio de partículas de um dado estado é dado por:

$$\langle n_j \rangle = -\frac{1}{\beta}\frac{\partial ln\Xi}{\partial E_j}. \tag{1.2}$$

Logo o resultado para o número médio de ocupação no ensemble gande-canônico é:

$$\langle n_j \rangle = -\frac{1}{\beta}\frac{\partial}{\partial E_j}\sum_i ln\left(\frac{1}{1-e^{-\beta(E_i-\mu_i)}}\right) = \frac{1}{\beta}\sum_i \frac{\partial}{\partial E_j} ln\left(1-e^{-\beta(E_i-\mu_i)}\right) = \frac{e^{-\beta(E_j-\mu_j)}}{1-e^{-\beta(E_j-\mu_j)}} \Rightarrow$$
$$\Rightarrow \langle n_j \rangle = \frac{1}{e^{\beta(E_j-\mu_j)}-1}. \tag{1.3}$$

Olhando para a última expressão é perceptível que se n_0, μ_0 e E_0 forem respectivamente o número de ocupação, o potencial químico e a energia do estado fundamental; tem-se que o número de ocupação do estado fundamental diverge quando $\mu_0 = E_0$. Esta divergência é que caracteriza a condensação de Bose-Einstein.

Fazendo o mesmo procedimento para férmions, a única diferença é que como os férmions obedecem o Princípio de Exclusão o somatório da Função de Partição Grande-Canônica é tal que cada número de ocupação só pode ser zero ou um, logo:

$$\Xi = \prod_i \sum_{n_i=0,1} e^{-\beta(E_i-\mu_i)n_i} = \prod_i [1+e^{-\beta(E_i-\mu_i)n_i}] \tag{1.4}$$

e o número médio de ocupação é então dado por:

$$\langle n_j \rangle = -\frac{1}{\beta}\frac{\partial}{\partial E_j}\sum_i ln\left(1+e^{-\beta(E_i-\mu_i)}\right) = \frac{e^{-\beta(E_j-\mu_j)}}{1+e^{-\beta(E_j-\mu_j)}} \Rightarrow \langle n_j \rangle = \frac{1}{1+e^{\beta(E_j-\mu_j)}}. \tag{1.5}$$

Note que o número médio de ocupação é limitado 0<$\langle n_i \rangle$ <1 e portanto nunca diverge, sendo a condensação de Bose-Einstein uma característica exclusiva de bósons e, em princípio, impossível para férmions.

1.3 Férmions, condensação de Bose-Enstein e a teoria BCS

Na última seção foi visto que férmions não podem sofrer condensação de Bose-Einstein, isto não é totalmente verdade. O fato é que para haver condensação de Bose-Einstein é crucial que o Princípio de Exclusão não seja válido e portanto a Estatística de Fermi-Dirac não pode valer

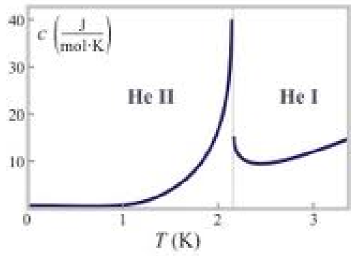

Figura 1.1: Gráfico do calor específico contra temperatura para o ^4He.

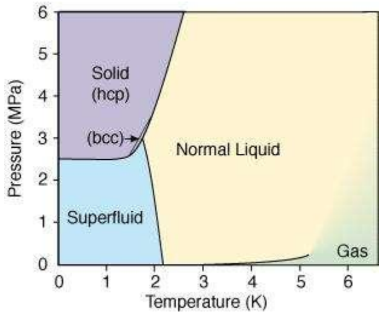

Figura 1.2: Diagrama de fases do ^4He no gráfico da pressão contra temperatura.

também; no entanto é possível formar bósons a partir de férmions como estados ligados destes, os quais podem sofrer condensação de Bose-Einstein. Algebricamente (levando em conta o Teorema de Spin e Estatística) isto não é surpresa, afinal é possível construir uma representação de spin inteiro a partir de uma representação de spins semi-inteiros mas não o contrário.

Esta possibilidade de formar bósons a partir de férmions é a idéia central de uma teoria nascida em 1957 chamada teoria BCS, cujo nome corresponde as inicias de seus criadores Bardeen-Cooper-Schrieffer (John Bardeen, Leon Cooper, Robert Schrieffer). A teoria BCS é amplamente usada na matéria condensada para descrever fenômenos de grande interesse atual como supercondutividade, superfluidez e gases quânticos fermiônicos, este último é o que mais interessa nesta tese.

A idéia central da teoria BCS é que próximo da energia de Fermi a distribuição de Fermi se torna instável quando a interação é atrativa. Isto porque os elétrons próximos do estado de Fermi se encontram ligados formando pares, os famosos pares de Cooper, estes pares possuem spin total inteiro e portanto se comportam como bósons, logo é possível mudar a estatística das partículas por meio deste mecanismo da teoria BCS.

No caso dos gases quânticos, por meio da variação da interação entre átomos é possível mudar o sinal da interação entre as partículas do gás. Na vizinhança de quando a constante de acoplamento muda de sinal o comprimento de espalhamento diverge e já não se tem mais um gás fracamente interagente de modo que uma teoria quântica de muitos corpos é necessária para descrever o sistema, quando a interação é atrativa os pares de Cooper podem se formar. Este tipo de transição de fase que não depende da temperatura, ou melhor dizendo, depende da constante de acoplamento e pode ocorrer a temperatura nula é chamada de transição de fase quântica e é um dos objetos de estudo deste trabalho. Contudo vale ressaltar que o crossover BCS/BEC é suave, ou seja, não apresenta nenhuma mudança abrupta em nenhuma propriedade termodinâmica e por isso não costuma ser considerado como uma transição de fase convencional.

No caso do supercondutor os elétrons dos pares de Cooper interagem trocando fônons, para separar o par de Cooper é necessário fornecer uma energia maior que o dobro da energia de gap, que é a diferença de energia entre o estado de Fermi e os estados excitados; os pares de Cooper no supercondutor também sofrem condensação de Bose-Einstein. No caso do ^3He, depois da condensação de Bose-Einstein ocorre ainda outra transição que é a formação do superfluido, bastante parecido com o supercondutor e também descrito pela teoria BCS.

Como foi dito anteriormente esta tese trata de gases quânticos, portanto é necessário entender como se pode fazer a interação entre os átomos de um gás variar e com isso conseguir o crossover BCS/BEC; o principal método para isso é a chamada Ressonância de Feshbach, que será o tema da próxima seção.

1.4 Ressonância de Feshbach

Em teoria de espalhamento o conjunto de números quânticos que caracterizam os estados in e out é chamado de canal (algumas referências definem o canal como sendo o processo em si). Quando os números quânticos dos estados in e out são distintos o espalhamento é dito multicanal. Existem situações em que o limite de baixa energia de um canal afeta o comprimento de espalhamento de outro canal, este tipo de situação é que é explorada nas chamadas Ressonâncias de Feshbach.

A ressonância de Feshbach acontece quando a energia total de um canal aberto coincide com a energia de um estado ligado de um canal fechado; em primeira ordem na constante de acoplamento entre os canais o espalhamento não é afetado, já que não existem estados contínuos no canal fechado. Em segunda ordem na constante de acoplamento é possível que duas partículas num canal aberto se espalhem e formem um estado intermediáio no canal fechado, que por sua vez pode decair em duas partículas num dado canal aberto. Estes processos de segunda ordem, em teoria de perturbação, geram termos do tipo

$$a \sim \frac{C}{E - E_0}, \tag{1.6}$$

onde E é a energia das partículas no canal aberto e E_0 a energia de um estado nos canais fechados.

Sendo assim, observando a teoria de perturbação em segunda ordem, é óbvio que se a energia total de duas partículas no canal aberto coincidir com a energia de um estado ligado no canal fechado o comprimento de espalhamento diverge.

A energia das partículas no canal aberto pode ser controlada de várias formas, de modo que existem diferentes maneiras de se fazer a ressonância de Feshbach, no entanto a mais popular é controlar a energia do canal aberto por meio do efeito Zeeman regulando um campo magnético externo. A figura (1.3) mostra o gráfico do comprimento de espalhamento em função do campo magnético externo numa ressonância de Feshbach.

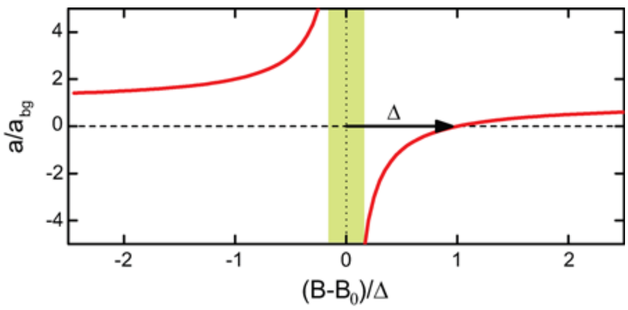

Figura 1.3: Comprimento de espalhamento em função do campo magnético externo numa ressonância de Feshbach no canal S.

Se a energia das partículas no canal aberto for maior que a do estado ligado no canal fechado, a interação efetiva entre os átomos é repulsiva, se por outro lado a energia do estado ligado for maior a interação é atrativa. Vê-se então que é possível diminuir a intensidade da atração até que ela mude de repulsiva para atrativa ou o contrário. O caso em que o comprimento de espalhamento diverge é bastante estudado nesta tese e corrresponde ao limite unitário da matriz S em três dimentsões.

Estes experimentos de Ressonância de Feshbach são bastante precisos e foram primeiramente usados em Física Nuclear [52], depois em 1992 foram sugeridas as primeiras aplicações a átomos frios [53, 54], em 1998 demonstrou-se experimentalmente a viabilidade deste tipo de ressonância [55] e desde então este método se tornou um paradigma na área.

Dentre algumas das principais aplicações já realizadas das Ressonâncias de Feshbach em átomos frios encontram-se: o crossover BCS/BEC que será estudado nesta tese e as primeiras evidências experimentais sobre a existência dos estados de Efimov (estados de três bósons idênticos com interação de dois corpos ressonante) [51], que foram sugeridos teoricamente em 1970 [50].

Capítulo 2

A formulação de Dashen da Mecânica Estatística

Neste capítulo apresentar-se-á a formulação de Dashen da Mecânica Estatística, a qual serve como ponto de partida para a elaboração do formalismo que será utilizado no presente trabalho.

2.1 Obtendo o grande potencial em termos de elementos de matriz conexos

A formulação de Dashen da Mecânica Estatística visa descrever sistemas físicos cujos constituentes micriscópicos obedeçam aos princípios fundamentais da Relatividade Restrita. Esta proposta apresentada em 1969 por Roger Dashen, Shang - Keng Ma e Bernstein [13] mostra-se uma alternativa importante para o tratamento estatístico deste tipo de sistema, já que até o surgimento deste trabalho não havia uma formulação geral da Mecânica Estatística capaz de descrever sistemas relativísticos interagentes; no entanto sistemas relativísticos sem interação eram tratados como o gás de fótons relativísticos não-interagentes.

Dentre as diferentes abordagens que surgiram para tratar os sistemas citados, duas se destacaram: a expansão do virial e o método da função de Green à temperatura finita. O primeiro destes métodos foi desenvolvido anteriormente e vem sido amplamente usado por químicos para obter a equação de estado de gases diluídos, o segundo foi desenvolvido posteriormente, envolve o emprego do formalismo e das técnicas perturbativas e diagramáticas da Teoria Quântica de Campos - TQC e é amplamente usado em Física do Estado Sólido e de baixas temperaturas em geral.

O método da expansão do virial apresentou pioneiramente um resultado historicamente importante que é a obtenção do segundo coeficiente do virial em termos do deslocamento de fase "phase-shift"da teoria de espalhamento [14]. Este resultado foi posteriormente obtido com os métodos modernos da teoria de espalhamento por Goldberger [19], o que sugere que uma formulação da matriz S deve ser possível a partir da expansão do virial, já que em princípio esta é essencialmente a única informação que a Mecânica Quântica Relativística, ou mais corretamente a TQC, fornece. A despeito de sua importância histórica o método da esxpansão do virial mostra-se um tanto limitado já que ele não permite obter nenhum coeficiente do virial a partir do terceiro, embora existam trabalhos mais formais sobre o terceiro coeficiente [15, 16, 17, 18] .

O método da função de Green à temperatura finita é de maneira geral menos limitado e pode ser aplicado sem grandes restrições a diferentes sistemas relativísticos, exceto por uma dificuldade técnica: a determinação do hamiltoniano de interação. Como é sabido das diferentes teorias de campos relativísticas conhecidas, como a Eletrodinâmica Quântica, a Teoria Eletrofraca e a Cromodinâmica Quântica do Modelo Padrão, o hamiltoniano de interação vai sendo modificado ordem a ordem pela soma de contratermos de renormalização de modo que não se tem de forma geral o hamiltoniano total de interação do sistema. Este problema pode ser contornado assumindo-se previamente que exista um hamiltoniano de interação e posteriormente eliminando este das fórmulas finais da teoria usando identidades provenientes da teoria de espalhamento, desta forma apenas os elementos de matriz S (os quais são sempre bem definidos por razões físicas, embora nem sempre fáceis de calcular) aparecem nas fórmulas finais.

É importante ressaltar que embora a formulação do Dashen tenha tido a meta de descrever sistemas quânticos relativísticos, ela engloba também os sistemas não-relativísticos como caso particular. O objeto de estudo desta tese são gases quânticos interagentes, porém não relativíticos, como poderá ser visto mais adiante na expressão das ações dos campos que descrevem estes sistemas.

2.2 A formulação de Dashen

Como é sabido da Mecânica Estatística usual de Boltzmann - Gibbs: dentro do ensemble grande - canônico, no qual se considera o sistema termodinâmico em contato com um reservatörio de energia e de partículas, o grande potencial é definido como sendo:

$$\Omega = -\frac{1}{\beta}.lnTre^{-\beta[H-\mu N]}, \tag{2.1}$$

onde H é a hamiltoniana do sistema, $\beta = \frac{1}{T}$ é o inverso da temperatura e μ o potencial químico.

A equação de estado do sistema pode ser obtida eliminando-se μ das seguintes equações:

$$\Omega = -PV, \tag{2.2}$$

$$N = -\frac{\partial\Omega}{\partial\mu}; \tag{2.3}$$

onde P e V são respectivamente a pressão e o volume do sistema.

Vale recordar que dentro da perspectiva do ensemble grande-can|ônico o fator $\beta = \frac{1}{T}$ e o potencial químico μ fazem o papel de multiplicadores de Lagrange, cuja função é garantir a conservação da energia e do número de partículas do sistema. Desta forma caso o sistema possua outras simetrias fundamentais envolvidas e naturalmente outras leis de conservação, a equação 2.1 deve ser naturalmente generalizada para:

$$\Omega = -\frac{1}{\beta}.lnTre^{-\beta[H-\sum_i \mu_i N_i]}; \tag{2.4}$$

um exemplo trivial é quando existem vários tipos de partícula cujo número se conserva, caracterizando o equilíbrio químico. No caso das interações fortes o índice i poderia significar o número bariônico, a estranheza e a cor. Embora aqui não se faça menção a isto o tempo todo, é claro que essas leis de conservação refletem as simetrias fundamentais do sistema como é esperado pelo Teorema de Noether classicamente ou em "nível de árvore", ou do ponto de vista quântico pelas identidades de Ward - Takahashi; do ponto de vista quântico essas simetrias podem ser quebradas pelas correções quânticas.

O traço da última equação equivale a tomar o traço sobre os elementos de N partículas, somando N de 0 a infinito, fazendo isto e expandindo a última equação em potências de $z_i = e^{\beta\mu_i}$ é possível obter os coeficientes da expansão de Ω em potências de z_i e naturalmente os coeficientes do virial do sistema em questão.

Espera-se que esta série convirja para o caso diluído $z_i << 1$ e este é essencialmente o método do virial, o segundo coeficiente pode ser obtido a partir do deslocamento de fase "phase-shift"da teoria de espalhamento mas os coeficientes de ordem superior permanecem uma grande dificuldade;

contudo o resultado do segundo coeficiente sugere que seja possível obter os outros coeficientes em função dos elementos de matriz S, o que é fundamental para o caso do sistemas relativísticos como já foi discutido.

A formulação do Dashen, que é o que se pretende apresentar nesta seção; embora parecida, não é exatamente igual a do método da função de Green à temperatura finita.

Supondo que seja possível definir um hamiltoniano de interação do sistema que envolva interações entre duas partículas de cada vez, define-se:

$$H_0 \to H_0 - \mu N, \tag{2.5}$$

$$V = \sum_{i<j} V_{ij}, \tag{2.6}$$

onde V_{ij} é a interação entre as partículas i e j; vale lembrar também que $Tre^{-\beta H} = \sum_{N=1}^{\infty} Tr_N e^{-\beta H}$ e $H = H_0 + V$.

Seja o conjunto ordenado $k \equiv k_1, ..., k_N$ o rótulo do autoestado de H_0 de N partículas, o elemento de matriz $< k|e^{-\beta H}|k >$ corresponde a amplitude de probabilidade de achar o estado $|k >$ num tempo imaginário $-i\beta$ após obter este mesmo estado no tempo 0. Considerando $0 < \tau_1 < ... < \tau_N < \beta$, pode-se fazer uma expansão de Feynman-Dyson e escrever:

$$e^{-\beta H} = \sum_{N=0}^{\infty} (-1)^N \int_0^{\beta} d\tau_1 ... d\tau_N \left[e^{-(\beta-\tau_1)H_0} V . e^{-(\tau_1-\tau_2)H_0} V ... e^{-(\tau_N)H_0} V \right]. \tag{2.7}$$

Até aqui não se está levando em conta a indistinguibilidade das partículas e portanto termos como $< k_1, k_2, ..., k_N|e^{-\beta H}|k_2, k_1, ..., k_N >$ não estão sendo considerados diagonais.

A expansão de Feynman-Dyson mostrada admite representações diagramáticas como acontece usualmente em TQC. Cada diagrama pode ser escrito como produto de diagramas conexos e portanto argumentos combinatórios idênticos aos usados para definir o gerador das funções conexas permitem escrever:

$$\Omega = \Omega_0 - \frac{1}{\beta} . \left[Tre^{-\beta H} \right]_C = \Omega_0 - \frac{1}{\beta} . \sum_N \left[Tr_N e^{-\beta H} \right]_C , \tag{2.8}$$

onde Ω_0 corresponde ao grande potencial do gás livre dado por:

$$\Omega_0 = -\frac{1}{\beta} . Tr_1 e^{-\beta H_0} . \tag{2.9}$$

É interessante observar que cada diagrama conexo é proporcional ao volume de modo que termos com potências espúrias de volume foram eliminados da expressão, deixando o grande potencial com as propriedades de extensividade desejadas; este resultado exprime o Princípio da Decomposição em Cluster.

Vê-se então que apenas os elementos conexos contribuem para o grande potencial, de modo que só resta agora escrever os elementos de matriz conexos em termos dos elementos de matriz S e, é claro, considerar os outros elementos diagonais ignorados pela não observância da indistinguibilidade das partículas.

2.3 Obtendo o grande potencial em termos dos elementos de matriz S

Na seção anterior obteve-se o grande potencial termodinâmico dado pelas equações (2.8) e (2.9), nesta seção mostrar-se-á como expressar estes resultados em termos dos elementos de matriz S.

Para isso pode-se definir os operadores "resolventes"G e G_0 pelas sguintes expressões:

$$G = \frac{1}{E - H} \qquad G_0 = \frac{1}{E - H_0}, \quad (2.10)$$

de forma que o traço que aparece na expressão do grande potencial fica trivialmente dado, usando o Teorema dos Resíduos, por:

$$Tre^{-\beta H} = \frac{1}{2\pi i}\int e^{-\beta E}TrG(E)dE = \int \frac{dE}{\pi}e^{-\beta E}Im[TrG(E)], \quad (2.11)$$

onde o contorno da integral é fechado e envolve o espectro de H, sendo adotado o sentido anti-horário. O argumento de $G(E)$ é entendido como possuindo uma parte imaginária que vai a zero com valores positivos no limite em que o volume tende a infinito.

A partir de agora até o final desta seção usar-se-ão as seguintes definições abaixo, lembrando que $H = H_0 + V$:

$$T(E) = V + VG(E)V \qquad \Omega(E) = G(E)G_0(E)^{-1} \qquad S(E) = \Omega^{-1}(E^*)\Omega(E), \quad (2.12)$$

onde V obviamente nada tem a ver com o volume e Ω não deve ser confundido com o grande potencial, a letra usada visou simplesmente ressaltar sua relação com a matriz de onda da teoria de espalhamento que é definida com a mesma letra. S em princípio é um operador criado para fazer manipulações matemáticas como os outros, mas mostrar-se-á que é o operador associado a matriz S mais a frente.

Das definições de $G(E)$ e $G_0(E)$ obtém-se o seguinte resultado:

$$G(E) = \frac{1}{E-H} = \frac{1}{E-H_0-V} = \frac{\frac{1}{E-H_0}}{1-\frac{V}{E-H_0}} = \frac{G_0(E)}{1-VG_0(E)} = \sum_{n=0}^{\infty} G_0(E)(VG_0(E))^n. \tag{2.13}$$

A seguir uma série de desenvolvimentos matemáticos será feita com o intuito de se obter uma expressão matemática para o operador S que seja útil para calcular o traço da equação (2.8) e ao mesmo tempo permita identificar S com o operador da matriz S.

Primeiramente pode-se obter G em função de G_0 e T:

$$G = \sum_{n=0}^{\infty} G_0(VG_0)^n = G_0 + G_0VG_0 + G_0VG_0VG_0 + G_0VG_0VG_0VG_0 =$$
$$G_0+G_0\left[V + VG_0V + VG_0VG_0V + ...\right]G_0 = G_0+G_0\left[V + V(G_0 + ... + G_0VG_0 + ...)V\right]G_0 =$$
$$G_0 + G_0\left[V + V\left(\sum_{n=0}^{\infty} G_0(VG_0)^n\right)V\right]G_0 = G_0 + G_0\left[V + VGV\right]G_0 = G_0 + G_0TG_0, \tag{2.14}$$

logo:

$$G = G_0 + G_0TG_0. \tag{2.15}$$

A seguir pode-se escrever T em função de V e Ω:

$$T = V + VGV = V + V(G_0 + G_0VG_0 + G_0VG_0VG_0 + ...)V = V[1 + G_0V + G_0VG_0V + ...] =$$
$$= V[G_0 + G_0VG_0 + G_0VG_0VG_0 + ...]G_0^{-1} = VGG_0^{-1} = V\Omega. \tag{2.16}$$

logo:

$$T = V\Omega. \tag{2.17}$$

Da expressão (2.15) e da definição de Ω, pode-se obter Ω dependente de G_0 e T:

$$\Omega = GG_0{}^{-1} = (G_0 + G_0 T G_0)\, G_0{}^{-1} = 1 + G_0 T, \tag{2.18}$$

logo:

$$\Omega = 1 + G_0 T. \tag{2.19}$$

Das identidades (2.17) e (2.19) tem-se de imediato que $T = V + VG_0T$, mas olhando novamente para a definição de T tem-se:

$$\begin{gathered} VG_0T = VG_0[V + VGV] = VG_0[V + VG_0V + VG_0VG_0V + ...] = VG_0V + VG_0VG_0V + \\ + VG_0VG_0VG_0V + ... = [V + VG_0V + VG_0VG_0V + ...]G_0V = \\ [V + V(G_0 + G_0VG_0 + G_0VG_0VG_0 + ...)V]\, G_0V = [V{+}VGV]G_0V = TG_0V \Rightarrow VG_0T = TG_0V, \end{gathered} \tag{2.20}$$

logo obtém-se para T:

$$T = V\Omega = V + VG_0T = V + TG_0V. \tag{2.21}$$

Usando as identidades (2.19) e (2.21) pode-se escrever também Ω dependente de G em vez de G_0:

$$\begin{gathered} \Omega = 1{+}G_0T = 1{+}G_0(V{+}VGV) = 1{+}(G_0{+}G_0VG)V = 1{+}\left[G_0 + G_0V\sum_{n=0}^{\infty} G_0(VG_0)^n\right]V = \\ 1 + \left[G_0 + \sum_{n=1}^{\infty} G_0(VG_0)^n\right]V = 1 + \left[\sum_{n=0}^{\infty} G_0(VG_0)^n\right]V = 1 + GV, \end{gathered} \tag{2.22}$$

logo juntando com o resultado (2.19) tem-se:

$$\Omega = 1 + G_0T = 1 + GV. \tag{2.23}$$

De (2.23) pode-se verificar por inspeção que o inverso de Ω é dado por:

$$\Omega^{-1} = 1 - G_0V, \tag{2.24}$$

a verifificação é direta usando (2.21) e (2.23):

$$\begin{gathered} (1 - G_0V)\Omega = (1 - G_0V)(1 + G_0T) = 1 + G_0T - G_0V - G_0VG_0T = \\ 1 + G_0T - G_0(V + VG_0T) = 1 + G_0T - G_0T = 1. \end{gathered} \tag{2.25}$$

É possível ainda observar das definições (2.10) e da hermiticidade de H e H_0 que: $G^\dagger(E) = G(E^*)$, $G_0^\dagger(E) = G_0(E^*)$ e $V = V^\dagger$; usando (2.21) tem-se que $T^\dagger(E) = T(E^*)$ e usando os resultados anteriores $\Omega^\dagger(E) = \Omega^T(E^*)$.

Usando a definição de S e as equações (2.23) e (2.24) obtém-se as seguintes identidades para S:

$$S = \Omega^{-1}(E^*)\Omega(E) = (1 - G_0(E^*)V)(1 + G_0(E)T(E)) = (1 - G_0^\dagger(E)V)(1 + G_0(E)T(E)) =$$
$$= 1 + G_0(E)T(E) - G_0^\dagger(E)V - G_0^\dagger(E)VG_0(E)T(E) = 1 + G_0(E)T(E) - G_0^\dagger(E)(V + VG_0(E)T(E)) =$$
$$= 1 + G_0(E)T(E) - G_0^\dagger(E)T(E) = 1 + (G_0(E) - G_0^\dagger(E))T(E) \Rightarrow S = 1 + (G_0 - G_0^\dagger)T \tag{2.26}$$

e

$$S^{-1} = \Omega^{-1}(E)\Omega(E^*) = (1 - G_0(E)V)(1 + G_0(E^*)T(E^*)) = (1 - G_0(E)V)(1 + G_0^\dagger(E)T^\dagger(E)) =$$
$$= 1 + G_0^\dagger(E)T^\dagger(E) - G_0(E)V - G_0(E)VG_0^\dagger(E)T^\dagger(E) = 1 + G_0^\dagger(E)T^\dagger(E) - G_0(E)(V + VG_0^\dagger(E)T^\dagger(E)) =$$
$$= 1 + G_0^\dagger(E)T^\dagger(E) - G_0(E)(V + T(E)G_0(E)V)^\dagger = 1 + G_0^\dagger(E)T^\dagger(E) - G_0T^\dagger(E) = 1 +$$
$$(G_0^\dagger(E) - G_0(E))T^\dagger(E) \Rightarrow S^{-1} = 1 + (G_0^\dagger - G_0)T^\dagger. \tag{2.27}$$

Lembrando que $VG_0T = TG_0V$ e recordando as propriedades de conjugação hermitiana já vistas tem-se $T^\dagger G_0^\dagger V = VG_0^\dagger T^\dagger$, o que unido a (2.21) resulta em:

$$T^\dagger = V + T^\dagger G_0^\dagger V = V + VG_0^\dagger T^\dagger. \tag{2.28}$$

Usando-se (2.21) e (2.28) convenientemente pode-se obter as seguintes identidades:

$$T - T^\dagger = V + VG_0T - (V + T^\dagger G_0^\dagger V) = VG_0T - T^\dagger G_0^\dagger V = (T^\dagger - T^\dagger G_0^\dagger V)G_0T - T^\dagger G_0^\dagger(T - VG_0T) =$$
$$= T^\dagger G_0 T - T^\dagger G_0^\dagger VG_0T - T^\dagger G_0^\dagger T + T^\dagger G_0^\dagger VG_0T = T^\dagger(G_0 - G_0^\dagger)T, \tag{2.29}$$

$$T - T^\dagger = V + TG_0V - (V + VG_0^\dagger T^\dagger) = TG_0V - VG_0^\dagger T^\dagger = TG_0(T^\dagger - VG_0^\dagger T^\dagger) - (T - TG_0V)G_0^\dagger T^\dagger =$$
$$= TG_0T^\dagger - TG_0VG_0^\dagger T^\dagger - TG_0^\dagger T^\dagger + TG_0VG_0^\dagger T^\dagger = T(G_0 - G_0^\dagger)T^\dagger \tag{2.30}$$

e analogamente aos casos anteriores

$$T - T^\dagger = V(G_0 - G_0^\dagger)V. \tag{2.31}$$

Juntando os resultados anteriores tem-se a seguinte identidade

$$T - T^\dagger = T^\dagger(G_0 - G_0^\dagger)T = T(G_0 - G_0^\dagger)T^\dagger = V(G_0 - G_0^\dagger)V, \tag{2.32}$$

que representa simultâneamente uma condição de unitariedade e o Teorema Óptico na forma de operador.

Como já foi dito antes: espera-se que no limite em que o volume tende a infinito, o argumento E dos operadores "resolventes"$G_0(E)$ e $G(E)$ tende a se tornar real por cima do eixo real; mas nesta circunstância a diferença $G_0(E) - G_0^\dagger(E)$ tende a uma delta de Dirac:

$$G_0(E) - G_0^\dagger(E) = -2\pi i\delta(E - H_0). \tag{2.33}$$

Usando este resultado, as identidades (2.26) e (2.27) podem ser escritas como:

$$S = 1 - 2\pi i\delta(E - H_0)T \tag{2.34}$$

e

$$S^{-1} = 1 + 2\pi i\delta(E - H_0)T^\dagger. \tag{2.35}$$

Sabe-se da teoria de espalhamento que os elementos de matriz S satizfazem a equação

$$S_{kk'} = \delta_{kk'} - 2\pi i\delta(E_k - E_{k'})T_{kk'}(E_{k'}), \tag{2.36}$$

comparando com (2.34) vê-se claramente que o operador S definido artificialmente nesta seção está associado aos elementos de matriz S:

$$S_{kk'} =< k|S(E_{k'})|k' > . \tag{2.37}$$

Finalmente, após tantos artifícios matemáticos, chegar-se-á a identidade que permitirá escrever o grande potencial em termos dos elementos de matriz S da teoria. Recordando que $S = \Omega^{-1*}\Omega$, $S^{-1} = \Omega^{-1}\Omega^*$ e definido: $A\frac{\bar{\partial}}{\partial E}B = A\frac{\partial B}{\partial E} - \frac{\partial A}{\partial E}B$ pode-se calcular $Tr\left[S^{-1}\frac{\bar{\partial}}{\partial E}S\right]$:

$$Tr\left[S^{-1}\frac{\bar{\partial}}{\partial E}S\right] = Tr\left[S^{-1}\frac{\partial S}{\partial E} - \frac{\partial S^{-1}}{\partial E}S\right] =$$
$$= Tr\left[\Omega^{-1}\Omega^{*}\frac{\partial \Omega^{-1*}}{\partial E}\Omega + \Omega^{-1}\Omega^{*}\Omega^{-1*}\frac{\partial \Omega}{\partial E} - \frac{\partial \Omega^{-1}}{\partial E}\Omega^{*}\Omega^{-1*}\Omega - \Omega^{-1}\frac{\partial \Omega^{*}}{\partial E}\Omega^{-1*}\Omega\right] =$$
$$= Tr\left[\Omega^{-1}\frac{\partial \Omega}{\partial E} - \frac{\partial \Omega^{-1}}{\partial E}\Omega + \Omega^{-1}\left(\Omega^{*}\frac{\partial \Omega^{-1*}}{\partial E} - \frac{\partial \Omega^{*}}{\partial E}\Omega^{-1*}\right)\Omega\right] =$$
$$= Tr\left[\Omega^{-1}\frac{\partial \Omega}{\partial E} - \frac{\partial \Omega^{-1}}{\partial E}\Omega\right] + Tr\left[\Omega^{-1}\left(\Omega^{*}\frac{\partial \Omega^{-1*}}{\partial E} - \frac{\partial \Omega^{*}}{\partial E}\Omega^{-1*}\right)\Omega\right] =$$
$$= Tr\left[\Omega^{-1}\frac{\partial \Omega}{\partial E} - \frac{\partial \Omega^{-1}}{\partial E}\Omega\right] + Tr\left[\Omega^{*}\frac{\partial \Omega^{-1*}}{\partial E} - \frac{\partial \Omega^{*}}{\partial E}\Omega^{-1*}\right] =$$
$$= Tr\left[\Omega^{-1}\frac{\partial \Omega}{\partial E} - \frac{\partial \Omega^{-1}}{\partial E}\Omega + \Omega^{*}\frac{\partial \Omega^{-1*}}{\partial E} - \frac{\partial \Omega^{*}}{\partial E}\Omega^{-1*}\right] = Tr\left[\Omega^{-1}\frac{\bar{\partial}}{\partial E}\Omega + \Omega^{*}\frac{\bar{\partial}}{\partial E}\Omega^{-1*}\right] \Rightarrow$$
$$\Rightarrow Tr\left[S^{-1}\frac{\bar{\partial}}{\partial E}S\right] = Tr\left[\Omega^{-1}\frac{\bar{\partial}}{\partial E}\Omega + \Omega^{*}\frac{\bar{\partial}}{\partial E}\Omega^{-1*}\right]. \quad (2.38)$$

Vale ressaltar que na última equação usou-se a linearidade e a invariância por transformação de similaridade do traço.

Usando as identidades (2.23) e (2.24) tem-se:

$$\Omega^{-1}\frac{\bar{\partial}}{\partial E}\Omega = (1 - G_0 V)\frac{\bar{\partial}}{\partial E}\Omega = \frac{\partial \Omega}{\partial E} - G_0\frac{\bar{\partial}}{\partial E}(V\Omega) = \frac{\partial G_0 T}{\partial E} - G_0\frac{\bar{\partial}}{\partial E}T = G_0\frac{\partial T}{\partial E} + \frac{\partial G_0}{\partial E}T -$$
$$- G_0\frac{\partial T}{\partial E} + \frac{\partial G_0}{\partial E}T = 2\frac{\partial}{\partial E}\left(\frac{1}{E - H_0}\right)T == \frac{-2}{(E - H_0)^2}T = -2G_0^2 T. \quad (2.39)$$

Como o operador $\bar{\partial}$ é obviamente antissimétrico tem-se então:

$$Tr\left[S^{-1}\frac{\bar{\partial}}{\partial E}S\right] = Tr\left[\Omega^{-1}\frac{\bar{\partial}}{\partial E}\Omega + \Omega^{*}\frac{\bar{\partial}}{\partial E}\Omega^{-1*}\right] = Tr\left[\Omega^{-1}\frac{\bar{\partial}}{\partial E}\Omega - \Omega^{-1*}\frac{\bar{\partial}}{\partial E}\Omega^{*}\right] =$$
$$= Tr\left[\Omega^{-1}\frac{\bar{\partial}}{\partial E}\Omega - \left(\Omega^{-1}\frac{\bar{\partial}}{\partial E}\Omega\right)^{*}\right] = Tr\left[2iIm\left(\Omega^{-1}\frac{\bar{\partial}}{\partial E}\Omega\right)\right] = -4iImTr\left[(G_0^2 T)\right] =$$
$$= -4iImTr\left[(G_0 T G_0)\right] \Rightarrow Tr\left[S^{-1}\frac{\bar{\partial}}{\partial E}S\right] = -4iImTr\left[(G_0 T G_0)\right], \quad (2.40)$$

onde na última igualdade antes do sinal lógico de implicação foi usada a invariância do traço por permutação cíclica do produto dos elementos.

