UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE FÍSICA E QUÍMICA DE SÃO CARLOS

"CORRELAÇÕES EM SISTEMAS DE
BOSONS CARREGADOS"

Álvaro de Almeida Caparica

Tese apresentada ao Instituto de
Física e Química de São Carlos ,
para obtenção do título de Dou-
tor em Ciências (Física Básica).

Orientador: Prof. Dr. Oscar Hipólito

Departamento de Física e Ciência dos Materiais

Fevereiro/1985

MEMBROS DA COMISSÃO JULGADORA DA TESE DE DOUTORADO DE _____

Alvaro de Almeida Canarica

APRESENTADA AO INSTITUTO DE FÍSICA E QUÍMICA DE SÃO CARLOS, DA
UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO, EM 22 DE março DE 1985.

COMISSÃO JULGADORA:

Dr. Oscar Hipólito - Orientador

Dr. Valério Kurak

Dr. José Roberto Drugowich de Felício

Dr. José Galvão de Pisapia Ramos

Dr. José D'Albuquerque e Castro

Trabalho realizado com o suporte financeiro do
CNPq e da CAPES.

A meus pais

e ao

Prof. Ulisses, meu velho amigo

AGRADECIMENTOS

Ao final do longo período, que ora se encerra com o término desse trabalho de tese, é sem dúvida o momento mais agradável escrever esta página singela. Vale a pena registrar aqui o meu profundo agradecimento a todas as pessoas do Departamento de Física que direta ou indiretamente me ajudaram durante esses anos com seu apoio, com sua competência, com sua amizade.

Agradeço, em particular, ao Oscar, amigo e orientador competente. Ao Drugo, Ana Sílvia, Ana Helena e Quicão que obstinadamente me arrancavam do fundo do poço toda vez que eu insistia em voltar para lá. Ao Lidério, Degani, Márcio e Luiz Nunes, com quem tive inúmeras vezes o prazer de discutir assuntos relacionados ao meu trabalho. Ao Valdeci e Valdir, profissionais extremamente dedicados e eficientes. À Cecília e Nicete, sempre solícitas, prontas a colaborar.

Durante esses anos fiz muitos amigos que vieram enriquecer o meu cotidiano. Quero agradecer também a eles por seu companheirismo e por tantos momentos agradáveis que passamos juntos. Eles são: Pedro, Giomal, Márcia, Marisa, Umbelino, Valter, Makoto, Onody, Almir e Laércio.

Quero também que se registre o meu apreço pela Fundação Educacional de Barretos, por seus professores, funcionários e alunos. Em todos esses anos foi particularmente importante a amizade e o apoio com que sempre pude contar do Johnny, Marcelo e Chahine.

Agradeço ainda ao Prof. Sylvio o convite para fazer doutorado nessa Instituição antes ainda do término do meu curso em Moscou.

Finalmente agradeço à Marta pelo excelente trabalho de datilografia e ao Geraldo pela confecção dos gráficos.

RESUMO

O gás de Bose carregado foi estudado em duas e três dimensões, sendo que no caso bidimensional foram considerados dois tipos distintos de interação: $1/r$ e $\ln(r)$. Aplicamos a esses sistemas o método do campo auto-consistente que leva em consideração a interação de curto alcance entre os bosons através de uma correção de campo local. Por meio de cálculos numéricos auto-consistentes determinamos o fator de estrutura $S(\vec{k})$ em um amplo intervalo de densidades. A partir de $S(\vec{k})$ obtivemos a função de correlação dos pares, a energia do estado fundamental que é essencialmente a energia de correlação, a pressão do gás e o espectro de excitações elementares. Calculamos ainda a densidade de blindagem induzida por uma impureza carregada fixada no gás. No limite de altas densidades nossos cálculos reproduzem os resultados da teoria de perturbação de Bogoliubov. Na região de densidades intermediárias em que os sistemas são fortemente correlacionados nossos resultados apresentam uma boa concordância com cálculos baseados na aproximação de HNC e no método de Monte Carlo. Nossos resultados são em várias situações confrontados com os de RPA demonstrando que o método que utilizamos é muito mais adequado para tratar o sistema. Os sistemas bidimensionais mostraram-se mais correlacionados que o tridimensional, sendo que o gás com interação $1/r$ é mais correlacionado que o logarítmico a altas densidades, mas na região de densidades baixas essa situação se inverte. Finalmente calculamos as funções termodinâmicas dos sistemas bi e tridimensionais a temperaturas finitas próximas do zero absoluto baseando-nos nos espectros de excitação do gás a temperatura zero.

