

## § Funções de distribuição

Como em Mecânica Estatística clássica (lembrar a função distribuição  $f$  da equação de Boltzmann), às vezes interessa restringir a atenção a distribuições de 1-partícula ou de pares. Isso pode ser feito introduzindo as matrizes densidade reduzidas:

► Def. Matrizes Densidade Reduzidas ( C.N. Yang, *Reviews of Modern Physics* 34, 694 (1962) ).

$$\langle x_1' | W_1 | x_1 \rangle \equiv \text{Tr} \left[ \rho \psi^\dagger(x_1) \psi(x_1') \right],$$

$$\langle x_1' x_2' | W_2 | x_1 x_2 \rangle \equiv \text{Tr} \left[ \rho \psi^\dagger(x_1) \psi^\dagger(x_2) \psi(x_2') \psi(x_1') \right],$$

$$\langle x_1' \dots x_m' | W_m | x_1 \dots x_m \rangle \equiv \text{Tr} \left[ \rho \psi^\dagger(x_1) \dots \psi^\dagger(x_m) \psi(x_m') \dots \psi(x_1') \right],$$

onde  $\rho$  é a Matriz Densidade do sistema de  $n$ -partículas idênticas e  $x \equiv (\vec{x}, \sigma)$  é um símbolo que inclui o spin. Os elementos diagonais definem distribuições:

$$D_m(x_1 \dots x_m) \equiv \langle x_1 \dots x_m | W_m | x_1 x_2 \dots x_m \rangle$$

Exemplo: i) Sabemos que  $\psi^\dagger(\vec{x}) \psi_\sigma(\vec{x})$  é o operador densidade de partículas com spin  $\sigma$ . Assim:

$$D_1(\vec{x}\sigma) = \text{Tr} \left[ \rho \psi_\sigma^\dagger(\vec{x}) \psi_\sigma(\vec{x}) \right] \equiv \left[ \psi_\sigma^\dagger(\vec{x}) \psi_\sigma(\vec{x}) \right]$$

onde a função distribuição  $D_1$  aparece como o valor médio do operador densidade.

A normalização é dada por :

$$\begin{aligned} \sum_{\sigma} \int d\vec{x} D_1(\vec{x}|\sigma) &= \text{Tr} \left\{ \rho \sum_{\sigma} \int d\vec{x} \psi_{\sigma}^{\dagger}(\vec{x}) \psi_{\sigma}(\vec{x}) \right\} \\ &= \text{Tr} \{ \rho N \} = [N] = \bar{N}. \end{aligned}$$

ii) A função distribuição de pares é de alguma importância. Usando a 'álgebra fundamental', temos

$$\begin{aligned} \psi^{\dagger}(x_1) \psi^{\dagger}(x_2) \psi(x_2') \psi(x_1') &= \pm \psi^{\dagger}(x_1) \psi^{\dagger}(x_2) \psi(x_1') \psi(x_2') \\ &= \pm \psi^{\dagger}(x_1) \left[ \pm \psi(x_1') \psi^{\dagger}(x_2) \mp \delta(x_2 - x_1') \right] \psi(x_2') \\ &= \psi^{\dagger}(x_1) \psi(x_1') \psi^{\dagger}(x_2) \psi(x_2') - \delta(x_2 - x_1') \psi^{\dagger}(x_1) \psi(x_2'). \end{aligned}$$

Para elementos diagonais,  $x_1' = x_1$ ,  $x_2' = x_2$  e integrando:

$$\int dx_1 \int dx_2 D_2(x_1, x_2) = \text{Tr} \{ \rho (N^2 - N) \} = \overline{N^2} - \bar{N} = \overline{N(N-1)}$$

No limite termodinâmico,  $N$  pode ser negligenciado frente a  $N^2$  e o desvio quadrático médio é nulo. Então temos:

$$\overline{N^2} = (\bar{N})^2.$$

Calculamos as funções de distribuição para bósons e férmions.

### A) Férmions

Calculamos as funções de distribuição para um gás ideal de férmions. Primeiro a matriz densidade de uma partícula:

$$\langle \vec{x}'\sigma' | W_1 | \vec{x}\sigma \rangle = \text{Tr} \left\{ \rho \psi_{\sigma}^{\dagger}(\vec{x}) \psi_{\sigma'}(\vec{x}') \right\} = \left[ \psi_{\sigma}^{\dagger}(\vec{x}) \psi_{\sigma'}(\vec{x}') \right]$$

Expandimos os campos em estados de ondas planas:

$$\psi_{\sigma'}(\vec{x}') = \sum_{\vec{k}'} \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k}' \cdot \vec{x}'} a_{\vec{k}'\sigma'}$$

$$\psi_{\sigma}^{\dagger}(\vec{x}) = \sum_{\vec{k}} \frac{1}{\sqrt{V}} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{x}} a_{\vec{k}\sigma}^{\dagger}$$

Calculamos valores médios, em geral de termos não diagonais

$$\left[ \psi_{\sigma}^{\dagger}(\vec{x}) \psi_{\sigma'}(\vec{x}') \right] = \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} e^{i(\vec{k}' \cdot \vec{x}' - \vec{k} \cdot \vec{x})} \left[ a_{\vec{k}\sigma}^{\dagger} a_{\vec{k}'\sigma'} \right]$$