Usando a identidade (2.15), a equação acima se reduz a:

$$Tr\left[S^{-1}\frac{\bar{\partial}}{\partial E}S\right] = -4iImTr\left[G - G_0\right]. \quad (2.41)$$

Comparando com (2.11) conclui-se:

$$Tr\left[e^{\beta H} - e^{\beta H_0}\right] = -\frac{1}{4\pi i}\int dE.e^{\beta E}.Tr\left[S^{-1}\frac{\bar{\partial}}{\partial E}S\right]. \quad (2.42)$$

Comparando com (2.8) chega-se finalmente a expressão do grande potencial em termos dos elementos de matriz S:

$$\Omega = \Omega_0 + \frac{1}{\beta}\int \frac{dE}{4\pi i}.e^{-\beta E}.\left(Tr\left[S^{-1}\frac{\bar{\partial}}{\partial E}S\right]\right)_C . \qquad (2.43)$$

2.4 Considerando o efeito da indistinguibilidade das partículas

Para considerar o efeito da indistinguibilidade das partículas deve-se incluir na equação (2.8) os elementos não diagonais que envolvem permutações dos termos diagonais, formalmente isto pode ser feito definindo o operador

$$A = \sum_P \delta_P.P, \qquad (2.44)$$

onde a soma envolve as N! permutações de um estado de N partículas, P é o operador que faz permutação do rótulo das partículas e δ_P vale 1 para permutações pares e s para permutações ímpares ($s = -1$ para férmions e $s = 1$ para bósons). Em [13] apenas os férmions são considerados, mas a contrução para bósons é obviamente esta feita aqui.

A generalização então inclui diagramas associados a elementos não diagonais que envolvem a permutação dos elementos diagonais, sendo assim a expressão (2.8) fica:

$$\Omega = \Omega_0 - \frac{1}{\beta}.\sum_N \left[Tr_N A e^{-\beta H}\right]_C , \qquad (2.45)$$

onde

$$Tr_N \equiv \frac{1}{N!}\sum_{k_1,\ldots,k_N} . \qquad (2.46)$$

O fator $\frac{1}{N!}$ evita que se conte a mesma amplitude mais de uma vez. Em [13] é feita a interpretação gráfica destes diagramas e mostra-se que os diagramas não diagonais também são proporcionais ao volume, mantendo a extensividade do grande potencial como esperado.

O mesmo truque se aplica a equação (2.47). Vale ressaltar que para obter (2.47) usou-se simplesmente a invariância do traço por uma permutação cíclica de operadores, esta propriedade não é afetada pela colocação do operador A, pois A comuta com H e H_0, e consequentemente com T, S, Ω e G. Sendo assim a equação (2.47) fica:

$$\Omega = \Omega_0 + \frac{1}{\beta}\int \frac{dE}{4\pi i}.e^{-\beta E}.\left(Tr\left[A.S^{-1}\frac{\bar{\partial}}{\partial E}S\right]\right)_C, \tag{2.47}$$

onde o traço novamente é dado por (2.46) e assim obtém-se a expressão final do grande potencial em termos dos elementos de matriz S. Em [13] é discutido ainda como incluir estados ligados na teoria, exemplos de aplicações, mais detalhes sobre o uso da matriz de espalhamento T, a expansão do virial neste contexto e várias outras coisas; mas para este trabalho apenas os resultados mostrados até aqui são suficientes como ponto de partida para o formalismo que será introduzido no próximo capítulo.

Capítulo 3

O formalismo

Nesta seção explcar-se-á o formalismo utilizado neste trabalho para obter os resultados que serão apresentados nas seções posteriores. Os resultados da seção anterior serão usados como ponto de partida.

Primeiramente será mostrado o formalismo de forma geral e como este pode ser usado para obter a expressão exata da energia livre e consequentemente das propriedades termodinâmicas de um sistema físico qualquer, bem como a possibilidade de se interpretar esta expressão em termos diagramáticos; depois mostrar-se-á como obter uma expressão aproximada para energia livre em termos da "aproximação de espuma", que será explicada mais a frente com detalhes, e como esta expressão pode ser usada para obter a energia livre e as outras propriedades termodinâmicas por meio da solução de uma equação integral para a pseudo-energia ou para uma grandeza y, que serão defindos mais adiante; por último mostrar-se-á como obter os coeficientes do virial dentro e fora da aproximação de espuma.

3.1 Obtenção da energia livre

A função de partição é definida, no ensemble grande-canônico, por:

$$Z(\beta,\mu) = Tre^{-\beta(H-\mu.N)}, \tag{3.1}$$

que em vez de ser chamada de Ω, como no capítulo anterior em concordância com a notação de [13]; será chamada de Z, em concordância com a notação de [20] e [21] que é onde este formalismo é desenvolvido. O traço é dado por $Tr \equiv \sum_{N=0}^{\infty} \frac{1}{N!} \int \frac{d^d\mathbf{k}_1}{(2\pi)^d} ... \frac{d^d\mathbf{k}_N}{(2\pi)^d} |1...N\rangle\langle 1...N|$ considerando a indistinguibilidade das partículas.

Considerando (2.47) pode-se escrever:

$$Z = Z_0 + \frac{1}{\beta} \int \frac{dE}{4\pi i}.e^{-\beta E}. \left(Tr \left[S^{-1} \frac{\bar{\partial}}{\partial E} S \right] \right)_C , \tag{3.2}$$

substituindo (2.26) e (2.27) tem-se:

$$Z = Z_0 + \frac{1}{2\pi} \int dE.e^{-\beta E}.TrIm\partial_E logS(E). \tag{3.3}$$

Como o logaritmo da matriz S é proporcional a uma delta de conservação da energia, pode-se definir o operador W:

$$ImlogS(E) = 2\pi\delta(E - H_0)W(E), \tag{3.4}$$

substituindo em Z e integrando por partes obtem-se:

$$\begin{aligned} Z = Z_0 + \int dE e^{-\beta E} Tr[(\partial_E \delta(E - H_0)W(E))] = Z_0 + e^{-\beta E} Tr[W(E)\delta(E - H_0)]_0^\infty + \\ + \int \beta e^{-\beta E} Tr[W(E)\delta(E - H_0)]dE = Tr e^{-\beta H_0} + \beta \int e^{-\beta E} Tr[W(E)\delta(E - H_0)]dE = \\ = \int dE e^{-\beta E} Tr[W(E)\delta(E - H_0)] + \beta \int e^{-\beta E} Tr[W(E)\delta(E - H_0)]dE = \\ \int dE e^{-\beta E} Tr[\delta(E - H_0)(W(E)\beta + 1)] \Rightarrow Z = \int e^{-\beta E} Tr[\delta(E - H_0)(W(E)\beta + 1)]dE. \end{aligned} \tag{3.5}$$

Definindo $\hat{W} = W\beta + 1$, tem-se então:

$$Z = \int e^{-\beta E} Tr[\delta(E - H_0)\hat{W}]dE. \tag{3.6}$$

Seja a notação $|k_1, ..., k_N\rangle = |1, ..., N\rangle$, escreve-se então os elementos de matriz conexos como se faz usualmente em teoria de campos:

$$\begin{aligned} \langle 1'|\hat{W}|1\rangle &= \langle 1'|\hat{W}|1\rangle_c \\ \langle 1'2'|\hat{W}|12\rangle &= \langle 1'2'|\hat{W}|12\rangle_c + \langle 1'|\hat{W}|1\rangle_c \langle 2'|\hat{W}|2\rangle_c + s\langle 2'|\hat{W}|1\rangle_c \langle 1'|\hat{W}|2\rangle_c \\ \langle 1'2'3'|\hat{W}|123\rangle &= \langle 1'2'3'|\hat{W}|123\rangle_c + \left[\langle 1'|\hat{W}|1\rangle_c \langle 2'3'|\hat{W}|23\rangle_c + ... \right]_6 \\ &+ \left[\langle 1'|\hat{W}|1\rangle_c \langle 2'|\hat{W}|2\rangle_c \langle 3'|\hat{W}|3\rangle_c + ... \right]_9 , \end{aligned} \tag{3.7}$$

onde o índice subscrito mostra o total de termos dentro do colchete e s é um fator estatístico que vale 1 para bósons e -1 para férmions. Considerando $(k'_1, ..., k'_N) = (k_1, ..., k_N)$ pode-se também definir os fatores $w(\mathbf{k})$ da seguinte forma:

$$\begin{aligned}\langle 1|\hat{W}|1\rangle &= \langle 1|\hat{W}|1\rangle_c = \hat{w}_1(\mathbf{k}_1)\\ \langle 12|\hat{W}|12\rangle &= \hat{w}_2(\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2)+\hat{w}_1(\mathbf{k}_1)\hat{w}_1(\mathbf{k}_2)\\ \langle 123|\hat{W}|123\rangle &= \hat{w}_3(\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2,\mathbf{k}_3)+\hat{w}_2(\mathbf{k}_2,\mathbf{k}_3)\hat{w}_1(\mathbf{k}_1)+\hat{w}_2(\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_3)\hat{w}_1(\mathbf{k}_2)\\ &\quad +\hat{w}_2(\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2)\hat{w}_1(\mathbf{k}_3)+\hat{w}_1(\mathbf{k}_1)\hat{w}_1(\mathbf{k}_2)\hat{w}_1(\mathbf{k}_3)\ .\end{aligned}$$

Recordando que a energia livre é dada por $F = -\frac{1}{\beta V} logZ$ e considerando que cada fator $\hat{w}_{\mathbf{k}}$ é proporcional a uma função delta e portanto ao volume tem-se:

$$F = -\frac{1}{\beta}\sum_{N=1}^{\infty}\frac{z^n}{n!}\int\frac{d^d\mathbf{k}_1}{(2\pi)^d}...\frac{d^d\mathbf{k}_N}{(2\pi)^d}e^{-\beta\sum_{i=1}^{N}w_i}w_N(\mathbf{k}_1,...,\mathbf{k}_N), \tag{3.8}$$

onde $w_i \equiv \frac{\hat{w}_i}{V}$, $z \equiv e^{\beta\mu}$ é a fugacidade e a energia livre é extensiva e escrita apenas em termos de produtos de elementos de matrizes conexos, em concordância com o Princípio da Decomposição em Cluster.

Em particular no caso da teoria livre, os únicos elementos de matriz conexos que não se anulam são os de uma partícula para uma partícula, logo:

$$\hat{w}_N(\mathbf{k}_1,...,\mathbf{k}_N) = s^{N-1}(N-1)!\langle N|1\rangle\langle 1|2\rangle...\langle N-1|N\rangle, \tag{3.9}$$

substituindo em (3.8) e sabendo que $\langle a|b\rangle = (2\pi)^d\delta(a-b)$, acha-se para a energia livre da teoria sem interação F_0:

$$F_0 = -\frac{s^{N-1}(N-1)!}{\beta V}\sum_{N=1}^{\infty}\int\frac{d^d\mathbf{k}_1}{(2\pi)^d}...\frac{d^d\mathbf{k}_N}{(2\pi)^d}e^{-\beta\sum_{i=1}^{N}w_i}(2\pi)^d\delta(N-1).(2\pi)^d\delta(1-2)...(2\pi)^d\delta((N-1)-N)$$

$$\frac{z^N}{N!} = -\frac{(2\pi)^d\delta(0)}{\beta V}\sum_{N=1}^{\infty}\frac{z^N}{N!}\int\frac{d^d\mathbf{k}}{(2\pi)^d}e^{-\beta w_{\mathbf{k}}N}s^{N-1}(N-1)! = -\frac{1}{\beta s}\int\frac{d^d\mathbf{k}}{(2\pi)^d}\sum_{N=1}^{\infty}\frac{s^N z^N e^{-\beta w_{\mathbf{k}}N}}{N} =$$

$$= \frac{1}{\beta s}\int\frac{d^d\mathbf{k}}{(2\pi)^d}log\left[1-sze^{-\beta w_{\mathbf{k}}}\right] \Rightarrow F_0 = \frac{1}{\beta s}\int\frac{d^d\mathbf{k}}{(2\pi)^d}log\left[1-sze^{-\beta w_{\mathbf{k}}}\right]. \tag{3.10}$$

Como $s^{-1} = s$, já que $s = 1$ ou $s = -1$, a energia livre do caso não interagente fica:

$$F_0 = \frac{s}{\beta}\int\frac{d^d\mathbf{k}}{(2\pi)^d}log\left[1-sze^{-\beta w_{\mathbf{k}}}\right]. \tag{3.11}$$

Considerando $|\mathbf{k}\rangle$ autoestado estável de uma partícula tem-se $\langle\mathbf{k}|\hat{W}|\mathbf{k}'\rangle_c = \langle\mathbf{k}|\mathbf{k}'\rangle_c$, neste caso pode-se somar em (3.8) os termos que envolvem fatores do tipo $\langle a|\hat{W}|b\rangle$ analogamente ao feito no caso livre; o resultado para isso foi obtido em [21] e é:

$$F = F_0 - \frac{1}{\beta}\sum_{N\geq 2}{}^{\text{"}}\frac{1}{N!}\int\prod_{i=1}^{N}\left(f_0(\mathbf{k}_i)\frac{d^d\mathbf{k}_i}{(2\pi)^d}\right)w_N(\mathbf{k}_1,...,\mathbf{k}_N), \tag{3.12}$$

onde as aspas ao lado do somatório indica que a soma não inclui os termos que envolvem fatores de uma partícula e $f_0(\mathbf{k}_i)$ chama-se "filling fraction"e é dado por:

$$f_0(\mathbf{k}) = \frac{z}{e^{\beta w_{\mathbf{K}}} - sz}. \tag{3.13}$$

A equação (3.12) é uma das equações centrais do formalismo desta tese por várias razões: é exata, ou seja, não envolve nenhuma aproximação; seus termos podem ser representados diagramaticamente e a potência em z mais baixa de cada diagrama é facilmente identificável quando se olha o diagrama, o que favorece uma expansão do virial; e considerando uma aproximação que envolve apenas processos de dois corpos (a chamada aproximação de espuma que será explicada mais adiante) esta expressão adquire uma quantidade finita de termos que envolve essencialmente o kernel de dois corpos da teoria. Na próxima seção deste capítulo explicar-se-á a diagramática estabelecida sobre a expressão (3.12) e na seção posterior a aproximação de espuma.

3.2 Diagramática

Definindo $\langle\mathbf{k}'_1,...,\mathbf{k}'_n|\hat{W}|\mathbf{k}_1,...,\mathbf{k}_m\rangle = (2\pi)^d\delta(\sum_{i=1}^n\mathbf{k}'_i - \sum_{j=1}^m\mathbf{k}_j)\beta\upsilon(\mathbf{k}'_1,...,\mathbf{k}'_n;\mathbf{k}_1,...,\mathbf{k}_m)$, os termos de interação de (3.12), ou seja os de $F - F_0$, podem ser representados diagramaticamente por meio das seguintes regras:

1 - Cada linha carrega um momento $\mathbf{k}$ e a cada linha associa-se um fator $f_0(\mathbf{k})$.

2 - A cada vértice com momenta $\mathbf{k}_1,...,\mathbf{k}_N$ entrando e momenta $\mathbf{k}'_1,...,\mathbf{k}'_N$ saindo associa-se um fator $(2\pi)^d\beta\upsilon(\mathbf{k}_1,...,\mathbf{k}_N;\mathbf{k}'_1,...,\mathbf{k}'_N)$. Note que o número de linhas entrando e saindo de cada vértice é sempre igual, além disso não existem "patas externas".

3 - Impõe-se conservação de momenta em cada vértice.

4 - Integra-se sobre os momenta independentes usando a medida $\frac{d^d\mathbf{k}}{(2\pi)^d}$.

5 - Divide-se por um fator de simetria igual ao número de permutação das linhas internas que não mudam a topologia do diagrama, incluindo as linhas internas. Este fator é análogo ao das regras de Feynman usuais.

6 - Para cada loop inclui-se um fator estatístico s que vale 1 para bósons e -1 para férmions.

7 - Divide-se o resultado final pelo volume $\beta V = (2\pi)^d \delta(0)\beta$; o que equivale a dividir pelo volume do espaço-tempo βV, já que a temperatura finita β é a circunferência compactificada da dimensão temporal.

O círculo sozinho não é permitido pois já foi considerado em F_0; logo o diagrama mais simples é (a) que aparece na figura (3.1), onde são mostrados os termos mais simples da expansão diagramática. É óbvio que, a despeito de semelhanças, as regras apresentadas são bastante diferentes das regras de Feynman, que serão usadas mais adiante para calcular as amplitudes de espalhamento do kernel de dois corpos.

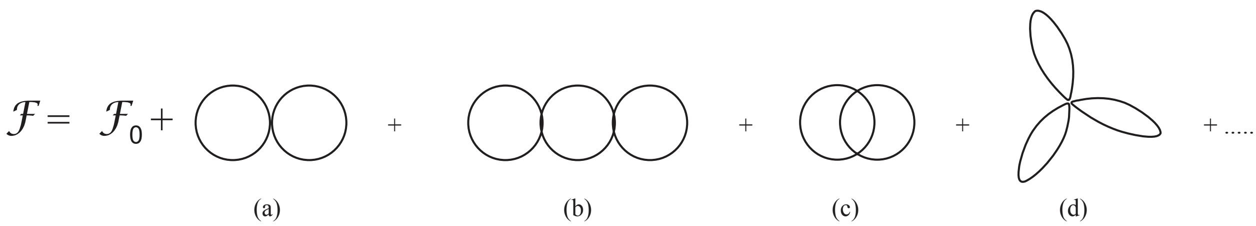

Figura 3.1: Contribuições mais simples da expansão diagramática da energia livre

Uma observação importante é que a fugacidade só aparece nas regras diagramáticas dentro do fator de cada linha na regra 1, que engloba uma "filling fraction". Expandindo as filling fractions em potências da fugacidade tem-se:

$$f_0(\mathbf{k}) = \frac{z}{e^{\beta w_{\mathbf{k}}} - sz} = f_0(\mathbf{k}) = \frac{z.e^{-\beta w_{\mathbf{k}}}}{1 - sze^{-\beta w_{\mathbf{k}}}} = z.e^{-\beta w_{\mathbf{k}}}\left[1 + sze^{-\beta w_{\mathbf{k}}} + \frac{s^2 z^2 e^{-2\beta w_{\mathbf{k}}}}{2} + ...\right], \tag{3.14}$$

logo cada "filling fraction", e consequentemente, cada linha possui a potência linear da fugacidade como a mais baixa. Sendo assim cada diagrama possui o número de linhas como a menor potência da fugacidade para qual ele contribui, ou dito de outra forma: um diagrama de n linhas só contribui para o n-ésimo coeficiente do virial e para os coeficientes de ordem mais elevada. A menor potência de fugacidade dos diagramas da figura (3.1) são: 2 para o diagrama (a), 4 para os diagramas (b) e (c), e 3 para o diagrama (d).

Para ilustrar a aplicação das regras diagramáticas seguem os resultados da aplicacação das regras para os diagramas da figura (3.1):

$$(a) = \frac{1}{2!}\int f_0(\mathbf{k}_1) f_0(\mathbf{k}_2) \upsilon_2(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2; \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) \frac{d^d\mathbf{k}_1}{(2\pi)^d}\frac{d^d\mathbf{k}_2}{(2\pi)^d}, \tag{3.15}$$

$$(b) = \frac{s}{2}(2\pi)^d\beta \int \left[\prod_{i=1}^{4} f_0(\mathbf{k}_i)\frac{d^d\mathbf{k}_i}{(2\pi)^d}\right] \upsilon_2(\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2;\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_3).\upsilon_2(\mathbf{k}_2,\mathbf{k}_4;\mathbf{k}_3,\mathbf{k}_4)\delta(\mathbf{k}_2-\mathbf{k}_3), \quad (3.16)$$

$$(c) = \frac{s}{8}(2\pi)^d\beta \int \left[\prod_{i=1}^{4} f_0(\mathbf{k}_i)\frac{d^d\mathbf{k}_i}{(2\pi)^d}\right] \upsilon_2(\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2;\mathbf{k}_3,\mathbf{k}_4).\upsilon_2(\mathbf{k}_3,\mathbf{k}_4;\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2)\delta\left(\sum_{i=1}^{4}\mathbf{k}_i\right), \quad (3.17)$$

$$(d) = \frac{s}{3!}\int \left[\prod_{i=1}^{3} f_0(\mathbf{k}_i)\frac{d^d\mathbf{k}_i}{(2\pi)^d}\right] \upsilon_3(\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2,\mathbf{k}_3;\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2,\mathbf{k}_3). \quad (3.18)$$

3.3 Aproximação de dois corpos e equação integral

Fazendo uma transformação de Legendre na energia livre define-se:

$$G = F + un, \quad (3.19)$$

onde n é dado por

$$n = -\frac{\partial F}{\partial \mu}. \quad (3.20)$$

Vê-se então que n corresponde ao número de partículas. A partir de n é possível definir a chamada "filling fraction física"f:

$$n = \int \frac{d^d\mathbf{k}}{(2\pi)^d} f(\mathbf{k}). \quad (3.21)$$

Tratando f e μ como variáveis independentes tem-se $\partial_\mu G = 0$, $\frac{\partial G}{\partial f} = \mu$ e $\frac{\partial F}{\partial f} = 0$.

Invertendo a construção anterior pode-se definir o funcional $\bar{F}$

$$\bar{F}(f,\mu) = G(f) - \mu\int \frac{d^d\mathbf{k}}{(2\pi)^d} f(\mathbf{k}) \quad (3.22)$$

e tem-se que:

$$\frac{\partial \bar{F}}{\partial f}(f,\mu) = 0 \Rightarrow \bar{F} = F, \quad (3.23)$$

ou seja a condição de estacionariedade dada pela equação $\frac{\partial \bar{F}}{\partial f} = 0$, também chamada de equação de ponto de sela, é necessária para que o funcional $\bar{F}$ seja igual a energia livre.

Relembrando a definição da "filling fraction"(3.13) tem-se:

$$\frac{\partial f_0}{\partial \mu} = \beta f_0(1 + sf_0). \quad (3.24)$$

Analogamente a construção inversa da transformação de Legendre feita anteriormente pode-se definir o funcional $\bar{F}_0(f)$ por:

$$\bar{F}_0(f,f_0) = -\frac{1}{\beta}\int \frac{d^d\mathbf{k}}{(2\pi)^d}\left(s.log(1+sf) - \frac{f-f_0}{1+sf_0}\right). \quad (3.25)$$

Procedendo desta maneira vê-se que a equação de ponto de sela ($\frac{\partial \bar{F}}{\partial f} = 0$) implica que $f = f_0$ e consequentemente $\bar{F}_0 = F_0$, onde F_0 é dado por (3.11). É claro que esta escolha para $\bar{F}_0$ não é única , mas ela é razoável e é consistente com a expansão diagramática.

Finalmente pode-se supor que o funcional $\bar{F}$ tenha a seguinte estrutura:

$$\bar{F} = \bar{F}_0 + \bar{F}_I, \quad (3.26)$$

onde

$$\bar{F}_I = -\frac{1}{\beta}\int \frac{d^d\mathbf{k}}{(2\pi)^d} U(f(\mathbf{k})). \quad (3.27)$$

Deste modo, o problema de achar a energia livre fica escrito como o problema de achar U, pois daí tem-se o funcional $\bar{F}$ e, usando a equação de ponto de sela, a energia livre F.

Usando (3.21) e (3.12) tem-se:

$$f(\mathbf{k}) = f_0(\mathbf{k}) + f_0(\mathbf{k})(sf_0(\mathbf{k})+1)\sum_{N=1}^{\infty}\frac{1}{N!}\int\left[\prod_{i=1}^{N}\frac{d^d\mathbf{k}_i}{(2\pi)^d}f_0(\mathbf{k}_i)\right] w_{N+1}(\mathbf{k},\mathbf{k}_1,...,\mathbf{k}_N). \quad (3.28)$$

Seja

$$\tilde{f}(\mathbf{k}) \equiv f_0(\mathbf{k}) + \left(\frac{sf_0(\mathbf{k})}{sf_0(\mathbf{k})+1}\right)(f(\mathbf{k}) - f_0(\mathbf{k})) \quad (3.29)$$

e a pseudo-energia $\epsilon(\mathbf{k})$ dada por:

$$f(\mathbf{k}) = \frac{1}{e^{\beta\epsilon_{\mathbf{k}}} - s}, \quad (3.30)$$

relembrando (3.13) tem-se que:

$$\tilde{f}(\mathbf{k}) = \frac{z}{e^{\beta w_{\mathbf{k}}} - sz} + \frac{\frac{sz}{e^{\beta w_{\mathbf{k}}}-sz}}{\frac{e^{\beta w_{\mathbf{k}}}}{e^{\beta w_{\mathbf{k}}}-sz}}\left(\frac{1}{e^{\beta\epsilon_{\mathbf{k}}}-s} - e^{\beta w_{\mathbf{k}}}\right) = \frac{z}{e^{\beta w_{\mathbf{K}}} - sz} + sze^{-\beta w_{\mathbf{K}}}\left[\frac{e^{\beta w_{\mathbf{K}}} - sz - ze^{\beta\epsilon_{\mathbf{k}}} + sz}{(e^{\beta\epsilon_{\mathbf{k}}} - s)(e^{\beta w_{\mathbf{k}}} - sz)}\right] =$$

$$= \frac{ze^{\beta\epsilon_{\mathbf{k}}} - sz + sz - sz^2 e^{\beta(\epsilon_{\mathbf{k}} - w_{\mathbf{k}})}}{(e^{\beta\epsilon_{\mathbf{k}}} - s)(e^{\beta w_{\mathbf{k}}} - sz)} = \frac{ze^{\beta(\epsilon_{\mathbf{k}} - w_{\mathbf{k}})}(e^{\beta w_{\mathbf{k}}} - sz)}{(e^{\beta\epsilon_{\mathbf{k}}} - s)(e^{\beta w_{\mathbf{k}}} - sz)} = \frac{ze^{\beta(\epsilon_{\mathbf{k}} - w_{\mathbf{k}})}}{e^{\beta\epsilon_{\mathbf{k}}} - s} = \frac{e^{\beta(\epsilon_{\mathbf{k}} + \mu - w_{\mathbf{k}})}}{e^{\beta\epsilon_{\mathbf{k}}} - s} =$$

$$= f(\mathbf{k}).e^{\beta(\epsilon_{\mathbf{k}} + \mu - w_{\mathbf{k}})} \Rightarrow \tilde{f}(\mathbf{k}) = f(\mathbf{k}).e^{\beta(\epsilon_{\mathbf{k}} + \mu - w_{\mathbf{k}})}. \quad (3.31)$$

De (3.29) tem-se também que:

$$\frac{\delta\tilde{f}(\mathbf{k})}{\delta f(\mathbf{k})} = \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}').\frac{sf_0(\mathbf{k})}{sf_0(\mathbf{k})+1}. \quad (3.32)$$

Como é de praxe em Teoria Quântica de Campos, uma linha vestida é obtida somando-se sobre todas as inserções possíveis devido a interações. Isto é feito tomando um diagrama de vácuo conexo, cortando uma linha interna de forma a gerar duas patas externas e somando sobre todos os diagramas possíveis criados desta maneira. Este procedimento equivale no fundo a gerar os termos de correção do propagador.

Considerando as regras diagramáticas aqui estabelecidas: cortar uma linha interna e gerar duas externas corresponde a substituir um fator $f_0(\mathbf{k})$ por $sf_0(\mathbf{k})^2$, onde o fator s aparece devido a regra 6 porque ao cortar uma linha interna é removida uma integral de loop. Note que ao obter $f(\mathbf{k})$ em (3.28) a derivação parcial sobre o potencial químico garante que toda linha interna de $F - F_0$ (que corresponde a soma de todos os diagramas conexos) foi considerada, mas que o fator $f_0(\mathbf{k})$ foi substituído por $f_0(\mathbf{k})(1 + sf_0(\mathbf{k}))$ em vez de $sf_0(\mathbf{k})^2$; sendo assim fica evidente que (3.29) no fundo é a linha vestida da teoria e tem-se então a verdadeira motivação para a equação (3.29).

A linha vestida $\tilde{f}$ deve satisfazer uma equação de Dyson do tipo:

$$\tilde{f}(\mathbf{k}) = f_0(\mathbf{k}) + sf_0(\mathbf{k})\Sigma(\mathbf{k}), \tag{3.33}$$

onde $\Sigma(\mathbf{k})$ é a soma das inserções redutíveis a uma partícula (1PI) amputadas. A analogia com os diagramas de Feynman se dá da seguinte maneira: considere um diagrama de vácuo de duas partículas 2PI com cada linha interna sendo uma linha vestida e remova uma linha interna de modo a forma uma inserção 1PI.

Se $-\beta F_I$ for a soma dos diagramas 2PI com linhas internas $\tilde{f}$ então:

$$\Sigma(\mathbf{k}) = -s\beta \left(\frac{1 + sf_0(\mathbf{k})}{sf_0(\mathbf{k})} \right) \frac{\delta F_I}{\delta f(\mathbf{k})}, \tag{3.34}$$

o fator s mais uma vez aparece devido a regra 6.

Deste modo a equação de Dyson (3.33) na ausência de interação, quando todos os vértices se anulam, se torna:

$$\tilde{f}(\mathbf{k}) - f_0(\mathbf{k}) + \beta \tilde{f}(\mathbf{k})(1 + sf_0(\mathbf{k})) \frac{\delta F_I}{\delta f(\mathbf{k})} = 0. \tag{3.35}$$

A equação (3.33), que na aproximação de espuma corresponde a (3.35), pode ser representada diagramaticamente pela figura (3.2).

Impor que a equação de ponto de sela de F resulte em (3.35) fixa F_0 a menos de uma constante e impor ainda que a equação de ponto de sela reproduza (3.11) implica que F_0 é dado por (3.25).

Diante dos fatos expostos é claro que F_0 e F_I são respecticamente a parte livre e a parte de interação do funcional F.

Figura 3.2: Representação diagramática da linha vestida.

Até aqui o problema de achar a energia livre foi apenas apresentado em termos de funcionais e interpretações diagramáticas foram estabelecidas com base em analogias com os métodos usuais da Teoria Quântica de Campos. Ainda não se sabe como achar a parte interagente do funcional $\bar{F}$ ou analogamente a função $U(\mathbf{k})$, a não ser por meio da expansão (3.12), que por si só pode ser implementada diretamente ou com o auxílio regras diagramáticas apresentadas; sendo assim a interpretação sobre o conceito de linha vestida, a série de Dyson e os funcionais definidos anteriormente até agora são inúteis, exceto pelo possível regozijo que venham a causar com a beleza de suas nuances matemáticas.

Apesar da vantagem de ser exata e poder ser representada diagramaticamente a expansão (3.12) tem a desvantagem de ter infinitos termos e ninguém, até o presente momento, sabe achar o resultado exato da soma infinita. A alternativa natural para solucionar este impasse é fazer uma aproximação que envolva um número finito de termos, ou ainda, que envolva um número infinito mas que se saiba calcular com métodos analíticos ou numéricos. Neste trabalho apresentar-se-á uma aproximação deste tipo: a aproximação de espuma.

A aproximação de espuma parte da premissa de que o gás esteja a temperaturas suficientemente altas e densidades suficientemente baixas. Ela consiste em considerar apenas os processos que envolvem o espalhamento de dois corpos, englobando diagramas como os da figura (3.3), estes diagramas são chamados diagramas de espuma.

A hipótese de que o gás esteja diluído justifica considerar apenas processos de dois corpos pois para um gás diluído os processos de três ou mais corpos contribuem muito pouco para a energia livre, como de acordo com a regra 2 cada vértice é proporcional a β, então a hipótese de altas

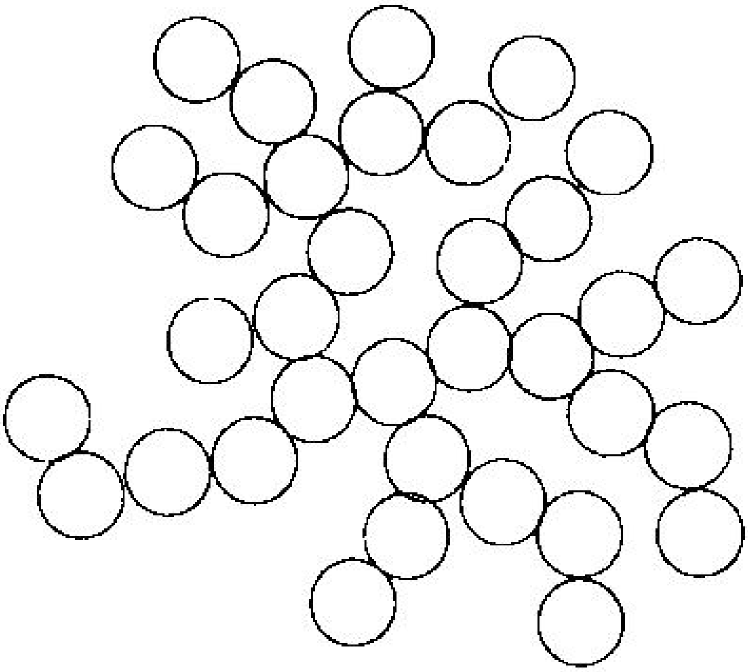

Figura 3.3: Diagramas de espuma.

temperaturas se justifica já que, fixado o número de linhas, os diagramas de espuma possuem o menor número de vértices.

Dentro desta aproximação o funcional da parte interagente da energia livre é dado por:

$$F_I = -\frac{1}{2} \int \frac{d^d\mathbf{k}}{(2\pi)^d} \frac{d^d\mathbf{k}'}{(2\pi)^d} \tilde{f}(\mathbf{k}) \tilde{f}(\mathbf{k}') G_2(\mathbf{k}, \mathbf{k}'), \tag{3.36}$$

e os termos com mais fatores $\tilde{f}$ são ignorados, $G_2(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \equiv w_2(\mathbf{k}, \mathbf{k}')_c$.

