



UNILAB

UNIVERSIDADE DA INTEGRAÇÃO INTERNACIONAL DA LUSOFONIA

AFRO-BRASILEIRA

INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS E DA NATUREZA - ICEN

CURSO DE GRADUAÇÃO EM FÍSICA

FRANCISCO LUCAS SANTOS OLIVEIRA

GASES DE FERMI DIPOLARES

ACARAPE

2021

FRANCISCO LUCAS SANTOS OLIVEIRA

GASES DE FERMI DIPOLARES

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado ao Curso de Graduação em Física do Instituto de Ciências Exatas e da Natureza - ICEN da Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira, como requisito parcial à obtenção do grau de Licenciatura em Física.

Orientador: Prof. Dr. Aristeu Rosendo Pontes Lima

ACARAPE

2021

Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira
Sistema de Bibliotecas da Unilab
Catalogação de Publicação na Fonte

O47g

Oliveira, Francisco Lucas Santos.

Gases de Fermi dipolares / Francisco Lucas Santos Oliveira. - 2021.

53 f. : il., color.

Monografia (graduação) - Instituto de Ciências Exatas e da Natureza, Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira, 2021.

Orientador: Prof. Dr. Aristeu Rosendo Pontes Lima.

1. Equações estáticas. 2. Interação dipolo-dipolo. 3. Superfície de Fermi. I. Título.

BA/UF/BSCM

CDD 533

FRANCISCO LUCAS SANTOS OLIVEIRA

GASES DE FERMI DIPOLARES

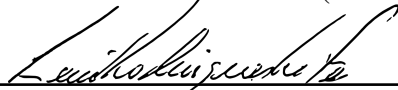
Trabalho de Conclusão de Curso apresentado ao Curso de Graduação em Física do Instituto de Ciências Exatas e da Natureza - ICEN da Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira, como requisito parcial à obtenção do grau de Licenciatura em Física.

Aprovada em:

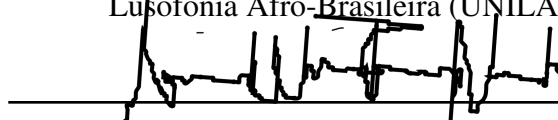
BANCA EXAMINADORA



Prof. Dr. Aristeu Rosendo Pontes Lima (Orientador)
Universidade da Integração Internacional da
Lusofonia Afro-Brasileira (UNILAB)



Prof. Dr. Levi Rodrigues Leite
Universidade da Integração Internacional da
Lusofonia Afro-Brasileira (UNILAB)



Prof. Dr. Aurélio Wildson Teixeira de Noronha
Universidade da Integração Internacional da
Lusofonia Afro-Brasileira (UNILAB)

À minha família, por sua capacidade de acreditar em mim e investir em mim. Mãe, seu cuidado e dedicação foi que deram, em todos os momentos, a esperança para seguir.

AGRADECIMENTOS

Quero primeiramente agradecer a Deus pelo dom da vida e por ter me ajudado até o presente momento.

Quero agradecer à pessoa mais importante dessa vida para mim, Dona Rosa, mulher que é minha mãe, meu pai, minha amiga, meu chão, minha maior inspiração. É por ela que ainda continuo aqui batalhando e sendo forte mesmo quando não consigo. EU TE AMO, MÃE.

Quero agradecer também ao meu irmão, Davi. Quero agradecer a minha irmã, Ingrid, por ter cuidado de mim quando era criança e por ter me dado o sobrinho mais lindo desse mundo.

Quero agradecer à Samile por ter me ajudado, me escutado, visto o quanto fiquei atribulado em muitos momentos durante a minha caminhada acadêmica e mesmo assim não desistiu de mim. Obrigado por tudo.

Quero agradecer ao professor Aristeu por ter aceitado me orientar e por ter tido muita paciência comigo. Ele é uma das minhas maiores inspirações como professor e como ser humano.

Quero agradecer à minha "panelinha", claro, Emília, Veridiano e Mazé. MUITÍSSIMO obrigado por tudo, por cada brincadeira, por cada discussão, por cada puxão de orelha, por cada atividade resolvida, por cada riso, por cada choro. Muito bom saber que eu não fiz só amigos e sim, irmãos.

Quero agradecer também ao meu amigo e irmão Cristiano. Ele me ajudou e tem me ajudado a passar por muita, muita coisa nesse período de universidade. Sou muito grato a Deus por sua amizade. Ponho aqui também os meus agradecimentos aos meus amigos Jean, Abmael, Midana, Vitória, Erico, Pedro, Joel. Eles também contribuíram muito para o meu crescimento profissional bem como pessoal.

Quero agradecer a todo o corpo docente do curso de Física da UNILAB, como também os professores das disciplinas pedagógicas e de matemática.

Quero agradecer especialmente ao professor Michel por ter me aceitado em seu grupo de Ensino, Pesquisa e Popularização da Astronomia e Astrofísica (GEPPAA). Nesse grupo fiz minha primeira viagem para fora do Ceará, representando-o. Foi nele também que cresci MUITO. Sou muito grato ao professor Michel por isso.

Quero agradecer também à professora Cinthia por ter me aceito em seu projeto de pesquisa, na área de Física Médica. Foi através desse projeto que participei do primeiro evento em inglês, uma experiência muito boa. Quero agradecer por cada conselho, por cada riso.

Quero agradecer a todos que contribuíram, direta ou indiretamente, para o meu crescimento pessoal e profissional. VENCEMOS!!!!

“Todos somos feitos do mesmo material - pedaços explodidos da matéria que se formou no calor de estrelas.”

(Blake Crouch)

RESUMO

Recentemente, os gases de Fermi ultrafrios têm sido alvo de intensos estudos, principalmente quanto às suas propriedades em temperatura zero. Na ausência de interações ou na presença de interações isotrópicas, a superfície de Fermi é esférica. Uma interação anisotrópica, porém, pode causar a deformação dessa superfície. Por exemplo, com interação do tipo dipolo-dipolo entre as partículas, a superfície assume uma forma de um elipsóide, uma vez que tende a minimizar a energia do sistema ao se alongar na direção de polarização dos dipolos. Diante disso, o objetivo do trabalho é fazer uma revisão teórica dos gases de Fermi dipolares e suas propriedades estáticas considerando a orientação dos dipolos ao longo do eixo z . De início, estudamos as características de um gás de Fermi ideal homogêneo e, depois, consideramos um gás de Fermi ideal preso por um potencial harmônico. No caso homogêneo, obtivemos a densidade de estados, além da energia interna e da pressão, estas últimas em $T = 0$. Já no caso harmônico, estudamos a densidade de estados, a densidade espacial e a distribuição de momento. Em seguida, antes de incluir a interação de dipolo-dipolo entre as partículas, apresentamos o experimento que possibilitou a observação da deformação da superfície de Fermi. Posteriormente, por meio de um ansatz apropriado para a função de Wigner, estudamos um gás de Fermi dipolar em uma armadilha triaxial e calculamos a energia total, obtendo as equações estáticas do sistema, que governam os parâmetros variacionais no equilíbrio. Por fim, introduzimos um sistema adequado de coordenadas adimensionais e estudamos um gás de Fermi interagente em uma armadilha cilíndrica e suas equações estáticas.

Palavras-chave: Superfície de Fermi. Interação dipolo-dipolo. Equações estáticas.

ABSTRACT

Recently, ultra-cold Fermi gases have been the subject of intense studies, mainly regarding their properties at zero temperature. In the absence of interactions or in the presence of isotropic interactions, the Fermi surface is spherical. In the case of anisotropic interaction, however, the deformation of this surface can take place. For example, with dipole-dipole interaction between the particles, the surface assumes the shape of an ellipsoid, since it tends to minimize the energy of the system by stretching in the direction of polarization of the dipoles. Therefore, the main goal of the work is to perform a theoretical review of the dipolar Fermi gases and their static properties considering the orientation of the dipoles along the z axis. At first, we study the characteristics of an ideal homogeneous Fermi gas and then we consider an ideal Fermi gas trapped in a harmonic potential. In the homogeneous case, we obtained the density of state, in addition to the internal energy and pressure at $T = 0$. In the harmonic case, we studied the density of state, the spatial density and the moment distribution. Then, before including the dipole-dipole interaction between the particles, we present the experiment that observed the deformation of the Fermi surface. Subsequently, using an appropriate ansatz for the Wigner function, we study a dipolar Fermi gas in a triaxial trap and calculate the total energy and obtain the static equations of the system, which govern the variational parameters in equilibrium. Finally, we introduce an appropriate set of dimensionless coordinates and study an interacting Fermi gas in a cylindrical trap and its static equations.

Keywords: Fermi surface. Dipole-dipole Interaction. Static equations

LISTA DE FIGURAS

- Figura 1 – Imagens bidimensionais de cores falsas de nuvens ${}^6\text{Li}$ e ${}^7\text{Li}$. Em $T / T_F = 1,0$, as duas nuvens têm aproximadamente o mesmo tamanho, mas à medida que os átomos são resfriados ainda mais, para $T/T_F = 0,56$, o gás de Bose se contrai, enquanto o gás de Fermi exibe apenas mudanças sutis de tamanho. Em $T/T_F = 0,25$, a diferença de tamanho entre os dois gases é claramente discernível. A esta temperatura, a imagem ${}^7\text{Li}$ exibe distorções devido à alta densidade óptica. 15
- Figura 2 – Esquematização das formas que as partículas são consideradas a temperaturas diferentes. **A)** Em temperatura ambiente as partículas se comportam como bolas de bilhar; **B)** Em baixas temperaturas quando a distância entre as partículas for comparável ao comprimento de onda de Broglie os efeitos ondulatórios começam aparecer. 19
- Figura 3 – Gráfico comparativo das funções de distribuições de um gás ideal, onde no eixo horizontal temos a energia e no eixo vertical temos a função de distribuição. a) Quando $\mu = 1$ e $k_B T = 0.01$ e as funções de distribuição de Bose-Einstein e a de Maxwell-Boltzmann tem o mesmo comportamento, onde todas as partículas se juntam em um mesmo estado de energia, enquanto a função de distribuição de Fermi-Dirac nos mostra que para cada estado de energia tem-se uma única partícula. b) Para $\mu = 1$ e $k_B T = 0.30$ observe que quando a energia aumenta as 3 funções de distribuição tendem a ter o mesmo comportamento. 20
- Figura 4 – Representação da função de distribuição da densidade de partícula. Observe que nos eixos x e y temos uma simetria, enquanto no eixo z temos uma alongamento. 25
- Figura 5 – Interação dos dipolos. (a) Dipolos com orientação arbitrária. (b) Direção de orientação dos dipolos. (c) Dipolos paralelos com posição relativa \vec{r} . (d) Dipolos paralelos (repulsão). (e) Dipolos cabeça-cauda (atração). 27

Figura 6 – A SFD segue a orientação da armadilha, onde o eixo horizontal representa a variação dos ângulos, denominados pela letra β . O eixo vertical representa o espectro da nuvem, que é definida como a razão entre o semieixo maior com o semieixo menor da nuvem no plano de imagem. Observe que quando o ângulo (eixo paralelo) varia a SFD também varia seguindo a rotação da orientação do dipolo, mantendo ao eixo maior sempre paralelo à direção de atração máxima da IDD.	28
Figura 7 – Relação da SFD com a temperatura, sendo o eixo horizontal a temperatura e o eixo vertical é o grau de deformação da superfície. Na figura as linhas representam a orientação do campo. A linha azul temos $\beta = 0^\circ$ e a linha vermelha $\beta = 90^\circ$. Para os dois casos é possível perceber que ao aumentar a temperatura a deformação da superfície tende a zero.	29
Figura 8 – Imagem obtida pelo experimento mostrando a SFD.(A) imagem experimental; (B) imagem ajustada. Observe que a parte vermelha mostra um maior impulso espalhado na orientação do dipolo (parte vermelha) do que nas outras (parte azul).	30
Figura 9 – Representação da superfície de Fermi. (a) e (b) representam a SF no espaço dos momentos; A ilustração (a) representa um gás de Fermi sem interação, enquanto (b) corresponde ao gás de Fermi dipolar com SF esticada em elipsóides cujos eixos coincidem com os eixos da armadilha.	31
Figura 10 – Função de anisotropia $f(x,y)$ que é limitada entre 1 para valores pequenos de x ou y e -2 para valores grandes de ambos os argumentos. Alinha preta representa a função de anisotropia para o caso de uma armadilha cilíndrica. .	34

LISTA DE SÍMBOLOS

Θ	Heaviside
V_{dd}	Potencial de interação dipolo-dipolo
μ	Potencial químico
ϵ_{dd}^f	Força dipolar adimensional
f	Função de anisotropia
f_s	Função de anisotropia cilíndrica
f_{MB}	Função de distribuição de Maxwell-Boltzmann
f_{BE}	Função de distribuição de Bose-Einstein
f_{FD}	Função de distribuição de Fermi-Dirac
k_B	Constante de Boltzmann
E_F	Energia de Fermi
R_i^0	Raio de Fermi
K_F	Momento de Fermi
$\bar{\omega}$	Frequência média de oscilação da armadilha
ω_i	Frequência de oscilação da armadilha
\hbar	Constante de Planck reduzida
λ	Comprimento de onda
ϵ_0	permissividade no vácuo
μ_e	momento de dipolo elétrico
μ_m	momento de dipolo magnético

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	14
2	GASES DE FERMI	18
2.1	Estatística quântica	18
2.2	Gás de Fermi ideal homogêneo	21
2.3	Gás de Fermi ideal em uma armadilha harmônica	23
3	GASES DE FERMI DIPOLARES	26
3.1	Potencial de dipolo-dipolo	26
3.2	Descrição de experimentos	28
4	ABORDAGEM VARIACIONAL	31
4.1	Ansatz para função de Wigner	31
4.2	Armadilha triaxial	32
4.3	Armadilha cilíndrica	35
5	CONCLUSÕES E TRABALHOS FUTUROS	38
	REFERÊNCIAS	39
	APÊNDICES	43
	APÊNDICE A – Transformada de Fourier da Interação Dipolo-Dipolo	43
	APÊNDICE B – Cálculo da energia de Hartree	45
	APÊNDICE C – Energia de Fock	49

1 INTRODUÇÃO

No início do século XX, a área da física teve um grande avanço, sendo um dos motivos a dedução da teoria da radiação do corpo negro feita por Max Planck em 1901 [1]. A partir dessa teoria surgiu a área da mecânica quântica que estuda o comportamento e as estruturas de objetos em dimensões próximas ou abaixo da escala atômica.