Lembrar que os traços são feitos na representação dos números de ocupação. Assim:

$$\left[ a_{\vec{k}\sigma}^{\dagger} a_{\vec{k}'\sigma'} \right] = \text{Tr} \left\{ \rho a_{\vec{k}\sigma}^{\dagger} a_{\vec{k}'\sigma'} \right\} = \delta_{\sigma\sigma'} \delta_{\vec{k}\vec{k}'} \bar{n}_{\vec{k}\sigma}$$

com:

$$\left[ \psi_{\sigma}^{\dagger}(\vec{x}) \psi_{\sigma'}(\vec{x}') \right] = \delta_{\sigma\sigma'} \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{x}' - \vec{x})} \bar{n}_{\vec{k}\sigma}$$

$$\equiv \delta_{\sigma\sigma'} g(|\vec{x}' - \vec{x}|)$$

O resultado acima reflete a simetria de translação.

Até aqui, o cálculo é válido para férmions e bósons.  
Avaliemos a distribuição  $G(|\vec{x}-\vec{x}'|)$ :

$$G(|\vec{x}-\vec{x}'|) = \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\cdot(\vec{x}'-\vec{x})} \bar{n}_{\vec{k}\sigma}$$

$$= \frac{1}{V} \frac{V}{(2\pi)^3} \int d\vec{k} e^{i\vec{k}\cdot(\vec{x}'-\vec{x})} \bar{n}_{\vec{k}\sigma}$$

Escolhemos o eixo  $k_z$  segundo a direção de  $\vec{x}'-\vec{x} \equiv \vec{R}$ . A integração fica:

$$G(|\vec{x}-\vec{x}'|) = \int_0^{\infty} \frac{k^2 dk}{(2\pi)^3} \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} d\theta \sin\theta e^{ikR \cos\theta} \bar{n}(\epsilon_k)$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^{\infty} k^2 dk \bar{n}(\epsilon_k) \int_{-1}^{+1} dx e^{ikR x}, \quad R \equiv |\vec{x}-\vec{x}'|$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^{\infty} dk \bar{n}(\epsilon_k) k^2 \frac{2}{kR} \sin(kR) =$$

$$= \frac{1}{2\pi^2 R} \int_0^{\infty} dk \frac{k \sin(kR)}{\exp[\beta(\epsilon_k - \mu)] + 1}$$

Esta integral pode ser avaliada em alguns limites:

A<sub>1</sub>) temperatura nula,  $T=0$

$$G(|\vec{x}-\vec{x}'|) = \frac{1}{2\pi^2 R} \int_0^{k_F} dk k \sin(kR)$$

trocar variável para  $x \equiv kR \Rightarrow dk = \frac{dx}{R}$

$$G_{T=0}(|\vec{x}-\vec{x}'|) = \frac{1}{2\pi^2 R^3} \int_0^{k_F R} dx \, x \sin x$$

$$= \frac{1}{2\pi^2 R^3} \left[ \sin(k_F R) - k_F R \cos(k_F R) \right]$$

$$= \frac{k_F^3}{2\pi^2 (k_F R)} \left\{ \frac{\sin(k_F R)}{(k_F R)^2} - \frac{\cos(k_F R)}{k_F R} \right\}$$

$$= \frac{k_F^3}{2\pi^2 (k_F R)} j_1(k_F R),$$

onde  $j_1$  é a função de Bessel esférica de ordem 1:

$$j_1(x) = \frac{1}{x^2} (\sin x - x \cos x).$$

O vetor de Fermi  $k_F$  está ligado à densidade de fermions por:

$$\frac{4}{3} \pi k_F^3 \cdot \frac{V}{(2\pi)^3} (2s+1) = \bar{N},$$

de onde tiramos ( $(2s+1)$  é a degenerescência de spin):

$$\frac{k_F^3}{2\pi^2} = \frac{3\bar{n}}{2s+1}, \text{ com } \bar{n} \equiv \frac{\bar{N}}{V}.$$

O resultado acima fica:

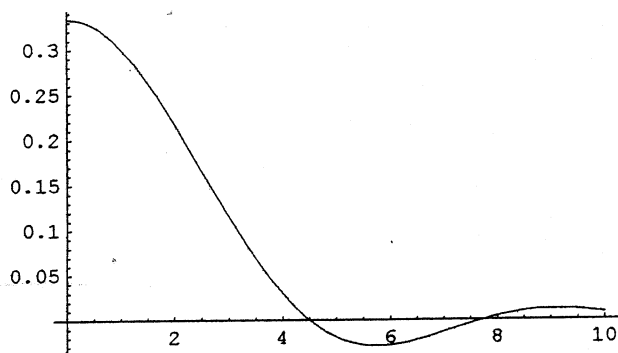
(\* Correlação de Fermi-Dirac a temperatura nula \*)

$$f[x_] = \frac{\text{Sin}[x]}{x^3} - \frac{\text{Cos}[x]}{x^2}$$

$$\text{Out}[10] = -\frac{\text{Cos}[x]}{x^2} + \frac{\text{Sin}[x]}{x^3}$$

In[11]:=

Plot[f[x], {x, 0.0, 10.0}]



Out[11]= - Graphics -

In[12]:=

N[f[0.000001]]