Sendo assim (3.35) fica:

$$\tilde{f}(\mathbf{k}) = f_0(\mathbf{k}) + \tilde{f}(\mathbf{k}) \left(s\beta f_0(\mathbf{k}) \int \tilde{f}(\mathbf{k}') G_2(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \frac{d^d\mathbf{k}'}{(2\pi)^d} \right). \tag{3.37}$$

Isolando $\tilde{f}(\mathbf{k}) - f_0(\mathbf{k})$ em (3.28) e (3.37), e substituindo (3.13), (3.30) e (3.31) tem-se:

$$\left(\frac{sf_0(\mathbf{k})}{sf_0(\mathbf{k})+1}\right)(f(\mathbf{k})-f_0(\mathbf{k}))=\tilde{f}(\mathbf{k})s\beta f_0(\mathbf{k})\int\tilde{f}(\mathbf{k}')G_2(\mathbf{k},\mathbf{k}')\frac{d^d\mathbf{k}'}{(2\pi)^d}\Rightarrow$$

$$\Rightarrow\tilde{f}(\mathbf{k})\beta\int\tilde{f}(\mathbf{k}')G_2(\mathbf{k},\mathbf{k}')\frac{d^d\mathbf{k}'}{(2\pi)^d}=\frac{f(\mathbf{k})-f_0(\mathbf{k})}{sf_0(\mathbf{k})+1}\Rightarrow$$

$$\Rightarrow\tilde{f}(\mathbf{k})\beta\int\tilde{f}(\mathbf{k}')G_2(\mathbf{k},\mathbf{k}')\frac{d^d\mathbf{k}'}{(2\pi)^d}=\frac{\frac{e^{\beta w_\mathbf{k}}-sz+sz-ze^{\beta\epsilon_\mathbf{k}}}{(e^{\beta\epsilon_\mathbf{k}}-s)(e^{\beta w_\mathbf{k}}-z)}}{\frac{e^{\beta w_\mathbf{k}}-sz+sz}{e^{\beta w_\mathbf{k}}-z}}=\frac{e^{\beta w_\mathbf{k}}-ze^{\beta\epsilon_\mathbf{k}}}{e^{\beta w_\mathbf{k}}(e^{\beta\epsilon_\mathbf{k}}-s)}=\frac{1-e^{\beta(\epsilon_\mathbf{k}+\mu-w_\mathbf{k})}}{e^{\beta\epsilon_\mathbf{k}}-s}=$$

$$f(\mathbf{k})(1-e^{\beta(\epsilon_\mathbf{k}+\mu-w_\mathbf{k})})\Rightarrow f(\mathbf{k})e^{\beta(\epsilon_\mathbf{k}+\mu-w_\mathbf{k})}\beta\int\tilde{f}(\mathbf{k}')G_2(\mathbf{k},\mathbf{k}')\frac{d^d\mathbf{k}'}{(2\pi)^d}=f(\mathbf{k})(1-e^{\beta(\epsilon_\mathbf{k}+\mu-w_\mathbf{k})})\Rightarrow$$

$$\Rightarrow e^{-\beta(\epsilon_\mathbf{k}+\mu-w_\mathbf{k})}=1+\beta\int\tilde{f}(\mathbf{k}')G_2(\mathbf{k},\mathbf{k}')\frac{d^d\mathbf{k}'}{(2\pi)^d}=1+\beta\int\frac{e^{\beta(\epsilon_{\mathbf{k}'}+\mu-w_{\mathbf{k}'})}}{e^{\beta\epsilon'_\mathbf{k}}-s}G_2(\mathbf{k},\mathbf{k}')\frac{d^d\mathbf{k}'}{(2\pi)^d}\Rightarrow$$

$$\Rightarrow\epsilon_\mathbf{k}=w_\mathbf{k}-\mu-\frac{1}{\beta}log\left(1+\beta\int\frac{e^{\beta(\epsilon_{\mathbf{k}'}+\mu-w_{\mathbf{k}'})}}{e^{\beta\epsilon'_\mathbf{k}}-s}G_2(\mathbf{k},\mathbf{k}')\frac{d^d\mathbf{k}'}{(2\pi)^d}\right). \quad (3.38)$$

Sendo assim, dentro da aproximação de espuma a pseudo-energia satisfaz a seguinte equação integral:

$$\epsilon_\mathbf{k}=w_\mathbf{k}-\mu-\frac{1}{\beta}log\left(1+\beta\int\frac{e^{\beta(\epsilon_{\mathbf{k}'}+\mu-w_{\mathbf{k}'})}}{e^{\beta\epsilon'_\mathbf{k}}-s}G_2(\mathbf{k},\mathbf{k}')\frac{d^d\mathbf{k}'}{(2\pi)^d}\right). \quad (3.39)$$

Definindo

$$y(\mathbf{k})=e^{-\beta(\epsilon_\mathbf{k}+\mu-w_\mathbf{k})}, \quad (3.40)$$

a equação (3.39) fica:

$$y(\mathbf{k})=1+\beta\int\frac{d^d\mathbf{k}'}{(2\pi)^d}.G_2(\mathbf{k},\mathbf{k}').\frac{ze^{-\frac{\beta\mathbf{k}'^2}{2m}}}{1-szy(\mathbf{k}')e^{-\frac{\beta\mathbf{k}'^2}{2m}}} \quad (3.41)$$

Vê-se então que a linha vestida, a série de Dyson e os funcionais definidos anteriormente são importantes dentro do contexto da aproximação de espuma não apenas por sua beleza matemática, mas porque por meio deles estabelece-se uma equação integral para a pseudo-energia ou para y; resolvendo esta equação integral é possível achar o comportamento da energia livre e das outras propriedades termodinâmicas.

É bem verdade que mesmo antes da aproximação de espuma (3.35) já era uma equação integral, mas ela era inútil do ponto de vista prático já que não havia uma maneira de se achar o funcional F_I.

Finalmente resta escrever a expressão final da energia livre na aproximação de espuma, que é exatamente $\bar{F}$ satisfazendo a equação do ponto de sela. Substituindo então (3.37) e (3.29) em (3.36), tem-se:

$$F_I = -\frac{1}{2}\int \frac{d^d\mathbf{k}}{(2\pi)^d}\frac{d^d\mathbf{k}'}{(2\pi)^d}\tilde{f}(\mathbf{k})\tilde{f}(\mathbf{k}')G_2(\mathbf{k},\mathbf{k}') = -\frac{1}{2}\int \frac{d^d\mathbf{k}}{(2\pi)^d}\left(\tilde{f}(\mathbf{k})\int \tilde{f}(\mathbf{k}')G_2(\mathbf{k},\mathbf{k}')\frac{d^d\mathbf{k}'}{(2\pi)^d}\right) =$$
$$-\frac{1}{2}\int \frac{d^d\mathbf{k}}{(2\pi)^d}\frac{\tilde{f}(\mathbf{k})-f_0(\mathbf{k})}{s\beta f_0(\mathbf{k})} = -\frac{1}{2\beta}\int \frac{d^d\mathbf{k}}{(2\pi)^d}\frac{f(\mathbf{k})-f_0(\mathbf{k})}{1+sf_0(\mathbf{k})}. \quad (3.42)$$

Somando o último resultado com (3.25) resulta em:

$$F = -\frac{1}{\beta}\int \frac{d^d\mathbf{k}}{(2\pi)^d}\left[s.log(1+sf) - \frac{1}{2}\frac{f-f_0}{1+sf_0}\right]. \quad (3.43)$$

Substituindo (3.30) e (3.13) em (3.43) e usando(3.40) obtém-se a expressão da energia livre na aproximação de espuma em termos de y:

$$F = -\frac{1}{\beta}\int \frac{d^d\mathbf{k}}{(2\pi)^d}\left[-s.log(1-szye^{-\frac{\beta\mathbf{k}^2}{2m}}) - \frac{z}{2}\frac{y-1}{e^{\frac{\beta\mathbf{k}^2}{2m}}-szy}\right]. \quad (3.44)$$

A expressão (3.44) juntamente com (3.41), ou equivalentemente com (3.39), representa a base do nosso formalismo. Resolvendo (3.41) ou (3.39) numericamente e substituindo em (3.44), obtém-se uma expressão aproximada da energia livre, a partir daí pode-se então obter todas as outras propriedades termodinâmicas, isto é basicamente o que é feito neste trabalho. A outra expressão fundamental deste formalismo é (3.12), pois fornece uma expressão exata da energia livre e é a fonte primordial de inspiração para as regras diagramáticas definidas anteriormente, como já foi dito; a partir dela também pode-se obter expressões exatas para os coeficientes do virial, pois a cada ordem apenas um número finito de termos de (3.12) contribui para estes coeficientes.

No capítulo 5, (3.12) será usada para obter a expressão exata do terceiro coeficiente do virial em termos do kernel de dois e do de três corpos.

Capítulo 4

Propriedades de escala, limite unitário e kernel

Com o fim da última seção é possível dizer que o formalismo utilizado nesta tese já foi totalmente apresentado, restando apenas fazer aplicações e mostrar os resultados novos obtidos neste trabalho. Contudo antes de chegar propriamente aos novos resultados, convém discutir alguns aspectos básicos e mais específicos do sistema fśico que será tratado.

Em particular é interessante discutir um pouco a aplicação do Grupo de Renormalização e as propriedades de escala da teoria que descreve o gás quântico que será abordado aqui pois isto é importante para definir propriamente o chamado limite unitário e também para obter uma expressão finita para o kernel de dois corpos, que desempenha um papel decisivo no formalismo dentro da aproximação de espuma vista no capítulo 3. Finalmente é importante também ver como a energia livre e algumas grandezas termodinâmicas escalam com alguma potência da temperatura ou de outro parâmetro termodinâmico e definir funções de escala apropriadas para descrever o sistema físico em questão.

No presente capítulo apresentar-se-á primeiramente a análise do Grupo de Renormalzação sobre a ação do gás quântico, em particular serão achados os pontos fixos da teoria e discutidas as transições de fase possíveis que eles possam representar; depois calcular-se-á a seção de choque e o comprimento de espalhamento da teoria. Feito tudo isto, pretende-se finalmente calcular o kernel de dois corpos renormalizado e a matriz S de dois corpos, posteriormente discutir-se-á o conceito e a existência do limite unitário em função do número de dimensões do sistema para exibir o kernel de dois corpos no limite unitário. Na última seção mostra-se-ão as propriedades de escala da teoria com o formalismo apresentado e definir-se-ão as funções de escala pertinentes que serão usadas na aplicação do formalismo.

4.1 Grupo de Renormalização

A ação para um gás quântico de bósons considerada neste trabalho é dada por:

$$S = \int dt.d^d\mathbf{x} \left(i\phi^\dagger \partial_t \phi - \frac{|\vec{\nabla}\phi|^2}{2m} - \frac{g}{2}(\phi^\dagger\phi)^2 \right). \tag{4.1}$$

Para um gás de férmions usa-se uma ação de dois campos dada por:

$$S = \int dt.d^d\mathbf{x} \left(\sum_{\alpha=\uparrow,\downarrow} \left(i\psi_\alpha^\dagger \partial_t \psi_\alpha - \frac{|\vec{\nabla}\psi_\alpha|^2}{2m} \right) - g\psi_\uparrow^\dagger\psi_\uparrow\psi_\downarrow^\dagger\psi_\downarrow \right). \tag{4.2}$$

A ação (4.1) tem simetria U(1), enquanto a ação (4.2) tem simetria SO(5) e por isso já foi tratada com uma versão relativística em [25]. Em [26] é considerada uma versão de N componentes com simetria Sp(N), no caso de duas componentes tem-se Sp(4)≡SO(5).

A função de vértices de quatro pontos da teoria livre correspondente a (4.1) é dada por:

$$\Gamma^{(4)} = -2ig - \frac{(-2ig)^2}{2} \int \frac{dw.d^d\mathbf{k}}{(2\pi)^{d+1}} \left(\frac{i}{w - \frac{\mathbf{k}^2}{2m} + i\epsilon} \right) \left(\frac{i}{-w - \frac{\mathbf{k}^2}{2m} + i\epsilon} \right). \tag{4.3}$$

Calculando a integral em (4.3) tem-se:

$$\int \frac{dw.d^d\mathbf{k}}{(2\pi)^{d+1}} \left(\frac{i}{w - \frac{\mathbf{k}^2}{2m} + i\epsilon} \right) \left(\frac{i}{-w - \frac{\mathbf{k}^2}{2m} + i\epsilon} \right) = \int \frac{d^d\mathbf{k}}{(2\pi)^{d+1}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dw}{[w - (\frac{\mathbf{k}^2}{2m} - i\epsilon)][w - (-\frac{\mathbf{k}^2}{2m} + i\epsilon)]} =$$
$$= 2\pi i \int \frac{d^d\mathbf{k}}{(2\pi)^{d+1}} \frac{1}{2(\frac{\mathbf{k}^2}{2m} - i\epsilon)} = 2\pi m i \frac{\Omega(d)}{(2\pi)^{d+1}} \int_0^{\infty} k^{d-3} dk = 2\pi m i \frac{\Omega(d)}{(2\pi)^{d+1}} \frac{\Lambda^{d-2}}{d-2}, \tag{4.4}$$

onde foi usado o Teorema dos Resíduos na resolução da integral em w, que foi vista como uma integral de contorno complexa sobre um semi-círculo englobando todo o semi-plano superior com o auxílio do Lema de Jordan. $\Omega(d)$ é elemento de ângulo sólido em d dimensões, que é calculado no apêndice A. A integral em dk foi regularizada com a colocação do "cut-off"Λ.

Sendo assim a função de vértices de quatro pontos é dada por:

$$\Gamma^{(4)} = -2i \left(g - \frac{2mg^2\Lambda^{d-2}}{2^d\pi^{\frac{d}{2}}\Gamma(\frac{d}{2})(d-2)} \right). \tag{4.5}$$

Seja $g \equiv \hat{g}\Lambda^{2-d}$, então:

$$\Gamma^{(4)} = 2i\left(\hat{g} - \frac{2m\hat{g}^2}{2^d\pi^{\frac{d}{2}}\Gamma(\frac{d}{2})(d-2)}\right)\Lambda^{2-d}. \tag{4.6}$$

Impondo que $\Gamma^{(4)}$ independa do "cut-off"Λ acha-se a equação do Grupo de Renormalização:

$$\frac{\partial\Gamma^{(4)}}{\partial\Lambda} = 0 \Rightarrow \Lambda\frac{\partial\hat{g}}{\partial\Lambda} = -(2-d)\hat{g} + \frac{2m\hat{g}^2}{2^d\pi^{\frac{d}{2}}\Gamma(\frac{d}{2})}. \tag{4.7}$$

Seja $l = -log\Lambda$, então a função beta da teoria é:

$$\frac{\partial\hat{g}}{\partial l} = (2-d)\hat{g} - \frac{2m\hat{g}^2}{2^d\pi^{\frac{d}{2}}\Gamma(\frac{d}{2})}. \tag{4.8}$$

Para d=3 (4.8) fica:

$$\frac{\partial\hat{g}}{\partial l} = -\hat{g} - \frac{m\hat{g}^2}{2\pi^2}. \tag{4.9}$$

Os zeros da função beta dão os pontos fixos do grupo de renormalização. Uma possível transição de fase ocorre num ponto fixo, que passa a ser chamado de ponto crítico. No entanto nem todo ponto fixo é crítico, em particular os pontos fixos não triviais são interessantes. O sinal da função beta na vizinhança de um ponto fixo determina sua relevância, note que apenas para d>3 existe ponto fixo relevante não-trivial e portanto ponto crítico.

O ponto fixo em função do número de dimens oes é dado por:

$$\hat{g}^* = \frac{(2-d)2^d\pi^{\frac{d}{2}}\Gamma(\frac{d}{2})}{2m}. \tag{4.10}$$

Para d=1,2 e 3 tem-se:

$$d = 1 \Rightarrow \hat{g}^* = \frac{\pi}{m}. \tag{4.11}$$

$$d = 2 \Rightarrow \hat{g}^* = 0. \tag{4.12}$$

$$d = 3 \Rightarrow \hat{g}^* = -\frac{2\pi^2}{m}. \tag{4.13}$$

Note que em d=2 só existe o ponto fixo trivial $g^* = 0$, comum a todas as dimensões, para d=1 o ponto fixo é irrelevante e para d>2 relevante.

A figura (4.1) apresenta os pontos fixos e suas relevâncias para d=1, 2 e 3. Em d=3 a fase acima do ponto crítico é chamada de BCS (Bardeen-Cooper-Schrifer) e a fase abaixo é chamada de BEC (Condensado de Bose-Einstein).

Para o caso fermiônico o cálculo é idêntico, exceto pelo fato de que a presença de dois campos leva a aparição de um fator meio no termo a um loop da função beta.

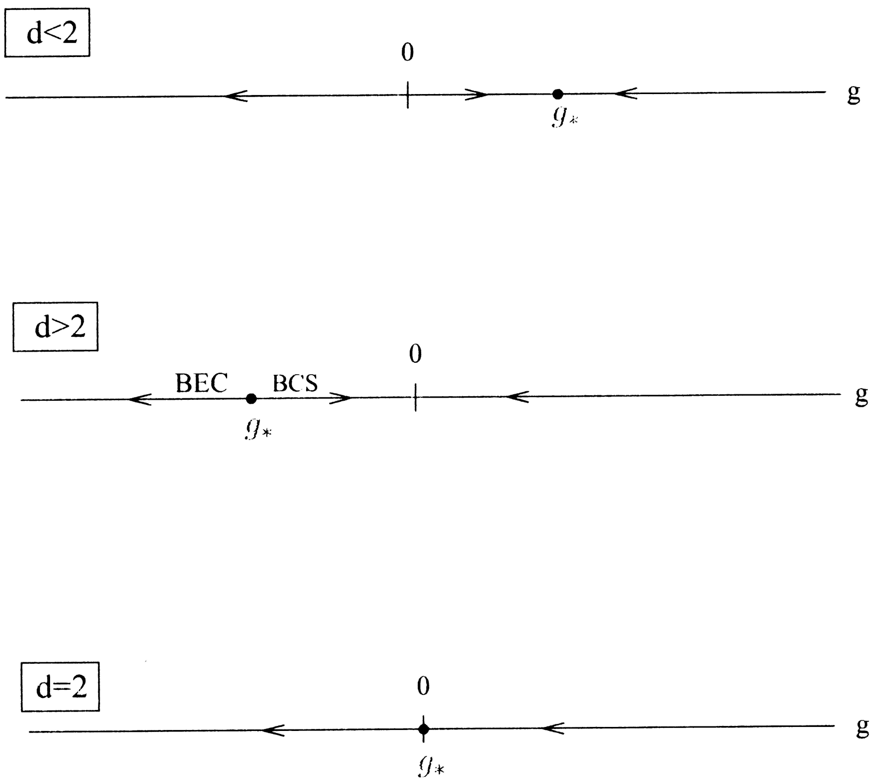

Figura 4.1: Diagrama de fase.

4.2 Seção de choque e comprimento de espalhamento

A seção de choque diferencial é dada por:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{m^2|\mathbf{k}-\mathbf{k}'|^{d-3}}{4(2\pi)^{d-1}} |\ \mathcal{M}(\mathbf{k},\mathbf{k}')\ |^2, \tag{4.14}$$

onde $\mathcal{M}(\mathbf{k})$ é a amplitude de espalhamento.

A ausência de simetria de Lorentz devido a natureza não-relativística do sistema restringe os diagramas de Feynman que aparecem no cálculo da amplitude de espalhamento, já que não são permitidos processos que envolvam criação e aniquilação de partículas. Sendo assim é possível calcular exatamente a amplitude de espalhamento que fica dada por uma série geométrica cujos termos são representados pelos diagramas de Feynman da figura (4.2).

Sendo assim a amplitude de espalhamento é dada por:

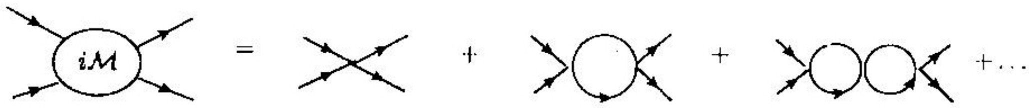

Figura 4.2: Diagramas de Feynman que contribuem para a amplitude de espalhamento.

$$i\mathcal{M}(\mathbf{k},\mathbf{k}') = -2ig + \frac{(-2ig)^2}{2}A + \frac{(-2ig)^3}{4}A^2 + ... = \frac{-2ig}{1+igA}, \tag{4.15}$$

onde A é dado por

$$A = \int \frac{dw.d^d\mathbf{k}}{(2\pi)^{d+1}} \left(\frac{i}{w - \frac{\mathbf{k}^2}{2m} + i\epsilon}\right)\left(\frac{i}{(E-w) - \frac{(\mathbf{P}-\mathbf{k})^2}{2m} + i\epsilon}\right) \tag{4.16}$$

e $\mathbf{P}$ e E são definidos como $\mathbf{P} \equiv \mathbf{k} + \mathbf{k}'$ e $E = \frac{\mathbf{k}^2+\mathbf{k}'}{2m}$.

A seguir a parte temporal de A é resolvida.

$$\begin{aligned} A &= \int \frac{dw.d^d\mathbf{k}}{(2\pi)^{d+1}} \left(\frac{i}{w - \frac{\mathbf{k}^2}{2m} + i\epsilon}\right)\left(\frac{i}{(E-w) - \frac{(\mathbf{P}-\mathbf{k})^2}{2m} + i\epsilon}\right) = \\ & \int \frac{dw.d^d\mathbf{k}}{(2\pi)^{d+1}} \left(\frac{1}{w - (\frac{\mathbf{k}^2}{2m} - i\epsilon)}\right)\left(\frac{1}{w - (E - \frac{(\mathbf{P}-\mathbf{k})^2}{2m} + i\epsilon)}\right) = \\ & \frac{2\pi i}{(2\pi)^{d+1}} \int d^d\mathbf{k} \frac{1}{E - \frac{(\mathbf{P}-\mathbf{k})^2}{2m} - \frac{\mathbf{k}^2}{2m} + 2i\epsilon} = \frac{mi}{(2\pi)^d}\int d^d\mathbf{k}\frac{1}{mE - \mathbf{k}^2 - \frac{\mathbf{P}^2}{2} + \mathbf{Pk} + i\epsilon} = \\ & = -\frac{mi}{(2\pi)^d}\int d^d\mathbf{k}\frac{1}{(\mathbf{k}-\frac{\mathbf{P}}{2})^2 + \frac{\mathbf{P}^2}{4} - mE - i\epsilon} = -\frac{mi}{(2\pi)^d}\int d^d\mathbf{k}\frac{1}{\mathbf{k}^2 - (\Delta + i\epsilon)^2}, \end{aligned} \tag{4.17}$$

onde $\Delta = \sqrt{mE - \frac{\mathbf{P}^2}{4}} = \sqrt{\frac{4mE - \mathbf{P}^2}{4}} = \sqrt{\frac{2\mathbf{k}^2 + 2\mathbf{k}'^2 - \mathbf{k}^2 - \mathbf{k}'^2 - 2\mathbf{k}.\mathbf{k}'}{4}} = \sqrt{-\frac{\mathbf{k}^2 - 2\mathbf{k}.\mathbf{k}' + \mathbf{k}'^2}{4}} = \frac{|\mathbf{k}-\mathbf{k}'|}{2}$ e usou-se o fato de que ϵ é infinitesimal: $\alpha\epsilon i = \epsilon i$ se α é real e $(\Delta + i\epsilon)^2 = \Delta^2 + 2i\epsilon - \epsilon^2 \simeq \Delta^2 + i\epsilon$.

Uma simples contagem de potências mostra que A diverge para d>1. Em uma dimensão obtém-se:

$$\begin{aligned} A &= -\frac{mi}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dk}{k^2 - (\Delta+i\epsilon)^2} = -\frac{mi}{2\pi}\int_C \frac{dz}{(z - \Delta - i\epsilon)(z + \Delta + i\epsilon)} = \\ & -\frac{mi}{2\pi}\int_C \frac{dz}{[z - (\Delta + i\epsilon)][z - (-\Delta - i\epsilon)]} = -\frac{mi}{2\pi}\frac{2\pi i}{2(\Delta + i\epsilon)} = \frac{m}{2\Delta} = \frac{m}{|k-k'|}, \end{aligned} \tag{4.18}$$

logo a amplitude de espalhamento será:

$$i\mathcal{M} = \frac{-2ig}{1 + \frac{igm}{|k-k'|}}. \tag{4.19}$$

Sendo assim a seção de choque diferencial será

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{m^2}{4|k-k'|^2}\frac{4g^2}{1+\frac{m^2g^2}{|k-k'|^2}} = \frac{g^2}{1+\frac{|k-k'|^2}{m^2g^2}}. \tag{4.20}$$

Em duas dimensões A é dado por:

$$A = -\frac{mi}{(2\pi)^2}\int \frac{d^2k}{\mathbf{k}^2-(\Delta+i\epsilon)^2} = -\frac{mi}{2\pi}\int_0^\infty \frac{k.dk}{\mathbf{k}^2-(\Delta+i\epsilon)^2} = -\frac{mi}{2\pi}\int_0^\infty \frac{k.dk}{\mathbf{k}^2-\Delta^2} =$$
$$= -\frac{mi}{2\pi}\int_0^{\Delta-\epsilon} \frac{k.dk}{\mathbf{k}^2-\Delta^2} - \frac{mi}{2\pi}\int_{\Delta+\epsilon}^\infty \frac{k.dk}{\mathbf{k}^2-\Delta^2} = -\frac{mi}{4\pi}.ln\left[\frac{(\Delta-\epsilon)^2-\Delta^2}{\Delta^2}\right] - \frac{mi}{4\pi}.ln\left[\frac{\Lambda^2-\Delta^2}{(\Delta+\epsilon)^2-\Delta^2}\right] =$$
$$-\frac{mi}{4\pi}.ln\left[\frac{\Lambda^2-\Delta^2}{\Delta^2}\right] - \frac{mi}{4\pi}.ln\left[\frac{(\Delta-\epsilon)^2-\Delta^2}{(\Delta+\epsilon)^2-\Delta^2}\right] = -\frac{mi}{4\pi}.ln\left[\frac{\Lambda^2}{\Delta^2}-1\right] - \frac{mi}{4\pi}.ln\left[\frac{(\Delta-\epsilon)^2-\Delta^2}{(\Delta+\epsilon)^2-\Delta^2}\right] =$$
$$= -\frac{mi}{4\pi}.ln\left[\frac{\Lambda^2}{\Delta^2}\right] - \frac{mi}{4\pi}.ln(-1) = -\frac{mi}{4\pi}\left[ln\left(\frac{4\Lambda^2}{|\mathbf{k}-\mathbf{k}'|^2}\right)+i\pi\right], \tag{4.21}$$

onde se colocou o "cut-off"Λ para regularizar a integral.

Logo a amplitude de espalhamento em duas dimensões é:

$$i\mathcal{M} = \frac{-2ig}{1+\frac{mg}{4\pi}\left[ln\left(\frac{4\Lambda^2}{|\mathbf{k}-\mathbf{k}'|^2}\right)+i\pi\right]} \tag{4.22}$$

A seção de choque em duas dimensões é é então dada por:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{m^2|\mathbf{k}-\mathbf{k}'|^{-1}}{4(2\pi)}\frac{4g^2}{|1+\frac{mg}{4\pi}\left[ln\left(\frac{4\Lambda^2}{|\mathbf{k}-\mathbf{k}'|^2}\right)+i\pi\right]|^2}. \tag{4.23}$$

Em três dimensões o resultado para A é:

$$A = -\frac{mi}{(2\pi)^3}\int \frac{d^3k}{\mathbf{k}^2-(\Delta+i\epsilon)^2} = -\frac{2mi}{(2\pi)^2}\int_0^\infty \frac{k^2dk}{\mathbf{k}^2-(\Delta+i\epsilon)^2} =$$
$$-\frac{2mi}{(2\pi)^2}\int_0^\infty \frac{[k^2-(\Delta+i\epsilon)^2+(\Delta+i\epsilon)^2]dk}{k^2-(\Delta+i\epsilon)^2} = -\frac{mi}{2\pi^2}\int_0^\infty dk - \frac{mi}{2\pi^2}(\Delta+i\epsilon)^2\int_0^\infty \frac{dk}{k^2-(\Delta+i\epsilon)^2} =$$
$$-\frac{mi}{2\pi^2}\Lambda - \frac{mi}{2\pi^2}(\Delta+i\epsilon)^2\int_{-\infty}^\infty \frac{dk}{[k-(\Delta+i\epsilon)].[k+(\Delta+i\epsilon)]} = -\frac{mi}{2\pi^2}\Lambda -$$
$$-\frac{mi}{2\pi^2}(\Delta+i\epsilon)^2\int_C \frac{dz}{[z-(\Delta+i\epsilon)].[z+(\Delta+i\epsilon)]} = -\frac{mi}{2\pi^2}\left[\Lambda+2\pi i\frac{\Delta+i\epsilon}{2}\right] = -\frac{mi}{2\pi^2}\left[\Lambda+\frac{i\pi|\mathbf{k}-\mathbf{k}'|}{2}\right]. \tag{4.24}$$

Logo a amplitude de espalhamento em três dimensões fica:

$$i\mathcal{M} = \frac{-2ig}{1+\frac{mg}{2\pi^2}\left[\Lambda + \frac{i\pi|\mathbf{k}-\mathbf{k}'|}{2}\right]} = \frac{-2i}{\left(\frac{1}{g}+\frac{m\Lambda}{2\pi^2}\right)+\frac{im|\mathbf{k}-\mathbf{k}'|}{4\pi}}. \tag{4.25}$$

Logo a seção de choque diferencial é dada por:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{m^2}{4(2\pi)^2}\frac{4}{\left[\left(\frac{1}{g}+\frac{m\Lambda}{2\pi^2}\right)+\frac{im|\mathbf{k}-\mathbf{k}'|}{4\pi}\right]^2}. \tag{4.26}$$

Definindo a constante de acoplamento renormalizada:

$$\frac{2}{g_R} = \frac{1}{g} + \frac{m\Lambda}{2\pi^2}, \tag{4.27}$$

tem-se:

$$i\mathcal{M} = \frac{-ig_R}{1+\frac{img_R|\mathbf{k}-\mathbf{k}'|}{8\pi}} \tag{4.28}$$

e

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{m^2}{4(2\pi)^2}\frac{1}{\left|\frac{1}{g_R}+\frac{im|\mathbf{k}-\mathbf{k}'|}{8\pi}\right|^2}. \tag{4.29}$$

Finalmente define-se em três dimensões $\sigma(|\mathbf{k}-\mathbf{k}'|) = \pi a(|\mathbf{k}-\mathbf{k}'|)^2$, e o comprimento de espalhamento é definido então como $a = a(|\mathbf{k}-\mathbf{k}'| = 0)$, ou seja como o raio da seção de choque quando a diferença $|\mathbf{k}-\mathbf{k}'|$ no argumento da seção de choque é nula.

Dentro da perspectiva experimental de uma Ressonância de Feshbach, o comprimento de espalhamento pode ser variado, de forma que é possível variar a interação efetiva entre as partículas do gás.

Em três dimensões o comprimento de espalhamento é dado por:

$$a = \frac{mg_R}{2\pi}. \tag{4.30}$$

Analogamente para d=2 quando $|\mathbf{k}-\mathbf{k}'|$ tende a zero o logaritmo diverge e a seção de choque e o comprimento de espalhamento se anulam:

$$\sigma = a = 0. \tag{4.31}$$

Note que todos os resultados para férmions são análogos, exceto pelo fator $\frac{1}{2}$ que aparece em A e se propaga no restante dos cálculos, e pelo fator 2 na constante de acoplamento devido ao modo como se definiu a ação para férmions.

4.3 O kernel de dois corpos

Finalmente agora será mostrado como achar o kernel de dois corpos, tão crucial para a aproximação de espuma e a partir dele a matriz S. Recordando as definições e resultados do capítulo 3, usando as equações (3.4) e (3.6), lembrando da definição $\hat{W} = W\beta + 1$ e da definição de w, $\hat{w}$ e do vértice, tem-se que o kernel de dois corpos obedece a equação:

$$\langle \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 | Imlog\hat{S} | \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 \rangle = 2\pi V \delta(E - \frac{\mathbf{k}_1^2 + \mathbf{k}_2^2}{2m}) G_2(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2). \tag{4.32}$$

Usando o fato de que a matriz S é unitária tem-se que $Imlog\hat{S} = -ilog\hat{S}$, logo:

$$-i\langle \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 | log\hat{S} | \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 \rangle = 2\pi V \delta(E - \frac{\mathbf{k}_1^2 + \mathbf{k}_2^2}{2m}) G_2(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2). \tag{4.33}$$

Redefinindo o operador T em (2.34) de modo que $S = 1 + 2\pi i T(E)\delta(E - H_0)$, tem-se que T satisfaz:

$$\langle |\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 | T(E) || \mathbf{k}'_1, \mathbf{k}'_2 \rangle = (2\pi)^d \delta(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}'_1 - \mathbf{k}'_2) \mu_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 \to \mathbf{k}'_1, \mathbf{k}'_2}. \tag{4.34}$$

De (4.34) pode-se concluir com um certo esforço que

$$\langle |\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 | [2\pi\delta(E - H_0).T(E)]^n || \mathbf{k}'_1, \mathbf{k}'_2 \rangle = 2\pi V \delta(E - \frac{\mathbf{k}_1^2 + \mathbf{k}_2^2}{2m}).(i\mu)^n I^{n-1}, \tag{4.35}$$

onde μ é a amplitude de espalhamento $\mu_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 \to \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2}$ e I é dado por:

$$I = \int \frac{d^d\mathbf{p}_1}{(2\pi)^d} \frac{d^d\mathbf{p}_2}{(2\pi)^d} (2\pi)^{d+1} \delta \left(\frac{\mathbf{k}_1^2 + \mathbf{k}_2^2}{2m} - \frac{\mathbf{p}_1^2 + \mathbf{p}_2^2}{2m} \right) .\delta(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 - \mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2) \tag{4.36}$$

e será chamado de volume do espaço de fase.

Substituindo (4.34) em (4.33), usando a expansão do logaritmo em série de Taylor e (4.35) chega-se a:

$$G_2(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) = -\frac{i}{I} log(1 + i\mu I). \tag{4.37}$$

As equações (4.35) e (4.37) são deduzidas com detalhes no apêndice C.

Desta forma para se achar o kernel de dois corpos só falta resolver a integral do volume do espaço de fase I, que é feita no apêndice D para d=1, 2 e 3. Sendo assim, usando as amplitudes calculadas na seção anterior, tem-se em três dimensões:

$$G_2(\mathbf{k},\mathbf{k}') = -\frac{16\pi\sigma}{m.|\mathbf{k}-\mathbf{k}'|} arctg\left(\frac{mg_R.|\mathbf{k}-\mathbf{k}'|}{8\pi}\right), \tag{4.38}$$

em duas dimensões

$$G_2(\mathbf{k},\mathbf{k}') = -\frac{8\sigma}{m} arctg\left[\frac{\frac{mg}{4}}{1+\frac{mg}{4\pi}log\left(\frac{4\Lambda^2}{|\mathbf{k}-\mathbf{k}'|^2}\right)}\right] \tag{4.39}$$

e em uma dimensão

$$G_2(k,k') = -\frac{i\sigma|k-k'|}{m} log\left(\frac{|k-k'|-igm}{|k-k'|+igm}\right). \tag{4.40}$$

Vale ressaltar que a diferença do cálculo para férmions considerando as ações (4.1) e (4.2) se dá apenas pelo fator meio na integral do loop e na constante de acoplamento, de modo que os resultados foram agrupados com o auxílio da variável σ, definida tal que $\sigma = 1$ para bosons e $\sigma = \frac{1}{2}$ para férmions.