ABSTRACT

The two and three-dimensional charged Bose gas have been studied. In the bidimensional case two different types of interaction were considered: $1/r$ and $\ln(r)$. We have applied to these systems the self-consistent-field method, which takes into account the short range correlations between the bosons through a local-field correction. By using self-consistent numerical calculations we determined the structure factor $S(\vec{k})$ in a wide range of densities. From $S(\vec{k})$ we obtained the pair-correlation function, the ground-state energy, the pressure of the gas and the spectrum of elementary excitations. In addition we calculated the screening density induced by a fixed charged impurity. In the high-density limit our calculations reproduce the results given by Bogoliubov's perturbation theory. In the intermediate-density region, corresponding to the strongly coupled systems, our results are in very good agreement with calculations based on HNC approximation as well as Monte Carlo method. Our results are compared in several situations with RPA results showing that the self-consistent method is much more accurate. The two-dimensional systems showed to be more correlated than the three-dimensional one; the gas with interaction $1/r$ is also more correlated than the logarithmic one at high densities, but it begins to be less correlated than this one in the low-density region. Finally we calculated the thermodynamic functions of the two and three-dimensional systems at finite temperatures near absolute zero, based upon the gas excitation spectra at zero temperature.

ÍNDICE

CAPÍTULO I	- INTRODUÇÃO.....	1
CAPÍTULO II	- MÉTODO DO CAMPO AUTO-CONSISTENTE NO ESTUDO DE UM SISTEMA DE MUITOS CORPOS.....	6
2.1.	Seção de choque diferencial e o fator de estrutura.....	6
2.2.	Aproximação da resposta linear e a função resposta densidade-densidade.....	11
2.3.	Método do campo auto-consistente.....	17
CAPÍTULO III	- APLICAÇÃO DA APROXIMAÇÃO DO CAMPO AUTO-CON- SISTENTE A UM GÁS DE BOSE TRIDIMENSIONAL À $T = 0$	23
3.1.	Susceptibilidade de um sistema de partí- culas livres.....	23
3.2.	Cálculo do fator de estrutura estático.....	24
3.3.	Função de correlação dos pares.....	27
3.4.	Energia do estado fundamental e pressão do gás.....	38
3.5.	Resposta a uma impureza carregada fixa na origem.....	43
3.6.	Espectro de excitações elementares.....	46
CAPÍTULO IV	- SISTEMA BIDIMENSIONAL DE BOSONS CARREGADOS COM INTERAÇÃO LOGARÍTMICA.....	54
4.1.	Fator de estrutura.....	55
4.2.	Função de correlação dos pares.....	57
4.3.	Blindagem de uma impureza carregada.....	64
4.4.	Espectro de excitações elementares.....	70

CAPÍTULO V	- SISTEMA BIDIMENSIONAL DE BOSONS CARREGADOS	
	COM INTERAÇÃO COULOMBIANA TRIDIMENSIONAL.....	74
5.1.	Fator de Estrutura.....	75
5.2.	Correlações.....	82
5.3.	Energia do estado fundamental.....	90
5.4.	Densidade de blindagem	92
5.5.	Espectro de excitações elementares.....	96
CAPÍTULO VI	- TERMODINÂMICA DO GÁS DE BOSE CARREGADO A	
	BAIXAS TEMPERATURAS.....	101
6.1.	Funções termodinâmicas do gás tridimen <u>sional</u>	107
6.2.	Funções termodinâmicas do gás bidimen- sional com interação $1/r$	114
CAPÍTULO VII	- CONCLUSÕES.....	120
APÊNDICE.....		123
REFERÊNCIAS.....		132

CAPÍTULO 1

INTRODUÇÃO

O estudo das propriedades dos sistemas de muitas partículas que existem na natureza a temperaturas muito baixas, como, por exemplo, os superfluidos e supercondutores, tem despertado a atenção dos físicos teóricos. Com o desenvolvimento de diferentes técnicas e aproximações de cálculo, ampliou-se, no entanto, o interesse em torno do assunto, resultando no estudo de sistemas puramente acadêmicos sem análogos no mundo que nos cerca.