Out[12]= 0.333252

$$G_{T=0^0}(|\vec{x}-\vec{x}'|) = \left( \frac{3\bar{n}}{2s+1} \right) \frac{j_1(k_F R)}{k_F R}$$

Esta é uma função que oscila e cai com a distância  $R$ .  
Tem um pico em  $R=0$  e para  $k_F R \gg 1$  vai a zero  
como

$$G_{0^0}(|\vec{x}-\vec{x}'|) \underset{k_F R \rightarrow \infty}{\approx} - \left( \frac{3\bar{n}}{2s+1} \right) \frac{\cos(k_F R)}{(k_F R)^2},$$

com

$$G_{0^0}(0) = \frac{\bar{n}}{2s+1}$$

A<sub>2</sub>) Temperaturas altas, limite de Maxwell-Boltzmann.  
Nesse limite,  $e^{\beta(\epsilon_k - \mu)} \gg 1$ ,

$$\begin{aligned} G(|\vec{x}-\vec{x}'|) &= \frac{1}{2\pi^2 R} \int_0^\infty dk \frac{k \sin(kR)}{\exp[\beta(\epsilon_k - \mu)] + 1} \approx \\ &\approx \frac{1}{2\pi^2 R} \int_0^\infty dk e^{\beta\mu} k \sin(kR) e^{-\frac{\beta\hbar^2 k^2}{2m}} \\ &= \frac{e^{\beta\mu}}{2\pi^2 R} \int_0^\infty dk k \sin(kR) e^{-\frac{\beta\hbar^2}{2m} k^2} \end{aligned}$$

Ver tabela G.R.\*, pag. 502:

$$\int_0^\infty dx x \sin ax e^{-p^2 x^2} = \frac{a\sqrt{\pi}}{4p^3} \exp\left(-\frac{a^2}{4p^2}\right)$$

\* I.S. Gradshteyn e I.M. Ryzhik, "Table of integrals, series and products."

Obtemos:

$$G(|\vec{x}-\vec{x}'|) = \frac{e^{\beta\mu}}{2\pi^2 R} \frac{R\sqrt{\pi}}{4\left(\frac{\hbar^2\beta}{2m}\right)^{3/2}} \exp\left\{-\frac{(\vec{x}-\vec{x}')^2}{4\left(\frac{\beta\hbar^2}{2m}\right)}\right\}$$

Identificamos o comprimento de onda térmico no fator:

$$4\left(\frac{\hbar^2\beta}{2m}\right) = \frac{1}{\pi} \left(\frac{\hbar^2}{2\pi m k_B T}\right) = \frac{\Lambda^2}{\pi}$$

$$\begin{aligned} G(|\vec{x}-\vec{x}'|) &= \frac{\sqrt{\pi}}{2\pi^2} \frac{e^{\beta\mu}}{4\Lambda^3} (4\pi)^{3/2} \exp\left\{-\pi \frac{(\vec{x}-\vec{x}')^2}{\Lambda^2}\right\} \\ &= \frac{e^{\beta\mu}}{\Lambda^3} \exp\left\{-\pi \frac{(\vec{x}-\vec{x}')^2}{\Lambda^2}\right\} \end{aligned}$$

O potencial químico é obtida da condição:

$$G(0) = \frac{e^{\beta\mu}}{\Lambda^3} = \frac{\bar{n}}{2s+1},$$

portanto, o resultado, perto do limite clássico, fornece

$$G(|\vec{x}-\vec{x}'|) = \frac{\bar{n}}{2s+1} \exp\left\{-\pi \frac{(\vec{x}-\vec{x}')^2}{\Lambda^2}\right\},$$

isto é, as correlações não-diagonais caem rapidamente, com o comprimento característico

$$\Lambda = \left(\frac{\hbar^2}{2\pi m k_B T}\right)^{1/2}.$$



A<sub>3</sub>) Calculamos agora a matriz densidade reduzida de 2-partículas:

$$\langle x_1 x_2 | W_2 | x'_1 x'_2 \rangle = \left[ \psi_{\sigma_1}^{\dagger}(x_1) \psi_{\sigma_2}^{\dagger}(x_2) \psi_{\sigma'_2}(x'_2) \psi_{\sigma'_1}(x'_1) \right]$$

Expandimos os operadores campo em ondas planas

$$\langle x_1 x_2 | W_2 | x'_1 x'_2 \rangle = \frac{1}{V^2} \sum_{\substack{\vec{k}_1 \vec{k}_2 \\ \vec{k}'_1 \vec{k}'_2}} e^{-i(\vec{k}_1 \cdot \vec{x}_1 + \vec{k}_2 \cdot \vec{x}_2)} e^{i(\vec{k}'_1 \cdot \vec{x}'_1 + \vec{k}'_2 \cdot \vec{x}'_2)} \times \\ \times \left[ a_{\vec{k}_1 \sigma_1}^{\dagger} a_{\vec{k}_2 \sigma_2}^{\dagger} a_{\vec{k}'_2 \sigma'_2} a_{\vec{k}'_1 \sigma'_1} \right].$$