Conhecendo o kernel de dois corpos e usando a equação (4.33) é possível escrever a matriz S de dois corpos, fazendo isto tem-se em três dimensões:

$$S(|\mathbf{k}-\mathbf{k}'|) = \frac{\frac{8\pi}{mg_R} - i|\mathbf{k}-\mathbf{k}'|}{\frac{8\pi}{mg_R} + i|\mathbf{k}-\mathbf{k}'|}, \tag{4.41}$$

em duas dimensões acha-se:

$$S(|\mathbf{k}-\mathbf{k}'|) = \frac{\frac{2\pi}{mg} + log\left(\frac{2\Lambda}{|\mathbf{k}-\mathbf{k}'|}\right) - \frac{i\pi}{2}}{\frac{2\pi}{mg} + log\left(\frac{2\Lambda}{|\mathbf{k}-\mathbf{k}'|}\right) + \frac{i\pi}{2}}, \tag{4.42}$$

e finalmente em uma dimensão obtém-se

$$S(k,k') = \frac{|k-k'|-igm}{|k-k'|+igm}. \tag{4.43}$$

Antes de prosseguir para a próxima seção vale enfatizar que o comprimento de espalhamento costuma ser definido também da seguinte maneira:

$$-a = lim_{|\mathbf{k}-\mathbf{k}'|\to 0}\frac{\delta}{|\mathbf{k}-\mathbf{k}'|}, \tag{4.44}$$

onde $\delta = -ilogS$. Usando esta definição e (4.41) tem-se em três dimensões:

$$\delta = -2arctg\left(\frac{mg_R|\mathbf{k}-\mathbf{k}'|}{8\pi}\right), \tag{4.45}$$

logo o comprimento de espalhamento em três dimensões será dado por:

$$a = \frac{mg_R}{4\pi}. \tag{4.46}$$

Esta última definição é que será usada a partir deste ponto ao longo da tese, em concordância com [27].

4.4 O limite unitário

O chamado limite unitário é definido como sendo um ponto fixo do grupo de renormalização, no qual a matriz S é unitária e $S = -I$, isto impõe um limite na seção de choque que faz o comprimento de espalhamento divergir. O ponto fixo do grupo de renormalização no qual o comprimento de espalhamento diverge ocorre a temperatura nula, caracterizando um ponto crítico quântico.

Estes sistemas são exemplos de teorias invariantes de escala que apresentam expoente crítico dinâmico $z = 2$ e portanto não relativísticas.

Considerando o caso tridimensional, o ponto fixo do grupo de renormalizaçõ é dado por (4.13) e é um ponto fixo relevante com constante de acoplamento negativa. Recordando que $g = \hat{g}\Lambda^{2-d}$ vê-se que em três dmensões o ponto fixo é negativo e ocorre quando a constante de acoplamento, e consequentemente o comprimento de espalhamento e a constante de acoplamento renormalizada, divergem.

Fazendo g_R divergir em (4.41) tem-se que a matriz S tende a $S = -1$, caracterizando o limite unitário. Pode-se fazer $g \rightarrow g^*$ com valores acima ou abaixo do ponto crítico, o que leva o comprimento de espalhamento e a constante de acoplamento renormalizada a divergir para mais ou menos infinito; deste modo o limite unitário pode ser atingido do lado BCS ou do lado BEC. O kernel no limite unitário é então dado pela expressão a seguir, onde o parâmetro σ, além de assumir os valores absolutos de 1 e 1/2 dependendo do da natureza bosônica ou fermiônica do gás, pode ser positivo ou negativo para englobar os resultados na fase BCS e BEC na mesma expressão.

$$G_2(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{8\pi^2\sigma}{m.|\mathbf{k} - \mathbf{k}'|}, \tag{4.47}$$

onde na região BCS ($a \rightarrow -\infty$) σ vale 1 para bósons e 1/2 para férmions e na região BEC ($a \rightarrow \infty$) a mesma coisa mas com sinal trocado.

Em duas dimensões o único ponto fixo do grupo de renormalização que existe é dado por (4.13), no qual o comprimento de espalhamento nunca diverge e portanto não existe o limite unitário propriamente definido. No entanto olhando para a equação (4.42) vê-se que fazendo a constante de acoplamento divergir e aceitando a hipótese de que o "cut-off"obedeça a seguinte expressão

$$\Lambda = \frac{|\mathbf{k} - \mathbf{k}'|}{2} \tag{4.48}$$

tem-se que $S \rightarrow -1$ e portanto este será definido aqui como um limite unitário artificial, ainda que não corresponda a um ponto fixo do Grupo de renormalização. Resolvendo (4.8) para d=2 tem-se:

$$g(\Lambda) = \frac{g_0(\Lambda)}{1 - \frac{mg_0}{2\pi} log\left(\frac{\Lambda}{\Lambda_0}\right)}, \tag{4.49}$$

onde g_0 é a constante de acoplamento para um certo "cut-off"arbitrário Λ_0.

A equação (4.49) evidencia que em duas dimensões a constante de acoplamento diverge quando o "cut-off"é dado por $\Lambda^* = \Lambda_0 e^{\frac{2\pi}{mg_0}}$, que é o famoso polo de Landau.

De (4.49) conclui-se também que g_0 é positiva para $\Lambda^* > \Lambda_0$ e negativa para $\Lambda^* < \Lambda_0$ de modo que o limite $g = \infty$ ocorre no ultra-violeta e $g = -\infty$ no infravermelho.

Sendo assim o kernel de dois corpos no limite unitário em duas dimensões é dado por:

$$G_2(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{4\pi\sigma}{m}, \tag{4.50}$$

onde σ obedece a mesma convenção que para o caso tridimensional, exceto pelo fato de que aqui os nomes BCS e BEC não fazem muito sentido já que o ponto crítico quântico não existe e devem ser interpretados apenas como o sinal da divergência do comprimento de espalhamento, definido de maneira similar ao caso tridimensional.

A necessidade de se introduzir artificialmente um limite unitário para d<3 não é tão surpreendente levando em conta que o Teorema de Mermim-Wagner proíbe quebra espontânea de simetria para d<3, restando apenas em duas dimensões a transição de fase de Kosterlitz-Touless como candidata a uma transição.

Em uma dimensão o grupo de renormalização apresenta um ponto fixo irrelevante dado por (4.12), ainda assim (4.43) mostra que fazendo g tender a mais ou menos infinito tem-se $S \to -1$ e este será definido artificiamente aqui também como um limite unitário.

Sendo assim o kernel de dois corpos em uma dimensão no limite unitário será dado por

$$G_2(k, k') = \frac{\pi|k - k'|\sigma}{2m}, \tag{4.51}$$

onde σ segue a mesma convenção e discussão que no caso bidimensional.

Independente de qualquer coisa, os limites unitários definidos nesta tese em uma e duas dimensões são exemplos de teorias invariantes de escala e podem ser vistos, no mínimo como um caso particular de acoplamento forte, ainda que não tenham a mesma importância que o limite unitário em três dimensões, que é amplo objeto de estudo teórico e também experimental com o auxílio dos experimentos de Ressonância de Feshbach.

4.5 Propriedades e funções de escala

Nesta seção definir-se-ão funções de escala convenientes para energia livre e outras grandezas termodinâmicas. Como ponto de partida, pode-se pensar primeiramente no caso da teoria livre em que a energia livre é dada por (3.11), que pode ser manipulada da seguinte maneira:

$$
\begin{aligned}
F_0 = \frac{s}{\beta}\int \frac{d^d\mathbf{k}}{(2\pi)^d} log\left[1 - sze^{-\beta w_{\mathbf{k}}}\right] = \frac{s}{\beta(2\pi)^d}\frac{2\pi^{\frac{d}{2}}}{\Gamma\left(\frac{d}{2}\right)}\int_0^\infty k^{d-1}.log(1-sze^{-\frac{\beta k^2}{2m}})dk = \\
= -\frac{2\pi^{\frac{d}{2}}s}{(2\pi)^d\beta\Gamma\left(\frac{d}{2}\right)}\left[\left(\frac{k^d}{d}log(1-sze^{-\frac{\beta k^2}{2m}})\right)_0^\infty - \frac{\beta}{md}\int_0^\infty \frac{sze^{-\frac{\beta k^2}{2m}}k^{d+1}dk}{1-sze^{-\frac{\beta k^2}{2m}}}\right] = \\
= -\frac{2\pi^{\frac{d}{2}}z}{(2\pi)^d md\Gamma\left(\frac{d}{2}\right)}\int_0^\infty \frac{k^{d+1}dk}{e^{\frac{\beta k^2}{2m}} - sz} = -\frac{2\pi^{\frac{d}{2}}s}{(2\pi)^d md\Gamma\left(\frac{d}{2}\right)}\left(\frac{m}{\beta}\right)^{\frac{d}{2}+1}\int_0^\infty \frac{szx^d dk}{e^x - sz} = \\
-sT\left(\frac{mT}{2\pi}\right)^{\frac{d}{2}}.Li_{\frac{d}{2}+1}(sz) \Rightarrow F_0 = -sT\left(\frac{mT}{2\pi}\right)^{\frac{d}{2}}.Li_{\frac{d}{2}+1}(sz), \quad (4.52)
\end{aligned}
$$

onde Li_ν representa o polilogaritmo.

Próximo da condensação de Bose-Einstein $\frac{\mu}{T} \to 0$ e consequentemente a fugacidade vai para um, logo para bósons tem-se:

$$
\mu \to 0 \Rightarrow F_0 \to -\left(\frac{mT}{2\pi}\right)^{\frac{d}{2}} T\zeta\left(\frac{d+2}{2}\right), \quad (4.53)
$$

onde se usou que $Li_\nu(1) = \zeta(1)$. Observando que $Li_\nu(-1) = -\left(1 - \frac{1}{2^{\nu-1}}\right)\zeta(1)$, vê-se que o resultado se estende para férmions a menos de uma constante multiplicativa. A definição do polilogaritmo e da função zeta, bem como a prova de algumas de suas propriedades, pode ser encontrada no apêndice B.

Sendo assim, é possível definir no caso interagente a função de escala da energia livre dependendo apenas das grandezas adimensionais $x \equiv \frac{\mu}{T}$ e $\alpha \equiv \frac{\lambda}{a}$, onde $\lambda \equiv \sqrt{\frac{2\pi}{mT}}$ é o comprimento de onda térmico e a é o comprimento de espalhamento (em três dimensões dado por $a = \frac{mg_R}{4\pi}$). Esta função de escala será então definida por:

$$
F = -\left(\frac{mT}{2\pi}\right)^{\frac{d}{2}} T\zeta\left(\frac{d+2}{2}\right) c\left(x, \frac{\lambda}{a}\right) = -\lambda^{-d}T\zeta\left(\frac{d+2}{2}\right) c\left(x, \alpha\right). \quad (4.54)
$$

Deste modo c tende para 1 na condensação de Bose-Einstein de bósons livres.

Derivando em relação a μ é possível ver que a densidade de partículas n escala com λ^d, logo definindo

$$q = n\lambda^d, \tag{4.55}$$

tem-se:

$$q\left(x,\alpha\right) = \zeta\left(\frac{d+2}{2}\right)\frac{\partial c\left(x,\alpha\right)}{\partial x}. \tag{4.56}$$

Em três dimensões, lembrando que a entropia é dada por $S = -\frac{\partial F}{\partial T}$, tem-se:

$$S = \zeta\left(\frac{5}{2}\right)\lambda^{-3}\left[\frac{5}{2}c - x\frac{\partial c}{\partial x} - \frac{\alpha}{2}\frac{\partial c\left(x,\alpha\right)}{\partial \alpha}\right] \tag{4.57}$$

e

$$s \equiv \frac{S}{n} = \zeta\left(\frac{5}{2}\right)\frac{1}{q}\left[\frac{5}{2}c - x\frac{\partial c}{\partial x} - \frac{\alpha}{2}\frac{\partial c\left(x,\alpha\right)}{\partial \alpha}\right]. \tag{4.58}$$

Comparando (3.44) com (4.54) e (4.55) acha-se as funções de escala da energia livre e da densidade de partículas em função de $y(\mathbf{k})$. Supondo que y depende apenas do módulo de $\mathbf{k}$, a parte angular das funções de escala pode ser integrada e o resultado em três dimensões é:

$$c = \frac{2}{\sqrt{\pi}\zeta\left(\frac{5}{2}\right)}\int_0^\infty \left[-s.log(1 - szy(k)e^{-k}) - \frac{z}{2}\frac{y(k)-1}{e^k - szy(k)}\right]\sqrt{k}dk \tag{4.59}$$

e

$$q = \frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_0^\infty \frac{zy(k)}{e^k - szy(k)}\sqrt{k}dk. \tag{4.60}$$

Em [23] outras funções de escala são definidas além destas aqui presentes, só que no limite unitário. Estas outras funções de escala poderiam ser definidas aqui também; no entanto as que já foram apresentadas são suficientes para expor os resultados numéricos das propriedades termodinâmicas e do estudo do crossover deste trabalho, resultados estes que se encontram em [27].

Capítulo 5

Resultados

5.1 Expansão do virial dentro da aproximação de espuma

Os coeficientes do virial podem ser definidos de várias maneiras, nesta tese a definição adotada será

$$F = -\frac{1}{\beta\lambda^d}\sum_{l=1}^{\infty} b_l.z^l. \tag{5.1}$$

Tendo em mente que $n = -\frac{\partial F}{\partial \mu}$ e usando (4.55) os coeficientes do virial podem ser definidos de maneira equivalente por:

$$q = \sum_{l=1}^{\infty} l.b_l.z^l. \tag{5.2}$$

Usando novamente (4.55) e recapitulando as definições da pseudo-energia (3.30), do filling fraction físico (3.21) e de $y(\mathbf{k})$ (3.40) tem-se:

$$q = n\lambda^d = \left(\frac{2\pi}{mT}\right)^{d/2}\int \frac{d^d\mathbf{k}}{(2\pi)^d}\frac{1}{e^{\beta\epsilon(\mathbf{k})} - s} = \left(\frac{1}{2\pi mT}\right)^{d/2}\int d^d\mathbf{k}\frac{zy(\mathbf{k})e^{-\frac{\beta\mathbf{k}^2}{2m}}}{1 - szy(\mathbf{k})e^{-\frac{\beta\mathbf{k}^2}{2m}}}. \tag{5.3}$$

Como foi mostrado no capítulo 3, dentro da aproximação de espuma, a grandeza $y(\mathbf{k}) = e^{-\beta(\epsilon_{\mathbf{k}}+\mu-w_{\mathbf{k}})}$ satisfaz a equação integral (3.41). Expandindo (3.41) em série de Taylor tem-se:

$$y(\mathbf{k}) = 1 + \frac{\beta}{(2\pi)^d}\int d^d\mathbf{k}'.G_2(\mathbf{k},\mathbf{k}').ze^{-\frac{\beta\mathbf{k}'^2}{2m}}(1 + szy(\mathbf{k}')e^{-\frac{\beta\mathbf{k}'^2}{2m}} + z^2y^2e^{-\frac{\beta\mathbf{k}'^2}{m}} + ...). \tag{5.4}$$

Expandindo em série de Taylor a função de escala q do número de partículas, dada pela equação (5.3) tem-se:

$$q = \left(\frac{1}{2\pi mT}\right)^{d/2} \int zy(\mathbf{k})e^{-\frac{\beta\mathbf{k}^2}{2m}}[1 + szy(\mathbf{k})e^{-\frac{\beta\mathbf{k}^2}{2m}} + z^2y^2(\mathbf{k})e^{-\frac{\beta\mathbf{k}^2}{m}} + ...]d^d\mathbf{k}. \tag{5.5}$$

.

Usando as equações (5.4) e (5.5) tem-se os coeficientes do virial que aparecem na equação (5.2). O resultado para o primeiro coeficiente b_1 é:

$$b_1 = \frac{1}{(2\pi mT)^{d/2}} \int d^d\mathbf{k}e^{-\frac{\beta\mathbf{k}^2}{2m}} = \frac{2\pi^{\frac{d}{2}}}{(2\pi mT)^{d/2}\Gamma(\frac{d}{2})} \int_0^\infty dk.k^{d-1}e^{-\frac{\beta k^2}{2m}} = \frac{2\pi^{\frac{d}{2}}}{(2\pi mT)^{d/2}\Gamma(\frac{d}{2})} \left(\frac{2m}{\beta}\right)^{\frac{d}{2}}$$
$$\int_0^\infty dk.k^{d-1}e^{-k^2} = \frac{2}{\Gamma(\frac{d}{2})} \int_0^\infty x^{\frac{d-1}{2}}e^{-x}\frac{dx}{2x^{\frac{1}{2}}} = \frac{1}{\Gamma(\frac{d}{2})} \int_0^\infty x^{\frac{d-1}{2}}e^{-x}dx = \frac{1}{\Gamma\left(\frac{d}{2}\right)}\Gamma\left(\frac{d}{2}\right) = 1, \tag{5.6}$$

onde foi usada a fórmula do elemento de ângulo sólido em coordenadas esféricas, a qual é deduzida no apêndice A e será usada a partir de agora corriqueiramente e sem menção. Ao longo deste capítulo será usado também o resultado da integral gaussiana simples em dimensão qualquer, a qual encontra-se feita também no apêndice A junto com o cálculo do elemento de ângulo sólido; as demais integrais serão desenvolvidas ao longo do capítulo. O primeiro coeficiente do virial é então dado por:

$$b_1 = 1. \tag{5.7}$$

Note que o resultado (5.7) é universal já que ele não depende de nenhum kernel ou de qualquer característica do hamiltoniano, isto era esperado já que este é um resultado conhecido. Vale ressaltar que mesmo dentro da aproximação de espuma os dois primeiros coeficientes do virial são exatos, como será mostrado mais adiante.

Para o segundo coeficiente, cujo resultado também é exato, tem-se:

$$2b_2 = \frac{s}{(2\pi mT)^{d/2}} \int d^d\mathbf{k}e^{-\frac{\beta\mathbf{k}^2}{m}} + \frac{1}{(2\pi mT)^{d/2}} \frac{\beta}{(2\pi)^d} \int d^d\mathbf{k}d^d\mathbf{k}'e^{-\frac{\beta\mathbf{k}^2}{2m}}e^{-\frac{\beta\mathbf{k}'^2}{2m}}.G_2(\mathbf{k},\mathbf{k}'), \tag{5.8}$$

mas

$$\frac{s}{(2\pi mT)^{d/2}}\int d^d\mathbf{k}e^{-\frac{\beta\mathbf{k}^2}{m}}=\frac{2\pi^{\frac{d}{2}}s}{(2\pi mT)^{d/2}\Gamma(\frac{d}{2})}\int_0^\infty k^{d-1}e^{-\frac{\beta k^2}{m}}dk=\frac{2\pi^{\frac{d}{2}}s}{(2\pi mT)^{d/2}\Gamma(\frac{d}{2})}\left(\frac{m}{\beta}\right)^{\frac{d}{2}}$$
$$\int_0^\infty k^{d-1}e^{-k^2}dk=\frac{2s}{2^{d/2}\Gamma(\frac{d}{2})}\int_0^\infty x^{\frac{d-1}{2}}e^{-x}\frac{dx}{2x^{\frac{1}{2}}}=\frac{s}{2^{d/2}\Gamma(\frac{d}{2})}\int_0^\infty x^{\frac{d}{2}-1}e^{-x}dx=\frac{s}{2^{d/2}\Gamma(\frac{d}{2})}\Gamma\left(\frac{d}{2}\right)=\frac{s}{2^{d/2}}, \tag{5.9}$$

logo

$$2b_2=\frac{s}{(2)^{d/2}}+\frac{\beta}{(2\pi)^d(2\pi mT)^{d/2}}\int d^d\mathbf{k}d^d\mathbf{k}'e^{-\frac{\beta\mathbf{k}^2}{2m}}e^{-\frac{\beta\mathbf{k}'^2}{2m}}.G_2(\mathbf{k},\mathbf{k}'). \tag{5.10}$$

O terceiro coeficiente do virial, que é o primeiro coeficiente aproximado, é dado por:

$$3b_3=\frac{1}{(2\pi mT)^{d/2}}\int d^d\mathbf{k}e^{-\frac{3\beta\mathbf{k}^2}{2m}}+\frac{s}{(2\pi mT)^{d/2}}\frac{2\beta}{(2\pi)^d}\int d^d\mathbf{k}d^d\mathbf{k}'e^{-\frac{\beta\mathbf{k}^2}{m}}e^{-\frac{\beta\mathbf{k}'^2}{2m}}.G_2(\mathbf{k},\mathbf{k}')+$$
$$\frac{1}{(2\pi mT)^{d/2}}\frac{\beta s}{(2\pi)^d}\int d^d\mathbf{k}d^d\mathbf{k}'e^{-\frac{\beta\mathbf{k}^2}{2m}}e^{-\frac{\beta\mathbf{k}'^2}{m}}.G_2(\mathbf{k},\mathbf{k}'). \tag{5.11}$$

Devido a invariância translacional e rotacional da hamiltoniana, o kernel de dois corpos deve depender apenas do módulo da diferença dos momenta do argumento do kernel, ou seja: $G_2(\mathbf{k},\mathbf{k}')=G_2(\mathbf{k}',\mathbf{k})=G_2(|\mathbf{k}-\mathbf{k}'|)$; logo a equação anterior fica mais simples:

$$3b_3=\frac{1}{(2\pi mT)^{d/2}}\int d^d\mathbf{k}e^{-\frac{3\beta\mathbf{k}^2}{2m}}+\frac{3\beta s}{(2\pi mT)^{d/2}(2\pi)^d}\int d^d\mathbf{k}d^d\mathbf{k}'e^{-\frac{\beta\mathbf{k}^2}{m}}e^{-\frac{\beta\mathbf{k}'^2}{2m}}.G_2(\mathbf{k},\mathbf{k}'). \tag{5.12}$$

Calculando a parte que não depende do kernel tem-se:

$$\frac{1}{(2\pi mT)^{d/2}}\int d^d\mathbf{k}e^{-\frac{3\beta\mathbf{k}^2}{2m}}=\frac{2\pi^{\frac{d}{2}}}{(2\pi mT)^{d/2}\Gamma(\frac{d}{2})}\int_0^\infty k^{d-1}e^{-\frac{3\beta k^2}{2m}}dk=$$
$$=\frac{2\pi^{\frac{d}{2}}}{(2\pi mT)^{d/2}\Gamma(\frac{d}{2})}\left(\frac{2m}{3\beta}\right)^{\frac{d}{2}}\int_0^\infty k^{d-1}e^{-k^2}dk=\frac{2}{3^{d/2}\Gamma(\frac{d}{2})}\int_0^\infty x^{\frac{d-1}{2}}e^{-x}\frac{dx}{2x^{\frac{1}{2}}}=$$
$$=\frac{1}{3^{d/2}\Gamma(\frac{d}{2})}\int_0^\infty x^{\frac{d}{2}-1}e^{-x}dx=\frac{1}{3^{d/2}\Gamma(\frac{d}{2})}\Gamma\left(\frac{d}{2}\right)=\frac{1}{3^{d/2}}, \tag{5.13}$$

logo o terceiro coeficiente do virial na aproximação de espuma é dado por:

$$3b_3=\frac{1}{3^{d/2}}+\frac{3\beta s}{(2\pi mT)^{d/2}(2\pi)^d}\int d^d\mathbf{k}d^d\mathbf{k}'e^{-\frac{\beta\mathbf{k}^2}{m}}e^{-\frac{\beta\mathbf{k}'^2}{2m}}.G_2(\mathbf{k},\mathbf{k}'). \tag{5.14}$$

Finalmente o quarto coeficiente do virial fica:

$$\begin{aligned}4b_4 = \frac{s}{(2\pi mT)^{d/2}}\int e^{-\frac{2\beta\mathbf{k}^2}{m}}d^d\mathbf{k} + \frac{1}{(2\pi mT)^{d/2}}\frac{3\beta}{(2\pi)^d}\int e^{-\frac{3\beta\mathbf{k}^2}{2m}}e^{-\frac{\beta\mathbf{k}'^2}{2m}}G_2(\mathbf{k},\mathbf{k}')d^d\mathbf{k}d^d\mathbf{k}'+\\
+\frac{s}{(2\pi mT)^{d/2}}\frac{2\beta s}{(2\pi)^d}\int e^{-\frac{\beta\mathbf{k}^2}{m}}e^{-\frac{\beta\mathbf{k}'^2}{m}}G_2(\mathbf{k},\mathbf{k}')d^d\mathbf{k}d^d\mathbf{k}'+\\
+\frac{\beta^2 s}{(2\pi mT)^{d/2}(2\pi)^{2d}}\int e^{-\frac{\beta\mathbf{k}^2}{m}}e^{-\frac{\beta\mathbf{k}'^2}{2m}}e^{-\frac{\beta\mathbf{k}''^2}{2m}}G_2(\mathbf{k},\mathbf{k}')G_2(\mathbf{k},\mathbf{k}'')d^d\mathbf{k}d^d\mathbf{k}'d^d\mathbf{k}''+\\
+\frac{\beta}{(2\pi)^d(2\pi mT)^{d/2}}\int e^{-\frac{\beta\mathbf{k}^2}{2m}}e^{-\frac{3\beta\mathbf{k}'^2}{2m}}G_2(\mathbf{k},\mathbf{k}')d^d\mathbf{k}d^d\mathbf{k}'+\\
+\frac{\beta^2 s}{(2\pi mT)^{d/2}(2\pi)^{2d}}\int e^{-\frac{\beta\mathbf{k}^2}{2m}}e^{-\frac{\beta\mathbf{k}'^2}{m}}e^{-\frac{\beta\mathbf{k}''^2}{2m}}G_2(\mathbf{k},\mathbf{k}')G_2(\mathbf{k}',\mathbf{k}'')d^d\mathbf{k}d^d\mathbf{k}'d^d\mathbf{k}''.\end{aligned} \quad (5.15)$$

Mais uma vez a simetria de translação e rotação da hamiltoniana implica que $G_2(\mathbf{k},\mathbf{k}') = G_2(\mathbf{k}',\mathbf{k})$, sendo assim é possível agrupar alguns dos termos da última equação e obter:

$$\begin{aligned}4b_4 = \frac{s}{(2\pi mT)^{d/2}}\int e^{-\frac{2\beta\mathbf{k}^2}{m}}d^d\mathbf{k} + \frac{4\beta}{(2\pi mT)^{d/2}(2\pi)^d}\int e^{-\frac{3\beta\mathbf{k}^2}{2m}}e^{-\frac{\beta\mathbf{k}'^2}{2m}}G_2(\mathbf{k},\mathbf{k}')d^d\mathbf{k}d^d\mathbf{k}'+\\
+\frac{2\beta}{(2\pi)^d(2\pi mT)^{d/2}}\int e^{-\frac{\beta\mathbf{k}^2}{m}}e^{-\frac{\beta\mathbf{k}'^2}{m}}G_2(\mathbf{k},\mathbf{k}')d^d\mathbf{k}d^d\mathbf{k}'+\\
+\frac{2\beta^2 s}{(2\pi mT)^{d/2}(2\pi)^{2d}}\int e^{-\frac{\beta\mathbf{k}^2}{2m}}e^{-\frac{\beta\mathbf{k}'^2}{m}}e^{-\frac{\beta\mathbf{k}''^2}{2m}}G_2(\mathbf{k},\mathbf{k}')G_2(\mathbf{k}',\mathbf{k}'')d^d\mathbf{k}d^d\mathbf{k}'d^d\mathbf{k}''.\end{aligned} \quad (5.16)$$

Calculando o primeiro termo, que não depende do kernel, obtém-se:

$$\begin{aligned}\frac{s}{(2\pi mT)^{d/2}}\int d^d\mathbf{k}e^{-\frac{2\beta\mathbf{k}^2}{m}} = \frac{2\pi^{\frac{d}{2}}s}{(2\pi mT)^{d/2}\Gamma(\frac{d}{2})}\int_0^\infty k^{d-1}e^{-\frac{2\beta k^2}{m}}dk = \frac{2\pi^{\frac{d}{2}}s}{(2\pi mT)^{d/2}\Gamma(\frac{d}{2})}\left(\frac{m}{2\beta}\right)^{\frac{d}{2}}\\
\int_0^\infty k^{d-1}e^{-k^2}dk = \frac{2s}{4^{d/2}\Gamma(\frac{d}{2})}\int_0^\infty x^{\frac{d-1}{2}}e^{-x}\frac{dx}{2x^{\frac{1}{2}}} = \frac{s}{4^{d/2}\Gamma(\frac{d}{2})}\int_0^\infty x^{\frac{d}{2}-1}e^{-x}dx = \frac{s}{4^{d/2}\Gamma(\frac{d}{2})}\Gamma\left(\frac{d}{2}\right) = \frac{s}{4^{d/2}},\end{aligned} \quad (5.17)$$

deste modo o quarto coeficiente dentro da aproximação em questão é:

$$\begin{aligned}4b_4 = \frac{s}{4^{d/2}} + \frac{4\beta}{(2\pi mT)^{d/2}(2\pi)^d}\int e^{-\frac{3\beta\mathbf{k}^2}{2m}}e^{-\frac{\beta\mathbf{k}'^2}{2m}}G_2(\mathbf{k},\mathbf{k}')d^d\mathbf{k}d^d\mathbf{k}'+\\
+\frac{2\beta}{(2\pi)^d(2\pi mT)^{d/2}}\int e^{-\frac{\beta\mathbf{k}^2}{m}}e^{-\frac{\beta\mathbf{k}'^2}{m}}G_2(\mathbf{k},\mathbf{k}')d^d\mathbf{k}d^d\mathbf{k}'+\\
+\frac{2\beta^2 s}{(2\pi mT)^{d/2}(2\pi)^{2d}}\int e^{-\frac{\beta\mathbf{k}^2}{2m}}e^{-\frac{\beta\mathbf{k}'^2}{m}}e^{-\frac{\beta\mathbf{k}''^2}{2m}}G_2(\mathbf{k},\mathbf{k}')G_2(\mathbf{k}',\mathbf{k}'')d^d\mathbf{k}d^d\mathbf{k}'d^d\mathbf{k}''.\end{aligned} \quad (5.18)$$

5.2 Expansão do virial em três dimensões

5.2.1 Resultados no limite unitário

Para achar os quatro primeiros coeficientes do virial no limite unitário em 3 dimensões basta substituir (4.47) nas equações (5.7), (5.10), (5.14) e (5.18) com d=3.

Conforme foi mostrado em (5.7), $b_1 = 1$ em todas as dimensões independentemente do kernel; sendo assim começar-se-á pelo segundo coeficiente. Substituindo o kernel no segundo termo de (5.10) para d=3 tem-se:

$$\frac{\beta}{(2\pi)^3(2\pi mT)^{3/2}}\int d^3\mathbf{k}d^3\mathbf{k}'e^{-\frac{\beta\mathbf{k}^2}{2m}}e^{-\frac{\beta\mathbf{k}'^2}{2m}}.G_2(\mathbf{k},\mathbf{k}') = \frac{8\pi^2\beta\sigma}{m(2\pi)^3(2\pi mT)^{3/2}}\int\frac{d^3\mathbf{k}d^3\mathbf{k}'e^{-\frac{\beta\mathbf{k}^2}{2m}}e^{-\frac{\beta\mathbf{k}'^2}{2m}}}{|\mathbf{k}-\mathbf{k}'|} =$$
$$\frac{8\pi^2\beta\sigma}{m(2\pi)^3(2\pi mT)^{3/2}}\left(\frac{2m}{\beta}\right)^{\frac{5}{2}}\int\frac{d^3\mathbf{k}d^3\mathbf{k}'e^{-(k^2+k'^2)}}{|\mathbf{k}-\mathbf{k}'|} = \frac{\pi^2\beta\sigma}{m(2\pi)^3(2\pi mT)^{3/2}}\left(\frac{2m}{\beta}\right)^{\frac{5}{2}}\int\frac{d^3ud^3v.e^{-\frac{(u^2+v^2)}{2}}}{v} =$$
$$\frac{16\pi^4\beta\sigma}{m(2\pi)^3(2\pi mT)^{3/2}}\left(\frac{2m}{\beta}\right)^{\frac{5}{2}}\int_0^\infty u^2e^{-\frac{u^2}{2}}du\int_0^\infty v.e^{-\frac{v^2}{2}}dv = \frac{16\pi^4\beta\sigma}{m(2\pi)^3\,(2\pi mT)^{3/2}}\left(\frac{2m}{\beta}\right)^{\frac{5}{2}}.2\sqrt{2}.\frac{\sqrt{\pi}}{4}.1 =$$
$$2\sqrt{2}\sigma. \quad (5.19)$$

Note que na última equação foi usada a substituição $\mathbf{u} = \mathbf{k}+\mathbf{k}'$ e $\mathbf{v} = \mathbf{k}-\mathbf{k}'$ para resolver as integrais. Finalmente substituindo d=3 no primeiro termo obtém-se:

$$2b_2 = \frac{s\sqrt{2}}{4} + 2\sqrt{2}\sigma \quad (5.20)$$

.