Um desses possíveis sistemas é o gás de Bose carregado. Não se trata de um sistema irreal, mas sim de um sistema que só existe em situações muito singulares. Ginzburg⁽¹⁾ analisa em seu excelente trabalho a possibilidade de existência e observação de estados superfluidos e supercondutores sob condições cósmicas, circunstância em que pode existir naturalmente um sistema de bosons carregados formado por íons de He^4 no centro de estrelas anãs brancas.

O gás de bosons carregados é também frequentemente lembrado como um possível modelo para a supercondutividade por apresentar o fenômeno ímpar da condensação de Bose-Einstein^(2,3). Num supercondutor os elétrons de condução encontram-se num estado ordenado no metal que se caracteriza pela formação de pares fracamente acoplados por uma interação atrativa indireta através da rede. Esses pares podem ser tratados como bosons carregados.

Mas, como já dissemos acima, existe, além de tudo, interesse acadêmico no estudo desse sistema particular de muitos corpos.

Em 1961 Foldy⁽⁴⁾ publicou um trabalho pioneiro em

que calculou utilizando o método de Bogoliubov⁽⁵⁾ a energia do estado fundamental e o espectro de excitações elementares de um sistema de bosons carregados à temperatura zero no limite de altas densidades. A partir daí muitos trabalhos foram desenvolvidos com o objetivo de melhorar esses cálculos tornando-os aplicáveis a sistemas de densidades mais baixas. Os primeiros cálculos da energia do estado fundamental na região intermediária ($1 \lesssim r_s \lesssim 100$) foram realizados por Lee⁽⁶⁾, Lee e Ree⁽⁷⁾ e Monnier⁽⁸⁾ que utilizaram um formalismo variacional partindo de uma função de onda de Jastrow.

Mais recentemente Hansen e Mazighi⁽⁹⁾ melhoraram esses resultados obtendo também por métodos variacionais a energia do estado fundamental do gás de Bose carregado para um grande intervalo de densidades ($1 \lesssim r_s \lesssim 200$). Esses resultados foram obtidos variacionalmente através de uma função de onda de Jastrow contendo dois parâmetros, com a qual foram calculados os valores esperados da energia tanto pela aproximação HNC (hypernetted-chain approximation) como pelo método de Monte Carlo.

Em nosso trabalho investigamos algumas propriedades dielétricas do gás de Bose carregado utilizando a aproximação do campo auto-consistente (SCFA - self-consistent-field approximation) proposta por Singwi et al⁽¹⁰⁻¹²⁾ para um gás de eletrons denegado e aplicada com sucesso a diversos sistemas em diferentes dimensionalidades⁽¹³⁻¹⁷⁾. Esse método é um dos melhores aperfeiçoamentos propostos à aproximação das fases aleatórias (RPA - random phase-approximation), pois tem o mérito de incluir as correlações de curto alcance que advêm do potencial repulsivo de Coulomb. As correlações de curto alcance, que são responsáveis pelas correções de campo local, são calculadas de forma auto-consistente fazendo a função resposta densidade-densidade dependente da função de correlação dos pares. Para um sistema clássico, o método con-

siste, em desacoplar a função de distribuição de duas partículas na equação de Liouville substituindo-a pelo produto de duas funções de distribuição de uma partícula e uma função de correlação dos pares. Já para um sistema quântico obtém-se resultados semelhantes levando-se em consideração na equação de movimento das flutuações da densidade o termo formado por uma soma de exponenciais com fases aleatórias, que é desprezado em RPA, substituindo-o por sua média estática.

No capítulo II descrevemos de maneira genérica o método de estudo de um sistema de muitos corpos baseado no cálculo do fator de estrutura na aproximação de resposta linear. No final do capítulo apresentamos de forma razoavelmente detalhada o método do campo auto-consistente que utilizaremos a seguir.

No capítulo III investigamos o gás de Bose carregado a três dimensões. Aplicando o método auto-consistente calculamos o fator de estrutura, a função de correlação dos pares, a densidade de blindagem a uma impureza carregada fixa na origem, a energia do estado fundamental, a pressão do gás e o espectro de excitações elementares. Nossos resultados numéricos para a energia do estado fundamental são comparados com os obtidos pelos métodos de Monte Carlo e HNC⁽⁶⁻⁸⁾. No limite de altas densidades quando $r_s \rightarrow 0$ os resultados mostram perfeita concordância com a teoria de Bogoliubov aplicada por Foldy ao gás de Bose carregado⁽⁴⁾.