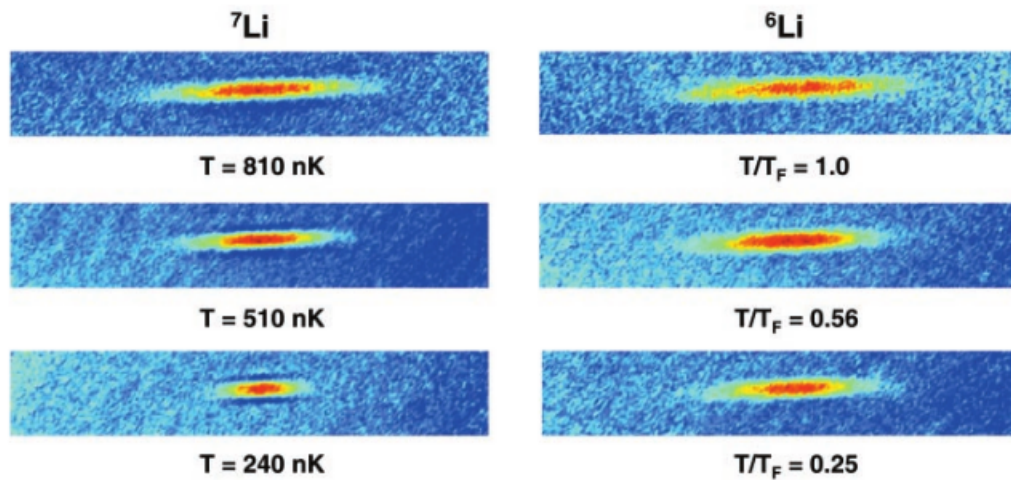
Foi também no início do século XX que começou o estudo de como a matéria se comportava a baixas temperaturas. Em 1911, o físico holandês Heike Kamerlingh Onnes resfriou um mercúrio sólido a uma temperatura de 3K e percebeu que o gás tende a conduzir a corrente sem nenhuma resistência, efeito que chamou de supercondutividade. Por essa descoberta, Onnes recebeu o prêmio Nobel de física em 1913 [2].

Alguns anos depois, em 1924, outro fenômeno de matéria a baixas temperaturas foi descrito teoricamente por Satyendra Bose [3] e por Albert Einstein [4]. Bose considerou que as partículas quânticas idênticas são indistinguíveis, possibilitando a derivação da fórmula de Planck da radiação do corpo negro. Einstein expandiu a proposta de Bose para um gás de partículas maciças não interagentes. Essa teoria desenvolvida por eles afirma que as partículas tendem a ocupar o menor estado de energia, representando assim um novo estado da matéria. Este fenômeno ficou conhecido como o condensado de Bose-Einstein (CBE). Porém, a realização experimental desse novo estado foi feita apenas 71 anos depois, em 1995 pelos físicos Eric Allin Cornell e Carl Wieman que conseguiram resfriar um gás de ^{87}Rb a uma temperatura de 170 nK [5]. A condensação também foi realizada usando átomos de Na por Wolfgang Ketterle no MIT (*Massachusetts Institute of Technology*) no mesmo ano [6].

Com a descoberta experimental do condensado de Bose-Einstein, a comunidade científica voltou seus olhos para os gases fermiônicos. Porém, para um gás de Fermi a abordagem é bem diferente, pois os férmions obedecem ao Princípio de Exclusão de Pauli (PEP) que tem como consequência o "empilhamento" das partículas em cada estado de energia dificultando a obtenção de baixas temperaturas. A teoria para os férmions foi desenvolvida por dois físicos na mesma época, porém independente um do outro. Enrico Fermi [7] e Paul. A. M. Dirac [8] foram os responsáveis por explicar teoricamente, em 1926, que em sistemas com partículas que são representadas por autofunções antissimétricas não podem haver estados estacionários com dois ou mais férmions na mesma órbita, que é o PEP.

Com essas propriedades, no estado fundamental, o gás de Fermi é chamado de mar de Fermi e sua geometria é esférica. Enquanto um gás de bósons sofre uma transição de fase

Figura 1 – Imagens bidimensionais de cores falsas de nuvens ${}^6\text{Li}$ e ${}^7\text{Li}$. Em $T/T_F = 1,0$, as duas nuvens têm aproximadamente o mesmo tamanho, mas à medida que os átomos são resfriados ainda mais, para $T/T_F = 0,56$, o gás de Bose se contrai, enquanto o gás de Fermi exibe apenas mudanças sutis de tamanho. Em $T/T_F = 0,25$, a diferença de tamanho entre os dois gases é claramente discernível. A esta temperatura, a imagem ${}^7\text{Li}$ exibe distorções devido à alta densidade óptica.



Fonte: Retirada de [11].

para um Condensado de Bose-Einstein (CBE), os férmions sofre uma transição suave para a degeneração quântica [9]. Os primeiros dados experimentais da degeneração quântica de um gás de Fermi foi obtido em 1999, pelos físicos Brian DeMarco e Deborah Jin do grupo do *Joint Institute for Laboratory Astrophysics* (JILA). Eles resfriaram um gás contendo um número de 7×10^4 átomos a uma temperatura de $0.5T_F$, onde T_F é a temperatura de Fermi [10]. Os dados obtidos não correspondida com a teoria clássica, mas coincidiam com previsões teóricas para gases de Fermi degenerados, tornando assim a natureza quântica da amostra aparente [9].

Dois anos após o experimento em JILA, Truscott *et al.* [11] publicou um artigo relatando a observação da pressão de Fermi em um gás de átomos aprisionados. Neste artigo, o experimento foi realizado com átomos de ${}^6\text{Li}$, que são bósons, e com átomos de ${}^7\text{Li}$, que são férmions. Os dados obtidos foram que, ao diminuir a temperatura o gás de bósons se contrai, enquanto o gás de férmions não sofre tanta essa contração devido ao PEP, como podemos ver na Fig. 1.

Com os dados obtidos da degeneração quântica de um gás de Fermi, surgiu a possibilidade de estudar a interação de dipolo-dipolo (IDD) de longo alcance em um gás de Fermi polarizado. O primeiro registro teórico que considerou um gás de Fermi dipolar foi publicado por K. Góral *et al.* em 2001 [12]. Góral utilizou de uma teoria semiclássica para

dipolos fermiônicos que permitiu o estudo das excitações hidrodinâmicas de um gás de Fermi de muitos corpos [13]. Neste período também foi estudado o emparelhamento anisotrópico em gases dipolares polarizados em amostras homogêneas [14], como também o estudo desses gases aprisionados harmonicamente [15]. Alguns anos depois, estudos feitos por Miyakawa, em 2008, mostraram que, devido a IDD, Superfície de Fermi (SF) seria deformada de uma esfera para um elipsóide [16]. Outros estudos também analisaram algumas propriedades dos gases de Fermi dipolares aprisionados, como as soluções estáticas, excitações baixas e dinâmicas de tempo de voo a temperatura zero [17], como também a temperaturas finitas [18] e no regime hidrodinâmico [19, 20].

Os gases de Fermi dipolares são formados por átomos ou moléculas com um momento dipolar magnético ou elétrico permanente ou induzido. Os momentos dipolares permanentes seguem a orientação dos campos externos para os dois tipos de gases quânticos dipolares ultrafrios. Para um gás bosônico, temos o experimento de Stuttgart [21]. Para o gás fermiônico, temos o experimento de Innsbruck [22] que será apresentado no Cap. 3.

O experimento de Innsbruck foi realizado com um gás de Fermi com dipolos magnéticos, porém, alguns experimentos já estavam sendo realizados com moléculas polares heteronucleares. Essas moléculas são válidas para estudos devido aos seus grandes momentos de dipolo elétrico. Estudo desenvolvido por Christopher em 2008, com moléculas heteronucleares, possibilitou o controle da interação entre as partículas no sistema através de campos elétricos aplicados [23]. Um ano depois, em 2009, Ospelkaus *et al.* conseguiu aproximar as moléculas de $^{40}\text{K}^{87}\text{Rb}$ da degenerescência quântica [24] e logo após, este mesmo grupo conseguiu detectar a anisotropia da amostra $^{40}\text{K}^{87}\text{Rb}$ causada pela IDD [25], como também a distribuição espacial e de momento [26]. Contudo, essas moléculas não são adequadas para estudos com temperaturas mais baixas devido a sua instabilidade química [9].

Com esse comportamento que o gás de Fermi dipolar apresenta, uma das teorias que mais chamaram atenção e que pôde ser comprovada é a teoria BCS. A teoria BCS, desenvolvida por John Bardeen, Leon Cooper e John Robert Schrieffer que ganharam o prêmio Nobel de Física em 1972, foi a primeira teoria microscópica da supercondutividade e explica esse efeito considerando a interação entre os férmions [27]. Quando os férmions tem uma interação atraente formam pares de Cooper que se comportam como uma partícula de spin inteiro e são regidos pelo estatística de Bose-Einstein, mesmo seus constituintes sendo férmions. Entretanto, quando a interação entre esses férmions forem repulsivas, serão formadas moléculas fracamente ligadas

em comparação aos pares de Cooper, e a condensação levará a superfluidez.

Os gases fermiônicos são particularmente interessantes pela possibilidade intrigante como a superfluidez anisotrópica em três dimensões ou Berenzinskii-Kosterlitz em duas dimensões, a existência de estados supersólidos fermiônicos, além da formação de gotículas fermiônicas, entre outros. Neles, a temperatura se mostra o fator primordial, já que tende a modificar a forma como a interação afeta as propriedades estáticas e dinâmicas do sistema.

Este Trabalho

A divisão desta monografia é feita com o objetivo de apresentar uma revisão dos estudos sobre gases fermiônicos ultrafrios. No início do Cap. 2 analisamos a diferença entre partículas clássicas para partículas quânticas, apresentando as funções de distribuição e as diferenças entre elas em baixas temperaturas. No mesmo capítulo, apresentamos o comportamento e as características de um gás de Fermi ideal homogêneo como também para um gás de Fermi ideal preso a uma armadilha harmônica. Definiremos a superfície de Fermi (SF) e o conceito de densidade de estados.

No Cap. 3, apresentamos o conceito de momento de dipolo das partículas e definimos o potencial de interação dipolo-dipolo que é de longo alcance e anisotrópico. Discutimos sobre a deformação que a SF sofre devido a este potencial, deixando de ser uma esfera para se tornar um elipsóide. Logo após, vamos apresentar um estudo experimental que pôde observar a referida deformação na SF.

O início do Cap. 4 apresentamos uma definição do que é uma ansatz e qual ansatz será utilizada para representar a um gás de Fermi dipolar degenerado com orientação ao longo do eixo z . Em seguida, abordamos a energia total de um gás de Fermi preso a uma armadilha triaxial e suas equações estáticas. Por fim, analisamos um sistema com armadilha cilíndrica, onde mostramos a energia total do sistema, como também, a minimizamos e encontramos as equações estáticas.

Por fim, no Cap. 5, apresentamos as conclusões desta monografia e expomos nossas perspectivas para futuros trabalhos.

2 GASES DE FERMI

Neste capítulo abordamos inicialmente o estudo da estatística de um gás quântico, mostrando as diferenças entre as duas categorias de partículas que são os bósons e os férmions. Em seguida, vamos analisar um gás de Fermi e suas propriedades em $T = 0K$ em sistemas homogêneos e na presença de um potencial externo.

2.1 Estatística quântica

No início do século XX, alguns experimentos mostraram que partículas subatômicas podem se comportar como onda e como partícula, teoria que ficou denominada como dualidade onda-partícula [28]. Essa teoria foi reforçada quando o físico Louis de Broglie apresentou o comprimento de onda das partículas, característica essa que apenas as ondas tinham [29]. De Broglie definiu o comprimento de onda das partículas λ como

$$\lambda = \frac{h}{p}, \quad (2.1)$$

onde h é a constante de Planck e p é o momento linear.

Através da Eq.(2.1) é possível perceber a transição da física clássica para a física quântica. Quando a temperatura for elevada, as partículas estarão com grande energia cinética, tornando assim o seu comprimento de onda bem pequeno, e neste caso, podemos considerar as partículas como bolas de bilhar, como mostrado da Fig. 2(A), e analisá-las através da física clássica. Porém, quanto menor for a temperatura, menor é sua energia cinética e por consequência, maior seu comprimento de onda de Broglie. Quando as partículas são resfriadas a ponto de seu comprimento de onda de Broglie ser comparável a separação interatômica, como mostra a Fig. 2(B), os efeitos quânticos começam aparecer [30].

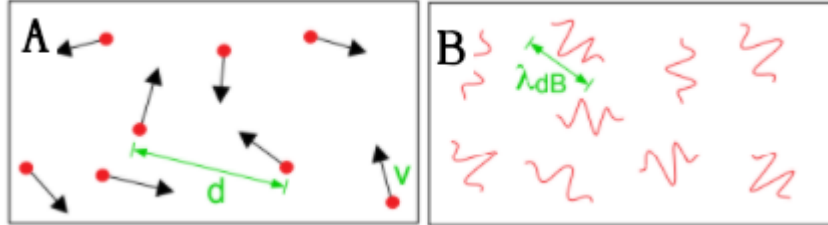
No âmbito da física quântica, as partículas são separadas em dois grupos: as bosônicas e as fermiônicas. As diferenças está nas suas funções de onda, enquanto a função de onda para os bósons é simétrica diante a inversão simultânea das coordenadas espaciais, a função de onda para os férmions é anti-simétrica, como mostrado na equação abaixo

$$\psi_{\pm}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = A[\psi_a(\vec{r}_1)\psi_b(\vec{r}_2) \pm \psi_b(\vec{r}_1)\psi_a(\vec{r}_2)], \quad (2.2)$$

onde o sinal $+$ representa os bósons e o sinal de $-$ os férmions.

Através da Eq. (2.2) é possível analisar o que ocorre se colocarmos dois férmions (pode ser dois elétrons, por exemplo) no mesmo estado quântico, $\psi_a = \psi_b$. Neste caso a função

Figura 2 – Esquematização das formas que as partículas são consideradas a temperaturas diferentes. **A)** Em temperatura ambiente as partículas se comportam como bolas de bilhar; **B)** Em baixas temperaturas quando a distância entre as partículas for comparável ao comprimento de onda de Broglie os efeitos ondulatórios começam a aparecer.



Fonte: Adaptada de [30].

de onda do sistema será

$$\psi_{-}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = A[\psi_a(\vec{r}_1)\psi_a(\vec{r}_2) - \psi_a(\vec{r}_1)\psi_a(\vec{r}_2)] = 0. \quad (2.3)$$

Podemos ver que a probabilidade de encontrar dois elétrons no mesmo estado quântico simultaneamente é zero. A este resultado, damos o nome de princípio de exclusão de Pauli [31].

Todavia, as distinções das partículas começam a aparecer apenas em baixas temperaturas da ordem da temperatura de Fermi T_F . No caso da temperatura ambiente, não há distinções entre essas duas categorias e ambas podem ser analisadas a partir da função de distribuição de Maxwell-Boltzmann

$$f_{MB}(E) = \frac{1}{e^{\beta(E-\mu)}}, \quad (2.4)$$

onde $\beta = 1/k_B T$, k_B é a constante de Boltzmann e μ representa o potencial químico.