Seguindo o mesmo procedimento para a equação (5.14), acha-se o segundo termo:

$$\frac{3\beta s}{(2\pi mT)^{3/2}(2\pi)^3}\int d^3\mathbf{k}d^3\mathbf{k}'e^{-\frac{\beta\mathbf{k}^2}{m}}e^{-\frac{\beta\mathbf{k}'^2}{2m}}.G_2(\mathbf{k},\mathbf{k}')=\frac{3\beta s}{(2\pi mT)^{3/2}(2\pi)^3}\frac{8\pi^2\sigma}{m}\int\frac{d^3\mathbf{k}d^3\mathbf{k}'e^{-\frac{\beta(2\mathbf{k}^2+\mathbf{k}'^2)}{2m}}}{|\mathbf{k}-\mathbf{k}'|}=$$

$$\frac{24\pi^2\beta\sigma s}{m(2\pi mT)^{3/2}(2\pi)^3}\int\frac{d^3\mathbf{k}d^3\mathbf{k}'e^{-\frac{\beta(2\mathbf{k}^2+\mathbf{k}'^2)}{2m}}}{|\mathbf{k}-\mathbf{k}'|}=\frac{24\pi^2\beta\sigma s}{m(2\pi mT)^{3/2}(2\pi)^3}\left(\frac{2m}{\beta}\right)^{5/2}\int\frac{d^3\mathbf{k}d^3\mathbf{k}'e^{-(2\mathbf{k}^2+\mathbf{k}'^2)}}{|\mathbf{k}-\mathbf{k}'|}=$$

$$\frac{24\pi^2\beta\sigma s}{27m(2\pi mT)^{3/2}(2\pi)^3}\left(\frac{2m}{\beta}\right)^{5/2}\int\frac{d^3ud^3ve^{-\frac{(u^2+2v^2)}{3}}}{v}=\frac{16.24\pi^4\beta\sigma s}{27m(2\pi mT)^{3/2}(2\pi)^3}\left(\frac{2m}{\beta}\right)^{5/2}\int_0^\infty u^2.e^{-\frac{u^2}{3}}du$$

$$\int_0^\infty ve^{-\frac{2v^2}{3}}dv=\frac{16.24\pi^4\beta\sigma s}{27m(2\pi mT)^{3/2}(2\pi)^3}\left(\frac{2m}{\beta}\right)^{5/2}3^{3/2}.\frac{3}{2}\int_0^\infty u^2.e^{-u^2}du\int_0^\infty ve^{-v^2}dv=$$

$$\frac{16.24\pi^4\beta\sigma s}{27m(2\pi mT)^{3/2}(2\pi)^3}\left(\frac{2m}{\beta}\right)^{5/2}3^{3/2}.\frac{3}{2}.\frac{\sqrt{\pi}}{4}.\frac{1}{2}=2s\sqrt{3}\sigma,\quad(5.21)$$

onde foi usada a substituição $\mathbf{u}=2\mathbf{k}+\mathbf{k}'$ e $\mathbf{v}=\mathbf{k}-\mathbf{k}'$. Finalmente o terceiro coeficiente do virial será dado por:

$$3b_3=\frac{\sqrt{3}}{9}+2s\sqrt{3}\sigma.\qquad(5.22)$$

Procedendo analogamente com (5.18), encontra-se para o segundo termo de (5.18):

$$\frac{4\beta}{(2\pi mT)^{3/2}(2\pi)^3}\int e^{-\frac{3\beta\mathbf{k}^2}{2m}}e^{-\frac{\beta\mathbf{k}'^2}{2m}}G_2(\mathbf{k},\mathbf{k}')d^3\mathbf{k}d^3\mathbf{k}'=\frac{4\beta}{(2\pi mT)^{3/2}(2\pi)^3}\frac{8\pi^2\sigma}{m}\int\frac{e^{-\frac{3\beta\mathbf{k}^2}{2m}}e^{-\frac{\beta\mathbf{k}'^2}{2m}}.d^3\mathbf{k}d^3\mathbf{k}'}{|\mathbf{k}-\mathbf{k}'|}=$$

$$=\frac{4\beta}{(2\pi mT)^{3/2}(2\pi)^3}\frac{8\pi^2\sigma}{m}\left(\frac{2m}{\beta}\right)^{5/2}\int\frac{e^{-3\mathbf{k}^2}e^{-\mathbf{k}'^2}.d^3\mathbf{k}d^3\mathbf{k}'}{|\mathbf{k}-\mathbf{k}'|}=\frac{\beta\pi^2\sigma}{(2\pi mT)^{3/2}(2\pi)^3(2m)}\left(\frac{2m}{\beta}\right)^{5/2}$$

$$\int\frac{e^{\frac{-u^2}{4}}e^{\frac{-3v^2}{4}}.d^3ud^3v}{v}=\frac{8\beta\pi^4\sigma}{(2\pi mT)^{3/2}(2\pi)^3m}\left(\frac{2m}{\beta}\right)^{5/2}\int_0^\infty u^2.e^{\frac{-u^2}{4}}du\int_0^\infty v.e^{\frac{-3v^2}{4}}dv=$$

$$=\frac{8\beta\pi^4\sigma}{(2\pi mT)^{3/2}(2\pi)^3m}\left(\frac{2m}{\beta}\right)^{5/2}.2^3.\frac{4}{3}\int_0^\infty x^2.e^{-x^2}dx\int_0^\infty y.e^{-y^2}dy=\frac{2\sigma}{\sqrt{\pi}}.2^3.\frac{4}{3}.\frac{\sqrt{\pi}}{4}.\frac{1}{2}=\frac{8\sigma}{3},\qquad(5.23)$$

onde se utilizou a mudança de variáveis $\mathbf{u}=3\mathbf{k}+\mathbf{k}'$ e $\mathbf{v}=\mathbf{k}-\mathbf{k}'$. A seguir calcula-se o terceiro termo de (5.18):

$$\frac{2\beta}{(2\pi mT)^{3/2}(2\pi)^3}\int e^{-\frac{\beta\mathbf{k}^2}{m}}e^{-\frac{\beta\mathbf{k}'^2}{m}}G_2(\mathbf{k},\mathbf{k}')d^3\mathbf{k}d^3\mathbf{k}' = \frac{2\beta}{(2\pi mT)^{3/2}(2\pi)^3}\frac{8\pi^2\sigma}{m}$$
$$\int \frac{e^{-\frac{\beta\mathbf{k}^2}{m}}e^{-\frac{\beta\mathbf{k}'^2}{m}}.d^3\mathbf{k}d^3\mathbf{k}'}{|\mathbf{k}-\mathbf{k}'|} = \frac{2\beta}{(2\pi mT)^{3/2}(2\pi)^3}\frac{8\pi^2\sigma}{m}\left(\frac{m}{\beta}\right)^{5/2}\int \frac{e^{-\mathbf{k}^2}e^{-\mathbf{k}^2}.d^3\mathbf{k}d^3\mathbf{k}'}{|\mathbf{k}-\mathbf{k}'|} =$$
$$= \frac{2\beta}{(2\pi mT)^{3/2}(2\pi)^3}\frac{\pi^2\sigma}{m}\left(\frac{m}{\beta}\right)^{5/2}\int \frac{e^{\frac{-u^2}{2}}e^{\frac{-v^2}{2}}.d^3ud^3v}{v} = \frac{32\beta\pi^4\sigma}{(2\pi mT)^{3/2}(2\pi)^3 m}\left(\frac{m}{\beta}\right)^{5/2}\int_0^\infty u^2.du.e^{-\frac{u^2}{2}}$$
$$\int_0^\infty v.e^{-\frac{v^2}{2}}.dv = \frac{64\sqrt{2}\beta\pi^4\sigma}{(2\pi mT)^{3/2}(2\pi)^3 m}\left(\frac{m}{\beta}\right)^{5/2}\int_0^\infty x^2.e^{-x^2}.dx\int_0^\infty v.e^{-\frac{v^2}{2}}.dv =$$
$$\frac{64\sqrt{2}\beta\pi^4\sigma}{(2\pi mT)^{3/2}(2\pi)^3 m}\left(\frac{m}{\beta}\right)^{5/2}.\frac{\sqrt{\pi}}{4}.1 = \sigma, \quad (5.24)$$

onde a substituição $\mathbf{u} = \mathbf{k} + \mathbf{k}'$ e $\mathbf{v} = \mathbf{k} - \mathbf{k}'$ foi feita. O quarto termo de (5.18) pode ser simplificado para

$$\frac{2\beta^2 s}{(2\pi mT)^{3/2}(2\pi)^6}\int e^{-\frac{\beta\mathbf{k}^2}{2m}}e^{-\frac{\beta\mathbf{k}'^2}{m}}e^{-\frac{\beta\mathbf{k}''^2}{2m}}G_2(\mathbf{k},\mathbf{k}').G_2(\mathbf{k}',\mathbf{k}'')d^3\mathbf{k}d^3\mathbf{k}'d^3\mathbf{k}'' = \frac{2\beta^2 s}{(2\pi mT)^{3/2}(2\pi)^6}\frac{64\pi^4\sigma^2}{m^2}$$
$$\int \frac{e^{-\frac{\beta\mathbf{k}^2}{2m}}e^{-\frac{\beta\mathbf{k}'^2}{m}}e^{-\frac{\beta\mathbf{k}''^2}{2m}}.d^3\mathbf{k}d^3\mathbf{k}'d^3\mathbf{k}''}{|\mathbf{k}-\mathbf{k}'|.|\mathbf{k}'-\mathbf{k}''|} = \frac{128\beta^2\pi^4\sigma^2 s}{(2\pi mT)^{3/2}(2\pi)^6 m^2}\left(\frac{2m}{\beta}\right)^{7/2}\int \frac{e^{-\mathbf{k}^2}e^{-2\mathbf{k}'^2}e^{-\mathbf{k}''^2}.d^3\mathbf{k}d^3\mathbf{k}'d^3\mathbf{k}''}{|\mathbf{k}-\mathbf{k}'|.|\mathbf{k}'-\mathbf{k}''|} =$$
$$8\sigma^2\pi^{-7/2}s\int \frac{e^{-\mathbf{k}^2}e^{-2\mathbf{k}'^2}e^{-\mathbf{k}''^2}.d^3\mathbf{k}d^3\mathbf{k}'d^3\mathbf{k}''}{|\mathbf{k}-\mathbf{k}'|.|\mathbf{k}'-\mathbf{k}''|} = 8\sigma^2\pi^{-7/2}s\int \frac{e^{-[\mathbf{u}^2+\mathbf{v}^2+4\mathbf{w}^2+2\mathbf{w}(\mathbf{u}+\mathbf{v})]}.d^3\mathbf{u}d^3\mathbf{v}d^3\mathbf{w}}{uv} =$$
$$= 8\sigma^2\pi^{-7/2}s(16\pi^3)\int e^{-(u^2+v^2+4w^2)}uvw^2dudvdw\int_0^\pi e^{-2uwcos\theta}d\theta\int_0^\pi e^{-2vwcos\theta'}d\theta' =$$
$$= \frac{128\sigma^2 s}{\sqrt{\pi}}\int_0^\infty\int_0^\infty\int_0^\infty e^{-(u^2+v^2+4w^2)}senh(2uw)senh(2vw)dudvdw, \quad (5.25)$$

onde foi feita a substituição de variáveis $\mathbf{u} = \mathbf{k} - \mathbf{k}'$, $\mathbf{v} = \mathbf{k}'' - \mathbf{k}'$ e $\mathbf{w} = \mathbf{k}'$.

Logo o quarto coeficiente do virial em três dimensões no limite unitário é dado por:

$$b_4 = \frac{1}{4}.\left[\frac{s}{8} + \frac{11\sigma}{3} + \frac{128\sigma^2 s}{\sqrt{\pi}}\int_0^\infty\int_0^\infty\int_0^\infty e^{-(u^2+v^2+4w^2)}senh(2uw)senh(2vw)dudvdw\right]. \quad (5.26)$$

A integral da última equação pode ser resolvida numericamente. Concluindo, para gases quânticos em 3 dimensões no limite unitário, tem-se:

$$b_1 = 1 \quad (5.27)$$
$$b_2 = \frac{1}{2}.\left[\frac{s\sqrt{2}}{4} + 2\sqrt{2}\sigma\right] \quad (5.28)$$

$$b_3 = \frac{1}{3}.\left[\frac{\sqrt{3}}{9} + 2s\sqrt{3}\sigma\right] \tag{5.29}$$

$$b_4 = \frac{1}{4}.\left[\frac{s}{8} + \frac{11\sigma}{3} + + \frac{128\sigma^2 s}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \int_0^\infty \int_0^\infty e^{-(u^2+v^2+4w^2)} senh(2uw) senh(2vw) dudvdw\right]. \tag{5.30}$$

Logo para férmions na região BCS em 3 dimensões ($s = -2\sigma = -1$) o limite unitário dá:

$$b_1 = 1, \tag{5.31}$$
$$b_2 = \frac{3\sqrt{2}}{8}, \tag{5.32}$$
$$b_3 = -\frac{8\sqrt{3}}{27}, \tag{5.33}$$
$$b_4 = -0.0535. \tag{5.34}$$

Para bósons em 3 dimensões na região BCS ($s = \sigma = 1$) tem-se:

$$b_1 = 1, \tag{5.35}$$
$$b_2 = \frac{9\sqrt{2}}{8}, \tag{5.36}$$
$$b_3 = \frac{19\sqrt{3}}{27}, \tag{5.37}$$
$$b_4 = 2.87. \tag{5.38}$$

Em 3 dimensões na região BEC, o limite unitário para férmions ($s = 2\sigma = -1$) dá:

$$b_1 = 1, \tag{5.39}$$
$$b_2 = -\frac{5\sqrt{2}}{8}, \tag{5.40}$$
$$b_3 = \frac{10\sqrt{3}}{27}, \tag{5.41}$$
$$b_4 = -0.9702. \tag{5.42}$$

Para bósons na região BEC ($s = -\sigma = 1$) em três dimensões no limite unitário tem-se:

$$b_1 = 1, \tag{5.43}$$
$$b_2 = -\frac{7\sqrt{2}}{8}, \tag{5.44}$$
$$b_3 = -\frac{17\sqrt{3}}{27}, \tag{5.45}$$

$$b_4 = 1.034. \tag{5.46}$$

Como esperado, o presente resultado para o segundo coeficiente concorda com o resultado exato obtido para férmions na região BCS em [28]. Ainda na região BCS o resultado obtido para férmions em [29, 30, 31], que envolve até processos de três corpos, apresenta o valor -0.29 para o terceiro coeficiente, estando em melhor concordância com os resultados experimentais [4] que o valor obtido aqui; isto é esperado já que a aproximação de espuma despreza a contribuição dos processos de três corpos, que são importantes para o cálculo deste coeficiente como já foi visto, contudo ainda assim o sinal obtido está correto. O quarto coeficiente não concorda nem mesmo no sinal com os resultados obtidos em [4], o que é perfeitamente natural já que para este coeficiente seria necessário considerar os processos de três e quatro corpos, que não são considerados na aproximação feita aqui.

5.2.2 Resultados além do limite unitário

Além do limite unitário deve-se substituir o kernel da equação (4.38) em (5.7), (5.10), (5.14) e (5.18) com d=3 para obtenção dos coeficientes do virial, onde σ cale 1 para bósons e 1/2 para férmions.

Diferente dos resultados no limite unitário, aqui até mesmo as integrais do segundo e do terceiro coeficiente são difíceis de se calcular analiticamente de modo que elas foram simplificadas e majoradas analiticamente e posteriormente, com o auxílio do software Mathematica, resolvidas numericamente; os coeficientes foram plotados em função da constante de acoplamento para diferentes temperaturas.

Seguindo os mesmos passos da subseção anterior, tem-se para o segundo termo de (5.10):

$$
\begin{aligned}
&-\frac{\beta}{(2\pi)^3(2\pi mT)^{3/2}}\int d^3\mathbf{k}d^3\mathbf{k}'e^{-\frac{\beta\mathbf{k}^2}{2m}}e^{-\frac{\beta\mathbf{k}'^2}{2m}}.G_2(\mathbf{k},\mathbf{k}')=\\
&\frac{\beta\sigma}{(2\pi)^3(2\pi mT)^{3/2}}\frac{16\pi}{m}.\int\frac{d^3\mathbf{k}d^3\mathbf{k}'e^{-\frac{\beta\mathbf{k}^2}{2m}}e^{-\frac{\beta\mathbf{k}'^2}{2m}}arctg\left(\frac{mg_R.|\mathbf{k}-\mathbf{k}'|}{8\pi}\right)}{|\mathbf{k}-\mathbf{k}'|}=\\
&\frac{16\pi\beta\sigma}{m(2\pi)^3(2\pi mT)^{3/2}}\left(\frac{8\pi}{mg_R}\right)^5\int\frac{d^3\mathbf{k}d^3\mathbf{k}'e^{-\frac{\beta\mathbf{k}^2}{2m}\frac{64\pi^2}{m^2g_R^2}}e^{-\frac{\beta\mathbf{k}'^2}{2m}\frac{64\pi^2}{m^2g_R^2}}arctg\left(|\mathbf{k}-\mathbf{k}'|\right)}{|\mathbf{k}-\mathbf{k}'|}=\\
&\frac{16\pi\beta\sigma}{m(2\pi)^3(2\pi mT)^{3/2}}\left(\frac{8\pi}{mg_R}\right)^5\int\frac{d^3\mathbf{k}d^3\mathbf{k}'e^{-\frac{32\pi^2\beta\left(\mathbf{k}^2+\mathbf{k}'^2\right)}{m^3g_R^2}}arctg\left(|\mathbf{k}-\mathbf{k}'|\right)}{|\mathbf{k}-\mathbf{k}'|}=\\
&\frac{2\pi\beta\sigma}{m(2\pi)^3(2\pi mT)^{3/2}}\left(\frac{8\pi}{mg_R}\right)^5\int\frac{d^3ud^3ve^{-\frac{16\pi^2\beta\left(u^2+v^2\right)}{m^3g_R^2}}arctg(v)}{v}=\\
&\frac{32\pi^3\beta\sigma}{m(2\pi)^3(2\pi mT)^{3/2}}\left(\frac{8\pi}{mg_R}\right)^5\int_0^\infty u^2e^{-\frac{16\pi^2\beta u^2}{m^3g_R^2}}du\int_0^\infty ve^{-\frac{16\pi^2\beta v^2}{m^3g_R^2}}arctg(v)dv=\\
&\frac{32\pi^3\beta\sigma}{m(2\pi)^3(2\pi mT)^{3/2}}\left(\frac{8\pi}{mg_R}\right)^5\left(\frac{m^3g_R^2}{16\pi^2\beta}\right)^{3/2}\int_0^\infty u^2e^{-u^2}du\int_0^\infty ve^{-\frac{16\pi^2\beta v^2}{m^3g_R^2}}arctg(v)dv=\\
&\frac{32\pi^3\beta\sigma}{m(2\pi)^3(2\pi mT)^{3/2}}\left(\frac{8\pi}{mg_R}\right)^5\left(\frac{m^3g_R^2}{16\pi^2\beta}\right)^{3/2}\frac{\sqrt{\pi}}{4}\int_0^\infty ve^{-\frac{16\pi^2\beta v^2}{m^3g_R^2}}arctg(v)dv=\\
&\frac{128\sqrt{2}\pi\beta\sigma}{m^3g_R^2}\int_0^\infty ve^{-\frac{16\pi^2\beta v^2}{m^3g_R^2}}arctg(v)dv \qquad (5.47)
\end{aligned}
$$

onde foi usada a substituição de variáveis $u=\mathbf{k}+\mathbf{k}$ e $v=\mathbf{k}-\mathbf{k}$. Substituindo d=3 no primeiro termo acha-se:

$$
b_2=\frac{1}{2}\left[\frac{s\sqrt{2}}{4}-\frac{128\sqrt{2}\pi\beta\sigma}{m^3g_R^2}\int_0^\infty ve^{-\frac{16\pi^2\beta v^2}{m^3g_R^2}}arctg(v)dv\right]. \qquad (5.48)
$$

Majorando a integral do segundo termo acha-se:

$$
\begin{aligned}
\left|\int_0^\infty ve^{-\frac{16\pi^2\beta v^2}{m^3g_R^2}}arctg(v)dv\right|\leqslant\int_0^\infty|v|e^{-\frac{16\pi^2\beta v^2}{m^3g_R^2}}|arctg(v)|dv\leqslant\frac{\pi}{2}\int_0^\infty ve^{-\frac{16\pi^2\beta v^2}{m^3g_R^2}}dv=\\
-\frac{\pi}{2}\left[\frac{m^3g_R^2}{32\pi^2\beta}e^{-\frac{16\pi^2\beta v^2}{m^3g_R^2}}\right]_0^\infty=\frac{m^3g_R^2}{64\pi\beta}, \qquad (5.49)
\end{aligned}
$$

logo o segundo coeficiente do virial obedece as seguintes restrições:

$$
\frac{1}{2}\left[\frac{s\sqrt{2}}{4}-2\sqrt{2}\sigma\right]\leqslant b_2\leqslant\frac{1}{2}\left[\frac{s\sqrt{2}}{4}+2\sqrt{2}\sigma\right]. \qquad (5.50)
$$

Para férmions ($s = -2\sigma = -1$) tem-se:

$$-\frac{5\sqrt{2}}{8} \leqslant b_2 \leqslant \frac{3\sqrt{2}}{8}, \tag{5.51}$$

e para bósons ($s = \sigma = 1$):

$$-\frac{7\sqrt{2}}{8} \leqslant b_2 \leqslant \frac{9\sqrt{2}}{8}. \tag{5.52}$$

Note que as desigualdades obtidas acima englobam o resultado do limite unitário, como era de se se esperar, pois o limite unitário é um caso particular do geral. Vale ressaltar também que os valores do limite unitário correspondem aos extremos do intervalo permitido para o segundo coeficiente em cada caso, sendo o limite do lado BCS o extremo superior e o do lado BEC o inferior.

Calculando a integral do segundo termo de (5.14) com d=3 tem-se:

$$\begin{aligned}
&-\frac{3\beta s}{(2\pi mT)^{3/2}(2\pi)^3}\int d^3\mathbf{k}d^3\mathbf{k}'e^{-\frac{\beta\mathbf{k}^2}{m}}e^{-\frac{\beta\mathbf{k}'^2}{2m}}.G_2(\mathbf{k},\mathbf{k}') = \\
&\frac{3\beta\sigma s}{(2\pi mT)^{3/2}(2\pi)^3}\left(\frac{16\pi}{m}\right)\int\frac{d^3\mathbf{k}d^3\mathbf{k}'e^{-\frac{\beta\mathbf{k}^2}{m}}e^{-\frac{\beta\mathbf{k}'^2}{2m}}.arctg\left(\frac{mg_R|\mathbf{k}-\mathbf{k}'|}{8\pi}\right)}{|\mathbf{k}-\mathbf{k}'|} = \\
&\frac{3\beta\sigma s}{(2\pi mT)^{3/2}(2\pi)^3}\left(\frac{16\pi}{m}\right)\left(\frac{8\pi}{mg_R}\right)^5\int\frac{d^3\mathbf{k}d^3\mathbf{k}'e^{-\frac{\beta(2\mathbf{k}^2+\mathbf{k}'^2)}{2m}\frac{64\pi^2}{m^2g_R{}^2}}.arctg(|\mathbf{k}-\mathbf{k}'|)}{|\mathbf{k}-\mathbf{k}'|} = \\
&\frac{3\beta\sigma s}{(2\pi mT)^{3/2}(2\pi)^3}\left(\frac{16\pi}{m}\right)\left(\frac{8\pi}{mg_R}\right)^5\int\frac{d^3\mathbf{k}d^3\mathbf{k}'e^{-\frac{32\pi^2\beta(2\mathbf{k}^2+\mathbf{k}'^2)}{m^3g_R{}^2}}.arctg(|\mathbf{k}-\mathbf{k}'|)}{|\mathbf{k}-\mathbf{k}'|} = \\
&\frac{3\beta\sigma s}{27(2\pi mT)^{3/2}(2\pi)^3}\left(\frac{16\pi}{m}\right)\left(\frac{8\pi}{mg_R}\right)^5\int\frac{d^3ud^3ve^{-\left(\frac{32\pi^2\beta}{m^3g_R{}^2}\right)\left(\frac{u^2+2v^2}{3}\right)}.arctg(v)}{v} = \\
&\frac{3.16\pi^2\beta\sigma s}{27(2\pi mT)^{3/2}8\pi^3}\left(\frac{16\pi}{m}\right)\left(\frac{8\pi}{mg_R}\right)^5\int_0^\infty u^2e^{-\frac{32\pi^2\beta u^2}{3m^3g_R{}^2}}du\int_0^\infty ve^{-\frac{64\pi^2\beta v^2}{3m^3g_R{}^2}}arctg(v)dv = \\
&\frac{32\beta\sigma s}{9m(2\pi mT)^{3/2}}\left(\frac{8\pi}{mg_R}\right)^5\left(\frac{3m^3g_R{}^2}{32\pi^2\beta}\right)^{3/2}\int_0^\infty x^2e^{-x^2}dx\int_0^\infty ve^{-\frac{64\pi^2\beta v^2}{3m^3g_R{}^2}}arctg(v)dv = \\
&\frac{32\beta\sigma s}{9m(2\pi mT)^{3/2}}\left(\frac{8\pi}{mg_R}\right)^5\left(\frac{3m^3g_R{}^2}{32\pi^2\beta}\right)^{3/2}\frac{\sqrt{\pi}}{4}\int_0^\infty ve^{-\frac{64\pi^2\beta v^2}{3m^3g_R{}^2}}arctg(v)dv = \\
&\frac{512\sqrt{3}\beta\pi\sigma s}{3m^3g_R{}^2}\int_0^\infty ve^{-\frac{64\pi^2\beta v^2}{3m^3g_R{}^2}}arctg(v)dv.
\end{aligned} \tag{5.53}$$

Substituindo o resultado em (5.14) e calculando o primeiro termo:

$$b_3 = \frac{1}{3}\left[\frac{\sqrt{3}}{9} - \frac{512\sqrt{3}\beta\pi\sigma s}{3m^3 {g_R}^2}\int_0^\infty ve^{-\frac{64\pi^2\beta v^2}{3m^3 {g_R}^2}} arctg(v)dv\right]. \tag{5.54}$$

Majorando a integral da equação anterior obtém-se:

$$\begin{aligned} &\frac{512\sqrt{3}\beta\pi\sigma}{3m^3 {g_R}^2}\left|\int_0^\infty ve^{-\frac{64\pi^2\beta v^2}{3m^3 {g_R}^2}} arctg(v)dv\right| \leqslant \frac{512\sqrt{3}\beta\pi\sigma}{3m^3 {g_R}^2}\int_0^\infty |ve^{-\frac{64\pi^2\beta v^2}{3m^3 {g_R}^2}} arctg(v)|dv \leqslant \\ &\frac{512\sqrt{3}\beta\pi\sigma}{3m^3 {g_R}^2}\int_0^\infty ve^{-\frac{64\pi^2\beta v^2}{3m^3 {g_R}^2}} |arctg(v)|dv \leqslant \left(\frac{512\sqrt{3}\beta\pi\sigma}{3m^3 {g_R}^2}\right).\left(\frac{\pi}{2}\right)\int_0^\infty ve^{-\frac{64\pi^2\beta v^2}{3m^3 {g_R}^2}} dv = \\ &= \frac{256\sqrt{3}\beta\pi^2\sigma}{3m^3 {g_R}^2}\left[-\frac{3m^3 {g_R}^2}{128\pi^2\beta}e^{-\frac{64\pi^2\beta v^2}{3m^3 {g_R}^2}}\right]_0^\infty = \left[\frac{256\sqrt{3}\beta\pi^2\sigma}{3m^3 {g_R}^2}\right].\left[\frac{3m^3 {g_R}^2}{128\pi^2\beta}\right] = 2\sigma\sqrt{3} \end{aligned} \tag{5.55}$$

A conclusão é que b_3 é limitado:

$$\frac{1}{3}\left[\frac{\sqrt{3}}{9} - 2\sqrt{3}\sigma\right] \leqslant b_3 \leqslant \frac{1}{3}\left[\frac{\sqrt{3}}{9} + 2\sqrt{3}\sigma\right]. \tag{5.56}$$

Sendo assim para férmions ($s = -2\sigma = -1$) o terceiro coeficiente do virial obedece a seguinte limitação:

$$-\frac{8\sqrt{3}}{27} \leqslant b_3 \leqslant \frac{10\sqrt{3}}{27}, \tag{5.57}$$

e para bósons ($s = \sigma = 1$):

$$-\frac{17\sqrt{3}}{27} \leqslant b_3 \leqslant \frac{19\sqrt{3}}{27}. \tag{5.58}$$

Os valores do limite unitário também são consistentes com as desigualdades obtidas; no entanto, diferente do segundo coeficiente, o limite unitário do lado BCS corresponde ao limite inferior para férmions e ao limite superior para bósons na faixa de valores do terceiro coeficiente do virial. O limite unitário do lado BEC corresponde aos outros extremos do terceiro coeficiente.

Calculando o segundo termo de (5.18) tem-se:

$$
\begin{aligned}
&\frac{4\beta}{(2\pi mT)^{3/2}(2\pi)^3}\int e^{-\frac{3\beta\mathbf{k}^2}{2m}}e^{-\frac{\beta\mathbf{k}'^2}{2m}}G_2(\mathbf{k},\mathbf{k}')d^3\mathbf{k}d^3\mathbf{k}' = \\
&= -\frac{64\beta\pi\sigma}{m(2\pi mT)^{3/2}(2\pi)^3}\int \frac{e^{-\frac{3\beta\mathbf{k}^2}{2m}}e^{-\frac{\beta\mathbf{k}'^2}{2m}}arctg\left(\frac{mg_R.|\mathbf{k}-\mathbf{k}'|}{8\pi}\right)}{|\mathbf{k}-\mathbf{k}'|}d^3\mathbf{k}d^3\mathbf{k}' = \\
&= -\frac{64\beta\pi\sigma}{m(2\pi mT)^{3/2}(2\pi)^3}\left(\frac{8\pi}{mg_R}\right)^5\int \frac{e^{-\frac{32\pi^2\beta\left(3\mathbf{k}^2+\mathbf{k}'^2\right)}{m^3 g_R{}^2}}arctg\left(|\mathbf{k}-\mathbf{k}'|\right)}{|\mathbf{k}-\mathbf{k}'|}d^3\mathbf{k}d^3\mathbf{k}' = \\
&= -\frac{\beta\pi\sigma}{m(2\pi mT)^{3/2}(2\pi)^3}\left(\frac{8\pi}{mg_R}\right)^5\int \frac{e^{-\frac{8\pi^2\beta\left(u^2+3v^2\right)}{m^3 g_R{}^2}}arctg\left(v|\right)}{|v|}d^3u d^3v = \\
&= -\frac{16\beta\pi^3\sigma}{m(2\pi mT)^{3/2}(2\pi)^3}\left(\frac{8\pi}{mg_R}\right)^5\int_0^\infty u^2.e^{-\frac{8\pi^2\beta u^2}{m^3 g_R{}^2}}du\int_0^\infty ve^{-\frac{24\pi^2\beta v^2}{m^3 g_R{}^2}}arctg(v)dv = \\
&-\frac{16\beta\pi^3\sigma}{m(2\pi mT)^{3/2}(2\pi)^3}\left(\frac{8\pi}{mg_R}\right)^5\left(\frac{m^3 g_R^2}{8\pi^2\beta}\right)^{\frac{3}{2}}\frac{\sqrt{\pi}}{4}\int_0^\infty ve^{-\frac{24\pi^2\beta v^2}{m^3 g_R{}^2}}arctg(v)dv = \\
&= -\frac{256\beta\pi\sigma}{m^3 g_R{}^2}\int_0^\infty ve^{-\frac{24\pi^2\beta v^2}{m^3 g_R{}^2}}arctg(v)dv, \qquad (5.59)
\end{aligned}
$$

onde se usou a substituição $\mathbf{u} = 3\mathbf{k} + \mathbf{k}'$ e $\mathbf{v} = \mathbf{k} - \mathbf{k}'$.

Para o terceiro termo acha-se:

$$
\begin{aligned}
&\frac{2\beta}{(2\pi)^3(2\pi mT)^{3/2}}\int e^{-\frac{\beta\mathbf{k}^2}{m}}e^{-\frac{\beta\mathbf{k}'^2}{m}}G_2(\mathbf{k},\mathbf{k}')d^3\mathbf{k}d^3\mathbf{k}' = \\
&= -\frac{32\beta\pi\sigma}{m(2\pi)^3(2\pi mT)^{3/2}}\int \frac{e^{-\frac{\beta\mathbf{k}^2}{m}}e^{-\frac{\beta\mathbf{k}'^2}{m}}arctg\left(\frac{mg_R|\mathbf{k}-\mathbf{k}'|}{8\pi}\right)}{|\mathbf{k}-\mathbf{k}'|}d^3\mathbf{k}d^3\mathbf{k}' = \\
&= -\frac{32\beta\pi\sigma}{m(2\pi)^3(2\pi mT)^{3/2}}\left(\frac{8\pi}{mg_R}\right)^5\int \frac{e^{-\frac{64\pi^2\beta(\mathbf{k}^2+\mathbf{k}'^2)}{m^3 g_R{}^2}}arctg\left(|\mathbf{k}-\mathbf{k}'|\right)}{|\mathbf{k}-\mathbf{k}'|}d^3\mathbf{k}d^3\mathbf{k}' = \\
&= -\frac{4\beta\pi\sigma}{m(2\pi)^3(2\pi mT)^{3/2}}\left(\frac{8\pi}{mg_R}\right)^5\int \frac{e^{-\frac{32\pi^2\beta(u^2+v^2)}{m^3 g_R{}^2}}arctg\left(|v|\right)}{|v|}d^3u d^3v = \\
&= -\frac{64\beta\pi^3\sigma}{m(2\pi)^3(2\pi mT)^{3/2}}\left(\frac{8\pi}{mg_R}\right)^5\int_0^\infty u^2 e^{-\frac{32\pi^2\beta u^2}{m^3 g_R{}^2}}du\int_0^\infty ve^{-\frac{32\pi^2\beta v^2}{m^3 g_R{}^2}}arctg(v)dv = \\
&-\frac{64\beta\pi^3\sigma}{m(2\pi)^3(2\pi mT)^{3/2}}\left(\frac{8\pi}{mg_R}\right)^5\left(\frac{m^3 g_R^2}{32\pi^2\beta}\right)^{\frac{3}{2}}\frac{\sqrt{\pi}}{4}\int_0^\infty ve^{-\frac{32\pi^2\beta v^2}{m^3 g_R{}^2}}arctg(v)dv = \\
&= -\frac{128\beta\pi\sigma}{m^3 g_R{}^2}\int_0^\infty ve^{-\frac{32\pi^2\beta v^2}{m^3 g_R{}^2}}arctg(v)dv, \qquad (5.60)
\end{aligned}
$$

onde se usou a substituição $\mathbf{u} = \mathbf{k} + \mathbf{k}'$ e $\mathbf{v} = \mathbf{k} - \mathbf{k}'$.