No valor médio, temos que tomar o traço na representação dos números de ocupação. Portanto, todos os valores médios serão nulos, a menos de dois termos:

i) termo direto:  $\vec{k}'_1 = \vec{k}_1, \sigma'_1 = \sigma_1; \vec{k}'_2 = \vec{k}_2, \sigma'_2 = \sigma_2.$

ii) termo de troca:  $\vec{k}'_1 = \vec{k}_2, \sigma'_1 = \sigma_2; \vec{k}'_2 = \vec{k}_1, \sigma'_2 = \sigma_1.$

No primeiro caso temos:

$$a_{\vec{k}_1 \sigma_1}^{\dagger} a_{\vec{k}_2 \sigma_2}^{\dagger} a_{\vec{k}_2 \sigma_2} a_{\vec{k}_1 \sigma_1} = -a_{\vec{k}_1 \sigma_1}^{\dagger} \left\{ -a_{\vec{k}_2 \sigma_2}^{\dagger} a_{\vec{k}_2 \sigma_2} + \delta_{\vec{k}_1 \vec{k}_2} \delta_{\sigma_1 \sigma_2} \right\} a_{\vec{k}_2 \sigma_2} \\ = N_{\vec{k}_1 \sigma_1} N_{\vec{k}_2 \sigma_2} - \delta_{\vec{k}_1 \vec{k}_2} \delta_{\sigma_1 \sigma_2} N_{\vec{k}_1 \sigma_1}$$

No segundo caso:

$$\begin{aligned}
 + a_{\vec{k}_1 \sigma_1} + a_{\vec{k}_2 \sigma_2} a_{\vec{k}_1 \sigma_1} a_{\vec{k}_2 \sigma_2} &= a_{\vec{k}_1 \sigma_1} \left\{ -a_{\vec{k}_1 \sigma_1} a_{\vec{k}_2 \sigma_2} + \delta_{\vec{k}_1 \vec{k}_2} \delta_{\sigma_1 \sigma_2} \right\} a_{\vec{k}_2 \sigma_2} \\
 &= -N_{\vec{k}_1 \sigma_1} N_{\vec{k}_2 \sigma_2} + \delta_{\vec{k}_1 \vec{k}_2} \delta_{\sigma_1 \sigma_2} N_{\vec{k}_1 \sigma_1}.
 \end{aligned}$$

Temos então:

$$\langle x_1 x_2 | W_2 | x'_1 x'_2 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{\substack{\vec{k}_1 \vec{k}_2 \\ \vec{k}'_1 \vec{k}'_2}} e^{-i(\vec{k}_1 \cdot \vec{x}_1 + \vec{k}_2 \cdot \vec{x}_2)} e^{i(\vec{k}'_1 \cdot \vec{x}'_1 + \vec{k}'_2 \cdot \vec{x}'_2)}$$

$$\times \left( \delta_{\vec{k}'_1 \vec{k}_1} \delta_{\vec{k}'_2 \vec{k}_2} \delta_{\sigma'_1 \sigma_1} \delta_{\sigma'_2 \sigma_2} - \delta_{\vec{k}'_1 \vec{k}_2} \delta_{\vec{k}'_2 \vec{k}_1} \delta_{\sigma'_1 \sigma_2} \delta_{\sigma'_2 \sigma_1} \right) [N_{\vec{k}_1 \sigma_1} N_{\vec{k}_2 \sigma_2}]$$

Para um gás livre (ideal), o operador estatístico  $\rho$  e a função partição  $\mathcal{Q}$  fatoram em termos relativos a estados de uma partícula. Assim temos:

$$[N_{\vec{k}_1 \sigma_1} N_{\vec{k}_2 \sigma_2}] = [N_{\vec{k}_1 \sigma_1}] [N_{\vec{k}_2 \sigma_2}] = \bar{n}_{\vec{k}_1 \sigma_1} \bar{n}_{\vec{k}_2 \sigma_2},$$

com:

$$\begin{aligned}
 \langle x_1 x_2 | W_2 | x'_1 x'_2 \rangle &= \delta_{\sigma'_1 \sigma_1} \delta_{\sigma'_2 \sigma_2} g(|\vec{x}_1 - \vec{x}'_1|) g(|\vec{x}_2 - \vec{x}'_2|) - \\
 &- \delta_{\sigma'_1 \sigma_2} \delta_{\sigma'_2 \sigma_1} g(|\vec{x}_1 - \vec{x}'_2|) g(|\vec{x}_2 - \vec{x}'_1|)
 \end{aligned}$$

A função distribuição de pares, é obtida tomando elementos diagonais  $\vec{x}_1' = \vec{x}_1$ ,  $\vec{x}_2' = \vec{x}_2$ ,  $\sigma_1' = \sigma_1$ ,  $\sigma_2' = \sigma_2$

$$D(\vec{x}_1 \sigma_1, \vec{x}_2 \sigma_2) = [G(0)]^2 - \delta_{\sigma_1 \sigma_2} [G(|\vec{x}_1 - \vec{x}_2|)]^2$$

Ela pode ser interpretada como a probabilidade, dada uma partícula em  $(\vec{x}_1, \sigma_1)$ , de achar a outra em  $\vec{x}_2$ , com spin  $\sigma_2$ . Notar que opera o Princípio de Pauli:

$$D(\vec{x}_1 \sigma, \vec{x}_2 \sigma) = G^2(0) - G^2(|\vec{x}_1 - \vec{x}_2|) \xrightarrow{\vec{x}_1 \rightarrow \vec{x}_2} 0.$$