Porém, a baixas temperaturas nem os bósons nem os férmions são descritos pela função de distribuição da Eq. (2.4). Neste caso, a função de distribuição para os bósons foi desenvolvida por S. N. Bose [3] e A. Einstein [4] e tem como expressão

$$f_{BE}(E) = \frac{1}{e^{\beta(E-\mu)} - 1}. \quad (2.5)$$

Observe que quando $E = \mu$ a função de distribuição de Bose-Einstein diverge, implicando na aglomeração das partículas no menor estado de energia, que é o CBE, um novo estado da matéria [33], como representada na cor laranja na Fig. 3(a)

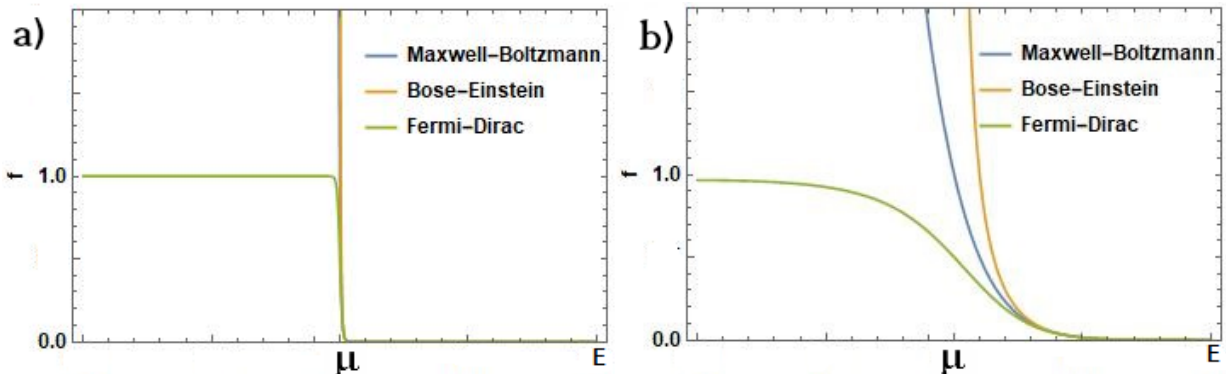
Para os férmions, a função de distribuição foi desenvolvida por E. Fermi [7] e P. A. M. Dirac [8] e pode ser expressa como

$$f_{FD}(E) = \frac{1}{e^{\beta(E-\mu)} + 1}. \quad (2.6)$$

No lim $\beta \rightarrow \infty$ e considerando $E > \mu$, vamos ter que a função de distribuição é zero. Porém, tomando o mesmo limite e considerando $E < \mu$, vamos ter que a função de distribuição é igual a 1. Isso implica que para $E > \mu$ os estados estão vazios e, para $E < \mu$ todos os estados estão ocupados, obedecendo ao PEP, como representada em verde na Fig. 3(a).

Entretanto, quando $(E - \mu)/K_bT \gg 1$ as funções de distribuição Fermi-Dirac (em verde) e Bose-Einstein (em laranja) se aproximam da distribuição de Boltzmann (em azul) [32], como mostra a Fig. 3(b).

Figura 3 – Gráfico comparativo das funções de distribuições de um gás ideal, onde no eixo horizontal temos a energia e no eixo vertical temos a função de distribuição. a) Quando $\mu = 1$ e $k_bT = 0.01$ e as funções de distribuição de Bose-Einstein e a de Maxwell-Boltzmann tem o mesmo comportamento, onde todas as partículas se juntam em um mesmo estado de energia, enquanto a função de distribuição de Fermi-Dirac nos mostra que para cada estado de energia tem-se uma única partícula. b) Para $\mu = 1$ e $k_bT = 0.30$ observe que quando a energia aumenta as 3 funções de distribuição tendem a ter o mesmo comportamento.



Fonte: Elaborada pelo autor.

Então, com base nessa característica dos gases de Fermi a baixas temperaturas, nas duas próximas seções iremos analisar um gás de Fermi ideal homogêneo e um gás de Fermi ideal preso a uma armadilha harmônica e mostrar as diferenças que existem entre ambos os casos.

2.2 Gás de Fermi ideal homogêneo

Nesta seção vamos analisar as propriedades de um gás de Fermi ideal, ou seja, sem interação entre as partículas, em temperatura zero. Vamos considerar que o gás tem N partículas de massa M , e que o gás está confinado em um volume V . Neste caso, o operador hamiltoniano do sistema é

$$H(\vec{p}) = \frac{1}{2M}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2), \quad (2.7)$$

e a energia permitida para cada a partícula tem a seguinte expressão

$$E_{n_x, n_y, n_z} = \frac{\hbar^2 k^2}{2M}, \quad (2.8)$$

sendo \vec{k} a magnitude do vetor de onda e é definido como $\vec{k} = 2\pi\vec{n}/L$, com o número de onda $\vec{n} = (n_x, n_y, n_z)$, tal que n_x, n_y e $n_z \in \mathbb{N}$.

Como mostrado na Fig. 3(b), todos os estados são ocupados até determinada energia. Esta energia limite é chamada de energia de Fermi e é denotada por E_F . Então, decorre da Eq. (2.8), se temos a condição de $E < E_F$, temos também $|k| \leq k_F$, onde k_F é o momento de Fermi. Com isso, a superfície que separa os estados desocupados dos estados ocupados, chamada de superfície de Fermi (SF), geometricamente é uma esfera de raio k_F , pois $k_F^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2$.

No limite termodinâmico, em que $N \rightarrow \infty$, $L \rightarrow \infty$, mas $n = N/L^3$ é constante, podemos usar uma abordagem semi-clássica [12] para calcular o número de partículas. Considerando que os níveis de energia forem suficientemente próximos, podemos substituir a soma dos estados por integrais, de forma que

$$N(E) = \int \frac{d^3r d^3k}{(2\pi)^3} \Theta[E_F - H(\vec{k})], \quad (2.9)$$

onde Θ é a função de heaviside. Ela é utilizada para representar a diferença dos estados ocupados para os estados desocupados, de tal forma que segue

$$\Theta(E_F - H(\vec{k})) = \begin{cases} 1, & \text{se } E_F - H(\vec{k}) \geq 0 \\ 0, & \text{se } E_F - H(\vec{k}) < 0. \end{cases} \quad (2.10)$$

Com isso, vamos substituir a Eq. (2.7) na Eq. (2.9)

$$N(E) = \int \frac{d^3r d^3k}{(2\pi)^3} \Theta \left[E_F - \frac{(\hbar k)^2}{2M} \right], \quad (2.11)$$

sendo $p = \hbar k$. Observe que a integral no espaço real nos dará o volume da SF. Dessa maneira ficamos com a expressão

$$N(E) = \frac{V}{(2\pi)^3} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi d\theta \sin\theta \int_0^\infty dk k^2 \Theta \left[E_f - \frac{(\hbar k)^2}{2M} \right]. \quad (2.12)$$

Como não há partículas fora da SF, a integral não pode ser resolvida tendo o limite até o infinito. Desta forma, a função de Heaviside que faz com que a integral analise as partículas até a SF através da propriedade da Eq. (2.10)

$$N(E) = \frac{V}{(2\pi)^3} \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi d\theta \sin\theta \int_0^{\sqrt{2ME_F}} dk (\hbar k)^2 = \frac{(2M)^3 V}{6\pi^2 \hbar^3} E^{\frac{3}{2}} \quad (2.13)$$

Agora podemos definir a densidade de estados, que é o número de estados $dN(E)$ por unidade de intervalo de energia dE [34]. Então, temos a relação

$$g(E) = \frac{dN(E)}{dE} = \frac{VM^{3/2}}{\sqrt{2\pi^2 \hbar^3}} E^{1/2}. \quad (2.14)$$

Tendo uma expressão que mostra a distribuição das partículas em relação a energia, podemos agora encontrar uma expressão para a energia de Fermi. Partindo da Eq. (2.14) e acrescentando a função heaviside, temos:

$$N = \int_0^\infty dE g(E) \Theta(E - \mu) = \int_0^{E_F} dE g(E). \quad (2.15)$$

Aqui μ representa o potencial químico do elemento que constitui o gás. Como estamos analisando o estado fundamental, e como mostrado na Fig. 3(b), temos que $\mu = E_F$. Com isto, a energia de Fermi é

$$E_F = \frac{\hbar^2}{2m} (6n\pi^2)^{2/3}. \quad (2.16)$$

sendo $n = N/V$ a densidade de partículas. Note que ela é constante em todo o volume. Determinada a energia de Fermi, podemos definir o número de onda de Fermi k_F através da relação

$$k_F = \left(\frac{2ME_F}{\hbar^2} \right)^{1/2} = (6n\pi^2)^{1/3}. \quad (2.17)$$

Com a Eq.(2.14) podemos encontrar a energia total do gás, já que a relação entre elas é

$$U = \int dE E g(E) \Theta(E) = \frac{VM^{\frac{3}{2}}}{\sqrt{2\pi^2 \hbar^3}} \int_0^{E_f} dE E^{\frac{3}{2}} = \frac{3}{5} NE_F \quad (2.18)$$

Usando a Eq.(2.18) podemos encontrar a pressão do sistema, utilizando a pressão de um gás ideal $PV = 2U/3$

$$p = \frac{2}{5} n E_F. \quad (2.19)$$

Essa é a expressão da pressão quântica de Pauli, ou conhecida como pressão de degenerescência, para um gás de Fermi ideal [31]. A pressão da Eq. (2.19) é totalmente diferente da pressão de

uma gás de bósons e até mesmo de um gás clássico, pois estes a pressão depende da temperatura, de acordo com a expressão $PV = nKT$. Porém, para os férmions isto é diferente, mesmo em $T = 0$ há uma pressão. Ela existe porque os férmions, mesmo no estado fundamental, não ocupam o mesmo estado quântico simultaneamente, obedecendo ao princípio de exclusão de Pauli. Então, eles ficam "empilhados" cada um em um estado diferente, e é neste "empilhamento" que surge a pressão da Eq.(2.16). Com isto, a origem desta pressão não é termodinâmica, já que ela não vem da agitação das partículas, mas sim quântica.

Outra informação relevante sobre a pressão quântica é que ela tem efeitos na astrofísica, pois as estrelas com massas entre 10 a 20 massas solares geram estrelas de nêutrons. O nêutron é um férmion e é por causa da pressão de Pauli, que essas estrelas não colapsam sob seus próprios campos gravitacionais.[32]

2.3 Gás de Fermi ideal em uma armadilha harmônica

Nesta subseção iremos fazer a análise de um gás de Fermi degenerado em temperatura zero, com N férmions de massa M , considerando agora a presença de uma potencial harmônico. O hamiltoniano do sistema é

$$H(\vec{r}, \vec{p}) = \frac{1}{2M}[p_x^2 + p_y^2 + p_z^2] + \frac{M\omega_r^2}{2}[x^2 + y^2 + \lambda z^2], \quad (2.20)$$

onde ω_r e $\omega_z = \lambda \omega_r$ são as frequências da armadilha na direção radial e axial. Através da Eq. (2.20) conseguimos encontrar a energia para uma partícula:

$$E_{n_x, n_y, n_z} = \hbar\omega \left(n_x + n_y + \lambda n_z + \frac{3}{2} \right), \quad (2.21)$$

onde $\vec{n} \in \mathbb{N}$.

Substituindo a Eq. (2.20) na Eq. (2.9) podemos encontrar a expressão para o número de partículas no sistema

$$N(E) = \int \frac{d^3r d^3k}{(2\pi)^3} \Theta(E - H(\vec{r}, \vec{k})), \quad (2.22)$$

Analisando a integral em relação ao espaço dos momentos, temos

$$N(E) = \int \frac{d^3r}{(2\pi)^3} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi d\theta \sin\theta \int_0^\infty d^3k k^2 \Theta \left(E - \frac{(\hbar k)^2}{2M} - \frac{M\omega_r^2 \rho^2}{2} \right). \quad (2.23)$$

sendo $\rho \leq R_F$ e $\rho \equiv (x^2 + y^2 + \lambda^2 z^2)^{\frac{1}{2}}$. Usando a propriedade da função heaviside e integrando a equação acima, obtemos

$$N(E) = \frac{4\pi 2^{\frac{3}{2}}}{3(2\pi)^3} \int d^3r \left(E - \frac{M\omega_r^2 \rho^2}{2} \right) \Theta \left[\left(E - \frac{M\omega_r^2 \rho^2}{2} \right) \right]. \quad (2.24)$$

De forma similar é feita a integral em relação ao espaço real. Então, a expressão para o número de partícula do sistema é

$$N(E) = \frac{E^3}{6(\hbar\bar{\omega})^3}. \quad (2.25)$$

Onde $\bar{\omega} = (\omega_x\omega_y\omega_z)^{1/3}$ é a média geométrica das frequências da armadilha.

A densidade de estados neste caso tem a seguinte expressão

$$g(E) = \frac{E^2}{2\lambda(\hbar\bar{\omega})^3}. \quad (2.26)$$

Observe que a Eq.(2.26) é diferente da densidade de estados para um gás de Fermi ideal homogêneo da Eq.(2.14). A origem física disso é a supressão de estados no espaço de fase devido ao confinamento espacial pelo potencial de aprisionamento [35]. Então, se no caso da Eq.(2.14) a SF era uma esfera, podemos dizer que ao aplicarmos um potencial externo ao sistema temos uma superfície de Fermi deformada (SFD).

Usando a Eq.(2.26) na Eq.(2.15) podemos encontrar a expressão para a energia de Fermi:

$$E_F = \hbar\bar{\omega}(6\lambda N)^{1/3}. \quad (2.27)$$

A partir da energia de Fermi, é possível definir o tamanho típico de um gás de férmion degenerado preso por uma armadilha harmônica, pois temos a relação:

$$R_F = \sqrt{\frac{2E_F}{m\omega_i^2}} = \sigma_i(48\lambda N)^{1/6}, \quad (2.28)$$

onde $\sigma_i = (\hbar/m\omega_i)^{1/2}$ é a largura radial do estado fundamental da armadilha harmônica.

Podemos definir um número de onda de Fermi K_F , que é determinado pelo momento de uma partícula livre de energia E_F [36]

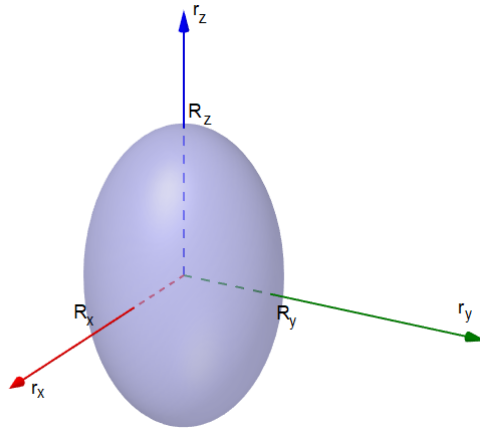
$$K_F = \sqrt{\frac{2mE_F}{\hbar^2}} = \sigma_i^{-1}(48\lambda N)^{1/6}. \quad (2.29)$$

Em suma, tanto R_F como K_F representam as larguras das distribuições de densidade à temperatura zero, e que podem ser calculadas integrando a função de distribuição no espaço real e no espaço dos momentos [37]. Para o espaço real temos a seguinte expressão

$$n(\vec{r}) = \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \Theta(E_F - H(\vec{r}, \vec{k})) = \frac{8N}{R^3\pi^2} \left(1 - \frac{\rho^2}{R_F^2}\right)^{3/2} \Theta\left(1 - \frac{\rho^2}{R_F^2}\right), \quad (2.30)$$

Ao analisarmos graficamente veremos que as partículas irão se configurar de tal forma que a geometria da superfície será um elipsóide, conforme a Fig. 4.