Finalmente para o último termo de (5.18) obtém-se:

$$\frac{2\beta^2 s}{(2\pi mT)^{3/2}(2\pi)^6}\int e^{-\frac{\beta\mathbf{k}^2}{2m}}e^{-\frac{\beta\mathbf{k}'^2}{m}}e^{-\frac{\beta\mathbf{k}''^2}{2m}}G_2(\mathbf{k},\mathbf{k}')G_2(\mathbf{k}',\mathbf{k}'')d^3\mathbf{k}d^3\mathbf{k}'d^3\mathbf{k}'' =$$
$$= \frac{512\beta^2\pi^2\sigma^2 s}{m^2(2\pi mT)^{3/2}(2\pi)^6}\int \frac{e^{-\frac{\beta\mathbf{k}^2}{2m}}e^{-\frac{\beta\mathbf{k}'^2}{m}}e^{-\frac{\beta\mathbf{k}''^2}{2m}}arctg\left(\frac{mg_R|\mathbf{k}-\mathbf{k}'|}{8\pi}\right)arctg\left(\frac{mg_R|\mathbf{k}'-\mathbf{k}''|}{8\pi}\right)d^3\mathbf{k}d^3\mathbf{k}'d^3\mathbf{k}''}{|\mathbf{k}-\mathbf{k}'||\mathbf{k}'-\mathbf{k}''|} =$$
$$= \frac{512\beta^2\pi^2\sigma^2 s}{m^2(2\pi mT)^{3/2}(2\pi)^6}\left(\frac{2m}{\beta}\right)^{\frac{7}{2}}\int \frac{e^{-\mathbf{k}^2}e^{-2\mathbf{k}'^2}e^{-\mathbf{k}''^2}arctg\left(\frac{mg_R|\mathbf{k}-\mathbf{k}'|}{8\pi}\sqrt{\frac{2m}{\beta}}\right)arctg\left(\frac{mg_R|\mathbf{k}'-\mathbf{k}''|}{8\pi}\sqrt{\frac{2m}{\beta}}\right)}{|\mathbf{k}-\mathbf{k}'||\mathbf{k}'-\mathbf{k}''|}$$
$$d^3\mathbf{k}d^3\mathbf{k}'d^3\mathbf{k}'' = \frac{512\beta^2\pi^2\sigma^2 s}{m^2(2\pi mT)^{3/2}(2\pi)^6}\left(\frac{2m}{\beta}\right)^{\frac{7}{2}}\int e^{-[\mathbf{u}^2+\mathbf{v}^2+4\mathbf{w}^2+2\mathbf{w}(\mathbf{u}+\mathbf{v})]}arctg\left(\frac{mg_R}{8\pi}\sqrt{\frac{2m}{\beta}}u\right)$$
$$arctg\left(\frac{mg_R}{8\pi}\sqrt{\frac{2m}{\beta}}v\right)d^3ud^3vd^3w = \frac{32\sigma^2 s\sqrt{\pi}}{\pi^6}(2\pi)^3\int_0^\infty ue^{-u^2}du\int_0^\infty ve^{-v^2}dv$$
$$\int_0^\infty w^2e^{-4w^2}arctg\left(\frac{mg_R}{8\pi}\sqrt{\frac{2m}{\beta}}u\right)arctg\left(\frac{mg_R}{8\pi}\sqrt{\frac{2m}{\beta}}v\right)dw\int_0^\pi sen\theta_w d\theta_w\int_0^\pi e^{-2uwcos\theta_u}sen\theta_u d\theta_u$$
$$\int_0^\pi e^{-2vwcos\theta_v}sen\theta_v d\theta_v = \frac{512\sigma^2 s}{\pi^2\sqrt{\pi}}\int_0^\infty\int_0^\infty\int_0^\infty e^{-(u^2+v^2+4w^2)}arctg\left(\frac{mg_R}{8\pi}\sqrt{\frac{2m}{\beta}}u\right)$$
$$arctg\left(\frac{mg_R}{8\pi}\sqrt{\frac{2m}{\beta}}v\right)senh(2uw)senh(2vw)dudvdw. \quad (5.61)$$

Logo o quarto coeficiente do virial em três dimensões além do limite unitário é dado por:

$$b_4 = \frac{s}{32} - \frac{64\beta\pi\sigma}{m^3 g_R{}^2}\int_0^\infty ve^{-\frac{24\pi^2\beta v^2}{m^3 g_R{}^2}}arctg(v)dv - \frac{32\beta\pi\sigma}{m^3 g_R{}^2}\int_0^\infty ve^{-\frac{32\pi^2\beta v^2}{m^3 g_R{}^2}}arctg(v)dv +$$
$$+\frac{128\sigma^2 s}{\pi^2\sqrt{\pi}}\int_0^\infty\int_0^\infty\int_0^\infty e^{-(u^2+v^2+4w^2)}arctg\left(\frac{mg_R}{8\pi}\sqrt{\frac{2m}{\beta}}u\right)arctg\left(\frac{mg_R}{8\pi}\sqrt{\frac{2m}{\beta}}v\right)$$
$$senh(2uw)senh(2vw)dudvdw. \quad (5.62)$$

Como já foi dito anteriormente: é possível definir a variável de escala $\alpha = \frac{\lambda}{a}$, onde $\lambda = \sqrt{\frac{2\pi}{mT}}$ é o comprimento de onda térmico e $a = \frac{mg_R}{4\pi}$ é o comprimento de espalhamento. Fazendo isto é possível ver que $\alpha^2 = \frac{32\pi^3\beta}{m^3 g_R^2}$. Escrevendo então (5.48), (5.54) e (5.62) em termos de α obtém-se:

$$b_2 = \frac{s\sqrt{2}}{8} - \frac{2\sqrt{2}\sigma}{\pi^2}\int_0^\infty ve^{-\frac{v^2}{2\pi}}arctg\left(\frac{v}{\alpha}\right)dv, \quad (5.63)$$

$$b_3 = \frac{\sqrt{3}}{27} - \frac{16\sqrt{3}\sigma s}{9\pi^2}\int_0^\infty ve^{-\frac{2v^2}{3\pi}}arctg\left(\frac{v}{\alpha}\right)dv \quad (5.64)$$

e

$$b_4 = \frac{s}{32} - \frac{2\sigma}{\pi}\int_0^\infty ve^{-\frac{3v^2}{4\pi}} arctg\left(\frac{v\sqrt{\pi}}{\alpha}\right)dv - \frac{\sigma}{\pi}\int_0^\infty ve^{-v^2} arctg\left(\frac{v\sqrt{\pi}}{\alpha}\right)dv +$$
$$+\frac{128\sigma^2 s}{\pi^{\frac{5}{2}}}\int_0^\infty\int_0^\infty\int_0^\infty e^{-(u^2+v^2+4w^2)} senh(uw)senh(vw) arctg\left(\frac{u\sqrt{\pi}}{\alpha}\right) arctg\left(\frac{v\sqrt{\pi}}{\alpha}\right) uvdudvdw. \tag{5.65}$$

É fácil ver que a condição do limite unitário ($a \to \pm\infty$) pode ser escrita em termos de α como sendo $\alpha \to 0^{\pm}$. Deste modo, majorando as integrais que envolvem a arcotangente, como feito anteriormente, recuperam-se as desiguadades obtidas antes e fazendo $\alpha = 0^{\pm}$ recuperam-se as expressões do limite unitário (5.28), (5.29) e (5.30).

É interessante notar também que embora os termos de (5.65) possam ser majorados, b_4 não é limitado pelos valores do limite unitário, embora os valores do limite unitário estejam englobados como caso particular ($\alpha \to 0^{\pm}$) de (5.65) como esperado. De fato não há razão para pensar que esta regra exista em geral. Embora aqui o terceiro coeficiente seja limitado pelos valores do caso unitário, se fosse computado aqui o valor exato de b_3 com a contribuição do kernel de três corpos, o resultado poderia não estar limitado pelos valores do caso unitário. Contudo b_2 é exato e podemos dizer sim, com certeza, que de fato o espectro de valores de segundo coeficiente do virial é limtado pelos valores do limite unitário para este coeficiente.

Numericamente é possível resolver as integrais que aparecem nas expressões dos coeficientes do virial e plotar seus gráficos em função da razão $\alpha = \frac{\lambda}{a}$. Nas figuras (5.1), (5.2) e (5.3) aparecem respectivamente os gráficos do segundo, do terceiro e do quarto coeficiente do virial para bósons $(s = 1)$ em função de α e nas figuras (5.4), (5.5) e (5.6) aparece respectivamente a mesma coisa para férmions.

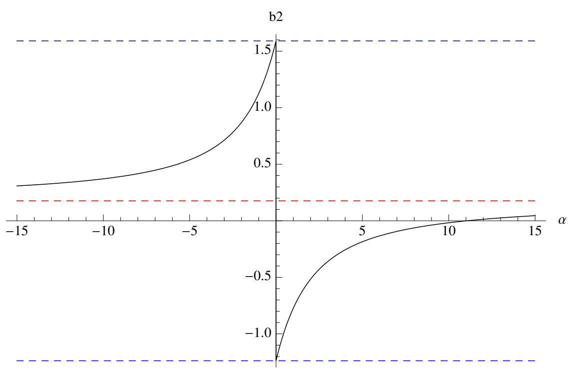

Figura 5.1: b_2 para bósons $(s = 1)$ contra a razão $\alpha = \frac{\lambda}{a}$. As linhas azuis representam os valores do limite unitário e a vermelha o caso livre.

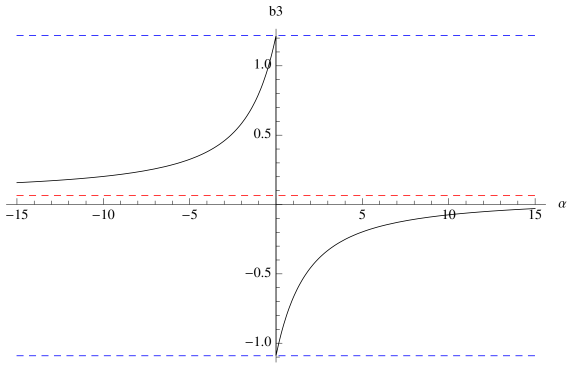

Figura 5.2: b_3 para bósons $(s = 1)$ contra a razão $\alpha = \frac{\lambda}{a}$. As linhas azuis representam os valores do limite unitário e a vermelha o caso livre.

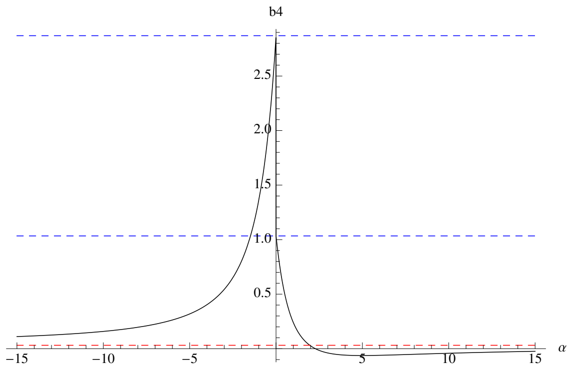

Figura 5.3: b_4 para bósons $(s = 1)$ contra a razão $\alpha = \frac{\lambda}{a}$. As linhas azuis representam os valores do limite unitário e a vermelha o caso livre.

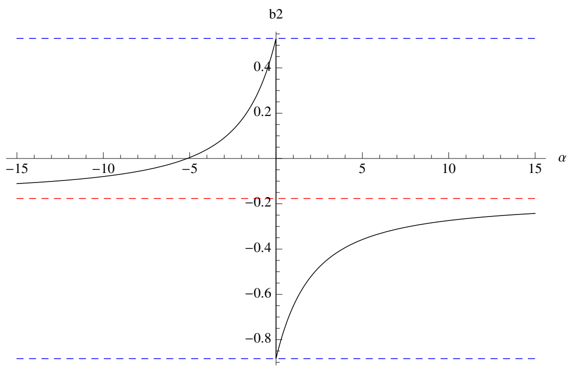

Figura 5.4: b_2 para férmions $(s = -1)$ contra a razão $\alpha = \frac{\lambda}{a}$. As linhas azuis representam os valores do limite unitário e a vermelha o caso livre.

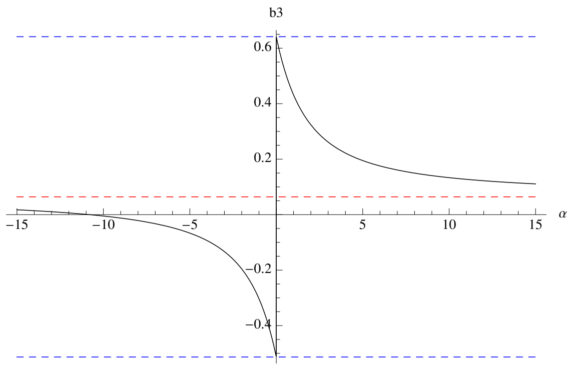

Figura 5.5: b_3 para férmions $(s = -1)$ contra a razão $\alpha = \frac{\lambda}{a}$. As linhas azuis representam os valores do limite unitário e a vermelha o caso livre.

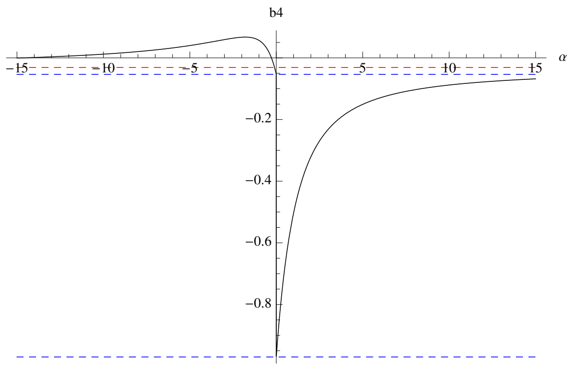

Figura 5.6: b_4 para férmions $(s = -1)$ contra a razão $\alpha = \frac{\lambda}{a}$. As linhas azuis representam os valores do limite unitário e a vermelha o caso livre.

Como era de se esperar, as figuras mostram que quando $\alpha \to 0^{\pm}$ os valores do limite unitário, representados pelas linhas tracejadas azuis, são recuperados e as desigualdades deduzidas anteriormente também são respeitadas; além disso quando $g \to 0^{\pm} \Rightarrow \alpha \to \pm\infty$ os valores dos coeficientes do gás ideal (basta fazer $G_2(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = 0$, ou seja o primeiro termo de (5.10), (5.14) e (5.18)) são recuperados, estes valores são representados pelas linhas tracejadas vermelhas e serão obtidos exatamente mais adiante.

5.3 Expansão do virial em duas dimensões no limite unitário

Como foi mencionado no capítulo 4, o kernel da equação (4.50) não corresponde a um ponto fixo do Grupo de Renormalização, contudo representa uma forma artificial de construir uma teoria invariante de escala e na pior das hipóteses pode ser visto como o kernel da teoria visto sob um determinado limite de acoplamento forte.

Deste modo define-se uma espécie inovadora de limite unitário em duas dimensões, no entanto; apesar do nome igual, é importante ter em mente que o limite unitário neste caso não está tão rigorosamente definido como no caso tridimensional.

Tendo em mente estas considerações dizer-se-á agora: o kernel de dois corpos no limite unitário em duas dimensões é dado por (4.50), logo com o auxílio das equações (5.7), (5.10), (5.14) e (5.18), achar-se-ão os coeficientes do virial em duas dimensões no limite unitário.

Calculando o segundo coeficiente acha-se:

$$2b_2 = \frac{s}{2} + \frac{\beta}{(2\pi)^2(2\pi mT)}\frac{4\pi\sigma}{m}\int d^2\mathbf{k}d^2\mathbf{k}' e^{-\frac{\beta\mathbf{k}^2}{2m}} e^{-\frac{\beta\mathbf{k}'^2}{2m}} = \frac{s}{2} + \frac{\beta\sigma}{2\pi^2m^2T}\left(\frac{2m}{\beta}\right)^2 \int d^2\mathbf{k}d^2\mathbf{k}' e^{-\mathbf{k}^2} e^{-\mathbf{k}'^2} =$$
$$= \frac{s}{2} + \frac{\beta\sigma}{2\pi^2m^2T}\left(\frac{2m}{\beta}\right)^2 (2\pi)^2 \left[\int_0^\infty k e^{-\mathbf{k}^2} dk\right]^2 = \frac{s}{2} + \frac{\beta\sigma}{2\pi^2m^2T}\left(\frac{2m}{\beta}\right)^2 (2\pi)^2 \left[\frac{1}{4}\right] = \frac{s}{2} + 2\sigma, \tag{5.66}$$

logo

$$b_2 = \frac{s}{4} + \sigma. \tag{5.67}$$

Procedendo-se analogamente para o terceiro coeficiente:

$$3b_3 = \frac{1}{3} + \frac{3\beta s}{(2\pi mT)(2\pi)^2}\frac{4\pi\sigma}{m}\int d^2\mathbf{k}d^2\mathbf{k}'e^{-\frac{\beta\mathbf{k}^2}{m}}e^{-\frac{\beta\mathbf{k}'^2}{2m}} = \frac{1}{3} + \frac{3\beta s}{(2\pi mT)(2\pi)^2}\frac{4\pi\sigma}{m}\left(\frac{2m}{\beta}\right)^2\int d^2\mathbf{k}e^{-2\mathbf{k}^2}$$
$$\int d^2\mathbf{k}'e^{\mathbf{k}'^2} = \frac{1}{3} + \frac{3\beta s}{(2\pi mT)(2\pi)^2}\frac{4\pi\sigma}{m}\left(\frac{2m}{\beta}\right)^2(2\pi)^2\int_0^\infty k.e^{-2k^2}dk\int_0^\infty k'.e^{-2k'^2}dk' =$$
$$= \frac{1}{3} + \frac{3\beta s}{(2\pi mT)}\frac{4\pi\sigma}{m}\left(\frac{2m}{\beta}\right)^2\left(\frac{1}{4}\right)\left(\frac{1}{2}\right) = \frac{1}{3} + 3\sigma s \Rightarrow 3b_3 = \frac{1}{3} + 3\sigma s, \quad (5.68)$$

obtém-se:

$$b_3 = \frac{1}{9} + s.\sigma. \quad (5.69)$$

Finalmente pode-se calcular o quarto coeficiente, que agora pode ser achado analiticamente devido a simplicidade do kernel:

$$4b_4 = \frac{s}{4} + \frac{4\beta}{(2\pi mT)(2\pi)^2}\frac{4\pi\sigma}{m}\int e^{-\frac{3\beta\mathbf{k}^2}{2m}}e^{-\frac{\beta\mathbf{k}'^2}{2m}}d^2\mathbf{k}d^2\mathbf{k}' + \frac{2\beta}{(2\pi)^2(2\pi mT)}\frac{4\pi\sigma}{m}\int e^{-\frac{\beta\mathbf{k}^2}{m}}e^{-\frac{\beta\mathbf{k}'^2}{m}}d^2\mathbf{k}d^2\mathbf{k}'$$
$$+\frac{2\beta^2 s}{(2\pi mT)(2\pi)^4}\left(\frac{4\pi\sigma}{m}\right)^2\int e^{-\frac{\beta\mathbf{k}^2}{2m}}e^{-\frac{\beta\mathbf{k}'^2}{m}}e^{-\frac{\beta\mathbf{k}''^2}{2m}}d^2\mathbf{k}d^2\mathbf{k}'d^2\mathbf{k}'' = \frac{s}{4} + \frac{4\beta}{(2\pi mT)}\frac{4\pi\sigma}{m}\left(\frac{2m}{3\beta}\right)\left(\frac{2m}{\beta}\right)$$
$$\int_0^\infty k.e^{-k^2}dk\int_0^\infty k'.e^{-k'^2}dk' + \frac{2\beta}{(2\pi mT)}\frac{4\pi\sigma}{m}\left(\frac{m}{\beta}\right)^2\int_0^\infty k.e^{-k^2}dk\int_0^\infty k'.e^{-k'^2}dk' +$$
$$+\frac{2\beta^2 s}{(2\pi mT)(2\pi)}\left(\frac{4\pi\sigma}{m}\right)^2\left(\frac{2m}{\beta}\right)^2\left(\frac{m}{\beta}\right)\int_0^\infty k.e^{-k^2}dk\int_0^\infty k.e^{-k'^2}dk'\int_0^\infty k''.e^{-k^2}dk'' =$$
$$= \frac{s}{4} + \frac{4\beta}{(2\pi mT)}\frac{4\pi\sigma}{m}\left(\frac{2m}{3\beta}\right)\left(\frac{2m}{\beta}\right)\left(\frac{1}{2}\right)^2 + \frac{2\beta}{(2\pi mT)}\frac{4\pi\sigma}{m}\left(\frac{m}{\beta}\right)^2\left(\frac{1}{2}\right)^2 +$$
$$+\frac{2\beta^2 s}{(2\pi mT)(2\pi)}\left(\frac{4\pi\sigma}{m}\right)^2\left(\frac{2m}{\beta}\right)^2\left(\frac{m}{\beta}\right)\left(\frac{1}{2}\right)^3 = \frac{s}{4} + \frac{8\sigma}{3} + \sigma + 4\sigma^2 s, \quad (5.70)$$

logo b_4 é dado por:

$$b_4 = \frac{s}{16} + \frac{2\sigma}{3} + \frac{\sigma}{4} + \sigma^2 s = \frac{(16\sigma^2+1)s}{16} + \frac{11\sigma}{12}. \quad (5.71)$$

5.4 Expansão do virial em uma dimensão no limite unitário

Assim como no caso bidimensional, o limite unitário também é definido artificialmente em uma dimensão e não corresponde a um ponto fixo do Grupo de Renormalização; contudo pensando num limite especial de acoplamento forte dizer-se-á que, no limite unitário unidimensional, o kernel de dois corpos da teoria é dado por (4.51).

Substituindo novamente o kernel correspondente nas equações (5.7), (5.10), (5.14) e (5.18) para d=1 obtém-se os coeficientes do virial relativos a esta situação.

Para o segundo coeficiente o resultado é:

$$
\begin{aligned}
2b_2 = \frac{s}{\sqrt{2}} + \frac{\beta}{2\pi.\sqrt{2\pi m T}}\frac{\pi\sigma}{2m}\int dkdk' e^{-\frac{\beta}{2m}\left(k^2+k'^2\right)}.|k-k'| = \\
= \frac{s}{\sqrt{2}} + \frac{\beta}{2\pi.\sqrt{2\pi m T}}\frac{\pi\sigma}{2m}\left(\frac{2m}{\beta}\right)^{\frac{3}{2}}\int dkdk' e^{-\left(k^2+k'^2\right)}.|k-k'| = \\
= \frac{s}{\sqrt{2}} + \frac{\beta}{2\pi.\sqrt{2\pi m T}}\frac{\pi\sigma}{2m}\left(\frac{2m}{\beta}\right)^{\frac{3}{2}}\int dkdk' e^{-\left(k^2+k'^2\right)}.|k-k'| = \\
= \frac{s}{\sqrt{2}} + \frac{\beta}{2\pi.\sqrt{2\pi m T}}\frac{\pi\sigma}{2m}\left(\frac{2m}{\beta}\right)^{\frac{3}{2}}\frac{1}{2}\int dudv e^{-\frac{\left(u^2+v^2\right)}{2}}.|v| = \\
= \frac{s}{\sqrt{2}} + \frac{\sigma}{4\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{u^2}{2}}du\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{v^2}{2}}|v|dv = \frac{s}{\sqrt{2}} + \frac{\sigma}{2\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{u^2}{2}}du\int_{0}^{\infty} e^{-\frac{v^2}{2}}vdv = \\
= \frac{s}{\sqrt{2}} + \frac{\sigma}{2\sqrt{\pi}}\sqrt{2\pi}.1 = \frac{s\sqrt{2}}{2} + \frac{\sigma\sqrt{2}}{2},
\end{aligned}
\tag{5.72}
$$

de modo que o segundo coeficiente do virial é:

$$
b_2 = \frac{s\sqrt{2}}{4} + \frac{\sigma\sqrt{2}}{4} = \frac{(\sigma+s)\sqrt{2}}{4}. \tag{5.73}
$$

Para o terceiro coeficiente acha-se:

$$
\begin{aligned}
3b_3 = \frac{1}{\sqrt{3}} + \frac{3\beta s}{(2\pi)\sqrt{2\pi m T}}\frac{\pi\sigma}{2m}\int dkdk' e^{-\frac{\beta\left(2k^2+k'^2\right)}{2m}}.|k-k'| = \frac{1}{\sqrt{3}} + \frac{3\beta s}{(2\pi)\sqrt{2\pi m T}}\frac{\pi\sigma}{2m}\left(\frac{2m}{\beta}\right)^{\frac{3}{2}} \\
\int dkdk' e^{-\left(2k^2+k'^2\right)}.|k-k'| = \frac{1}{\sqrt{3}} + \frac{3\beta s}{(2\pi)\sqrt{2\pi m T}}\frac{\pi\sigma}{2m}\left(\frac{2m}{\beta}\right)^{\frac{3}{2}}\frac{1}{3}\int dudv e^{-\frac{\left(u^2+2v^2\right)}{3}}.|v| = \\
= \frac{1}{\sqrt{3}} + \frac{\sigma.s}{2\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{u^2}{3}}du.\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{2v^2}{3}}|v|dv = \frac{1}{\sqrt{3}} + \frac{\sigma.s}{\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{u^2}{3}}du.\int_{0}^{\infty} e^{-\frac{2v^2}{3}}v.dv = \\
= \frac{1}{\sqrt{3}} + \frac{\sigma.s}{\sqrt{\pi}}(\sqrt{3\pi}).\left(\frac{3}{4}\right) = \frac{1}{\sqrt{3}} + \frac{3\sqrt{3}\sigma.s}{4} = \frac{\sqrt{3}}{3} + \frac{3\sqrt{3}\sigma.s}{4}.
\end{aligned}
\tag{5.74}
$$

Logo b_3 é dado por:

$$
b_3 = \left(\frac{1}{3} + \frac{3\sigma.s}{4}\right)\frac{\sqrt{3}}{3}. \tag{5.75}
$$

Finalmente calcular-se-á o quarto coeficiente dado pela equação (5.18), para o segundo termo tem-se:

$$\frac{4\beta}{(2\pi)\sqrt{2\pi mT}}\int e^{-\frac{3\beta k^2}{2m}}e^{-\frac{\beta k'^2}{2m}}G_2(\mathbf{k},\mathbf{k}')dkdk' = \frac{4\beta}{(2\pi)\sqrt{2\pi mT}}\frac{\pi\sigma}{2m}\int e^{-\frac{3\beta k^2}{2m}}e^{-\frac{\beta k'^2}{2m}}|k-k'|dkdk' =$$
$$= \frac{4\beta}{(2\pi)\sqrt{2\pi mT}}\frac{\pi\sigma}{2m}\left(\frac{2m}{\beta}\right)^{\frac{3}{2}}\int e^{-(3k^2+k'^2)}|k-k'|dkdk' = \frac{4\beta}{(2\pi)\sqrt{2\pi mT}}\frac{\pi\sigma}{2m}\left(\frac{2m}{\beta}\right)^{\frac{3}{2}}\int e^{-\frac{u^2+3v^2}{4}}|v|\frac{dudv}{4} =$$
$$= \frac{\sigma}{2\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\frac{u^2}{4}}du\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\frac{3v^2}{4}}|v|dv = \frac{\sigma}{\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\frac{u^2}{4}}du\int_{0}^{\infty}e^{-\frac{3v^2}{4}}vdv = \frac{\sigma}{\sqrt{\pi}}\left(\sqrt{4\pi}\right)\left(\frac{2}{3}\right) = \frac{4\sigma}{3}. \tag{5.76}$$

Calculando o terceiro termo acha-se:

$$\frac{2\beta}{(2\pi)\sqrt{2\pi mT}}\int e^{-\frac{\beta k^2}{m}}e^{-\frac{\beta k'^2}{m}}G_2(k,k')dkdk' = \frac{2\beta}{(2\pi)\sqrt{2\pi mT}}\frac{\pi\sigma}{2m}\int e^{-\frac{\beta k^2}{m}}e^{-\frac{\beta k'^2}{m}}|k-k'|dkdk' =$$
$$= \frac{2\beta}{(2\pi)\sqrt{2\pi mT}}\frac{\pi\sigma}{2m}\left(\frac{m}{\beta}\right)^{\frac{3}{2}}\int e^{-(k^2+k'^2)}|k-k'|dkdk' = \frac{2\beta}{(2\pi)\sqrt{2\pi mT}}\frac{\pi\sigma}{2m}\left(\frac{m}{\beta}\right)^{\frac{3}{2}}\frac{1}{2}\int e^{-\frac{u^2+v^2}{2}}|v|dudv =$$
$$= \frac{\sigma}{4\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\frac{u^2}{2}}du\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\frac{v^2}{2}}|v|dv = \frac{\sigma}{2\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\frac{u^2}{2}}du\int_{0}^{\infty}e^{-\frac{v^2}{2}}vdv = \frac{\sigma}{2\sqrt{2\pi}}\sqrt{2\pi}.1 = \frac{\sigma}{2}. \tag{5.77}$$

Resta agora apenas o último termo calculado a seguir.

$$\frac{2\beta^2 s}{(2\pi)^2\sqrt{2\pi mT}}\int e^{-\frac{\beta k^2}{2m}}e^{-\frac{\beta k'^2}{m}}e^{-\frac{\beta k''^2}{2m}}G_2(k,k')G_2(k',k')dkdk'dk'' =$$
$$= \frac{2\beta^2 s}{(2\pi)^2\sqrt{2\pi mT}}\left(\frac{\pi\sigma}{2m}\right)^2\int e^{-\frac{\beta k^2}{2m}}e^{-\frac{\beta k'^2}{m}}e^{-\frac{\beta k''^2}{2m}}|k-k'||k'-k''|dkdk'dk'' =$$
$$= \frac{2\beta^2 s}{(2\pi)^2\sqrt{2\pi mT}}\left(\frac{\pi\sigma}{2m}\right)^2\left(\frac{2m}{\beta}\right)^{\frac{5}{2}}\int e^{-(k^2+2k'^2+k''^2)}|k-k'||k'-k''|dkdk'dk'' =$$
$$= \frac{\sigma^2 s}{2\sqrt{\pi}}\int e^{-(k^2+2k'^2+k''^2)}|k-k'||k'-k''|dkdk'dk''. \tag{5.78}$$

Finalmente a expressão do quarto coeficiente do virial em uma dimensão, no limite unitário, definido da maneira peculiar já discutida, é dado por:

$$b_4 = \frac{s}{8}+\frac{\sigma}{3}+\frac{\sigma}{8}+\frac{\sigma^2 s}{8\sqrt{\pi}}\int e^{-(k^2+2k'^2+k''^2)}|k-k'||k'-k''|dkdk'dk'', \tag{5.79}$$

onde a integral do último termo pode ser resolvida numericamente:

$$\int e^{-(k^2+2k'^2+k''^2)}|k-k'||k'-k''|dkdk'dk'' = 1.985. \tag{5.80}$$

5.5 Calculando os coeficientes do virial na presença de uma armadilha harmônica

Para considerar a influência de uma armadilha harmônica nos coeficientes do virial foi usada a aproximação de densidade local (Local density Approximation - LDA), esta aproximação é implementada simplesmente fazendo a seguinte substituição no potencial químico $\mu \to \mu - V(\mathbf{r})$, onde $V(r)$ é o potencial da armadilha. A energia livre é dada por $F = \int F(\mathbf{r}) d^d\mathbf{r}$.

Conhecendo as mudanças que a armadilha provoca na energia livre é fácil achar as mudanças que aparecerão nos coeficientes do virial:

$$\mu \to \mu - V(\mathbf{r}) \Rightarrow z \to z.e^{-\beta V(\mathbf{r})} \Rightarrow F = -\frac{1}{\beta\lambda^d}\sum_{n=1}^{\infty} b_n z^n \to -\int \frac{1}{\beta\lambda^d}\sum_{n=1}^{\infty} b_n z^n e^{-\beta n V(\mathbf{r})} d^d\mathbf{r} =$$
$$-\frac{1}{\beta\lambda^d}\sum_{n=1}^{\infty}\left(b_n \int e^{-\beta n V(\mathbf{r})} d^d\mathbf{r}\right) z^n \Rightarrow b_n \to b_n \int e^{-\beta n V(\mathbf{r})} d^d\mathbf{r}. \quad (5.81)$$

Considerando a seguinte armadilha harmônica $V(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^{d}\left[\frac{w_i x_i^2}{2}\right] - lnA$, os coeficientes do virial se modificam de acordo com a expressão abaixo.

$$b_n' = b_n \int e^{-\beta n V(\mathbf{r})} d^d\mathbf{r} = b_n A^{\frac{n}{T}} \prod_{i=1}^{d} \int e^{-\frac{\beta n w_i x_i^2}{2}} dx_i = \; = b_n A^{\frac{n}{T}} \left(\frac{2\pi}{\beta n}\right)^{\frac{d}{2}} . \left[\prod_{i=1}^{d} w_i\right]^{-\frac{1}{2}}, \quad (5.82)$$

onde b_n' representa o coeficiente do virial quando a armadilha é considerada e b_n o coeficiente quando a armadilha está ausente.

No caso particular em que a armadilha é isotrópica $(w_1 = w_2 = ... = w_d = w)$ tem-se:

$$b_n' = b_n A^{\frac{n}{T}} \left(\frac{2\pi}{\beta w n}\right)^{\frac{d}{2}}. \quad (5.83)$$

Como se pode ver em (5.83), fixada a temperatura, a razão $\frac{b_n'}{b_n}$ decai com a frequência w como uma lei de potência, como é mostrado na figura (5.7). Fixada a frequência, a expressão (5.83) mostra que no regime de altas temperaturas a razão $\frac{b_n'}{b_n}$ cresce com a temperatura como uma lei de potência onde o expoente depende da dimensão do sistema; por outro lado para baixas temperaturas se $A > 1$ a razão diverge com uma lei exponencial quando a temperatura tende a zero mas se $A \leq 1$ a razão tende a zero. Se $A = 1$ o comportamento exponencial desaparece completamente e apenas a lei de potência governa a razão $\frac{b'_n}{b_n}$. A figura (5.8) mostra a razão $\frac{b'_n}{b_n}$ em função da temperatura para uma frequência fixa quando $A = 2$ e $A = 0.5$, ilustrando a análise feita aqui para este caso.

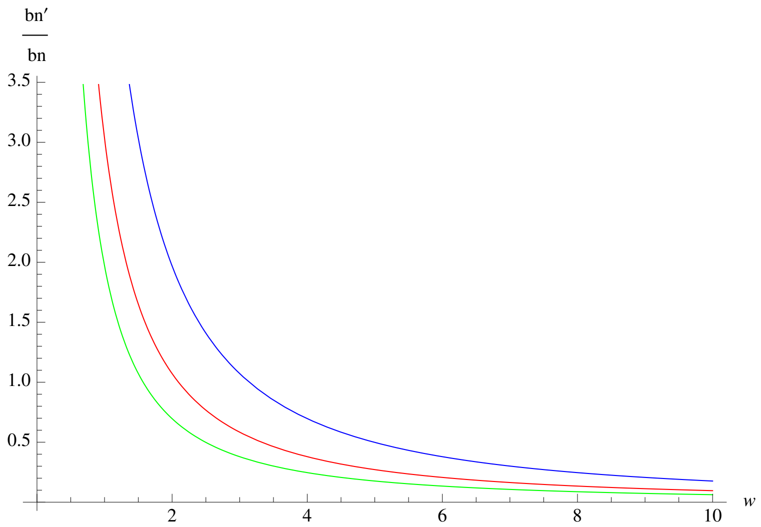

Figura 5.7: Razão entre o coeficiente do virial na ausência e na presença de armadilha harmônica para o segundo, terceiro e quarto coeficientes do virial contra a frequência da armadilha para $A = T = 1$: $\frac{b'_n}{b_n} \times w$, $n = 2$ (azul), $n = 3$ (vermelho) e $n = 4$ (verde).