No limite de Maxwell-Boltzmann, obtemos:

$$D(\vec{x}_1 \sigma, \vec{x}_2 \sigma) = \left( \frac{n}{2S+1} \right)^2 \left[ 1 - e^{-\frac{2\pi (\vec{x}_1 - \vec{x}_2)^2}{\lambda^2}} \right],$$

que é menor que o caso 'clássico', dado simplesmente pela densidade. No caso clássico, esse efeito poderia ser atribuído à interação entre as partículas com um potencial  $V(R)$ ,  $R \equiv |\vec{x}_1 - \vec{x}_2|$ , de maneira que

$$e^{-\beta V(R)} = 1 - e^{-\frac{2\pi (\vec{x}_1 - \vec{x}_2)^2}{\lambda^2}}, \text{ ou}$$

$$V(R) = -k_B T \ln \left( 1 - e^{-\frac{2\pi R^2}{\lambda^2}} \right),$$

com um 'potencial efetivo'  $v(R)$  fortemente repulsivo quando  $R \rightarrow 0$

B) Bósons (sem spin,  $s=0$ )

Primeiro, analisamos a distribuição de 1-partícula:

B<sub>1</sub>) Temperatura alta e limite de Maxwell-Boltzmann

$$\begin{aligned} \langle \vec{x}' | W_1 | \vec{x} \rangle &= [\psi^\dagger(\vec{x}) \psi(\vec{x}')] = \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{x}' - \vec{x})} \bar{n}_{\vec{k}} \\ &= G(R) = \frac{1}{2\pi^2 R} \int_0^\infty dk \frac{k \sin(kR)}{\exp[\beta(\epsilon_k - \mu)] - 1} \quad R = |\vec{x}' - \vec{x}| \\ &\approx \frac{1}{2\pi^2 R} \int_0^\infty dk \, k \sin(kR) e^{-\beta \epsilon_k} e^{\beta \mu} \\ &= \frac{e^{\beta \mu}}{2\pi^2 R} \int_0^\infty dk \, k \sin(kR) \exp\left(-\frac{\beta \hbar^2}{2m} k^2\right). \end{aligned}$$

O resultado é idêntico que para férmions (exceto pela degenerescência de spin). Assim:

$$G(R) = \bar{n} \exp\left(-\frac{\pi R^2}{\Lambda^2}\right),$$

onde em ordem mais baixa,  $x = e^{\beta \mu} = \bar{n} \Lambda^3$

B<sub>2</sub>) temperatura baixa, fase condensada

Aqui temos  $x = e^{\beta \mu} = 1$  e o número de bósons no estado fundamental é macroscópico:

$\bar{n}_0 \equiv \frac{\bar{N}_0}{V}$  e' finito no limite termodinâmico.

Assim:

$$\langle \bar{x}' | W_\lambda | \bar{x} \rangle = G_f(R) =$$

$$= \bar{n}_0(T) + \frac{1}{2\pi^2 R} \int_0^\infty dk \frac{k \sin(kR)}{\exp(\beta E_k) - 1}$$

Trocar variável para :  $\xi \equiv \beta E_k = \frac{\beta \hbar^2}{2m} k^2$

$$\Rightarrow d\xi = \frac{\beta \hbar^2}{m} k dk \quad \text{ou} \quad k dk = \frac{m}{\beta \hbar^2} d\xi$$

$$k = \sqrt{\frac{2m}{\beta \hbar^2} \xi} \quad \text{Verificar fator } \frac{m}{\beta \hbar^2} = \frac{m k_B T}{h^2 / (2\pi)^2}$$

$$\frac{m}{\beta \hbar^2} = 2\pi \left( \frac{2\pi m k_B T}{h^2} \right) = 2\pi \frac{1}{\Lambda^2} \Rightarrow k = \sqrt{\frac{4\pi}{\Lambda^2} \xi} = \frac{2}{\Lambda} \sqrt{\pi \xi}$$

Portanto:

$$G_f(R) = \bar{n}_0(T) + \frac{1}{2\pi^2 R} \frac{2\pi}{\Lambda^2} \int_0^\infty d\xi \frac{\sin\left(\frac{2}{\Lambda} R \sqrt{\pi \xi}\right)}{\exp \xi - 1}$$

Seja  $R \ll \Lambda$ ,  $\sin\left(\frac{2}{\Lambda} R \sqrt{\pi \xi}\right) = \frac{2R}{\Lambda} \sqrt{\pi \xi} - \frac{1}{6} \left(\frac{2R}{\Lambda}\right)^3 (\pi \xi)^{3/2} \dots$

Aparecem as seguintes integrais:

$$\zeta\left(\frac{3}{2}\right) \Gamma\left(\frac{3}{2}\right) = \int_0^\infty d\xi \frac{\xi^{1/2}}{e^\xi - 1}, \quad \int_0^\infty d\xi \frac{\xi^{3/2}}{e^\xi - 1} = \zeta\left(\frac{5}{2}\right) \Gamma\left(\frac{5}{2}\right)$$

com os valores:

$$\Gamma(3/2) = \frac{1}{2}\sqrt{\pi} \quad , \quad \Gamma(5/2) = \frac{3}{4}\sqrt{\pi}.$$