Figura 4 – Representação da função de distribuição da densidade de partícula. Observe que nos eixos x e y temos uma simetria, enquanto no eixo z temos uma alongamento.



Fonte: Elaborada pelo autor.

Para a distribuição no espaço dos momentos, obtemos

$$n(\vec{k}) = \int \frac{d^3r}{(2\pi)^3} \Theta(E_F - H(\vec{r}, \vec{k})) = \frac{8N}{K_F^3 \pi^2} \left(1 - \frac{k^2}{K_F^2}\right)^{3/2} \Theta\left(1 - \frac{k^2}{K_F^2}\right). \quad (2.31)$$

Observe que a Eq. (2.31) é similar a Eq. (2.30), então se espera que no espaço dos momentos a SF seja deformada de uma esfera para um elipsóide igual no espaço real. Porém, essa consideração só foi levada em conta a partir de 2008 [16], como será debatido mais adiante.

3 GASES DE FERMI DIPOLARES

No capítulo anterior, foram discutidas algumas propriedades de um gás de Fermi homogêneo sem nenhuma interação. Porém, sabemos que as partículas interagem umas com as outras. Neste capítulo, iremos introduzir o potencial dipolo-dipolo e apresentar um experimento que mostrou a deformação da superfície de Fermi de uma esfera para um elipsóide.

3.1 Potencial de dipolo-dipolo

Aqui nessa seção, vamos analisar a interação entre dipolos em um gás atômico e apresentar o potencial de interação entre eles, conhecido como potencial de interação dipolo-dipolo (IDD).

Inicialmente, vamos analisar duas partículas com dipolos com orientações distintas e determinadas através dos vetores unitários \hat{m}_1 e \hat{m}_2 , onde \vec{m} é o vetor momento de dipolo, separadas por uma distância \vec{r} , como representado na Fig. 5(a). O potencial de interação dessas duas partículas é dado por

$$V_{dd} = \frac{C_{dd}}{4\pi} \frac{(\hat{m}_1 \cdot \hat{m}_2)\mathbf{r}^2 - 3(\hat{m}_1 \cdot \vec{r})(\hat{m}_2 \cdot \vec{r})}{|\vec{r}|^5}, \quad (3.1)$$

onde C_{dd} é uma constante que caracteriza a magnitude da interação dipolar. No caso de dipolos elétricos, temos $C_{dd}^e = \mu_e^2/\epsilon_0$, onde ϵ_0 é a permissividade do vácuo e μ_e é o momento de dipolo elétrico. Em caso de dipolos magnéticos, $C_{dd}^m = \mu_0\mu_m^2$, sendo μ_0 a permeabilidade do vácuo e μ_m é o momento de dipolo magnético [33]. A unidade de medida dos dipolos elétricos é o Debye ($D = 3,33564 \cdot 10^{-30}$ Cm), enquanto que a unidade de medida dos dipolos magnéticos é o magnéton de Bohr ($\mu_B = 9,27401 \cdot 10^{-24}$ J/T) [38].

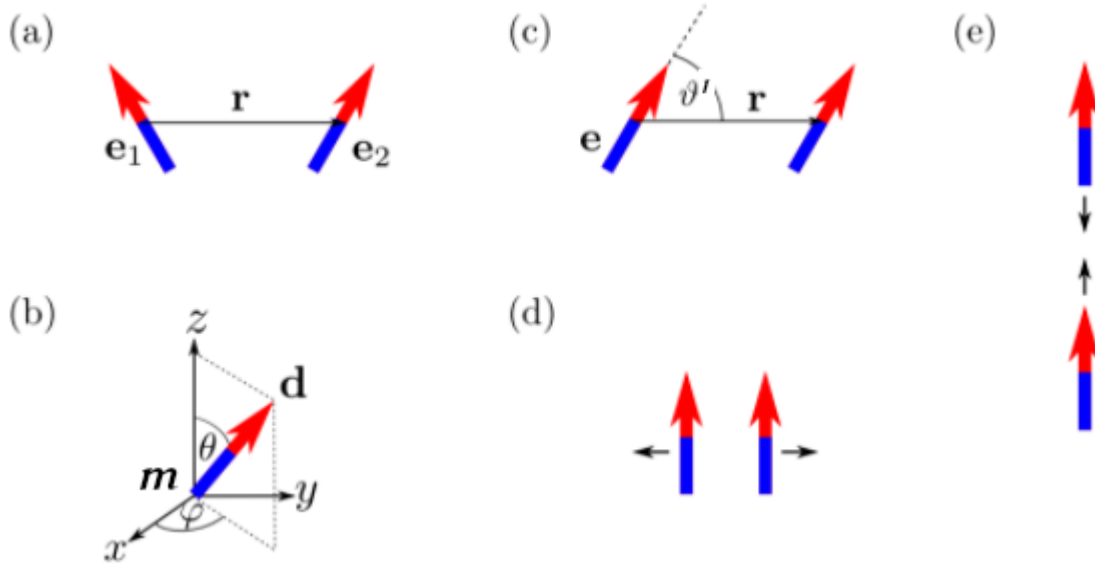
No sistema que vamos analisar, vamos tomar que todos os momentos são paralelos, isto é, trata-se de um no gás de Fermi polarizado. A direção de polarização é representada pelo vetor unitário \vec{m} , como mostra a Fig. 5b). Na Fig. 5c) temos a representação de duas partículas interagindo com os dipolos orientados na mesma direção e o potencial da IDD neste caso é

$$V_{dd}(\vec{r}) = -\frac{C_{dd}}{4\pi} \frac{3(\vec{r} \cdot \vec{m})^2 - \vec{r}^2 \cdot \vec{m}^2}{|\vec{r}|^5}. \quad (3.2)$$

Neste trabalho vamos considerar os dipolos orientados ao longo do eixo z, ou seja $\hat{m} = \hat{z}$. Com essa observação a Eq.(3.2) fica

$$V_{dd}(\vec{r}) = \frac{C_{dd}}{4\pi|\vec{r}|^3} (1 - 3\cos^2\theta'). \quad (3.3)$$

Figura 5 – Interação dos dipolos. (a) Dipolos com orientação arbitrária. (b) Direção de orientação dos dipolos. (c) Dipolos paralelos com posição relativa \vec{r} . (d) Dipolos paralelos (repulsão). (e) Dipolos cabeça-cauda (atração).



Fonte: Retirada de [37].

Vale ressaltar que dependendo do ângulo θ , a IDD pode ser positiva ou negativa, que significa que os férmions dipolares podem se atrair ou se repelir. Observe que quando $\theta = 90^\circ$, os férmions ficam um do lado do outro, como representado na Fig. 5d), e se repelem. Enquanto que, quando $\theta = 0^\circ$, como representado na Fig. 5e), os férmions ficam um na frente do outro e se atraem, essa configuração é conhecida como configuração cabeça-cauda. [37].

Para alguns cálculos, como os da energia para um gás de Fermi, é conveniente que o potencial da Eq.(3.3) esteja no espaço dos momentos. Para isso, utilizamos a transformada de Fourier para sair do espaço real para o espaço dos momentos, que se encontra no Apêndice A. Então, o potencial da IDD no espaço dos momentos é

$$\bar{V}_{dd}(\vec{k}) = \frac{C_{dd}}{3} \left[\frac{3(\vec{m} \cdot \vec{k})^2}{\vec{k}^2} - 1 \right]. \quad (3.4)$$

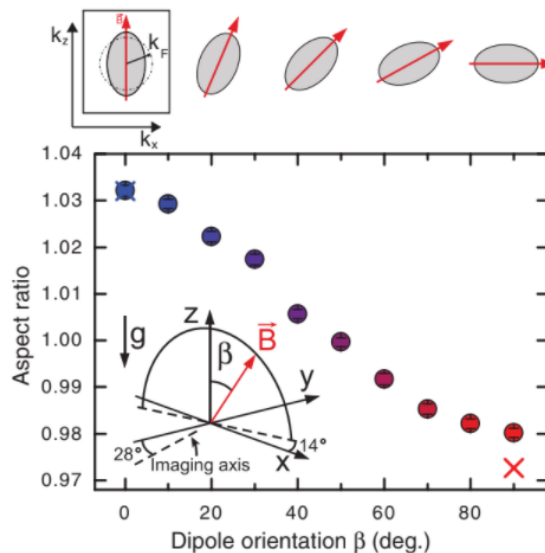
A IDD foi incorporada nos cálculos apenas em 2001 [12] e em 2008, através do método de Hartree-Fock [16], foi possível prever teoricamente, que devido a IDD, a SF sofre uma deformação não só no espaço real, como também, no espaço dos momentos. Na próxima seção, vamos relatar como foi o experimento que possibilitou a observação dessa deformação.

3.2 Descrição de experimentos

Nesta seção vamos relatar sobre o experimento que mostrou a deformação da superfície de Fermi. Este experimento foi realizado na Áustria, com a parceria entre o Instituto de Física Experimental e Centro de Física Quântica, Universidade de Innsbruck, e o Instituto de Óptica Quântica e Informação Quântica, Academia Austríaca de Ciências. O experimento foi denominado como a "observação da deformação da superfície de Fermi em um gás quântico dipolar"[22].

O experimento foi feito com um gás de Fermi dipolar de componente único de átomos de Érbio (Er), contendo um número de 7×10^4 de átomos. Este elemento químico é da classe dos lantanóides, que são elementos que têm como característica um grande momento magnético. O érbio, por exemplo, tem seu momento magnético igual a 7 magnétos de Bohr, o que ocasiona uma forte IDD entre os férmions. Neste experimento, os momentos dipolares magnéticos foram alinhados através de um campo magnético externo.

Figura 6 – A SFD segue a orientação da armadilha, onde o eixo horizontal representa a variação dos ângulos, denominados pela letra β . O eixo vertical representa o espectro da nuvem, que é definida como a razão entre o semieixo maior com o semieixo menor da nuvem no plano de imagem. Observe que quando o ângulo (eixo paralelo) varia a SFD também varia seguindo a rotação da orientação do dipolo, mantendo ao eixo maior sempre paralelo à direção de atração máxima da IDD.



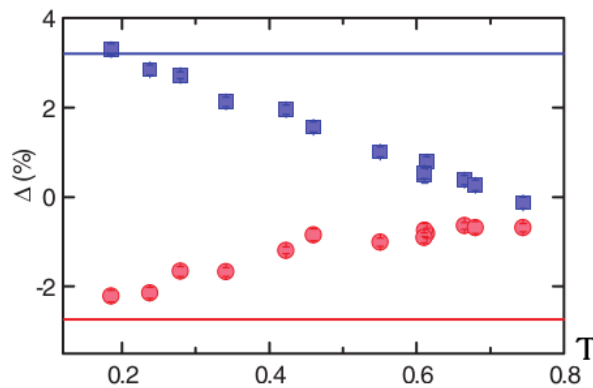
Fonte: Retirada de [22].

A Fig. 6 é o resultado obtido pelo experimento. O gás foi resfriado até $0,18T_F$, com $T_F = 1,12\mu K$. Na Fig. 6 o eixo horizontal representa a variação dos ângulos, denominados pela letra β . O eixo vertical representa o espectro da nuvem, que é definida como a razão entre o semieixo maior com o semieixo menor da nuvem no plano de imagem.

Pelo resultado mostrado na Fig. 6, foi visto que para $\beta = 0^\circ$ a nuvem do gás teve um formato elipsoidal, com alongamento na direção da orientação do dipolo, e quando β era alterado, a nuvem seguia a rotação da orientação do dipolo, mantendo ao eixo maior sempre paralelo à direção de atração máxima da IDD.

Porém, quando o experimento foi submetido a temperatura finita, foi possível perceber que ao aumentar a temperatura a deformação da superfície diminui, mesmo tendo o campo externo aplicado. Na Fig. 7 podemos fazer essa análise

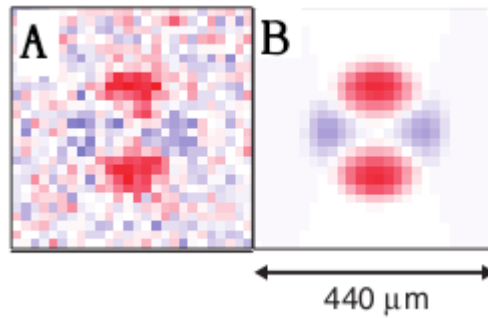
Figura 7 – Relação da SFD com a temperatura, sendo o eixo horizontal a temperatura e o eixo vertical é o grau de deformação da superfície. Na figura as linhas representam a orientação do campo. A linha azul temos $\beta = 0^\circ$ e a linha vermelha $\beta = 90^\circ$. Para os dois casos é possível perceber que ao aumentar a temperatura a deformação da superfície tende a zero.



Na Fig. 7 o experimento foi feito com orientação do campo externo para $\beta = 0^\circ$, linhas e quadrados azul, e para $\beta = 90^\circ$, linhas e bolas vermelhas. Para os dois casos, quando a temperatura aumenta, o grau de deformação Δ da superfície tende a zero.

Na Fig. 8 o gráfico apresenta a deformação da superfície de Fermi. Na Fig. 8A) temos a imagem resultante de um padrão semelhante a uma folha de trevo, mostrando que o impulso espalhado ao longo da orientação dos dipolos é maior (parte vermelha) do que na outra direção (parte azul). Para efeito de comparação, o mesmo procedimento é aplicado para imagens obtidas por um ajuste à nuvem observada, Fig. 8B).

Figura 8 – Imagem obtida pelo experimento mostrando a SFD. (A) imagem experimental; (B) imagem ajustada. Observe que a parte vermelha mostra um maior impulso espalhado na orientação do dipolo (parte vermelha) do que nas outras (parte azul).



Fonte: Adaptada de [22].

Esse experimento é muito relevante para esse área, primeiro que foi possível observar a deformação na SF. Segundo que, entender como se comporta a superfície de Fermi nos trás novas expectativas na compreensão das excitações do sistema, bem como, o emparelhamento de Cooper em supercondutores.