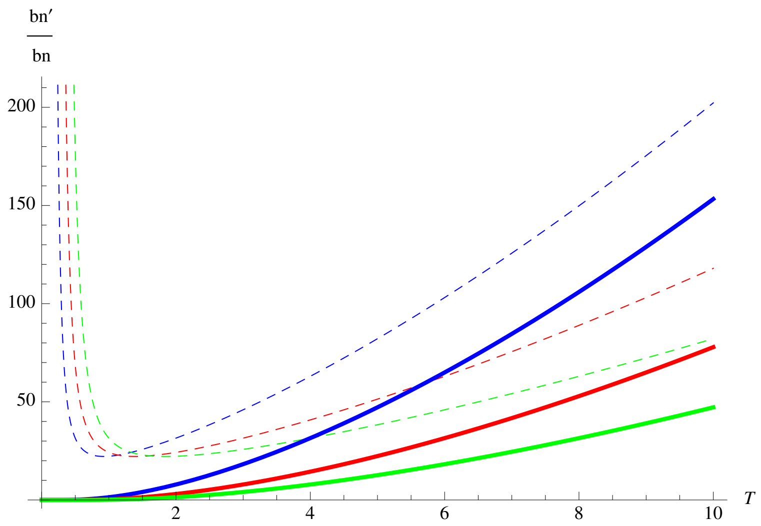

Figura 5.8: Razão entre o coeficiente do virial na ausência e na presença de armadilha harmônica para o segundo, terceiro e quarto coeficientes do virial contra a temperatura para $w = 1$ com $A = 0.5$ (linhas cheias) e $A = 2$ (linhas tracejadas): $\frac{b'_n}{b_n} \times T$, $n = 2$ (azul),$n = 3$ (vermelho) e $n = 4$ (verde).

5.6 Resultados além da aproximação de espuma

Nesta seção os três primeiros coeficientes do virial serão obtidos exatamente, sem o uso da aproximação de espuma. O método para fazer isso é fácil de se imaginar, basta usar a expressão exata da energia livre dada por (3.12), expandir seus termos em potências da fugacidade e obter os coeficientes do virial por comparação com (5.1).

Os termos de interação de (3.12) podem ser obtidos diretamente da expressão ou com o auxílio das regras diagramáticas estabelecidas no capítulo 3, aqui os termos serão escritos e referidos aos diagramas correspondentes indicados na figura (3.1).

Além de escrever os termos interagentes, é preciso escrever a contribuição da parte não interagente da energia livre. para isso basta expandir (3.11) em potências da fugacidade. Isto é feito a seguir:

$$F_0 = \frac{s}{\beta}\int \frac{d^d\mathbf{k}}{(2\pi)^d} log\left[1 - sze^{-\frac{\beta\mathbf{k}^2}{2m}}\right] = \frac{s}{\beta}\int \frac{d^d\mathbf{k}}{(2\pi)^d}\left[-\sum_{n=1}^{\infty}\frac{s^n z^n e^{-\frac{\beta\mathbf{k}^2 n}{2m}}}{n}\right] =$$

$$= -\sum_{n=1}^{\infty}\left[\frac{s^{n+1}z^n}{(2\pi)^d n\beta}\frac{2\pi^{\frac{d}{2}}}{\Gamma\left(\frac{d}{2}\right)}\int_0^{\infty} k^{d-1}e^{-\frac{\beta\mathbf{k}^2 n}{2m}}dk\right] = -\sum_{n=1}^{\infty}\left[\frac{s^{n+1}z^n}{(2\pi)^d n\beta}\frac{2\pi^{\frac{d}{2}}}{\Gamma\left(\frac{d}{2}\right)}\left(\frac{2m}{\beta n}\right)^{\frac{d}{2}}\int_0^{\infty} k^{d-1}e^{-\mathbf{k}^2}dk\right] =$$

$$= -\sum_{n=1}^{\infty}\left[\frac{s^{n+1}z^n}{(2\pi)^d n\beta}\frac{2\pi^{\frac{d}{2}}}{\Gamma\left(\frac{d}{2}\right)}\left(\frac{2m}{\beta n}\right)^{\frac{d}{2}}\int_0^{\infty} k^{\frac{d-1}{2}}e^{-x}\frac{dx}{2x^{\frac{1}{2}}}\right] =$$

$$= -\sum_{n=1}^{\infty}\left[\frac{s^{n+1}z^n}{(2\pi)^d n\beta}\frac{\pi^{\frac{d}{2}}}{\Gamma\left(\frac{d}{2}\right)}\left(\frac{2m}{\beta n}\right)^{\frac{d}{2}}\int_0^{\infty} k^{\frac{d}{2}-1}e^{-x}dx\right] = -\sum_{n=1}^{\infty}\left[\frac{s^{n+1}z^n}{(2\pi)^d n\beta}\frac{\pi^{\frac{d}{2}}}{\Gamma\left(\frac{d}{2}\right)}\left(\frac{2m}{\beta n}\right)^{\frac{d}{2}}\Gamma\left(\frac{d}{2}\right)\right] =$$

$$= -\sum_{n=1}^{\infty}\left[\frac{s^{n+1}z^n}{n^{\frac{d}{2}+1}\beta}\left(\frac{mT}{2\pi}\right)^{\frac{d}{2}}\right] \Rightarrow F_0 = -\frac{1}{\beta\lambda^d}\sum_{n=1}^{\infty}\left[\frac{s^{n+1}z^n}{n^{\frac{d}{2}+1}}\right]. \quad (5.84)$$

Da última expressão vê-se que os coefiientes do virial para o gás ideal são exatos e dados por:

$$b_l = \frac{s^{l+1}}{l^{\frac{d}{2}+1}}, \quad (5.85)$$

correspondendo ao caso em que todos os kernéis são nulos e a contribuição do primeiro termo de (5.7), (5.10), (5.14) e (5.18).

A seguir resta calcular a contribuição da parte interagente da energia livre, que possui representação diagramática. Como já foi discutido, um diagrama de n linhas só contribui a partir do n-ésimo coeficiente do virial.

O único diagrama de duas linhas que existe é (a) em (3.1) e ele contribuirá para todos os coeficientes do virial a partir do segundo. Note que (a) é um diagrama de espuma e por isso o resultado achado na seção anterior é exato e a aproximação de espuma dá o segundo coeficiente do virial corretamente.

Sendo assim, expandindo (a) em potências da fugacidade:

$$(a) = \frac{1}{2}\int \frac{d^d\mathbf{k}}{(2\pi)^d}\frac{d^d\mathbf{k}'}{(2\pi)^d} f_0(\mathbf{k}) f_0(\mathbf{k}') G_2(\mathbf{k},\mathbf{k}') = \frac{1}{2}\int \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3}\frac{d^3\mathbf{k}'}{(2\pi)^3}\left(\frac{z}{e^{-\frac{\beta\mathbf{k}^2}{2m}} - sz}\right)\left(\frac{zG_2(\mathbf{k},\mathbf{k}')}{e^{-\frac{\beta\mathbf{k}'^2}{2m}} - sz}\right) =$$
$$= \frac{z^2}{2}\int \frac{d^d\mathbf{k}}{(2\pi)^d}\frac{d^d\mathbf{k}'}{(2\pi)^d}\left(\frac{e^{-\frac{\beta\mathbf{k}^2}{2m}}}{\left[1 - sze^{-\frac{\beta\mathbf{k}^2}{2m}}\right]}\right)\left(\frac{e^{-\frac{\beta\mathbf{k}'^2}{2m}}}{\left[1 - sze^{-\frac{\beta\mathbf{k}'^2}{2m}}\right]}\right) G_2(\mathbf{k},\mathbf{k}') =$$
$$= \frac{z^2}{2}\int \frac{\frac{d^d\mathbf{k}}{(2\pi)^d}\frac{d^d\mathbf{k}'}{(2\pi)^d} e^{-\frac{\beta(\mathbf{k}^2+\mathbf{k}'^2}{2m})} G_2(\mathbf{k},\mathbf{k}')}{\left[1 - sz(e^{-\frac{\beta\mathbf{k}^2}{2m}} + e^{-\frac{\beta\mathbf{k}'^2}{2m}}) + \ldots\right]} =$$
$$\frac{z^2}{2}\int \frac{d^d\mathbf{k}}{(2\pi)^d}\frac{d^d\mathbf{k}'}{(2\pi)^d} e^{-\frac{\beta(\mathbf{k}^2+\mathbf{k}'^2}{2m})} G_2(\mathbf{k},\mathbf{k}')\left[1 + sz(e^{-\frac{\beta\mathbf{k}^2}{2m}} + e^{-\frac{\beta\mathbf{k}'^2}{2m}}) + \ldots\right]. \quad (5.86)$$

O resultado é:

$$(a) = \left[\frac{1}{2}\int \frac{d^d\mathbf{k}}{(2\pi)^d}\frac{d^d\mathbf{k}'}{(2\pi)^d} e^{\frac{\beta(\mathbf{k}^2+\mathbf{k}'^2}{2m})} G_2(\mathbf{k},\mathbf{k}')\right] z^2 + \left[s\int \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3}\frac{d^3\mathbf{k}'}{(2\pi)^3} e^{\frac{\beta(2\mathbf{k}^2+\mathbf{k}'^2}{2m})} G_2(\mathbf{k},\mathbf{k}')\right] z^3 + \ldots \quad . \quad (5.87)$$

O único diagrama de três linhas que existe é (d), que contribuirá para os coeficientes do virial a partir do terceiro; logo os diagramas que contribuem para o terceiro coeficiente do virial são (a) e (d).

Note que, diferente de (a), o diagrama (d) não é de espuma; logo o resultado exato que será obtido para o terceiro coeficiente do virial deve incluir um termo extra proveniente de (d) e a contribuição de (a) e da parte não interagente deve corresponder ao resultado achado antes. Calculando (d) tem-se:

$$
\begin{aligned}
(d) = \frac{1}{3!}\int \frac{d^d\mathbf{k}}{(2\pi)^d}\frac{d^d\mathbf{k}'}{(2\pi)^d}\frac{d^d\mathbf{k}''}{(2\pi)^d} f_0(\mathbf{k})f_0(\mathbf{k}')f_0(\mathbf{k}'')G_3(\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{k}'') = \\
= \frac{z^3}{6(2\pi)^{3d}}\int \frac{d^d\mathbf{k}d^d\mathbf{k}'d^d\mathbf{k}''G_3(\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{k}'')}{\left[e^{\frac{\beta\mathbf{k}^2}{2m}}-sz\right]\left[e^{\frac{\beta\mathbf{k}'^2}{2m}}-sz\right]\left[e^{\frac{\beta\mathbf{k}''^2}{2m}}-sz\right]} = \\
= \frac{z^3}{6(2\pi)^{3d}}\int \frac{d^d\mathbf{k}d^d\mathbf{k}'d^d\mathbf{k}''e^{-\frac{\beta(\mathbf{k}^2+\mathbf{k}'^2+\mathbf{k}''^2}{2m})}G_3(\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{k}'')}{\left[1-sze^{-\frac{\beta\mathbf{k}^2}{2m}}\right]\left[1-sze^{-\frac{\beta\mathbf{k}'^2}{2m}}\right]\left[1-sze^{-\frac{\beta\mathbf{k}''^2}{2m}}\right]} = \\
= \frac{z^3}{6(2\pi)^{3d}}\int \frac{d^d\mathbf{k}d^d\mathbf{k}'d^d\mathbf{k}''e^{-\frac{\beta(\mathbf{k}^2+\mathbf{k}'^2+\mathbf{k}''^2}{2m})}G_3(\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{k}'')}{\left[1-sz(e^{-\frac{\beta\mathbf{k}^2}{2m}}+e^{-\frac{\beta\mathbf{k}'^2}{2m}}+e^{-\frac{\beta\mathbf{k}''^2}{2m}})+...\right]} = \\
= \frac{z^3}{6(2\pi)^{3d}}\int d^d\mathbf{k}d^d\mathbf{k}'d^d\mathbf{k}''e^{-\frac{\beta(\mathbf{k}^2+\mathbf{k}'^2+\mathbf{k}''^2}{2m})}G_3(\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{k}'')\left[1+sz(e^{-\frac{\beta\mathbf{k}^2}{2m}}+e^{-\frac{\beta\mathbf{k}'^2}{2m}}+e^{-\frac{\beta\mathbf{k}''^2}{2m}})+...\right] = \\
= \left[\frac{1}{6(2\pi)^{3d}}\int d^d\mathbf{k}d^d\mathbf{k}'d^d\mathbf{k}''e^{-\frac{\beta(\mathbf{k}^2+\mathbf{k}'^2+\mathbf{k}''^2}{2m})}G_3(\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{k}'')\right]z^3 + \\
\left[\frac{s}{6(2\pi)^{3d}}\int d^d\mathbf{k}d^d\mathbf{k}'d^d\mathbf{k}''e^{-\frac{\beta(\mathbf{k}^2+\mathbf{k}'^2+\mathbf{k}''^2}{2m})}\left(e^{-\frac{\beta\mathbf{k}^2}{2m}}+e^{-\frac{\beta\mathbf{k}'^2}{2m}}+e^{-\frac{\beta\mathbf{k}''^2}{2m}}\right)G_3(\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{k}'')\right]z^4+...
\end{aligned}
\tag{5.88}
$$

Finalmente como não existe diagrama de uma linha, a contribuição para o primeiro coeficiente vem totalmente de (5.84) e tem-se $b_1 = 1$ como esperado.

Juntando a contribuição de (5.84) e (5.86) tem-se novamente (5.10) e a aproximação de espuma é exata para o segundo coeficiente como esperado.

Considerando apenas a contribuição de F_0 e (a) obtém-se novamente (5.14); no entanto o terceiro coeficiente recebe ainda uma contribuição de (d), ignorada pela aproximação de espuma. Finalmente o resultado exato para o terceiro coeficiente do virial é:

$$
\begin{aligned}
b_3 = \frac{1}{3^{d/2+1}} + \frac{\beta s}{(2\pi mT)^{d/2}(2\pi)^d}\int d^d\mathbf{k}d^d\mathbf{k}'e^{-\frac{\beta\mathbf{k}^2}{m}}e^{-\frac{\beta\mathbf{k}'^2}{2m}}.G_2(\mathbf{k},\mathbf{k}')+ \\
+\frac{\beta}{6(2\pi)^{2d}(2\pi mT)^{\frac{d}{2}}}\int d^d\mathbf{k}d^d\mathbf{k}'d^d\mathbf{k}''e^{-\frac{\beta(\mathbf{k}^2+\mathbf{k}'^2+\mathbf{k}''^2}{2m})}G_3(\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{k}'').
\end{aligned}
\tag{5.89}
$$

5.7 Propriedades termodinâmicas

Dentro da aproximação de espuma é possível obter as propriedades termodinâmicas do gás como já foi explicado no capítulo (3), para isto basta calcular o kernel de dois corpos e com ele resolver a equação integral (3.41) ou equivalentemente a equação integral da pseudo-energia (3.39) e com isto obter a pseudo-energia ou y em função de $\mathbf{k}$. A partir, daí usando as equações (4.59) e (4.60), tem-se as funções de escala c e q e com isso a energia livre e a densidade de partículas. As outras propriedades termodinâmicas podem ser encontradas por derivação numérica.

Resultados para o limite unitário com este procedimento já foram obtidos em duas dimensões em [23] e em três dimensões em [24]. Nesta tese é estudado o caso tridimensional além do limite unitário, cujos resultados são publicados em [27], para isso usa-se o kernel (4.38) e a equação integral (3.41). Antes de resolver numericamente a equação integral (3.41) é possível resolver analiticamente a integral das partes angulares do integrando, restando apenas uma equação integral em uma variável para ser resolvida numericamente, a resolução da parte angular de (3.41) encontra-se no apêndice E para o kernel de dois corpos em três dimensões além do limite unitário.

As principais propriedades termodinâmicas aparecem plotadas a seguir em termos das variáveis de escala $x = \frac{\mu}{T}$ e $\frac{T}{T_F}$, onde T_F é a temperatura de Fermi para diferentes valores de α.

A seguir aparecem os gráficos da entropia em função de x e de $\frac{T}{T_F}$ e também o gráfico de $\frac{\mu}{\mu_F}$ contra $\frac{T}{T_F}$ (μ_F é o potencial químico de Fermi) para um gás de férmions com diferentes valores de $alpha$ negativos, ou seja na região BCS.

Também foram achados resultados para bósons, mas para ilustrar a capacidade do método apenas gráficos para férmions serão mostrados nesta seção. Os resultados para férmions são interessantes para descrever o crossover BCS/BEC. Na próxima seção será mostrado um critério de transição de fase para bósons e outro para férmions, aí serão mostrados gráficos para ambos os tipos de partícula e o estudo do crossover será feito.

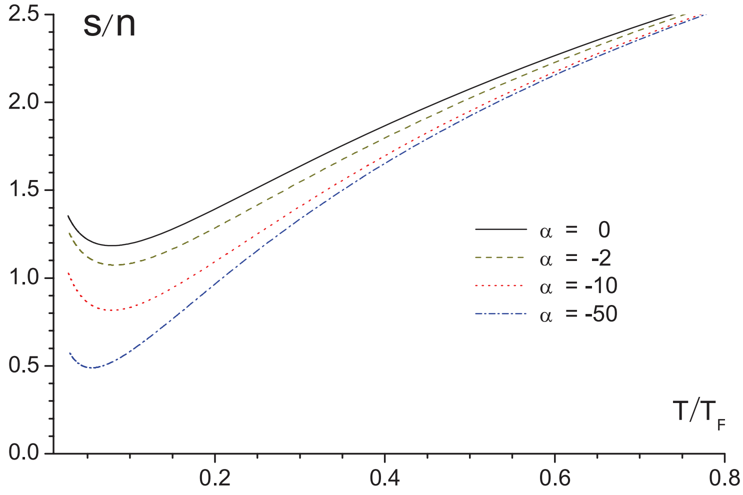

Figura 5.9: Entropia em função da razão $\frac{T}{T_F}$ para férmions na região BCS (α<0) e no limite unitário (α=0).

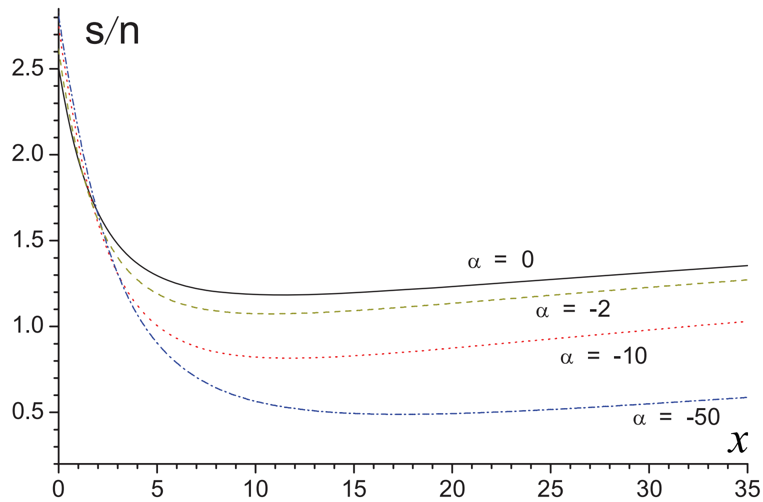

Figura 5.10: Entropia em função de $x = \frac{\mu}{T}$ para férmions na região BCS (α<0) e no limite unitário (α=0).

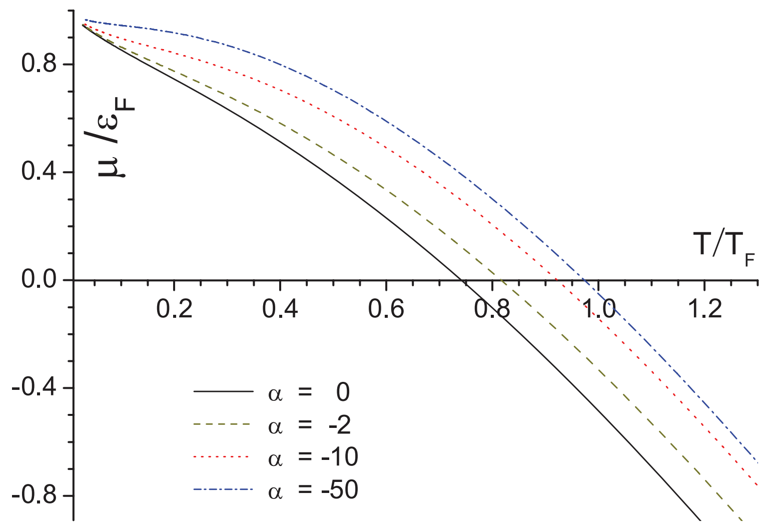

Figura 5.11: Razão entre o potencial químico e a energia de Fermi contra razão entre temperatura e temperatura de Fermi para férmions na região BCS (α<0) e no limite unitário (α=0).

5.8 Transição de fase

Uma pergunta importante dentro da perspectiva deste formalismo é como se pode identificar o crossover BCS/BEC para um gás quântico. Para um gás de bósons isto é fácil: a condensação de Bose-Einstein é caracterizada pela divergência da densidade de partículas do estado fundamental $(\mathbf{K} = 0)$, olhando a expressão (3.30) é fácil ver que isto pode ser caracterizado por $\epsilon(\mathbf{k} = 0) = 0$. Vale ressaltar que neste caso é assumido que o condensado de Bose-Einstein existe na região BCS (α<0) como um estado metaestável, não se colapsando.

Logo, para bósons: traçando a curva da pseudo-energia nula em função de x tem-se os pontos críticos da figura 5.12 no limite unitário (α=0). Repetindo este procedimento fora do limite unitário é possível achar para cada valor de α as respectivas temperaturas críticas e com isso traçar os valores críticos da função de escala q em função de α, como é feito na figura (5.13). O gráfico da razão $\frac{T_c}{T_F}$ contra a razão $\frac{1}{k_F a}$ aparece na figura (5.14).

No caso dos férmions não há uma forma tão direta de se fazer isto, então o critério adorado é que uma mudança no comportamento do crescimento da entropia por partícula evidencia a transição de fase.

Para férmions, com o critério estabelecido, o gráfico da razão $\frac{T_c}{T_F}$ contra $\frac{1}{k_F a}$ aparece na figura (5.15) e com isto o crossover BCS/BEC para férmions é estudado.

Os resultados esperados no limte untário em [24] são recuperados aqui, como por exemplo: no limte unitário (α=0), a função de escala do número de partículas no ponto crítico deve tender a $\zeta(\frac{3}{2})$ e a razão $\frac{T}{T_F}$ deve tender a $\left[\frac{4\zeta(\frac{3}{2})}{3\sqrt{\pi}}\right]^{\frac{2}{3}}$ para bósons.

O comportamento do crescimento das temperaturas críticas em função da razão $\frac{1}{k_F a}$ apresenta boa concordância com os resultados obtidos com o método Monte-Carlo [7, 8, 9, 10].

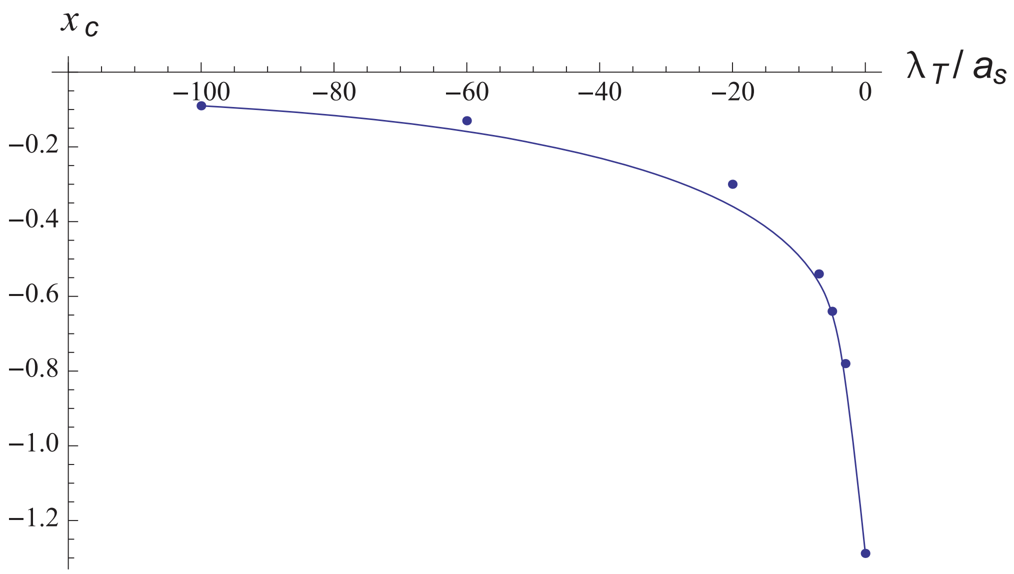

Figura 5.12: Pontos críticos da função de escala $x = \frac{\mu}{T}$ para bósons na região BCS.

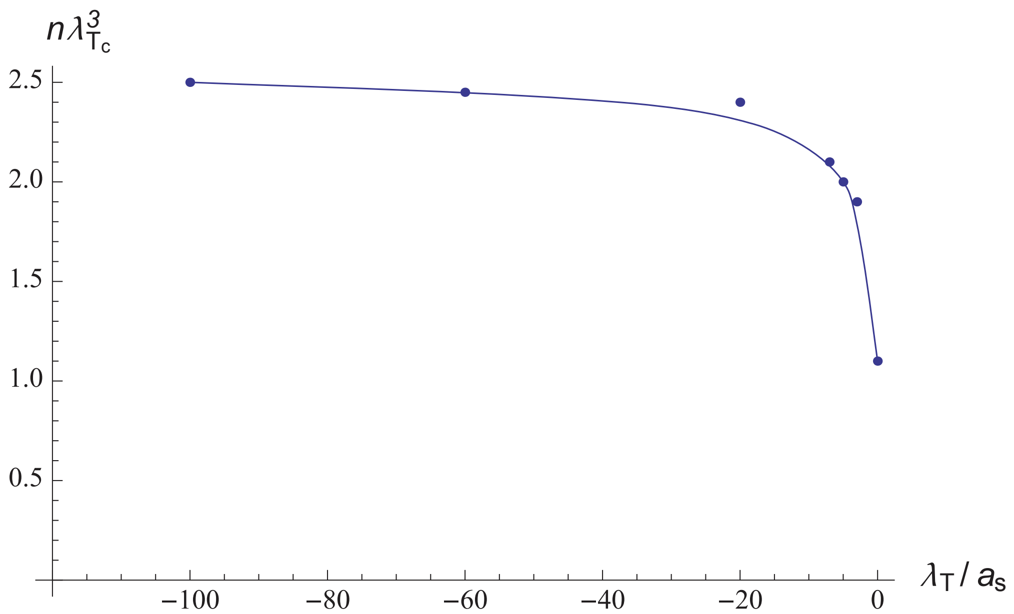

Figura 5.13: Valores críticos da função de escala q contra α para bósons na região BCS.

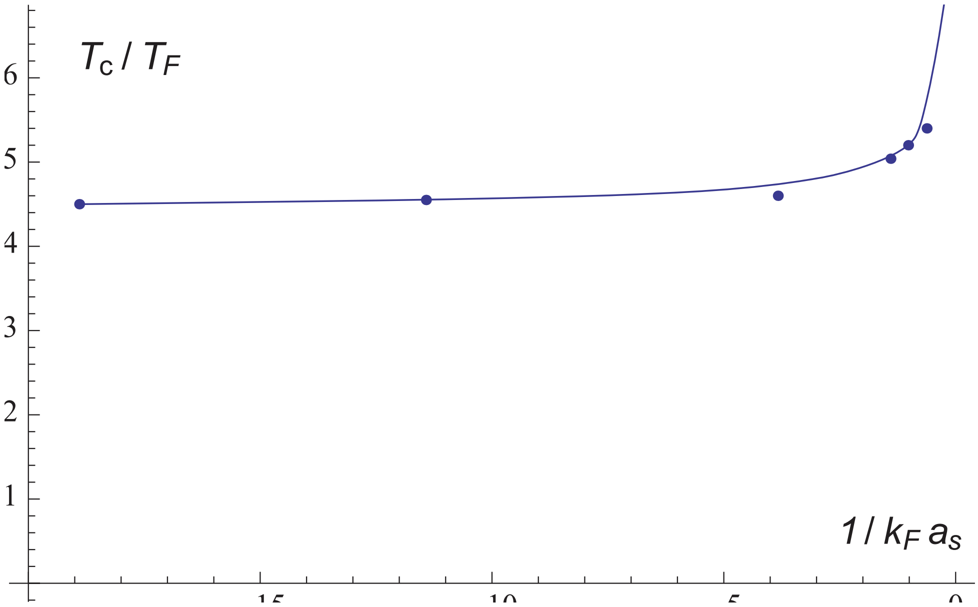

Figura 5.14: Razão $\frac{T}{T_F}$ contra a razão $\frac{1}{k_F a}$ para bósons.

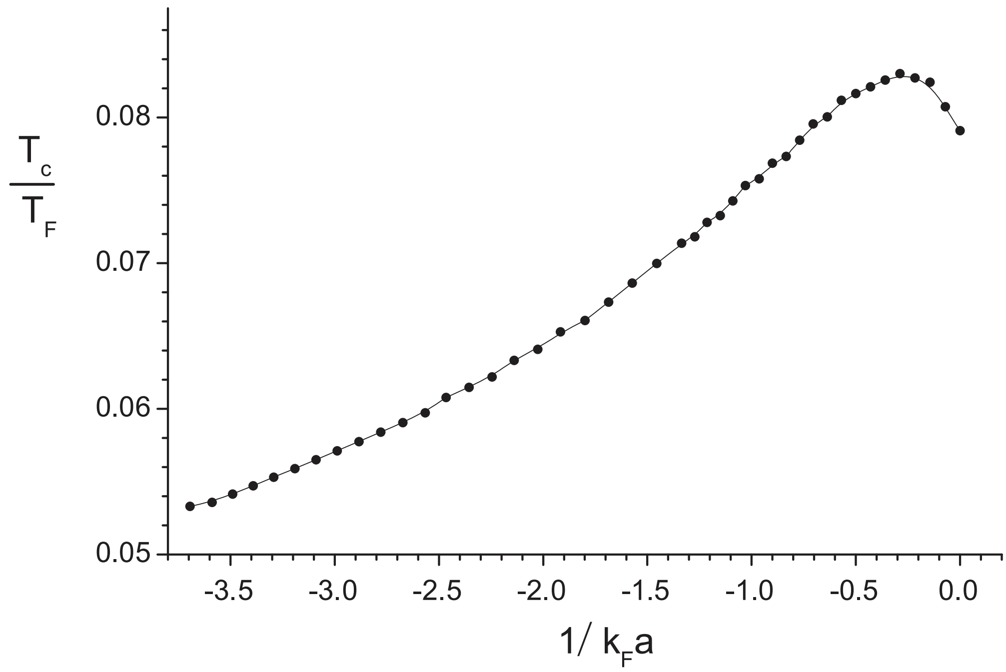

Figura 5.15: Razão $\frac{T}{T_F}$ contra a razão $\frac{1}{k_F a}$ para férmions.

Capítulo 6

Conclusões e perspectivas

O método aqui apresentado se mostra uma boa alternativa para obtenção dos coeficientes do virial. O segundo coeficiente do virial é obtido de maneira exata e uma forma sistemática de obter expressões exatas para os coeficientes de ordem superior é mostrada, sendo que para cada ordem é acrescentada a dificuldade de se calcular um kernel de mais corpos. A expressão exata para o terceiro coeficiente é achada e a do quarto, embora não tenha sido encontrada, não é muito difícil também.

Sendo assim, com o formalismo proposto, a dificuldade de se calcular os coeficientes do virial de ordem superior decorre da dificuldade de se achar o kernel de mais corpos e resolver as integrais das expressões que aparecem, esta dificuldade não parece ser nem um pouco maior que a dificuldade dos outros métodos encontrados na literatura [30, 31, 32]. De toda sorte a aproximação de espuma apresenta ao menos concordância com o sinal do terceiro coeficiente no sistema tratado aqui, servindo ao menos como ferramenta exploratória para sistemas ainda não estudados.

As propriedades termodinâmicas foram achadas e o crossover foi estudado dentro da aproximação vigente, os resultados obtidos não apresentam a mesma precisão que os obtidos com métodos Monte Carlo, mas isto é esperado uma vez que o sistema em questão envolve baixas temperaturas e a aproximação do formalismo é para altas temperaturas. Espera-se então que este mesmo método apresente uma melhor descrição da criticalidade quando aplicado a outros sistemas em que as transições de fase ocorram a altas temperaturas.

Dentre as perspectivas futuras tem-se calcular o kernel de três corpos e obter o valor exato do terceiro coeficiente do virial; utilizar outras técnicas para se obter o kernel de três ou até mesmo de quatro corpos aproximado e com isso melhores aproximações para o terceiro e quarto coeficientes do virial.

Como no limite unitário a constante de acoplamento diverge, técnicas não perturbativas para se obter o kernel devem ser usadas, algumas candidatas são bosonização, expansão 1/n, métodos de integrabilidade e teoria de perturbação otimizada. Claro que cada uma dessas técnicas requer peculiaridades que as tornem aplicáveis a talvez outros sistemas, que não o presente, integrabilidade geralmente é difícil de se encontrar em mais de uma dimensão, bosonização em dimensão maior que um geralmente requer aproximações e expansão 1/n requer simetrias específicas como simetria O(n) do lagrangeano.

Espera-se também obter os coeficientes do virial para gases multi-componentes, em princípio na aproximação de espuma e posteriormente além dela.

Finalmente, espera-se aplicar os métodos numéricos inerentes ao formalismo e a aproximação de espuma a sistemas com temperaturas críticas altas e cujo diagrama de fases não dependa muito dos processos de três ou mas corpos, neste caso se espera que a aproximação apresente melhores resultados.

Apêndice A

Integral gaussiana e elemento de ângulo sólido em dimensão quaquer

Uma possibilidade de se achar o elemento de ângulo sólido em dimensão qualquer consistem em resolver a integral Gaussiana em dimensão qualquer e comparar os resultados.