Recentemente muitos físicos teóricos e experimentais têm demonstrado um interesse crescente por sistemas bidimensionais de muitos corpos. As propriedades eletrônicas de sistemas bidimensionais tais como eletrons ligados à superfície do hélio líquido ou eletrons nas camadas de inversão em estruturas metal-semicondutor, por exemplo, tem sido amplamente investigadas nos últimos anos⁽¹⁸⁾. Nesses sistemas os eletrons interagem na direção perpendicular à superfície através do seu potencial imagem,

ocupando estados quânticos discretos e, em seu movimento paralelo à superfície, interagem entre si através de um potencial $1/r$. Os efeitos de muitos corpos desses sistemas foram estudados através do fator de estrutura, a função de correlação dos pares, as funções termodinâmicas, a relação de dispersão do plasma, a energia do estado fundamental, etc.^(16,17,19) Esses sistemas não são estritamente bidimensionais, uma vez que a função de onda do eletron tem uma extensão finita na terceira dimensão, bem como o campo eletromagnético também não se restringe ao plano, mas abrange um espaço tridimensional.

Um sistema Coulombiano estritamente bidimensional é formado por partículas imersas num fundo neutralizador que interagem através de um potencial $V(r)$ obtido da equação de Poisson bidimensional

$$\Delta V(\vec{r}) = -2\pi e^2 \delta(\vec{r}).$$

O potencial que satisfaz essa equação é o potencial logarítmico. Assim, em se tratando de sistemas bidimensionais, dois tipos diferentes devem ser considerados: com potencial $1/r$ e com potencial $\ln(r)$.

Além do interesse acadêmico que desperta como um problema de muitos corpos, o sistema com potencial logarítmico pode ter aplicações em situações físicas reais como, por exemplo, um modelo para superfluidez bidimensional⁽²⁰⁻²²⁾. Além disso, a interação $\ln(r)$ tornou-se recentemente importante para a compreensão de deslocamentos em sólidos, da transição de Kosterlitz-Thouless⁽²³⁾ e de filmes finos supercondutores⁽²⁴⁻²⁶⁾.

Nos capítulos IV e V estudamos os sistemas bidimensionais de bosons-carregados com potenciais $\ln(r)$ e $1/r$ respectivamente. Mostramos que ambos os sistemas são mais correlacionados

que o sistema tridimensional, sendo que o sistema com potencial $1/r$ é mais correlacionado que o logarítmico a altas densidades, situação que se inverte a medida que se passa para a região de densidades mais baixas. Os resultados para a energia do estado fundamental para o sistema com potencial $1/r$ foram comparados com os de Monte Carlo que o Prof. David M. Ceperley nos forneceu em comunicação privada e apresentaram uma boa concordância.

No capítulo VI estendemos o estudo dos sistemas bi e tridimensionais à região de temperaturas finitas próximas do zero absoluto, calculando a energia livre, a energia interna, a entropia e o calor específico a volume constante. Nessa aproximação o fator de estrutura a temperatura finita é calculado a partir do espectro de excitações elementares à temperatura zero.

Finalmente, no capítulo VII apresentamos as conclusões.

CAPÍTULO II

MÉTODO DO CAMPO AUTO-CONSISTENTE NO ESTUDO
DE UM SISTEMA DE MUITOS CORPOS

A forma usual de se estudar um sistema de muitos corpos é através da sua resposta a algum tipo de perturbação. Podemos, por exemplo, obter informações sobre as propriedades eletrônicas e estruturais de um material através do espalhamento de raios-X , de neutrons lentos, etc.. Em nosso trabalho estudaremos as propriedades dielétricas de um gás de bosons carregados, imersos num fundo neutralizador estático, nas regiões de densidades altas e intermediárias, interagindo através de um potencial de Coulomb à temperatura zero. Como já assinalamos anteriormente, tal sistema de bosons carregados não existe em condições normais e, portanto, sua realização experimental é praticamente impossível ou, no mínimo, muito difícil. Entretanto, iremos calcular aquilo que um físico experimental obteria de uma experiência direta, i.e., a seção de choque diferencial parcial para o espalhamento de partículas dentro de um ângulo sólido $d\Omega$ com transferência de energia da ordem de $d\omega$.