Obtemos a expansão:

$$\begin{aligned} g(R) &= \overline{n_0(\tau)} + \frac{1}{\pi R \Lambda^2} \left\{ \frac{2R\sqrt{\pi}}{\Lambda} \frac{1}{2}\sqrt{\pi} \zeta(3/2) - \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{6} \left(\frac{2R}{\Lambda}\right)^3 \pi^{3/2} \frac{3}{4}\sqrt{\pi} \zeta(5/2) \dots \right\} \\ &= \overline{n_0(\tau)} + \frac{\zeta(3/2)}{\Lambda^3} - \frac{\pi}{\Lambda^3} \zeta(5/2) \left(\frac{R}{\Lambda}\right)^2 \dots \end{aligned}$$

Verificamos, que para a fase condensada

$$\frac{\zeta(3/2)}{\Lambda^3} = \overline{n_1(\tau)}$$

é a densidade de partículas ocupando os estados excitados.

Assim:

$$\begin{aligned} g(R) &\cong \overline{n_0 + n_1} - \frac{\pi}{\Lambda^3} \zeta(5/2) \left(\frac{R}{\Lambda}\right)^2 \\ &= \overline{n} - \frac{\pi}{\Lambda^3} \zeta(5/2) \left(\frac{R}{\Lambda}\right)^2, \quad R \ll \Lambda \end{aligned}$$

que cai quadraticamente com  $(R/\Lambda)$  para curtas distâncias. Para estudar o comportamento a grandes distâncias ( $R \gg \Lambda$ ), voltamos à expressão inicial:

$$g(R) = \overline{n_0(T)} + \frac{1}{2\pi^2 R} \int_0^\infty dk \frac{k \sin(kR)}{\exp(\beta E_k) - 1}$$

Para  $kR \gg 1$ , a função  $\sin(kR)$  oscila fortemente, sendo seu comportamento sob integração dominado pela vizinhança de  $k \approx 0$ . Nessa região aproximamos o denominador por

$$\exp(\beta E_k) - 1 \approx \beta E_k = \left( \frac{\hbar^2}{2m k_B T} \right) k^2,$$

Assim,

$$g(R) \approx \overline{n_0(T)} + \frac{1}{2\pi^2 R} \left( \frac{2m k_B T}{\hbar^2} \right) \underbrace{\int_0^\infty dk \frac{\sin(kR)}{k}}_{\pi/2}$$

$$= \overline{n_0(T)} + \frac{(2\pi)^2 \pi}{2\pi^2 2\pi} \frac{1}{R \Lambda^2} = \overline{n_0} + \frac{1}{\Lambda^3} \left( \frac{\Lambda}{R} \right)$$

$$g(R) = \overline{n_0(T)} + \frac{1}{\Lambda^3} \left( \frac{\Lambda}{R} \right),$$

que cai lentamente com a distância ( $\sim 1/R$ ) para a densidade do condensado  $\overline{n_0}$ . Pode ser escrita como:

$$g(R) = \overline{n_0} + \frac{\overline{n_0}}{S(3/2)} \left( \frac{\Lambda}{R} \right) \quad (*)$$

Esta propriedade dada por (\*) foi chamada por Yang de "off-diagonal long range order", porque

$$\begin{aligned} \langle \vec{x}' | W_1 | \vec{x} \rangle &= g(|\vec{x} - \vec{x}'|) = g(R) = \\ &= \bar{n}_0 + \frac{1}{S(3/2)} \bar{n}' \left( \frac{\Lambda}{R} \right) \xrightarrow{|\vec{x} - \vec{x}'| \rightarrow \infty} \bar{n}_0 \neq 0 \end{aligned}$$

ou:

$$\lim_{R \rightarrow \infty} g(R) = \bar{n}_0 \neq 0,$$

isto é, os elementos fora da diagonal mostram 'coerência' a distâncias longas. Comparar com o limite de Maxwell-Boltzmann, onde

$$g(R) = \bar{n} \exp\left(-\frac{\pi R^2}{\Lambda^2}\right) \xrightarrow{R \rightarrow \infty} 0.$$

B<sub>3</sub>) Para a densidade reduzida de 2-bósons, temos:

$$\begin{aligned} \langle \vec{x}_1 \vec{x}_2 | W_2 | \vec{x}'_1 \vec{x}'_2 \rangle &= \frac{1}{V^2} \sum_{\substack{\vec{k}_1 \vec{k}_2 \\ \vec{k}'_1 \vec{k}'_2}} e^{-i(\vec{k}_1 \cdot \vec{x}_1 + \vec{k}_2 \cdot \vec{x}_2)} e^{i(\vec{k}'_1 \cdot \vec{x}'_1 + \vec{k}'_2 \cdot \vec{x}'_2)} \\ &\quad \times \left[ a_{\vec{k}_1}^+ a_{\vec{k}_2}^+ a_{\vec{k}'_2} a_{\vec{k}'_1} \right] \end{aligned}$$

Para os valores médios, tomamos traços com estados na representação dos números de ocupação:

$$\begin{aligned} \left[ a_{\vec{k}_1}^+ a_{\vec{k}_2}^+ a_{\vec{k}'_2} a_{\vec{k}'_1} \right] &= \delta_{\vec{k}'_1 \vec{k}_1} \delta_{\vec{k}'_2 \vec{k}_2} \left[ a_{\vec{k}_1}^+ (a_{\vec{k}_1}^+ a_{\vec{k}_2}^+ - \delta_{\vec{k}_1 \vec{k}_2}) a_{\vec{k}_2} \right] \\ &= \delta_{\vec{k}'_1 \vec{k}_1} \delta_{\vec{k}'_2 \vec{k}_2} \left( \left[ N_{\vec{k}_1} N_{\vec{k}_2} \right] - \delta_{\vec{k}_1 \vec{k}_2} \left[ N_{\vec{k}_1} \right] \right); \end{aligned}$$

é o termo direto.