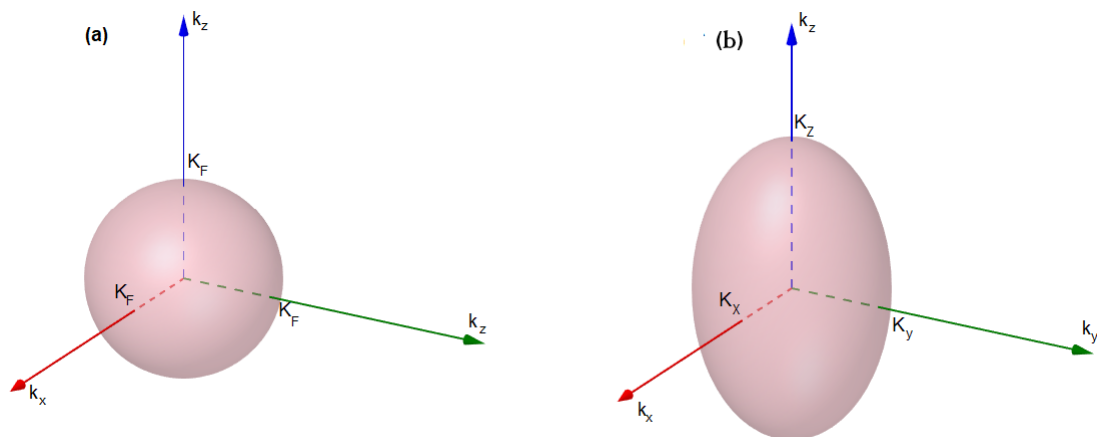
4 ABORDAGEM VARIACIONAL

Neste capítulo apresentamos uma abordagem variacional para descrever um gás de Fermi a temperatura zero. Por meio de um Ansatz adequado para a função de Wigner, analisamos as energias presentes nessa configuração tanto em uma armadilha triaxial, como em uma armadilha cilíndrica.

4.1 Ansatz para função de Wigner

Sabemos que em temperatura zero a SF se configurava de tal maneira a se tornar uma esfera, como demonstrado no capítulo II desse trabalho, e como mostrado na Fig. 9(a) e Fig. 9(b). O raio da esfera no espaço real é o raio de Thomas-Fermi, e no espaço dos momentos, o raio é dado pelo momento de Fermi.

Figura 9 – Representação da superfície de Fermi. (a) e (b) representam a SF no espaço dos momentos; A ilustração (a) representa um gás de Fermi sem interação, enquanto (b) corresponde ao gás de Fermi dipolar com SF esticada em elipsóides cujos eixos coincidem com os eixos da armadilha.



Fonte: Elaborada pelo autor.

No trabalho de Góral *et al.* de 2001 [12] foi considerado um Ansatz gaussiano para representar a densidade de partículas do sistema. Neste trabalho, foi previsto que no espaço real a densidade teria uma deformação, de tal maneira que haveria um alongamento na direção de polarização. O trabalho inclui a IDD e a consideração do termo direto de Hartree.

Neste trabalho, vamos utilizar o Ansatz que é usado desde 2008 [16] para a função de Wigner semiclássica, que se assemelha à forma da distribuição de Fermi-Dirac transformada

por Wigner de um gás de Fermi não interativo e tem como expressão

$$f(\vec{r}, \vec{k}) = \Theta \left(1 - \sum_i \frac{r_i^2}{R_i^2} - \sum_i \frac{k_i^2}{K_i^2} \right), (i = x, y, z) \quad (4.1)$$

onde Θ representa a função Heaviside, enquanto os parâmetros variacionais R_i e K_i representam o raio de Thomas-Fermi e o momento de Fermi, respectivamente. Uma outra diferença entre os trabalhos citados acima, é que no trabalho de 2008, foi considerado além do termo direto de Hartree, o termo de troca de Fock, onde foi previsto que não só o espaço real teria uma deformação, mas também no espaço dos momentos, como mostrado na Fig. 9(b).

A função da Eq.(4.1) continua sendo utilizada porque consegue determinar com sucesso a deformação da SF, como também, descreve com precisão sistemas como moléculas polares com massa da ordem de 100 unidades atômicas e um momento dipolar tão grande quanto 1D [38].

A Eq.(4.1) considera que o eixo dos dipolos estão ao longo do eixo z. Porém, o experimento descrito no capítulo III foi realizado para ângulos arbitrários e o ansatz acima só possibilitou resultados para $\theta = 0^\circ$. Então, foi desenvolvido uma teoria para a distribuição de equilíbrio global do gás dipolar de Fermi para dipolos de orientação arbitrária, no qual forneceu uma descrição precisa do experimento [37].

4.2 Armadilha triaxial

Como definimos a função de Wigner para um gás de fermi dipolar com a orientação ao longo do eixo z, podemos agora analisar a energia total E_{total} de um gás de fermi de muitos corpos que está na teoria de campo médio de Hartree-Fock e que é dada pela soma da energia cinética E_c , energia de aprisionamento E_a , energia direta de Hartree E_H e com a energia de troca de Fock E_F

$$E_{total} = E_c + E_a + E_H + E_F. \quad (4.2)$$

Pela teoria semiclássica, essas energias são expressas usando a função de Wigner[12].

A energia cinética, após ser calculada, pode ser expressada através do momento de Fermi de acordo com

$$E_c = \int \int \frac{d^3r d^3k}{(2\pi)^3} \frac{\hbar^2 k^2}{2M} f(\vec{r}, \vec{k}) = \frac{N}{8} \sum_i \frac{\hbar^2 K_i^2}{2M}. \quad (4.3)$$

De forma similar, a energia de aprisionamento pode ser expressa através do raio de Thomas-Fermi

$$E_a = \int \int \frac{d^3 r d^3 k}{(2\pi)^3} V_a(\vec{r}) f(\vec{r}, \vec{k}) = \int \int \frac{d^3 r d^3 k}{(2\pi)^3} \left(\frac{M\omega_r^2 r^2}{2} \right) f(\vec{r}, \vec{k}) = \frac{NM}{8} \sum_i \omega_i^2 R_i^2, \quad (4.4)$$

onde $V_a(\vec{r})$ é o potencial de aprisionamento.

Agora vamos calcular a energia de interação entre os férmions por meio da aproximação de Hartree-Fock. Essa aproximação tem a contribuição de Hartree, ver o apêndice B

$$\begin{aligned} E_H &= \frac{1}{2} \int d^3 x \int d^3 x' \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3 k'}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3 k''}{(2\pi)^3} e^{i\vec{k}'' \cdot (\vec{x} - \vec{x}')} \bar{V}_{dd}(\vec{k}'') f(\vec{x}, \vec{k}) f(\vec{x}', \vec{k}') \\ &= -\frac{6N^2 c_0}{\bar{R}^3} f\left(\frac{R_x}{R_z}, \frac{R_y}{R_z}\right), \end{aligned} \quad (4.5)$$

em que a função de anisotropia dada por

$$f(x, y) = -\frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \text{sen}\theta d\theta \left(\frac{3x^2 y^2 \cos^2 \theta}{y^2 \cos^2 \varphi \text{sen}^2 \theta + x^2 \text{sen}^2 \varphi \text{sen}^2 \theta + x^2 y^2 \cos^2 \theta} - 1 \right), \quad (4.6)$$

e está representada na Fig. 10.

Observe que $f(x, y)$ é limitada entre 1 e -2 passando por 0 em $x = y = 1$. Isso reflete o fato de que a interação dipolo-dipolo é parcialmente atrativa e parcialmente repulsiva, dependendo se os dipolos estão orientados cabeça com cauda ou lado a lado um com o outro, respectivamente. Em um sistema com armadilha cilíndrica e para polarização ao longo do eixo de simetria, a interação é, portanto, predominantemente atrativa em sistemas em forma de charuto (prolato), onde os dipolos estarão na configuração cabeça-cauda, representada na Fig. 5e) e repulsiva em forma de panqueca (oblato), quando os dipolos estiverem um paralelo em relação ao outro, como está representado na Fig. 5d) [40].

Temos também a contribuição de Fock

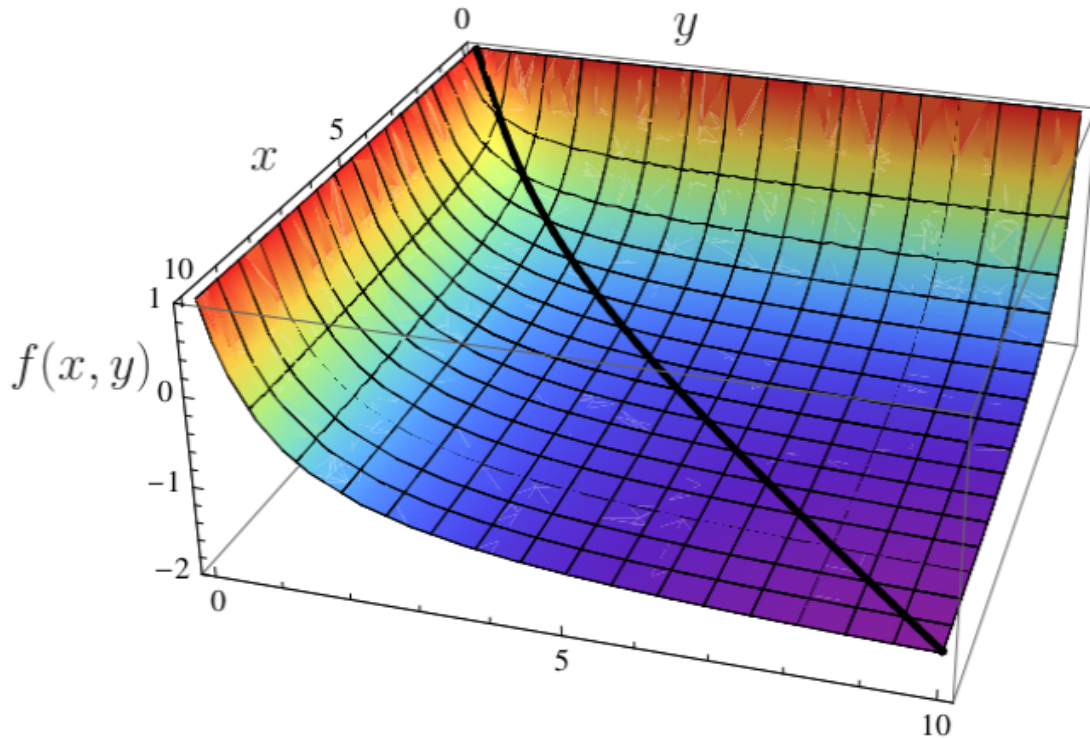
$$\begin{aligned} E_F &= -\frac{1}{2} \int d^3 x \int d^3 x' \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3 k'}{(2\pi)^3} V_{dd}(\vec{x}) e^{i(\vec{k} - \vec{k}') \cdot \vec{x}'} f(\vec{x}, \vec{k}) f(\vec{x}', \vec{k}') \\ &= \frac{6N^2 c_0}{\bar{R}^3} f\left(\frac{K_z}{K_x}, \frac{K_z}{K_y}\right). \end{aligned} \quad (4.7)$$

No Apêndice C detalhamos o cálculo acima.

Então, substituído as Eqs.(4.3), (4.4), (4.5) e (4.7) na Eq.(4.2) temos a expressão para a energia total de um gás de Fermi

$$E_{total}(R_i, K_i, \theta, \varphi) = \frac{N}{8} \left[\sum_i \frac{\hbar^2 K_i^2}{2M} + \frac{M}{2} \sum_i \omega_i^2 R_i^2 \right] - \frac{6N^2 c_0}{\bar{R}^3} \left[f\left(\frac{R_x}{R_z}, \frac{R_y}{R_z}\right) - f\left(\frac{K_z}{K_x}, \frac{K_z}{K_y}\right) \right]. \quad (4.8)$$

Figura 10 – Função de anisotropia $f(x,y)$ que é limitada entre 1 para valores pequenos de x ou y e -2 para valores grandes de ambos os argumentos. Alinha preta representa a função de anisotropia para o caso de uma armadilha cilíndrica.



Fonte: Retirada de [40].

Encontrada a energia total do sistema, se fez necessário encontrar expressões para os parâmetros variacional R_i e K_i . Para encontrá-los precisamos minimizar a energia total. Porém, como temos uma função que depende de mais de uma variável e que essa função é restringida, temos que usar o método dos multiplicadores de Lagrange [41] que nos possibilitará encontrar os extremos da Eq. (4.8). Este método consiste em introduzir uma nova variável, que iremos chamar de μ , que serve para garantir a conservação do número de partículas

$$\bar{R}^3 \bar{K}^3 = 48N. \quad (4.9)$$

Desta forma, vamos definir \tilde{E} como

$$\tilde{E}(R_i, K_i, \mu, \theta, \varphi) = E_{total}(R_i, K_i, \theta, \varphi) - \mu \left(\frac{\bar{R}^3 \bar{K}^3}{48} - N \right), \quad (4.10)$$

onde μ é o potencial químico.

As equações estáticas seguem da extremização da energia (4.10) com respeito aos parâmetros variacionais R_i , K_i , bem como o multiplicador de Lagrange μ [40]. Após as derivações em relação ao momento de Fermi, obtemos as seguintes equações

$$\begin{aligned}
\frac{\hbar^2 K_x^2}{2M} &= \frac{1}{3} \sum_i \frac{\hbar^2 K_i^2}{2M} + \frac{24c_0 N^2 K_z}{\bar{R}^3 K_x} f_1 \left(\frac{K_z}{K_x}, \frac{K_z}{K_y} \right) \\
\frac{\hbar^2 K_y^2}{2M} &= \frac{1}{3} \sum_i \frac{\hbar^2 K_i^2}{2M} + \frac{24c_0 N^2 K_z}{\bar{R}^3 K_y} f_2 \left(\frac{K_z}{K_x}, \frac{K_z}{K_y} \right) \\
\frac{\hbar^2 K_z^2}{2M} &= \frac{1}{3} \sum_i \frac{\hbar^2 K_i^2}{2M} - \frac{24c_0 N^2 K_z}{\bar{R}^3 K_x} f_1 \left(\frac{K_z}{K_x}, \frac{K_z}{K_y} \right) - \frac{24c_0 N^2 K_z}{\bar{R}^3 K_y} f_2 \left(\frac{K_z}{K_x}, \frac{K_z}{K_y} \right),
\end{aligned} \tag{4.11}$$

de tal forma que o potencial químico é expresso por

$$\mu = \frac{1}{12} \sum_i \frac{\hbar^2 K_i^2}{2M}. \tag{4.12}$$

O potencial químico também pode ser posto da seguinte forma

$$\mu = \frac{M}{12} \sum_i \frac{\omega_i^2 R_i^2}{2} + \frac{6Nc_0}{\bar{R}^3} \left[f \left(\frac{R_x}{R_z}, \frac{R_y}{R_z} \right) - f \left(\frac{K_z}{K_x}, \frac{K_z}{K_y} \right) \right]. \tag{4.13}$$