Primeiramente, devido a simetria esférica tem-se:

$$\int e^{-(x_1^2+\ldots+x_d^2)}d^dx = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\mathbf{r}^2}d^d\mathbf{r} = \Omega(d)\int_0^{\infty} e^{-r^2}r^{d-1}dr. \tag{A.1}$$

Recordando a definição da função gama tem-se:

$$\Gamma(n) = \int_0^{\infty} x^{n-1}e^{-x}dx \Rightarrow n! = \Gamma(n+1), \forall n \in \mathbf{N}. \tag{A.2}$$

Fazendo a substituição $y = \sqrt{x} \Rightarrow dy = \frac{1}{2\sqrt{x}}dx = \frac{dx}{2y} \Rightarrow dx = 2ydy$ obtém-se outra expressão para a função gama:

$$\Gamma(n) = \int_0^{\infty} x^{n-1}e^{-x}dx = \int_0^{\infty} y^{2(n-1)}e^{-y^2}2ydy = 2\int_0^{\infty} y^{2n-1}e^{-y^2}. \tag{A.3}$$

Logo a integral Gaussiana em (A.1) pode ser escrita como:

$$\int e^{-(x_1^2+\ldots+x_d^2)}d^dx = \frac{\Omega(d)\Gamma(\frac{d}{2})}{2}. \tag{A.4}$$

A integral gaussiana simples em uma dimensão é facilmente calculada usando coordenadas polares e observando que seu quadrado corresponde a uma integral dupla:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} dx = \sqrt{\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} dx \int_{-\infty}^{\infty} e^{-y^2} dy} = \sqrt{\int\int e^{-(x^2+y^2)} dx dy} = \sqrt{\int\int e^{-r^2} r dr d\theta} = \sqrt{\int_0^{2\pi} d\theta \int_0^{\infty} e^{-r^2} r dr} = \sqrt{2\pi \int_0^{\infty} e^{-r^2} r dr} = \sqrt{2\pi \left[\frac{e^{-r^2}}{2}\right]_0^{\infty}} = \sqrt{\pi}. \quad (A.5)$$

A integral de (A.1) é facilmente achada, conhecendo-se a integral gaussiana, como se pode ver a seguir:

$$\int e^{-(x_1^2+...+x_d^2)} d^d x = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x_1^2} dx_1 ... \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x_d^2} dx_d = \left[\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x_1^2} dx_1\right]^d = \pi^{\frac{d}{2}}. \quad (A.6)$$

Usando (A.1) e (A.4) acha-se o valor do elemento de ângulo sólido em d dimensões:

$$\Omega(d) = \frac{2\pi^{\frac{d}{2}}}{\Gamma(\frac{d}{2})}. \quad (A.7)$$

Apêndice B

Funções zeta de Riemann e polilogaritmo

A função zeta de Riemann é definida como a continuação analítica da série

$$\zeta(z) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^z}. \tag{B.1}$$

Considerando o caso real, vê-se que a série acima só converge para $z < 1$ e diverge para $z \geq 1$, sendo que em $z = 1$ é a famosa série harmônica; este resultado pode ser obtido pelo teste da integral para séries. No caso complexo o resultado é similar e a série só converge para $Re(z) > 1$. Considerando a definição prévia é possível relacionar a função gama com a função zeta. Usando (B.1) e (A.3) pode-se calcular a seguinte integral, onde n é em princípio um número natural maior que 1

$$\begin{aligned}\int_0^\infty \frac{x^{n-1}dx}{e^x - 1} = \int_0^\infty \frac{x^{n-1}e^{-x}dx}{1 - e^{-x}} = \int_0^\infty x^{n-1}\left(\sum_{m=1}^{\infty} e^{-mx}\right) dx = \sum_{m=1}^{\infty}\int_0^\infty x^{n-1}e^{-mx}dx = \\ = \sum_{m=1}^{\infty}\frac{1}{m^n}\int_0^\infty x^{n-1}e^{-x}dx = \left(\sum_{m=1}^{\infty}\frac{1}{m^n}\right)\left(\int_0^\infty x^{n-1}e^{-x}dx\right) = \zeta(n)\Gamma(n).\end{aligned} \tag{B.2}$$

Sendo assim a função zeta de Riemann pode ser escrita como:

$$\zeta(z) = \frac{1}{\Gamma(z)}\int_0^\infty \frac{x^{z-1}dx}{e^x - 1}. \tag{B.3}$$

A integral da expressão (B.3) converge não apenas para z natural, mas para todo número complexo com parte real diferente de 1; de fato esta é a extensão analítica da série (B.1) e a definição da função zeta de Riemann.

Antes de seguir em frente vale ressaltar que os cálculos realizados até agora não provam que a expressão (B.3) é a extensão analítica de (B.1) ou que ela seja única, são apenas uma motivação para tornar o enunciado deste resultado mais convincente, tal demonstração está fora do escopo desta tese. Na verdade mesmo os cálculos realizados em (B.2) são questionáveis, pois a comutação do somatório infinito com a integral depende da veracidade de certas propriedades de convergência que não foram demonstradas aqui; contudo esta veracidade acontece e o resultado está correto.

O polilogaritmo é definido como sendo:

$$Li_\nu(z) = \frac{1}{\Gamma(\nu)} \int_0^\infty \frac{z.x^{\nu-1}dx}{e^x - z}. \tag{B.4}$$

Analogamente ao que acontece com a função zeta, o polilogaritmo pode ser visto como a continuação analítica de uma série:

$$Li_\nu(z) = \frac{1}{\Gamma(\nu)} \int_0^\infty \frac{z.x^{\nu-1}dx}{e^x - z} = \frac{1}{\Gamma(\nu)} \int_0^\infty \frac{ze^{-x}.x^{\nu-1}dx}{1 - ze^{-x}} = \frac{1}{\Gamma(\nu)} \int_0^\infty \sum_{n=1}^\infty z^n e^{-nx} x^{\nu-1} dx = \frac{1}{\Gamma(\nu)} \sum_{n=1}^\infty z^n \int_0^\infty e^{-nx} x^{\nu-1} dx = \frac{1}{\Gamma(\nu)} \sum_{n=1}^\infty \frac{z^n}{n^\nu} \int_0^\infty e^{-x} x^{\nu-1} dx = \frac{1}{\Gamma(\nu)} \sum_{n=1}^\infty \frac{z^n}{n^\nu} \Gamma(\nu) = \sum_{n=1}^\infty \frac{z^n}{n^\nu}. \tag{B.5}$$

Considerando $\nu = 1$, o polilogaritmo é dado por:

$$Li_1(z) = \frac{1}{\Gamma(1)} \int_0^\infty \frac{zdx}{e^x - z} = \int_0^\infty \frac{ze^{-x}dx}{1 - ze^{-x}} = \left[ln(1 - ze^{-x})\right]_0^\infty = -ln(1 - z), \tag{B.6}$$

daí o seu nome.

Finalmente comparando (B.3) e (B.4) vê-se claramente que

$$Li_\nu(1) = \zeta(\nu), \tag{B.7}$$

propriedade que foi usada ao longo desta tese.

Calculando o polilogaritmo agora com argumento $z = -1$ obtém-se:

$$Li_\nu(-1) = -\frac{1}{\Gamma(\nu)} \int_0^\infty \frac{x^{\nu-1}dx}{e^x + 1}, \tag{B.8}$$

mas observando que

$$\frac{1}{e^x + 1} = \frac{(e^x + 1 - 2)}{(e^x + 1)(e^x - 1)} = \frac{1}{e^x - 1} - \frac{2}{(e^x + 1)(e^x - 1)} = \frac{1}{e^x - 1} - \frac{2}{e^{2x} - 1} \tag{B.9}$$

e recordando (B.3) tem-se

$$Li_\nu(-1) = -\frac{1}{\Gamma(\nu)}\int_0^\infty \frac{x^{\nu-1}dx}{e^x-1} + \frac{2}{\Gamma(\nu)}\int_0^\infty \frac{x^{\nu-1}dx}{e^{2x}-1} = -\frac{1}{\Gamma(\nu)}\int_0^\infty \frac{x^{\nu-1}dx}{e^x-1} + \frac{1}{2^{\nu-1}\Gamma(\nu)}\int_0^\infty \frac{x^{\nu-1}dx}{e^x-1} =$$
$$= -\left(1-\frac{1}{2^{\nu-1}}\right)\frac{1}{\Gamma(\nu)}\int_0^\infty \frac{x^{\nu-1}dx}{e^x-1} = -\left(1-\frac{1}{2^{\nu-1}}\right)\zeta(\nu) = -\left(1-\frac{1}{2^{\nu-1}}\right)Li_\nu(1), \quad \text{(B.10)}$$

que foi a outra propriedade de polilogaritmo usada nesta tese.

Apêndice C

Cálculo da expressão do kernel de dois corpos.

Este apêndice visa mostrar os detalhes da obtenção da expressão (4.37), o primeiro passo para isso é obter (4.35). Sendo assim, recordando (4.34) tem-se:

$$\langle|\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2|[2\pi i\delta(E-H_0).T(E)]^n||\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2\rangle = \int (2\pi i)^n \langle|\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2|\delta(E-H_0).T(E)|\mathbf{q}_1,\mathbf{p}_1\rangle ...$$

$$\langle|\mathbf{q}_{n-2},\mathbf{p}_{n-2}|\delta(E-H_0).T(E)|\mathbf{q}_{n-1},\mathbf{p}_{n-1}\rangle.\langle|\mathbf{q}_{n-1},\mathbf{p}_{n-1}|\delta(E-H_0).T(E)|\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2\rangle \frac{d^d\mathbf{p}_1}{(2\pi)^d}\frac{d^d\mathbf{q}_1}{(2\pi)^d}...$$

$$\frac{d^d\mathbf{p}_{n-1}}{(2\pi)^d}\frac{d^d\mathbf{q}_{n-1}}{(2\pi)^d} = \int \langle|\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2|T(E)|\mathbf{q}_1,\mathbf{p}_1\rangle ... \langle|\mathbf{q}_{n-2},\mathbf{p}_{n-2}|T(E)|\mathbf{q}_{n-1},\mathbf{p}_{n-1}\rangle.\langle|\mathbf{q}_{n-1},\mathbf{p}_{n-1}|T(E)|\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2\rangle.$$

$$\delta(E-\frac{\mathbf{k}_1^2+\mathbf{k}_2^2}{2m}).\delta(E-\frac{\mathbf{p}_1^2+\mathbf{q}_1^2}{2m})...\delta(E-\frac{\mathbf{p}_{n-1}^2+\mathbf{q}_{n-1}^2}{2m})\frac{d^d\mathbf{p}_1}{(2\pi)^d}\frac{d^d\mathbf{q}_1}{(2\pi)^d}...\frac{d^d\mathbf{p}_{n-1}}{(2\pi)^d}\frac{d^d\mathbf{q}_{n-1}}{(2\pi)^d}(2\pi i)^n =$$

$$\int (2\pi i)^n \delta(E-\frac{\mathbf{k}_1^2+\mathbf{k}_2^2}{2m}).\delta(E-\frac{\mathbf{p}_1^2+\mathbf{q}_1^2}{2m})...\delta(E-\frac{\mathbf{p}_{n-1}^2+\mathbf{q}_{n-1}^2}{2m})(2\pi)^d\delta(\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2-\mathbf{p}_1-\mathbf{q}_1)\mu_{\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2\to\mathbf{p}_1,\mathbf{q}_1}$$

$$(2\pi)^d\delta(\mathbf{p}_1+\mathbf{q}_1-\mathbf{p}_2-\mathbf{q}_2)\mu_{\mathbf{p}_1,\mathbf{q}_1\to\mathbf{p}_2,\mathbf{q}_2}...(2\pi)^d\delta(\mathbf{p}_{n-1}+\mathbf{q}_{n-1}-\mathbf{k}_1-\mathbf{k}_2)\mu_{\mathbf{p}_{n-1},\mathbf{q}_{n-1}\to\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2}\frac{d^d\mathbf{p}_1}{(2\pi)^d}\frac{d^d\mathbf{q}_1}{(2\pi)^d}...$$

$$\frac{d^d\mathbf{p}_{n-1}}{(2\pi)^d}\frac{d^d\mathbf{q}_{n-1}}{(2\pi)^d} = [i\mu_{\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2\to\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2}]^n.\left[(2\pi)^{d+1}\int \frac{d^d\mathbf{p}}{(2\pi)^d}\frac{d^d\mathbf{q}}{(2\pi)^d}\delta\left(\frac{\mathbf{k}_1^2+\mathbf{k}_2^2}{(2m}-\frac{p^2+q^2}{2m}\right)\delta(\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2-\mathbf{p}-\mathbf{q})\right]^{n-1}$$

$$(2\pi)^{d+1}\delta(0)\delta\left(E-\frac{\mathbf{k}_1^2+\mathbf{k}_2^2}{2m}\right) = 2\pi V.(i\mu)^n.I^{n-1}\delta\left(E-\frac{\mathbf{k}_1^2+\mathbf{k}_2^2}{2m}\right)\Rightarrow$$

$$\Rightarrow \langle|\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2|[2\pi i\delta(E-H_0).T(E)]^n||\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2\rangle = 2\pi V.\delta\left(E-\frac{\mathbf{k}_1^2+\mathbf{k}_2^2}{2m}\right)(i\mu)^n.I^{n-1}, \quad \text{(C.1)}$$

onde $\mu \equiv \mu_{\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2\to\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2}$ e I é definido como em (4.36).

Finalmente desenvolvendo o primeiro membro de (4.33) obtém-se:

$$
\begin{aligned}
& - i\langle \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 | log\hat{S} | \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 \rangle = -i\langle \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 | log[1 + 2\pi i \delta(E - H_0)\hat{T}(E)] | \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 \rangle = \\
& i \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n \langle | \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 | [2\pi i \delta(E - H_0).T(E)]^n || \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 \rangle}{n} = 2\pi i V \delta \left(E - \frac{\mathbf{k}_1^2 + \mathbf{k}_2^2}{2m} \right) \left[\sum \frac{(-1)^n I^{n-1} (i\mu)^n}{n} \right] = \\
& - \frac{2\pi i V}{I} \delta \left(E - \frac{\mathbf{k}_1^2 + \mathbf{k}_2^2}{2m} \right) \left[- \sum \frac{(-1)^n (i\mu I)^n}{n} \right] = - \frac{2\pi i V}{I} \delta \left(E - \frac{\mathbf{k}_1^2 + \mathbf{k}_2^2}{2m} \right) log(1 + i\mu I).
\end{aligned}
\tag{C.2}
$$

Olhando novamente para (4.33) e observando que o primeiro membro corresponde ao desenvolvimento feito em (C.2), pode-se obter o kernel de dois corpos diretamente; o resultado é:

$$
G_2(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) = -\frac{i}{I} log(1 + i\mu I) \tag{C.3}
$$

e assim está provada a expressão (4.37).

Apêndice D

Cálculo do volume do espaço de fase

A seguir calcular-se-á o elemento de volume do espaço de fase em uma, duas e três dimensões; recordando (4.36) e definindo $E = \frac{\mathbf{k}_1^2+\mathbf{k}_2^2}{2m}$ e $\mathbf{P} = \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2$ tem-se:

$$I = \int \frac{d^d\mathbf{p}_1}{(2\pi)^d}\frac{d^d\mathbf{p}_2}{(2\pi)^d}(2\pi)^{d+1}\delta\left(E - \frac{\mathbf{p}_1^2+\mathbf{p}_2^2}{2m}\right).\delta(\mathbf{P}-\mathbf{p}_1-\mathbf{p}_2) = \int \frac{d^d\mathbf{p}_1}{(2\pi)^{d-1}}\delta\left(E - \frac{\mathbf{p}_1^2+(\mathbf{P}-\mathbf{p}_1)^2}{2m}\right) =$$
$$= \int \frac{d^d\mathbf{p}_1}{(2\pi)^{d-1}}\delta\left(-\frac{\mathbf{p}_1^2 - \mathbf{P}.\mathbf{p}_1 + \frac{\mathbf{P}^2}{2} - 2mE}{m}\right) = m\int \frac{d^d\mathbf{p}_1}{(2\pi)^{d-1}}\delta\left[\left(\mathbf{p}_1 - \frac{\mathbf{P}}{2}\right)^2 + \frac{\mathbf{P}^2}{4} - mE\right] =$$
$$= m\int \frac{d^d\mathbf{p}}{(2\pi)^{d-1}}\delta\left[\mathbf{p}^2 - \frac{4mE-\mathbf{P}^2}{4}\right] = \frac{m\Omega(d)}{(2\pi)^{d-1}}\int p^{d-1}\delta\left[p^2 - \frac{4mE-\mathbf{P}^2}{4}\right]dp =$$
$$= \frac{m\Omega(d)}{(2\pi)^{d-1}}\int p^{d-1}\left[\frac{\delta\left[p - \frac{\sqrt{4mE-\mathbf{P}^2}}{2}\right] + \delta\left[p + \frac{\sqrt{4mE-\mathbf{P}^2}}{2}\right]}{\sqrt{4mE-\mathbf{P}^2}}\right]dp = \frac{m\Omega(d)}{(2\pi)^{d-1}}\left(\frac{\sqrt{4mE-\mathbf{P}^2}}{2}\right)^{d-1}, \tag{D.1}$$

onde se usou a substituição $\mathbf{p} = \mathbf{p}_1 - \frac{\mathbf{P}}{2}$.

Recordando as definições de E e $\mathbf{P}$ tem-se:

$$\frac{\sqrt{4mE-\mathbf{P}^2}}{2} = \frac{\sqrt{2\mathbf{k}_1^2+2\mathbf{k}_2^2-(\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2)^2}}{2} = \frac{\sqrt{\mathbf{k}_1^2+\mathbf{k}_2^2-2\mathbf{k}_1.\mathbf{k}_2}}{2} = \frac{|\mathbf{k}_1-\mathbf{k}_2|}{2}, \tag{D.2}$$

logo o elemento de volume do espaço de fase fica sendo dado por:

$$I = \frac{m\Omega(d)}{(2\pi)^{d-1}}\left(\frac{|\mathbf{k}_1-\mathbf{k}_2|}{2}\right)^{d-1}. \tag{D.3}$$

Fazendo $d = 1, 2, 3$ e usando a expressão (A.7) tem-se:

$$d = 1 \Rightarrow I = \frac{m}{|\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2|}, \tag{D.4}$$

$$d = 2 \Rightarrow I = \frac{m}{2}, \tag{D.5}$$

$$d = 3 \Rightarrow I = \frac{m|\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2|}{4\pi}. \tag{D.6}$$

Apêndice E

Simplificação da equação integral

Substituindo o kernel (4.38) em (3.41) obtém-se:

$$y(\mathbf{k}) = 1 - \frac{16\pi\sigma\beta}{m}\int \frac{arctg\left(\frac{mg_R|\mathbf{k}-\mathbf{k}'|}{8\pi}\right)}{|\mathbf{k}-\mathbf{k}'|}\frac{ze^{-\frac{\beta\mathbf{k}'^2}{2m}}}{1-szy(\mathbf{k}')e^{-\frac{\beta\mathbf{k}'^2}{2m}}}\frac{d^3\mathbf{k}'}{(2\pi)^3} =$$
$$1 - \frac{2\sigma\beta}{\pi^2 m}\int \frac{arctg\left(\frac{mg_R|\mathbf{k}-\mathbf{k}'|}{8\pi}\right)}{|\mathbf{k}-\mathbf{k}'|}\frac{ze^{-\frac{\beta\mathbf{k}'^2}{2m}}}{1-szy(\mathbf{k}')e^{-\frac{\beta\mathbf{k}'^2}{2m}}}d^3\mathbf{k}'. \quad \text{(E.1)}$$

A integral do segundo membro pode ser simplificada quando escrita em coordenadas esféricas. Escolhendo coordenadas esféricas de modo que o eixo z coincida com a direção do vetor **k** tem-se:

$$y(\mathbf{k}) = 1 - \frac{2\sigma\beta}{\pi^2 m}\int_0^\infty k'^2dk'\int_0^\pi sen\theta d\theta\int_0^{2\pi} d\phi\frac{arctg\left(\frac{mg_R\sqrt{k^2+k'^2-2kk'cos\theta}}{8\pi}\right)}{\sqrt{k^2+k'^2-2kk'cos\theta}}\frac{ze^{-\frac{\beta\mathbf{k}'^2}{2m}}}{1-szy(\mathbf{k}')e^{-\frac{\beta\mathbf{k}'^2}{2m}}} \Rightarrow$$
$$\Rightarrow y(\mathbf{k}) = 1 - \frac{4\sigma\beta}{\pi m}\int_0^\infty k'^2dk'\int_0^\pi \frac{arctg\left(\frac{mg_R\sqrt{k^2+k'^2-2kk'cos\theta}}{8\pi}\right)}{\sqrt{k^2+k'^2-2kk'cos\theta}}\frac{ze^{-\frac{\beta\mathbf{k}'^2}{2m}}}{1-szy(\mathbf{k}')e^{-\frac{\beta\mathbf{k}'^2}{2m}}}sen\theta d\theta. \quad \text{(E.2)}$$

Fazendo a mudança de variáveis $x = cos\theta \Rightarrow dx = -sen\theta d\theta$ tem-se:

$$y(\mathbf{k}) = 1 + \frac{4\sigma\beta}{\pi m}\int_0^\infty k'^2dk'\int_1^{-1} \frac{arctg\left(\frac{mg_R\sqrt{k^2+k'^2-2kk'x}}{8\pi}\right)}{\sqrt{k^2+k'^2-2kk'x}}\frac{ze^{-\frac{\beta\mathbf{k}'^2}{2m}}}{1-szy(\mathbf{k}')e^{-\frac{\beta\mathbf{k}'^2}{2m}}}dx. \quad \text{(E.3)}$$

Apesar de não parecer simples, a integral da parte angular pode ser transformada numa integral simples com uma mera substituição de variáveis, seja $s = \frac{mg_R\sqrt{k^2+k'^2-2kk'x}}{8\pi} \Rightarrow ds = -\frac{mg_Rkk'dx}{8\pi\sqrt{k^2+k'^2-2kk'x}}$, então a equação integral fica:

$$y(\mathbf{k}) = 1 - \frac{32\sigma\beta}{m^2 g_R}\int_0^\infty \frac{k'}{k}dk' \int_{\frac{mg_R\sqrt{k^2+k'^2-2kk'}}{8\pi}}^{\frac{mg_R\sqrt{k^2+k'^2+2kk'}}{8\pi}} \frac{ze^{-\frac{\beta\mathbf{k}'^2}{2m}}arctg(s)ds}{1-szy(\mathbf{k}')e^{-\frac{\beta\mathbf{k}'^2}{2m}}} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow y(\mathbf{k}) = 1 - \frac{32\sigma\beta}{m^2 g_R}\int_0^\infty \frac{ze^{-\frac{\beta\mathbf{k}'^2}{2m}}}{1-szy(\mathbf{k}')e^{-\frac{\beta\mathbf{k}'^2}{2m}}}\frac{k'dk'}{k}\int_{\frac{mg_R\sqrt{k^2+k'^2-2kk'}}{8\pi}}^{\frac{mg_R\sqrt{k^2+k'^2+2kk'}}{8\pi}} arctg(s)ds. \quad \text{(E.4)}$$

A integral do arcotangente é facilmente feita usando integração por partes:

$$\int arctg(s)ds = s.arctgs - \int\frac{sds}{1+s^2} = s.arctgs - \frac{1}{2}\int\frac{2sds}{1+s^2} = s.arctgs - \frac{1}{2}log(1+s^2). \quad \text{(E.5)}$$

Sendo assim, após a integração do arcotangente, a equação integral fica:

$$y(\mathbf{k}) = 1 + \frac{4\sigma\beta}{\pi m}\int_0^\infty \frac{ze^{-\frac{\beta\mathbf{k}'^2}{2m}}}{1-szy(\mathbf{k}')e^{-\frac{\beta\mathbf{k}'^2}{2m}}}\frac{k'dk'}{k}$$
$$\left[\frac{4\pi}{mg_R}log\left[\frac{\left(\frac{8\pi}{mg_R}\right)^2+(k+k')^2}{\left(\frac{8\pi}{mg_R}\right)^2+(k-k')^2}\right] - (k+k')arctg\left(\frac{mg_R}{8\pi}(k+k')\right) + (k-k')arctg\left(\frac{mg_R}{8\pi}(k-k')\right)\right]. \quad \text{(E.6)}$$

Fazendo as mudanças de escala $k \to \sqrt{2mT}k$, $k' \to \sqrt{2mT}k'$ e escrevendo a equação anterior em termos do parâmtero $\alpha = \frac{\lambda}{a}$, definido no capítulo 4 desta tese, chega-se ao seguinte resultado:

$$y(\mathbf{k}) = 1 + \frac{8\sigma}{\pi}\int_0^\infty \frac{ze^{-k'^2}}{1-szy(\mathbf{k}')e^{-k'^2}}\frac{k'dk'}{k}$$
$$\left[\frac{\alpha}{2\sqrt{\pi}}log\left[\frac{\left(\frac{\alpha}{\pi^2}\right)^2+(k+k')^2}{\left(\frac{\alpha}{\pi^2}\right)^2+(k-k')^2}\right] - (k+k')arctg\left(\frac{\sqrt{\pi}}{\alpha}(k+k')\right) + (k-k')arctg\left(\frac{\sqrt{\pi}}{\alpha}(k-k')\right)\right]. \quad \text{(E.7)}$$

Resolvendo (E.7) numericamente, obtém-se $y(\mathbf{k})$ e depois as funções de escala c e q e as propriedades termodinâmicas, como explicado ao longo da tese.

Referências Bibliográficas

[1] Y. Shin, c. Schunk, A. Schirotzek, and W. Ketterle, Nature (London) 451, 689 (2008).

[2] I. Bloch, J. Dalibard, and W. Zwerger, Rev. Mod. Phys. 80, 885 (2008).

[3] C. Chin, R. Grimm, P. Julienne, and E. Tiesinga, Rev. Mod. Phys. 82, 1225 (2010).

[4] S. Nascimbène, N. Navon, K. J. Jiang, F. Chevy, and C. Salomon, Nature (London) 463, 1057 (2010).

[5] K . Van Houcke, F. Werner, E. Kozik, N. Prokofev, B. Svistunov, M. J. H. Ku, A. T. Sommer, L. W. Cheuk, A. Schirotzek, and M. W. Zwierlein, Nat. Phys. 8, 266 (2012).

[6] M. Horikoshi, S. Nakajima, M. Ueda, and T. Mukaiyama, Science 327, 442 ('2010).

[7] A. Minguzzi, S. Succi, F. Toschi, M. P. Tosi, and P .Vignolo, Phys. Rep. 395, 223 (2004).

[8] E. Burovski, N. Prokof'ev, B. Svistunov, and M. Troyer, Phys. Rev. Lett. 96, 160402 (2006).

[9] A. Bulgac, J. E. Drut, and P, Magierski, Phys. rev. A 78, 023625 (2008).

[10] P. Magiesrki, G. Wlazlowski, A. Bulgac, and J. E. Drut, Phys. Rel. Lett. 103, 210403 (2009).

[11] Y. Castin and f. Werner, BEC - BCS Crossover and the Unitary Fermi Gas, Springer Lecture Notes in Physics Vol. 836, edited by W. Zwerger (Springer, Berlin, 2012), pp. 127 - 191.

[12] H. Hu, X. J. Liu, and P. D. Drummond, New J. Phys. 12, 063038 (2010).

[13] Roger Dashen, Shanf - Keng Ma and Herbert J. Bernstein. *S - Matriz formulation of Statistical Machanics. Prys rev Vol 187, num 1(1969).*

[14] K. Huang (John Wiley & Sons, Inc. New York, 1963). *Statistical Mechanics.*

[15] A. Pais and G. Uhlenbeck, Phys. Rev. 116, 250 (1959).

[16] W. G. Gibson, Phys. Letters. 21, 619 (1966).

[17] A. S. Reiner, Phys. Rev. 151, 170 (1966).

[18] B. Baumgartl, Z. Physik 198, 148 (1967).

[19] M. L. Goldberger, Phys. Fluids 2, 252 (1959).

[20] A. Leclair, J. Phys. A 40 (2007) 9655. *Quantum Statistical mechanics of gases in terms of dynamical filling fractions and scattering amplitudes.*

[21] Pye Ton How and A. Leclair, Nuc Phys B 824, 415 (2010). *Critical point of the two dmen-sional Bose gas: an S - Matrix approach.*

[22] C. N. Yang and C. p. Yang, J. Math. Phys. 10, 1115 (1969).

[23] P. T. How and A, Leclar, J. Stat. Mech (2010) P03025. *S - matrix approach to quantum gases in the unitary limit: the two dimensional case.*

[24] P. T. How and A, Leclar, J. Stat. Mech (2010) P07001. *S - matrix approach to quantum gases in the unitary limit: the three dimensional case.*

[25] E. Kapit and A. LeClair, J. Phys. A42 (2009) 025402 [arXiv:0805.4182]. *A model of a 2d non-Fermi liquid with SO(5) symmetry, AF order, and a d-wave SC gap.*

[26] P. Nikoli?c and S. Sachdev, Phys. Rev. A75 (2007) 033608. *Renormalization group fixed points, universal phase di- agram, and 1/N expansion for quantum liquids with interactions near the unitarity limit.*

[27] André Leclair, Edgar Marcelino, Andre Nicolai, and Itzhak Roditi. Phys. Rev. A . 86. 023603 (2012).

[28] T. L. Hoand E. J. Mueller, Phys. Rev. Lett. 92, 160404 (2004).

[29] A. J. Liu, H. Hu, and P. D. drummond, Phys. Rev. Lett 102, 160401 (2009).

[30] D. B. Kaplan and S. Sun, Phys. Re. Lett. 107. 030601 (2009).

[31] X. Leyronas, Phys. Rev. A 84, 053633 (2011).

[32] D. Rakshit, K. m. Daily, and D. Blume, Phys. Rev. A 85, 033634 (2012).

[33] C. A. R. Sa de Melo, Phys. Rev. Lett 71 3202 (1993).

[34] A. Einstein, Sitzungsber. Kgl. Preuss Akad. Wis. 261 (1924); ibid 3 (1925).*Quantentheorie des einatomigen idealen Gases.*

[35] M.H. Anderson, J.R. Ensher, M.R. Matthews, C.E. Wieman, and E.A. Cornell, Science 269,198 (1995); *Observation of Bose-Einstein Condensation in a Dilute Atomic Vapor.*

[36] K. B. Davis, M. -O. Mewes, M. R. Andrews, N. J. van Druten, D. S. Durfee, D. M. Kurn, and W. Ketterle, Phys. Rev. Lett. 75, 3969 (1995); *Bose-Einstein Condensation in a Gas of Sodium Atoms.*

[37] C.C. Bradley, C.A. Sackett, J.J. Tollet, and R.G. Hulet, Phys. Rev. Lett. 75, 1687 (1995); *Evidence of Bose-Einstein Condensation in an Atomic Gas with Attractive Interactions.*

[38] G. Modugno, G. Ferrari, G. Roati, R. J. Brecha, A. Simoni, and M. Inguscio, Science 294, 1320 (2001); *Bose- Einstein Condensation of Potassium Atoms by Sympathetic Cooling.*

[39] Tino Weber, Jens Herbig, Michael Mark, Hanns-Christoph N?agerl, and Rudolf Grimm, Science 299, 232 (2003); *Bose-Einstein Condensation of Cesium.*

[40] Thomas C. Killian, Dale G. Fried, Lorenz Willmann, David Landhuis, Stephen C. Moss, Thomas J. Greytak, and Daniel Kleppner, Phys. Rev. Lett. 81, 3807 (1998); *Cold Collision Frequency Shift of the 1S- 2S Transition in Hydrogen.*

[41] Dale G. Fried, Thomas C. Killian, Lorenz Willmann, David Landhuis, Stephen C. Moss, Daniel Kleppner, and Thomas J. Greytak, Phys. Rev. Lett. 81, 3811 (1998); *Bose-Einstein Condensation of Atomic Hydrogen.*

[42] A. Robert, O. Sirjean, A. Browaeys, J. Poupard, S. Nowak, D. Boiron, C. I. Westbrook, and A. Aspect, Science 292, 461 (2001); *A Bose-Einstein Condensate of Metastable Atoms.*

[43] F. Pereira Dos Santos, J. Lonard, Junmin Wang, C. J. Barrelet, F. Perales, E. Rasel, C. S. Unnikrishnan, M. Leduc, and C. Cohen-Tannoudji, Phys. Rev. Lett. 86, 3459 (2001); *Bose-Einstein Condensation of Metastable Helium.*

[44] YosukeTakasu,KenichiMaki,KadukiKomori,TetsushiTakano,KazuhitoHonda,Mitsu- taka Kumakura, Tsutomu Yabuzaki, and Yoshiro Takahashi, Phys. Rev. Lett. 91, 040404 (2003); *Spin-Singlet Bose-Einstein Condensation of Two-Electron Atoms.*

[45] Axel Griesmaier, J?org Werner, Sven Hensler, Ju?rgen Stuhler, and Tilman Pfau, Phys. Rev. Lett. 94, 160401 (2005); *Bose- Einstein Condensation of Chromium.*

[46] S.Jochim,M.Bartenstein,A.Altmeyer,G.Hendl,S.Riedl,C.Chin,J.HeckerDenschlag, and R. Grimm, Science 302, 2101 (2003); *Bose-Einstein Condensation of Molecules.*

[47] M. W. Zwierlein, C. A. Stan, C. H. Schunck, S. M. F. Raupach, S. Gupta, Z. Hadzibabic, and W. Ketterle, Phys. Rev. Lett. 91, 250401 (2003); *Observation of Bose-Einstein Condensation of Molecules.*

[48] Cindy A. Regal, Christopher Ticknor, John L. Bohn, Deborah S. Jin, Nature 424 47 (2003); *Creation of ultra- cold molecules from a Fermi gas of atoms.*

[49] Markus Greiner, Cindy A. Regal, Deborah S. Jin, Nature 426, 537 (2003); *Emergence of a molecular BoseEin- stein condensate from a Fermi gas.*

[50] Efimov, V, Phys. Lett. 33B, 563 (1970); Efimov V., ÒWeakly-bound states of three resonantly- interacting particlesÓ, Sov. J. Nucl. Phys. 12, 589 (1971); *Energy levels arising from resonant two-body forces in a three-body system.*

[51] T. Kraemer, M. Mark, P. Waldburger, J. G. Danzl, C. Chin, B. Engeser, A. D. Lange, K. Pilch, A. Jaakkola, H.-C. Naegerl, and R. Grimm, arXiv:cond-mat/0512394 (2005); *Evidence for Efimov quantum states in an ultracold gas of cesium atoms.*

[52] H. Feshbach, Ann. Phys. 19, 287 (1962).

[53] E. Tiesinga, A. J. Moerdijk, B. J. Verhaar, and H. T. C. Stoof, Phys. Rev. A 46, R1167 (1992); *Conditions for Bose- Einstein condensation in magnetically trapped atomic cesium.*

[54] E. Tiesinga, B. J. Verhaar, and H. T. C. Stoof, Phys. Rev. A. 47, 4114 (1993); *Threshold and resonance phe- nomena in ultracold ground-state collisions.*

[55] Ph. Courteille, R. S. Freeland, D. J. Heinzen, F. A. van Abeelen and B. J. Verhaar, Phys. Rev. Lett. 81, 69 (1998); *Observation of a Feshbach Resonance in Cold Atom Scattering.*

[56] Ryota Watanabe, Shunji Tsuchiya and Yoji Ohashi, Journal of Physics: Conference Series 400 (2012) 012080; *Inhomogeneous Pseudogap Phenomenon in the BCS-BEC Crossover Regime of a Trapped Superfluid Fermi Gas.*

[57] Hui Hu, Xia-Ji Liu and Peter D Drummond, New Journal of Physics 12 (2010) 063038; *Universal thermodynamics of a strongly interacting Fermi gas: theory versus experiment.*