O termo de troca da:

$$\begin{aligned} & \delta_{\vec{k}_1' \vec{k}_2} \delta_{\vec{k}_2' \vec{k}_1} \left[ a_{\vec{k}_1}^\dagger (a_{\vec{k}_1} a_{\vec{k}_2}^\dagger - \delta_{\vec{k}_1 \vec{k}_2}) a_{\vec{k}_2} \right] = \\ & = \delta_{\vec{k}_1' \vec{k}_2} \delta_{\vec{k}_2' \vec{k}_1} \left( [N_{\vec{k}_1} N_{\vec{k}_2}] - \delta_{\vec{k}_1 \vec{k}_2} [N_{\vec{k}_1}] \right). \end{aligned}$$

Portanto:

$$\begin{aligned} \langle \vec{x}_1 \vec{x}_2 | W_2 | \vec{x}_1' \vec{x}_2' \rangle &= \frac{1}{V^2} \sum_{\vec{k}_1 \vec{k}_2} e^{i\vec{k}_1 \cdot (\vec{x}_1' - \vec{x}_1)} e^{i\vec{k}_2 \cdot (\vec{x}_2' - \vec{x}_2)} [N_{\vec{k}_1} N_{\vec{k}_2}] \\ & - \frac{1}{V^2} \sum_{\vec{k}_1} e^{i\vec{k}_1 \cdot (\vec{x}_1 + \vec{x}_2' - \vec{x}_1' - \vec{x}_2)} [N_{\vec{k}_1}] + \\ & + \frac{1}{V^2} \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2} e^{i\vec{k}_1 \cdot (\vec{x}_2' - \vec{x}_1)} e^{i\vec{k}_2 \cdot (\vec{x}_1' - \vec{x}_2)} [N_{\vec{k}_1} N_{\vec{k}_2}] \\ & - \frac{1}{V^2} \sum_{\vec{k}_2} e^{i\vec{k}_2 \cdot (\vec{x}_1 + \vec{x}_2' - \vec{x}_1' - \vec{x}_2)} [N_{\vec{k}_2}]. \end{aligned}$$

Como tratamos de um sistema de partículas não-interagentes temos

$$[N_{\vec{k}_1} N_{\vec{k}_2}] = [N_{\vec{k}_1}] [N_{\vec{k}_2}] = \bar{n}_{\vec{k}_1} \bar{n}_{\vec{k}_2}$$

$$\begin{aligned} \langle \vec{x}_1 \vec{x}_2 | W_2 | \vec{x}_1' \vec{x}_2' \rangle &= g(|\vec{x}_1 - \vec{x}_1'|) g(|\vec{x}_2 - \vec{x}_2'|) + \\ & + g(|\vec{x}_1 - \vec{x}_2'|) g(|\vec{x}_2 - \vec{x}_1'|) - \frac{2}{V} g(|\vec{x}_1 + \vec{x}_2 - \vec{x}_1' - \vec{x}_2'|) \end{aligned}$$

No limite termodinâmico, o termo  $\mathcal{O}(1/V)$  pode ser negligenciado.

Resultado:

$$\langle \vec{x}_1 \vec{x}_2 | W_2 | \vec{x}'_1 \vec{x}'_2 \rangle = \langle \vec{x}_1 | W_1 | \vec{x}'_1 \rangle \langle \vec{x}_2 | W_1 | \vec{x}'_2 \rangle + \\ + \langle \vec{x}_1 | W_1 | \vec{x}'_2 \rangle \langle \vec{x}_2 | W_1 | \vec{x}'_1 \rangle.$$

A distribuição de probabilidade de pares é obtida para elementos diagonais:

$$D_2(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = \langle \vec{x}_1 \vec{x}_2 | W_2 | \vec{x}_1 \vec{x}_2 \rangle \\ = \bar{n}^2 + g^2(|\vec{x}_1 - \vec{x}_2|)$$

$$D_2(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = \bar{n}^2 + g^2(|\vec{x}_1 - \vec{x}_2|),$$

que, diferentemente de férmions, é sempre maior que o valor clássico  $\bar{n}^2$ .