Porém, essas expressões para o multiplicador de Lagrange são matematicamente equivalentes [37]. Desta forma, as equações estáticas em relação aos parâmetros variacionais no espaço real são

$$\begin{aligned}
\omega_x^2 R_x^2 &= \frac{1}{3} \sum_i \frac{\hbar^2 K_i^2}{M^2} - \frac{48Nc_0}{M\bar{R}^3} \left[f \left(\frac{R_x}{R_z}, \frac{R_y}{R_z} \right) - f \left(\frac{K_z}{K_x}, \frac{K_z}{K_y} \right) \right] + \frac{48Nc_0 R_x}{M\bar{R}^3 R_z} f_1 \left(\frac{R_x}{R_z}, \frac{R_y}{R_z} \right), \\
\omega_y^2 R_y^2 &= \frac{1}{3} \sum_i \frac{\hbar^2 K_i^2}{M^2} - \frac{48Nc_0}{M\bar{R}^3} \left[f \left(\frac{R_x}{R_z}, \frac{R_y}{R_z} \right) - f \left(\frac{K_z}{K_x}, \frac{K_z}{K_y} \right) \right] + \frac{48Nc_0 R_y}{M\bar{R}^3 R_z} f_2 \left(\frac{R_x}{R_z}, \frac{R_y}{R_z} \right), \\
\omega_z^2 R_z^2 &= \frac{1}{3} \sum_i \frac{\hbar^2 K_i^2}{M^2} - \frac{48Nc_0}{M\bar{R}^3} \left[f \left(\frac{R_x}{R_z}, \frac{R_y}{R_z} \right) - f \left(\frac{K_z}{K_x}, \frac{K_z}{K_y} \right) \right] \\
&\quad - \frac{48Nc_0 R_x}{M\bar{R}^3 R_z} f_1 \left(\frac{R_x}{R_z}, \frac{R_y}{R_z} \right) - \frac{48Nc_0 R_y}{M\bar{R}^3 R_z} f_2 \left(\frac{R_x}{R_z}, \frac{R_y}{R_z} \right).
\end{aligned} \tag{4.14}$$

4.3 Armadilha cilíndrica

Antes de analisarmos as energias e as equações estáticas de um gás de Fermi preso a uma armadilha cilíndrica, vamos introduzir um conjunto de coordenadas adimensionais. No Cap. 2 definimos o raio de Thomas-Fermi e o momento de Fermi, Eqs. (2.28) e (2.29), respectivamente. Agora, vamos expressar o raio de Thomas-Fermi R_i em unidades de R_F e o momento de Fermi K_i em unidades de K_F . Definindo então $\tilde{R} \equiv R_i/R_F$ e $\tilde{K} \equiv K_i/K_F$ de tal forma que a conservação do número de partículas, Eq. (4.10), se reduz a

$$\bar{R}^3 \bar{K}^3 = 1. \tag{4.15}$$

Podemos também definir a razão entre as coordenadas referentes ao raio de Thomas-Fermi de acordo com as coordenadas adimensionais pela relação

$$\frac{R_i}{R_j} = \frac{\tilde{R}_i \lambda_i}{\tilde{R}_j}, \quad (4.16)$$

onde $\lambda_i = \omega_j / \omega_i$.

Com a introdução dessas coordenadas adimensionais, podemos escrever a energia do sistema em termos delas. Assim, a Eq. (4.10) tem a seguinte estrutura

$$\frac{\tilde{E}}{NE_F} = \frac{1}{8} \left\{ \sum_i (\tilde{K}_i^2 + \tilde{R}_i^2) - \frac{2\varepsilon_{dd}^f c_d}{\tilde{R}^3} \left[f\left(\frac{\tilde{R}_x \lambda_x}{\tilde{R}_z}, \frac{\tilde{R}_y \lambda_y}{\tilde{R}_z}\right) - f\left(\frac{\tilde{K}_z}{\tilde{K}_x}, \frac{\tilde{K}_z}{\tilde{K}_x}\right) \right] \right\} - \frac{\mu}{NE_F} (\tilde{R}^3 \tilde{K}^3 - 1). \quad (4.17)$$

Onde ε_{dd}^f é a força dipolar adimensional e c_d é uma constante, e são dadas pelas equações a seguir, respectivamente

$$\varepsilon_{dd}^f = \frac{C_{dd}}{\pi} \left(\frac{M^3 \bar{\omega}}{\hbar^5} \right) N^{1/6}, \quad (4.18)$$

$$c_d = \frac{2^{38/3}}{3^{23/6} \cdot 5 \cdot 7 \cdot \pi^2} \approx 0.2791. \quad (4.19)$$

A armadilha cilíndrica é outro tipo de potencial que podemos estudar aplicando-o em um gás de Fermi. Neste caso, temos uma simetria no plano xOy, ocasionando assim a igualdade $\omega_x = \omega_y$, que conseqüentemente nos leva $R_x = R_y$ no espaço real. No espaço dos momentos também temos a simetria entre $K_x = K_y$, devido a simetria da função de anisotropia $f(x, y) = f(y, x)$ [40]. Com isto, vamos definir

$$f(x, x) = f_s(x), \quad (4.20)$$

e aplicar a seguinte identidade matemática

$$\lim_{y \rightarrow x} x \frac{\partial f(x, y)}{\partial x} = \lim_{y \rightarrow x} y \frac{\partial f(x, y)}{\partial y} = \frac{1}{2} x f'_s(x) = -1 + \frac{2+x^2}{2(1-x^2)} f_s(x). \quad (4.21)$$

Tomando essas definições e essa propriedade matemática, as Eqs. (4.11) reduzem a

$$\tilde{K}_z - \tilde{K}_x = \varepsilon_{dd}^f C(\tilde{R}, \tilde{K}_x, \tilde{K}_z), \quad (4.22)$$

onde

$$C(\tilde{R}, \tilde{K}_x, \tilde{K}_z) = \frac{3c_d}{\tilde{R}^3} \left[1 - \frac{(2\tilde{K}_x^2 + \tilde{K}_z^2) f_s(\tilde{K}_z/\tilde{K}_x)}{2(\tilde{K}_x^2 - \tilde{K}_z^2)} \right]. \quad (4.23)$$

Usando o mesmo processo e usando a propriedade matemática (4.21) para as variáveis espaciais, vamos obter

$$\tilde{R}_z^2 - \tilde{R}_x^2 = \varepsilon_{dd}^f Q(\tilde{R}_x, \tilde{R}_z), \quad (4.24)$$

onde

$$Q(\tilde{R}_x, \tilde{R}_z) = \frac{3c_d}{\tilde{R}_x^2 \tilde{R}_z} \left[1 - \frac{(2\tilde{R}_z^2 + \tilde{R}_x^2) f(\tilde{R}_x \lambda_x / \tilde{R}_z)}{2(\tilde{R}_z^2 - \tilde{R}_x^2)} \right]. \quad (4.25)$$

Tais informações foram apresentadas em [19], [20]. Para se obter os valores numéricos é necessário um software que realize esses cálculos.

5 CONCLUSÕES E TRABALHOS FUTUROS

O trabalho apresentado nessa monografia tem como um de seus objetivos servir como base para estudantes que estão começando o estudo de gases quânticos dipolares degenerados, com ênfase, nos gases de Fermi.

Fizemos um estudo da transição de referencial, indo da física clássica para a física quântica, introduzindo o conceito de estatística quântica. Foram apresentadas as funções de distribuição e através delas, mostramos a distinção de comportamento das partículas a baixas temperaturas. De posse destes conceitos, estudamos um gás de Fermi tanto na ausência quanto na presença de uma armadilha harmônica e mostramos que a densidade de estados na ausência da armadilha é diferente da densidade de estados na presença da armadilha.

Apresentamos no presente estudo também a inclusão da interação dipolo-dipolo (IDD), mostrando o conceito de momento dipolar e analisando diferentes configurações com dois elétrons considerando a IDD. Através da IDD, a SF sofre uma deformação, alongando-se na direção do dipolo. Para abordar melhor este assunto, apresentamos um estudo experimental que foi possível observar esta deformação que até aquele presente momento, ocorria apenas na teoria.

Por fim, apresentamos o ansatz que utilizamos para representar a função de Wigner no estado fundamental de um gás de Fermi dipolar considerando a orientação do dipolo ao longo eixo z . Estudamos a energia total do sistema na presença de uma armadilha triaxial, como também, na presença de uma armadilha cilíndrica. Em ambos os casos, conseguimos calcular as equações estáticas do sistema.

Para estudos futuros, pretendemos reproduzir os cálculos considerando os dipolos com orientações arbitrárias [37], encontrar as soluções das equações estáticas e analisar o gás de Fermi dipolar para temperaturas finitas [22].

REFERÊNCIAS

- [1] EISBERG, R.; RESNICK, R.; ATOMOS, Física Quântica. Moléculas, Sólidos, Núcleos e Partículas. **CAMPUS, 2a Edição**, 1985.
- [2] VAN DELFT, Dirk. History and significance of the discovery of superconductivity by Kamerlingh Onnes in 1911. **Physica C: Superconductivity**, v. 479, p. 30-35, 2012.
- [3] BOSE, Satyendra Nath. **Plancks gesetz und lichtquantenhypothese**. 1924.
- [4] A. Einstein. Quantentheorie des einatomigen idealen Gases. Sitzungsbericht der Preussischen Akademie der Wissenschaften, **Physikalisch-mathematische Klasse p. 3**(1925).
- [5] ANDERSON, Mike H. et al. Observation of Bose-Einstein condensation in a dilute atomic vapor. **science**, v. 269, n. 5221, p. 198-201, 1995.
- [6] DAVIS, Kendall B. et al. Bose-Einstein condensation in a gas of sodium atoms. **Physical review letters**, v. 75, n. 22, p. 3969, 1995.
- [7] FERMI, Enrico. Sulla quantizzazione del gas perfetto monoatomico. **Rendiconti Lincei**, v. 145, 1926.
- [8] DIRAC, Paul Adrien Maurice. On the theory of quantum mechanics. **Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character**, v. 112, n. 762, p. 661-677, 1926.
- [9] WÄCHTLER, Falk. **Hartree-Fock Theory of Dipolar Fermi Gases**. 2011. Tese de Doutorado. Doktorska disertacija. Universität Potsdam, Am Neuen Palais 10, 14469 Potsdam, Germany.
- [10] DEMARCO, Brian; JIN, Deborah S. Onset of Fermi degeneracy in a trapped atomic gas. **science**, v. 285, n. 5434, p. 1703-1706, 1999.
- [11] TRUSCOTT, Andrew G. et al. Observation of Fermi pressure in a gas of trapped atoms. **Science**, v. 291, n. 5513, p. 2570-2572, 2001.
- [12] GÓRAL, Krzysztof; ENGLERT, Berthold-Georg; RZA ŻEWSKI, Kazimierz. Semiclassical theory of trapped fermionic dipoles. **Physical Review A**, v. 63, n. 3, p. 033606, 2001.

- [13] GÓRAL, Krzysztof; BREWCZYK, Mirosław; RZA ŻEWSKI, Kazimierz. Hydrodynamic excitations of trapped dipolar fermions. **Physical Review A**, v. 67, n. 2, p. 025601, 2003.
- [14] BARANOV, M. A. et al. Superfluid pairing in a polarized dipolar Fermi gas. **Physical Review A**, v. 66, n. 1, p. 013606, 2002.
- [15] BARANOV, M. A. et al. Superfluidity of trapped dipolar fermi gases. **Physical review letters**, v. 92, n. 25, p. 250403, 2004.
- [16] MIYAKAWA, Takahiko; SOGO, Takaaki; PU, Han. Phase-space deformation of a trapped dipolar Fermi gas. **Physical Review A**, v. 77, n. 6, p. 061603, 2008.
- [17] SOGO, T. et al. Dynamical properties of dipolar Fermi gases. **New Journal of Physics**, v. 11, n. 5, p. 055017, 2009.
- [18] ZHANG, J.-N. et al. Dynamical properties of a trapped dipolar Fermi gas at finite temperature. **Physical Review A**, v. 83, n. 5, p. 053628, 2011.
- [19] LIMA, Aristeu Rosendo Pontes. Hydrodynamic studies of dipolar quantum gases. **Dissertationschrift, Freie Universität Berlin**, 2010.
- [20] LIMA, Aristeu RP; PELSTER, Axel. Collective motion of polarized dipolar Fermi gases in the hydrodynamic regime. **Physical Review A**, v. 81, n. 2, p. 021606, 2010.
- [21] WENZEL, Matthias et al. Striped states in a many-body system of tilted dipoles. **Physical Review A**, v. 96, n. 5, p. 053630, 2017.
- [22] AIKAWA, K. et al. Observation of Fermi surface deformation in a dipolar quantum gas. **Science**, v. 345, n. 6203, p. 1484-1487, 2014.
- [23] TICKNOR, Christopher. Collisional control of ground state polar molecules and universal dipolar scattering. **Physical review letters**, v. 100, n. 13, p. 133202, 2008.
- [24] OSPELKAUS, S. et al. Ultracold polar molecules near quantum degeneracy. **Faraday Discussions**, v. 142, p. 351-359, 2009.
- [25] NI, K.-K. et al. Dipolar collisions of polar molecules in the quantum regime. **Nature**, v. 464, n. 7293, p. 1324-1328, 2010.

- [26] WANG, D. et al. Direct absorption imaging of ultracold polar molecules. **Physical Review A**, v. 81, n. 6, p. 061404, 2010.
- [27] BARDEEN, John; COOPER, Leon N.; SCHRIEFFER, J. Robert. Microscopic theory of superconductivity. **Physical Review**, v. 106, n. 1, p. 162, 1957.
- [28] DIMITROVA, T. L.; WEIS, Antoine. The wave-particle duality of light: A demonstration experiment. **American Journal of Physics**, v. 76, n. 2, p. 137-142, 2008.
- [29] MACKINNON, Edward. De Broglie's thesis: A critical retrospective. **American Journal of Physics**, v. 44, n. 11, p. 1047-1055, 1976.
- [30] DURFEE, Dallin; KETTERLE, Wolfgang. Experimental studies of Bose-Einstein condensation. **Optics Express**, v. 2, n. 8, p. 299-313, 1998.
- [31] GRIFFITHS, David J.; SCHROETER, Darrell F. **Introduction to quantum mechanics**. Cambridge University Press, 2018.
- [32] BARENGHI, Carlo F.; PARKER, Nick G. **A primer on quantum fluids**. Cham: Springer, 2016.
- [33] NETO, José Fernandes de Oliveira. **Gotículas quânticas dipolares com orientação arbitrária**. Trabalho de Conclusão de Curso - Curso em Licenciatura em Física, Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira. Acarape-CE. 2019.
- [34] CHEN, Gang. **Nanoscale energy transport and conversion: a parallel treatment of electrons, molecules, phonons, and photons**. Oxford University Press, 2005.
- [35] INGUSCIO, Massimo; KETTERLE, Wolfgang; SALOMON, Christophe (Ed.). **Ultra-cold Fermi gases**. IOS press, 2008.
- [36] BUTTS, D. A.; ROKHSAR, D. S. Trapped fermi gases. **Physical Review A**, v. 55, n. 6, p. 4346, 1997.
- [37] VELJIĆ, Vladimir. Quantum kinetic theory for ultracold dipolar Fermi gases. Tese de Doutorado. **Univerzitet u Beogradu-Fizički fakultet**, 2019.
- [38] VELJIĆ, Vladimir et al. Ground state of an ultracold Fermi gas of tilted dipoles in elongated traps. **New Journal of Physics**, v. 20, n. 9, p. 093016, 2018.

- [39] BAILLIE, D.; BLAKIE, P. B. Magnetostriction and exchange effects in trapped dipolar Bose and Fermi gases. **Physical Review A**, v. 86, n. 2, p. 023605, 2012.
- [40] LIMA, Aristeu RP; PELSTER, Axel. Dipolar Fermi gases in anisotropic traps. **Physical Review A**, v. 81, n. 6, p. 063629, 2010.
- [41] SOUZA, Maycon Henrique de. **Estudo do teorema de Lagrange e aplicações em problemas de otimização**. 2019. Trabalho de Conclusão de Curso. Universidade Tecnológica Federal do Paraná.
- [42] GRADSHTEYN, Izrail Solomonovich; RYZHIK, Iosif Moiseevich. **Table of integrals, series, and products**. Academic press, 2014.

APÊNDICE A – TRANSFORMADA DE FOURIER DA INTERAÇÃO DIPOLO-DIPOLO

Neste apêndice vamos calcular a transformada de Fourier do potencial de interação dipolo-dipolo entre dois férmions polarizados, que é dada por:

$$V_{dd}(\vec{r}) = -\frac{C_{dd}}{4\pi} \frac{3(\vec{r} \cdot \vec{m})^2 - \vec{r}^2 \cdot \vec{m}^2}{|\vec{r}|^5}, \quad (\text{A.1})$$

Onde \vec{e} é a orientação mais geral dos dipolos e pode ser escrito como

$$\vec{m} = m \begin{pmatrix} \text{sen}\alpha\text{cos}\beta \\ \text{sen}\alpha\text{sen}\beta \\ \text{cos}\alpha \end{pmatrix} \quad \vec{r} = r \begin{pmatrix} \text{sen}\theta\text{cos}\varphi \\ \text{sen}\theta\text{sen}\varphi \\ \text{cos}\theta \end{pmatrix}. \quad (\text{A.2})$$

Então, vamos calcular:

$$|\vec{r} \cdot \vec{m}|^2 = m^2 r^2 (\text{sen}\alpha\text{cos}\beta\text{sen}\theta\text{cos}\varphi + \text{sen}\alpha\text{sen}\beta\text{sen}\theta\text{sen}\varphi + \text{cos}\alpha\text{cos}\theta)^2, \quad (\text{A.3})$$

e:

$$\vec{m}^2 \cdot \vec{r}^2 = m^2 r^2, \quad (\text{A.4})$$

Substituindo as eqs.A.3 e A.4 na eq.A.1, tem-se:

$$V_{dd}(\vec{r}) = -\frac{C_{dd}m^2}{4\pi r^3} [3\text{sen}^2\alpha\text{sen}^2\theta(\text{cos}^2\beta\text{cos}^2\varphi + 2\text{sen}\varphi\text{sen}\beta\text{cos}\beta\text{cos}\varphi + \text{sen}^2\beta\text{sen}^2\varphi) + 6\text{sen}\alpha\text{cos}\alpha\text{cos}\theta\text{sen}\theta(\text{cos}\beta\text{cos}\varphi + \text{sen}\beta\text{sen}\varphi) + 3\text{cos}^2\alpha\text{cos}^2\theta - 1] \quad (\text{A.5})$$

Aplicando a transformada, é obtido:

$$\begin{aligned} \bar{V}_{dd}(\vec{k}) = & -\frac{C_{dd}m^2}{4\pi} \int_0^\infty \frac{dr}{r} \int_0^\pi d\theta \text{sen}\theta e^{-ikr\text{cos}\theta} \int_0^{2\pi} [3\text{sen}^2\alpha\text{sen}^2\theta(\text{cos}^2\beta\text{cos}^2\varphi + \\ & 2\text{sen}\varphi\text{sen}\beta\text{cos}\beta\text{cos}\varphi + \text{sen}^2\beta\text{sen}^2\varphi) + 6\text{sen}\alpha\text{cos}\alpha\text{cos}\theta\text{sen}\theta(\text{cos}\beta\text{cos}\varphi + \text{sen}\beta\text{sen}\varphi) + \\ & 3\text{cos}^2\alpha\text{cos}^2\theta - 1] d\varphi, \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

Na integral em φ os termos cruzados são zero, tornando a eq.A.6:

$$\begin{aligned} \bar{V}_{dd}(\vec{k}) = & -\frac{C_{dd}m^2}{4} \int_0^\infty \frac{dr}{r} \int_0^\pi d\theta \text{sen}\theta e^{-ikr\text{cos}\theta} (3\text{sen}^2\alpha\text{sen}^2\theta + 6\text{cos}^2\alpha\text{cos}^2\theta - 2) \\ = & \frac{C_{dd}e^2}{4} (1 - 3\text{cos}^2\alpha) \int_0^\infty \frac{dr}{r} \int_0^\pi d\theta \text{sen}\theta e^{-ikr\text{cos}\theta} (3\text{cos}^2\theta - 1) \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

Chamando $u = \text{cos}\theta$ e respondendo a integral, tem-se:

$$\bar{V}_{dd}(\vec{k}) = \frac{C_{dd}m^2}{4} (1 - 3\text{cos}^2\alpha) \int_0^\infty \frac{dr}{r} \left(\frac{\text{sen}(kr)}{kr} + \frac{3\text{cos}(kr)}{(kr)^2} - \frac{3\text{sen}(kr)}{(kr)^3} \right) \quad (\text{A.8})$$

A integral em r é mais delicada, pois a integral é indefinida em $r = 0$. Para responde-la faz-se necessário o uso do limite

$$\bar{V}_{dd}(\vec{k}) = \frac{C_{dd}m^2}{4}(1 - 3\cos^2\alpha)\lim_{a\rightarrow 0}\int_a^\infty \frac{dr}{r} \left(\frac{\text{sen}(kr)}{kr} + \frac{3\cos(kr)}{(kr)^2} - \frac{3\text{sen}(kr)}{(kr)^3} \right). \quad (\text{A.9})$$

Após resolver a integral temos que aplicar o limite

$$\bar{V}_{dd}(\vec{k}) = \frac{C_{dd}m^2}{4}(1 - 3\cos^2\alpha)\lim_{a\rightarrow 0} \left[\frac{\cos(ka)}{(ka)^2} - \frac{\text{sen}(ka)}{(ka)^3} \right], \quad (\text{A.10})$$

resultando assim no potencial no espaço-k

$$\bar{V}_{dd}(\vec{k}) = \frac{C_{dd}}{3} \left[\frac{3(\vec{m} \cdot \vec{k})^2}{\vec{k}^2} - 1 \right] \quad (\text{A.11})$$

APÊNDICE B – CÁLCULO DA ENERGIA DE HARTREE

Aqui será demonstrado os passos para encontrar a energia de Hartree. A ideia principal será a utilização das transformadas de Fourier, é através delas que iremos desacoplar as funções de distribuição e o potencial de interação em relação as suas variáveis espaciais. Com essas considerações posso escrever o termo de Hartree como

Sendo:

$$\begin{aligned} E_{dd}^D &= \frac{1}{2} \int d^3x \int d^3x' \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3k'}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3k''}{(2\pi)^3} e^{i\vec{k}'' \cdot (\vec{x} - \vec{x}')} \bar{V}_{dd}(\vec{k}'') f(\vec{x}, \vec{k}) f(\vec{x}', \vec{k}') \\ &= \frac{1}{2} \int \frac{d^3k''}{(2\pi)^3} V_{dd}(\vec{k}'') \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} f(-\vec{k}'', \vec{k}) \int \frac{d^3k'}{(2\pi)^3} f(\vec{k}'', \vec{k}') \end{aligned} \quad (\text{B.1})$$

Onde $f(-\vec{k}'', \vec{k})$ e $f(\vec{k}'', \vec{k})$ são as transformadas de fourier da função de Wigner

$$f(-\vec{k}'', \vec{k}) = \int d^3x e^{i\vec{k}'' \cdot \vec{x}} \left[h(\vec{k}) - \sum_i \frac{x_i^2}{R_i^2} \right], \quad (\text{B.2})$$

e

$$f(\vec{k}'', \vec{k}) = \int d^3x e^{-i\vec{k}'' \cdot \vec{x}} \left[h(\vec{k}) - \sum_i \frac{x_i^2}{R_i^2} \right], \quad (\text{B.3})$$

e $h(\vec{k}) = 1 - \sum_j \frac{k_j^2}{K_j^2}$. Como as transformadas são em relação a posição, irei considerar nos cálculos a abreviação $h(\vec{k})$. Resolvendo a B.2, tenho

$$f(-\vec{k}'', \vec{k}) = \int dx dy e^{i(k''_x x + k''_y y)} \int_{-\infty}^{+\infty} dz \Theta \left[h(\vec{k}) - \sum_i \frac{x_i^2}{R_i^2} \right] (\cos(k''_z z) + i \sin(k''_z z)). \quad (\text{B.4})$$

Por causa da simetria da função seno, o termo $i \sin(k_z z) = 0$. Para resolver a equação acima, é preciso analisar a função de passo Heaviside, por quanto ela será 1 quando $|z| \leq R_z \sqrt{h(\vec{k}) - x^2/R_x^2 - y^2/R_y^2}$, caso contrário é zero. Outra manipulação é $z = R_z \sqrt{h(\vec{k}) - x^2/R_x^2 - y^2/R_y^2} \cos \theta$. Com isto a integral acima fica

$$\begin{aligned} f(-\vec{k}'', \vec{k}) &= \int dx dy e^{i(k''_x x + k''_y y)} 2 \int_0^{\pi/2} d\theta \sin \theta \cos \left\{ k''_z R_z \left[h(\vec{k}'') - \frac{x^2}{R_x^2} - \frac{y^2}{R_y^2} \right]^{1/2} \cos \theta \right\} \\ &\quad \times R_z \left[h(\vec{k}'') - \frac{x^2}{R_x^2} - \frac{y^2}{R_y^2} \right]^{1/2} \Theta \left[h(\vec{k}'') - \frac{x^2}{R_x^2} - \frac{y^2}{R_y^2} \right]. \end{aligned} \quad (\text{B.5})$$

Essa integral pode ser calculada usando a relação das funções trigonométricas com as funções de Bessel[[42], (3.715.20)]

$$\int_0^{\pi/2} \cos(z \cos(x)) \sin^{2\nu}(x) dx = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \left(\frac{2}{\nu} \right) \Gamma \left(\nu + \frac{1}{2} \right) J_\nu(z) \quad \text{para } \text{Re } \nu > -\frac{1}{2}. \quad (\text{B.6})$$

Utilizando esta relação, a eq.B.5 fica

$$f(-\vec{k}'', \vec{k}) = \int dx e^{ik''_x x} \frac{R_z \sqrt{2\pi}}{\sqrt{k''_z R_z}} 2 \int_{-\infty}^{+\infty} dy (\cos k''_y y + i \sin k''_y y) \left[h(\vec{k}'') - \frac{x^2}{R_x^2} - \frac{y^2}{R_y^2} \right]^{1/4} \times \Theta \left[h(\vec{k}'') - \frac{x^2}{R_x^2} - \frac{y^2}{R_y^2} \right] J_{1/2} \left\{ k''_z R_z \left[h(\vec{k}'') - \frac{x^2}{R_x^2} - \frac{y^2}{R_y^2} \right]^{1/2} \right\}. \quad (\text{B.7})$$

Usando o mesmo processo da função de passo Heaviside que foi utilizado para a variável z, a eq.B.7 ficará

$$f(-\vec{k}'', \vec{k}) = \int dx e^{ik''_x x} \frac{R_z \sqrt{2\pi}}{\sqrt{k''_z R_z}} 2 \int_0^{\pi/2} du \sin^{3/2}(u) R_y \left[h(\vec{k}'') - \frac{x^2}{R_x^2} \right]^{3/4} \Theta \left[h(\vec{k}'') - \frac{x^2}{R_x^2} \right] \times J_{1/2} \left\{ k''_z R_z \left[h(\vec{k}'') - \frac{x^2}{R_x^2} \right]^{1/2} \sin(u) \right\} \cos \left\{ k''_y R_y \left[h(\vec{k}'') - \frac{x^2}{R_x^2} \right]^{1/2} \cos(u) \right\}. \quad (\text{B.8})$$

A resolução desta integral pode ser feita pela relação das funções trigonométricas com as funções de Bessel[[42], (6.688.2)].

$$\int_0^{\pi/2} dx \sin^{v+1}(x) \cos(\beta \cos x) J_\nu(\alpha \sin x) = \frac{\alpha^v \sqrt{\pi}}{\sqrt{2}} (\alpha^2 + \beta^2)^{-\frac{1}{2}v - \frac{1}{4}} \times J_{v+1/2} \left[(\alpha^2 + \beta^2)^{1/2} \right] \quad \text{para } \text{Re } v > -1. \quad (\text{B.9})$$

Usando esta equação e após simplificando os termos, a próxima integral, que é em relação a coordenada x, pode ser calculada da mesma forma. O resultado é

$$f(-\vec{k}'', \vec{k}) = \frac{(2\pi)^{3/2} h(\vec{k}) \Theta[h(\vec{k})]}{(\sum_i k_i''^2 R_i^2)^{3/4}} J_{3/2} [h(\vec{k})^{1/2} (\sum_i k_i''^2 R_i^2)^{1/2}]. \quad (\text{B.10})$$

Este é o resultado da eq.B.2. O próximo cálculo é da outra transformada de Fourier da função de Wigner, a eq.B.3. Observe que esta outra função é uma função par, logo o processo é o mesmo do cálculo anterior e o resultado também. Portanto, pode-se análise a seguinte expressão

$$\int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} f(\vec{k}'', \vec{k}) = \frac{\bar{R}^3}{(2)^{3/2} (\sum_i k_i''^2 R_i^2)^{3/4}} \int d^3 k \left(1 - \sum_j \frac{k_j^2}{K_j^2} \right)^{3/4} \Theta \left(1 - \sum_j \frac{k_j^2}{K_j^2} \right) \times J_{3/2} \left[\left(1 - \sum_j \frac{k_j^2}{K_j^2} \right) (\sum_i k_i''^2 R_i^2)^{1/2} \right]. \quad (\text{B.11})$$

A resolução dessa integral pode ser feita utilizando as coordenadas esféricas. Para isto pode ser feita tal substituição de $k_j = K_j u_j$. Logo

$$\int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} f(\vec{k}'', \vec{k}) = \frac{\bar{R}^3 \bar{K}^3}{(2)^{3/2} (\sum_i k_i''^2 R_i^2)^{3/4}} 4\pi \int_0^1 du u^2 (1 - u^2)^{3/4} \times J_{3/4} [(1 - u^2)^{1/2} (\sum_i k_i''^2 R_i^2)^{1/2}] \quad (\text{B.12})$$

Considerando $u = \cos \theta$ a integral acima pode ser resolvida através da relação das funções trigonométricas com as funções de Bessel[[42], (6.683)]

$$\int_0^{\pi/2} d\theta J_\mu(a \sin \theta) \sin^{\mu+1} \theta \cos^{2\rho+1} \theta = 2^\rho \Gamma(\rho+1) a^{-\rho-1} J_{\rho+\mu+1}(a) \quad \text{para } \text{Re} \rho, \text{Re} \mu > -1. \quad (\text{B.13})$$