A maneira ilustrativa, consideramos o caso de férmions e bósons sem spin, perto do limite de Maxwell-Boltzmann. Escreveremos então:

$$D_2(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = \bar{n}^2 \left\{ 1 \mp \exp\left(-\frac{2\pi R^2}{\Lambda^2}\right) \right\} \begin{cases} -, \text{ férmions} \\ +, \text{ bósons} \end{cases}$$

onde a correlação quântica (para acima ou para abaixo) cai com comprimento característico  $\Lambda = \left(\frac{h^2}{2m\pi k_B T}\right)^{1/2}$ . O

caso clássico corresponde com o regime aleatório, onde

$$D_2(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = \bar{n}^2, \text{ sem correlação nenhuma entre as}$$

partículas. Desde o ponto de vista clássica, a correlação é criada pelas interações. Portanto, o resultado quântico, perto do limite de Maxwell-Boltzmann, poderia ser pensado em termos de partículas clássicas com um potencial de interação tal que:

$$\exp\left\{\beta U(R)\right\} = 1 \pm \exp\left(-\frac{2\pi R^2}{\Lambda^2}\right)$$

ou

$$U(R) = -k_B T \ln \left\{ 1 \pm e^{-\frac{2\pi R^2}{\Lambda^2}} \right\}$$

i) para bósons, esse potencial é atrativo:

$$U_B(R) = -k_B T \ln \left( 1 + e^{-\frac{2\pi R^2}{\Lambda^2}} \right) < 0 ;$$

ii) para férmions, é repulsivo e infinito para  $R \rightarrow 0$

$$U_F(R) = -k_B T \ln \left( 1 - e^{-\frac{2\pi R^2}{\Lambda^2}} \right) > 0 .$$

(\* Potenciais Efetivos para Férmions e Bósons \*)

f[x\_] = -Log[1 + Exp[-2 \* π \* x<sup>2</sup>]]

Out[39]= -Log[1 + e<sup>-2πx<sup>2</sup></sup>]

In[40]:=

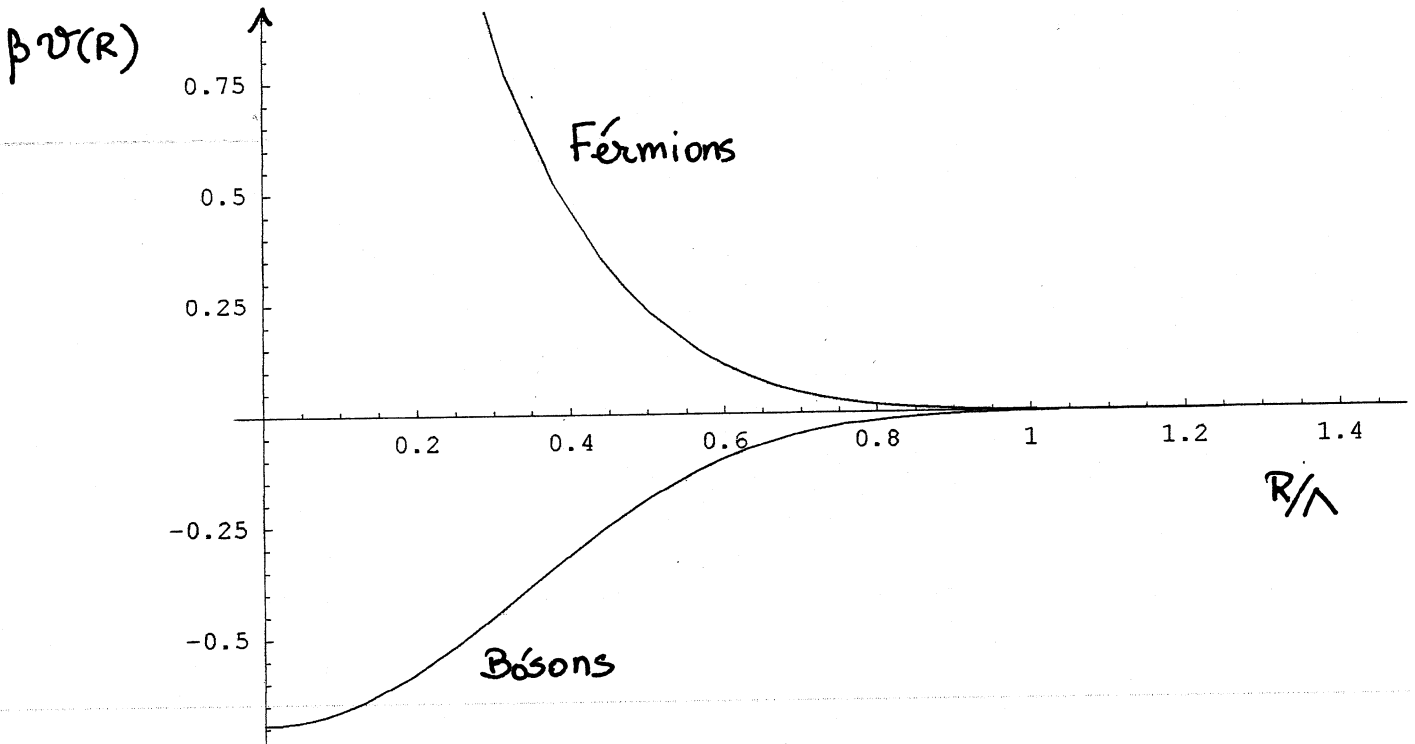
g[x\_] = -Log[1 - Exp[-2 \* π \* x<sup>2</sup>]]

Out[40]= -Log[1 - e<sup>-2πx<sup>2</sup></sup>]

In[44]:=

Plot[{f[x], g[x]}, {x, 0.0, 1.5}]

From In[44]:=



Out[44]= - Graphics -

In[46]:=

N[g[0.0001]]

Out[46]= 16.5828