Utilizando a eq.B.13 na eq.B.12 o resultado obtido será

$$\int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} f(-\vec{k}'', \vec{k}) = \frac{\bar{K}^3 \bar{R}^3 J_3[h(\vec{k})^{1/2} (\sum_i k_i'^2 R_i^2)^{1/2}]}{(\sum_i k_i'^2 R_i^2)^{3/2}} = n(\vec{k}''). \quad (\text{B.14})$$

Então, com essas expressões a equação B.1 fica

$$E_{dd}^D = \frac{1}{2} \int \frac{d^3 k''}{(2\pi)^3} v_{dd}(\vec{k}'') n^2(\vec{k}''), \quad (\text{B.15})$$

E substituindo o potencial de interação dipolo-dipolo e as transformadas de Fourier das funções de Wigner

$$E_{dd}^D = \frac{C_{dd}}{6} \int \frac{d^3 k''}{(2\pi)^3} \left(\frac{(\vec{m} \cdot \vec{k}'')^2}{k''^2} - 1 \right) \frac{\bar{K}^6 \bar{R}^6 J_3^2[h(\vec{k})^{1/2} (\sum_i k_i'^2 R_i^2)^{1/2}]}{(\sum_i k_i'^2 R_i^2)^3}. \quad (\text{B.16})$$

Fazendo uma substituição $k_i' R_i = u_i$ e uma mudança para coordenadas esféricas, a integral leva a

$$E_{dd}^D = \frac{\bar{R}^6 \bar{K}^6 C_{dd}}{6} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi d\theta \frac{\sin \theta}{3 \cos^2 \theta} \int_0^\infty du \frac{J_3^2(u)}{u^4} \times \left(\frac{3 \cos^2 \theta}{(R_z/R_x)^2 \cos^2 \varphi \sin^2 \theta + (R_z/R_y)^2 \sin^2 \varphi \sin^2 \theta + \cos^2 \theta} - 1 \right). \quad (\text{B.17})$$

Utilizando mais uma identidade das funções de Bessel

$$\int_0^\infty dt J_\nu(\alpha t) J_\mu(\alpha t) t^{-\lambda} = \frac{\alpha^{\lambda-1} \Gamma(\lambda) \Gamma\left(\frac{\nu+\mu-\lambda+1}{2}\right)}{2^\lambda \Gamma\left(\frac{-\nu+\mu+\lambda+1}{2}\right) \Gamma\left(\frac{\nu+\mu+\lambda+1}{2}\right) \Gamma\left(\frac{\nu-\mu+\lambda+1}{2}\right)} \quad \text{para } \text{Re}(\nu+\mu+1) > \text{Re}(\lambda) > 0, \alpha > 0 \quad (\text{B.18})$$

e sabendo que nas descrições teóricas de gases quânticos ultra-frios, fermiônicos ou bosônicos, existe um caráter anisotrópico do DDI que é refletido pelo aparecimento de uma função especial anisotrópica, que determina a energia dipolar do sistema. Aqui, definimos uma delas que é:

$$f(x, y) = -\frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin \theta d\theta \left(\frac{3x^2 y^2 \cos^2 \theta}{y^2 \cos^2 \varphi \sin^2 \theta + x^2 \sin^2 \varphi \sin^2 \theta + x^2 y^2 \cos^2 \theta} - 1 \right). \quad (\text{B.19})$$

Com essas considerações, a expressão para a energia de Hartree é:

$$E_{dd}^D = -\frac{6N^2 c_0}{\bar{R}^3} f\left(\frac{R_x}{R_z}, \frac{R_y}{R_z}\right). \quad (\text{B.20})$$

Aqui c_0 é uma constante relacionada à força do DDI, definida como

$$c_0 = \frac{2^{10} C_{dd}}{3^4 \cdot 5 \cdot 7 \cdot \pi^3} \quad (\text{B.21})$$

APÊNDICE C – ENERGIA DE FOCK

Dentre as 4 energias, a energia de Fock é a mais complexa de ser calculada. Entretanto, ela pode encontrada utilizando as transformadas de Fourier. Serão trocadas as variáveis tando da posição quanto do momento das funções de Wigner por duas transformadas de Fourier. Com isto, a energia de Fock fica

$$\begin{aligned} E_{ex} &= -\frac{1}{2} \int d^3x \int d^3x' \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3k'}{(2\pi)^3} V_{dd}(\vec{x}) e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{x}'} f(\vec{x}, \vec{k}) f(\vec{x}, \vec{k}'), \\ &= -\frac{1}{2} \int d^3x' \int \frac{d^3k'}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3k''}{(2\pi)^3} \bar{f}(\vec{k}'', \vec{x}') \bar{f}(-\vec{k}'', -\vec{x}') \bar{V}_{dd}(\vec{k}') e^{i\vec{x}'\cdot\vec{k}'}, \end{aligned} \quad (\text{C.1})$$

onde $\bar{f}(-\vec{k}'', \vec{k})$ é a transformada de Fourier de $f(\vec{x}, \vec{k})$ com respeito a primeira variável e $\bar{f}(-\vec{k}'', -\vec{x}')$ é a segunda transformada, que será feita em relação ao segundo termo de $\bar{f}(-\vec{k}'', \vec{k})$. A ordem de integração depende do potencial de interação, por isso que aqui é considerado que a integral sobre o potencial de interação levará à função de anisotropia, da mesma forma que no termo de Hartree. Então, o primeiro passo será calcular as duas transformada de Fourier da função de Wigner. Observe que a primeira transformada foi calculada no termo de Hartree B.10. Portanto, o próximo passo será

$$\begin{aligned} \bar{f}(-\vec{k}'', \vec{x}') &= \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}'} f(-\vec{k}'', \vec{k}), \\ &= \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}'} \frac{\bar{R}^3 \Theta \left(1 - \sum_j \frac{k_j^2}{K_j^2}\right)^{3/4}}{g(\vec{k}'')^{3/4}} \left(1 - \sum_l \frac{k_l^2}{K_l^2}\right)^{3/4} J_{3/2} \left[\left(1 - \sum_m \frac{k_m^2}{K_m^2}\right)^{1/2} g(\vec{k}'')^{1/2} \right], \end{aligned} \quad (\text{C.2})$$

onde $g(\vec{k}'') = k_x''^2 R_x^2 + k_y''^2 R_y^2 + k_z''^2 R_z^2$. Usando a substituição de $k_z = K_z \sqrt{1 - \frac{k_x^2}{K_x^2} - \frac{k_y^2}{K_y^2}} \cos \theta$ a eq.C.2 pode ser reescrita como

$$\begin{aligned} \bar{f}(-\vec{k}'', \vec{x}') &= \frac{\bar{R}^3}{(2\pi)^{3/2} g(\vec{k}'')^{3/4}} \int dk_x dk_y e^{i(xk_x + yk_y)} \Theta \left(1 - \frac{k_x^2}{K_x^2} - \frac{k_y^2}{K_y^2}\right) \left(1 - \frac{k_x^2}{K_x^2} - \frac{k_y^2}{K_y^2}\right)^{5/4} \\ &\times 2 \int_0^{\pi/2} d\theta \sin^{5/2} \theta K_z \cos \left(z K_z \sqrt{1 - \frac{k_x^2}{K_x^2} - \frac{k_y^2}{K_y^2}} \cos \theta \right) J_{3/2} \left[g(\vec{k}'')^{1/2} \left(1 - \frac{k_x^2}{K_x^2} - \frac{k_y^2}{K_y^2}\right)^{1/2} \cos \theta \right]. \end{aligned} \quad (\text{C.3})$$

Feita esta substituição, pode ser utilizada a relação da eq.B.9 que é a relação das integrais trigonométricas com as funções de Bessel. O cálculo das duas outras variáveis é da mesma

forma. Então, o resultado da transformada de Fourier é

$$\bar{f}(-\vec{k}'', \vec{x}') = \frac{\bar{R}^3 \bar{K}^3}{[g(\vec{k}'') + x^2 K_x^2 + y^2 K_y^2 + z^2 K_z^2]^{3/2}} J_3 \{ [g(\vec{k}'') + x^2 K_x^2 + y^2 K_y^2 + z^2 K_z^2]^{1/2} \}. \quad (C.4)$$

Com este resultado a eq.C.1 fica

$$E_{ex} = -\frac{1}{2} \int d^3 x' \int \frac{d^3 k'}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3 k''}{(2\pi)^3} \bar{V}_{dd}(\vec{k}') e^{i\vec{x}' \cdot \vec{k}'} \frac{\bar{R}^6 \bar{K}^6 J_3^2 \{ [g(\vec{k}'') + x^2 K_x^2 + y^2 K_y^2 + z^2 K_z^2]^{1/2} \}}{[g(\vec{k}'') + x^2 K_x^2 + y^2 K_y^2 + z^2 K_z^2]^3}. \quad (C.5)$$

Essa função de Bessel elevado ao quadrado por ser representada na forma integral pela relação [[42], (6.519.2.2)]

$$\int_0^{\pi/2} J_{2\nu}(2z \sin t) dt = \frac{\pi}{2} J_\nu^2(z), \quad \text{para } \text{Re } \nu > -\frac{1}{2}, \quad (C.6)$$

implicando em

$$J_3^2 [g(\vec{k}'') + x^2 K_x^2 + y^2 K_y^2 + z^2 K_z^2]^{1/2} = \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi/2} dt J_6 \{ 2 \sin t [g(\vec{k}'') + x^2 K_x^2 + y^2 K_y^2 + z^2 K_z^2]^{1/2} \}. \quad (C.7)$$

Da eq.C.5 vamos analisar a variável x' e vamos analisar a coordenada z , as outras são análogas.

Então, fazendo $u_z = zK_z$ e usando [[42], (6.726.2)]

$$\begin{aligned} \int_0^{+\infty} (x^2 + b^2)^{-\nu/2} J_\nu(a\sqrt{x^2 + b^2}) \cos(cx) dx &= \sqrt{\frac{\pi}{2}} a^{-\nu} b^{-\nu+1/2} (a^2 - c^2)^{(\nu/2)-1/4} J_{\nu-1/4}(b\sqrt{a^2 - c^2}) \\ &\text{para } 0 < c < a, b > 0, \text{Re } \nu > -\frac{1}{2} \\ &= 0 \text{ para } 0 < a < c, b > 0, \text{Re } \nu > -\frac{1}{2}, \end{aligned} \quad (C.8)$$

obtemos

$$\begin{aligned} \int d^3 x' \bar{f}^2(\vec{k}'', \vec{x}') e^{i\vec{k}'' \cdot \vec{x}'} &= \bar{R}^6 \bar{K}^6 \int dx' dy' e^{i(x'k'_x + y'k'_y)} \frac{4}{\pi K_z} \int_0^{\pi/2} dt \frac{\left(4 \sin^2 t - \frac{k_z'^2}{K_z^2}\right)^{11/4} \Theta\left(2 \sin t - \sqrt{\frac{k_z'^2}{K_z^2}}\right)}{(2 \sin t)^6 [x'^2 K_x^2 + y'^2 K_y^2 + g(\vec{k}'')]^{11/4}} \\ &\times \sqrt{\frac{\pi}{2}} J_{11/2} \left\{ \left(4 \sin^2 t - \frac{k_z'^2}{K_z^2}\right)^{1/2} [x'^2 K_x^2 + y'^2 K_y^2 + g(\vec{k}'')]^{1/2} \right\}. \end{aligned} \quad (C.9)$$

A função Heaviside aparece para que a eq.C.8 seja satisfeita. As outras integrais são calculadas da mesma forma. Logo, o resultado da integral x' é

$$\begin{aligned} \int d^3 x' \bar{f}^2(\vec{k}'', \vec{x}') e^{i\vec{k}'' \cdot \vec{x}'} &= \sqrt{\frac{1}{27}} \bar{R}^6 \bar{K}^3 \int_0^{\pi/2} \frac{dt}{\sin t} \frac{\left(4 \sin^6 t - \frac{k_z'^2}{K_z^2} - \frac{k_y'^2}{K_y^2} - \frac{k_x'^2}{K_x^2}\right)}{g(\vec{k}'')^{9/4}} \\ &\times J_{9/2} \left[g(\vec{k}'')^{1/2} \left(4 \sin t - \frac{k_z'^2}{K_z^2} - \frac{k_y'^2}{K_y^2} - \frac{k_x'^2}{K_x^2}\right)^{1/2} \right] \Theta\left(2 \sin t - \sqrt{\frac{k_z'^2}{K_z^2} - \frac{k_y'^2}{K_y^2} - \frac{k_x'^2}{K_x^2}}\right). \end{aligned} \quad (C.10)$$

O próximo passo é calcular a integral em k'' . Fazendo a substituição $u_i = k_i''/R_i$, usando simetria esférica e a relação

$$\int_0^{+\infty} \frac{J_\nu(ax)}{x^{\nu-q}} dx = \frac{\Gamma\left(\frac{1}{2}q + \frac{1}{2}\right)}{2^{\nu-q} a^{\nu-q+1} \Gamma\left(\nu - \frac{1}{2}q + \frac{1}{2}\right)} \text{ para } -1 < \text{Re}q < \text{Re}\nu - \frac{1}{2}, \quad (\text{C.11})$$

o resultado é

$$\int d^3k'' \int d^3x' \bar{f}^2(\vec{k}'', \vec{x}') e^{i\vec{k}'' \cdot \vec{x}'} = \frac{\pi^2 \bar{R}^3 \bar{K}^3}{192} \int_0^{\pi/2} \frac{dt}{\sin^6 t} \left(4 \sin^2 t - \sum_i \frac{k_i'^2}{K_i^2}\right)^3 \Theta\left(2 \sin t - \sqrt{\sum_i \frac{k_i'^2}{K_i^2}}\right). \quad (\text{C.12})$$

Só falta agora calcular a integral k' . Para resolvê-la será feita a substituição $u_i = k_i'/K_i$ e utilizado as coordenadas esféricas

$$E_{ex} = \frac{-C_{dd} \bar{R}^3 \bar{K}^6}{73728 \pi^4} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi d\theta \sin \theta \left(\frac{3 \cos^2 \theta}{(K_x^2/K_z^2) \sin^2 \theta \cos^2 \varphi + (K_y^2/K_z^2) \sin^2 \theta \sin^2 \varphi + \cos^2 \theta} - 1 \right) \\ \times \int_0^{\pi/2} \frac{dt}{\sin^6 t} \int_0^{2 \sin t} du u^2 (4 \sin^2 t - u^2)^3, \quad (\text{C.13})$$

onde as integrais em θ e φ são a definição da função de anisotropia, definida na eq.B.19 e com a definição de c_0 na eq.B.21, a solução para o termo de Fock é

$$E_{ex} = \frac{6N^2 c_0}{\bar{R}^3} f\left(\frac{K_z}{K_x}, \frac{K_z}{K_y}\right) \quad (\text{C.14})$$