2.1 Seção de choque diferencial e fator de estrutura

As experiências de espalhamento em sistemas de muitos corpos são, em geral, realizadas com neutrons. O fato, entretanto, de estarmos estudando o sistema teoricamente nos dá a liberdade de escolher partículas carregadas para serem espalhadas. Como o nosso sistema é carregado, a interação entre os alvos e as partículas espalhadas será simplesmente Coulombiana. Quando ocorre o espalhamento dentro de um ângulo sólido $d\Omega$ uma partícula inicialmente com mo

mento $\hbar\vec{k}'$ e energia $\hbar\omega_0$ passa a ter momento $\hbar\vec{k}''$ e energia $\hbar\omega_n$. Assim sendo, há uma transferência de energia e momento para o alvo dada por

$$\begin{aligned}\hbar\omega &= E_n - E_0 = \hbar\omega_{no} \\ \hbar\vec{k} &= \hbar\vec{k}' - \hbar\vec{k}''\end{aligned}\tag{2.1}$$

onde E_0 e E_n são as energias inicial e final do alvo. Como o choque é inelástico, a amostra, em virtude da transferência de energia, passa do seu estado fundamental $|0\rangle$ para um estado excitado $|n\rangle$. De acordo com a "regra ^{de ouro} áurea" da teoria de perturbação de ^{segunda} primeira ordem, a probabilidade por unidade de tempo de que ocorra a transição $|0, \vec{k}'\rangle \rightarrow |n, \vec{k}''\rangle$ é dada por

$$W_{no} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle n, \vec{k}'' | V | 0, \vec{k}' \rangle|^2 \delta(\hbar\omega - \hbar\omega_{no})\tag{2.2}$$

onde V é o potencial de interação entre a partícula espalhada e a amostra.

Para calcular a seção de choque de espalhamento dentro de um ângulo sólido $d\bar{\Omega}$ e com transferência de energia $d\omega$, devemos inicialmente somar as probabilidades W_{no} sobre todos os estados finais $|n\rangle$ permitidos pela conservação da energia e multiplicar o resultado pela densidade de estados para uma variação de momento $\vec{k}'' \rightarrow \vec{k}'' + d\vec{k}''$. A seguir, para obtermos o resultado na forma de uma determinada área referente a uma única partícula devemos dividi-lo pelo fluxo de partículas incidentes. Finalmente as variáveis devem ser convertidas para Ω e ω . O resultado final é ⁽²⁷⁾

$$\frac{d^2\sigma}{d\bar{\Omega}d\omega} = \left(\frac{k''}{k'}\right) \left(\frac{m\Omega}{2\pi\hbar^2}\right)^2 \sum_n |\langle n, \vec{k}'' | V | 0, \vec{k}' \rangle|^2 \delta(\omega - \omega_{no})\tag{2.3}$$

onde m é a massa de cada alvo e Ω é o volume total do sistema.

A estrutura e a dinâmica da amostra, que são os aspectos do problema que nos interessam, entram no cálculo da seção de choque através da perturbação V . As partículas são espalhadas por colisões com as partículas do sistema e nós consideramos que V é dado pela soma das interações de uma partícula incidente situada em $\vec{r}$ e um boson em $\vec{r}_i$, i.e.

$$\begin{aligned} V(\vec{r}) &= \sum_{i=1}^N \phi(\vec{r}_i - \vec{r}) = \sum_i \frac{1}{\Omega} \sum_{\vec{k}} \phi_{\vec{k}} e^{i\vec{k}(\vec{r}_i - \vec{r})} = \\ &= \frac{1}{\Omega} \sum_{\vec{k}} \phi_{\vec{k}} \rho_{\vec{k}} e^{-i\vec{k}\vec{r}} \end{aligned} \quad (2.4)$$

onde $\phi_{\vec{k}}$ é a transformada de Fourier do potencial, que no caso tridimensional é $\phi_{\vec{k}} = \frac{4\pi e^2}{k^2}$, e a linha da somatória aqui e onde mais surgir adiante, indica a exclusão do termo de $\vec{k}=0$. O conjunto de vetores de onda $\vec{k}$ satisfazem as condições periódicas de contorno na forma usual. $\rho_{\vec{k}}$ é a transformada de Fourier da densidade numérica de partículas

$$\begin{aligned} \rho(\vec{r}) &= \sum_i \delta(\vec{r} - \vec{r}_i) = \sum_i \left[\frac{1}{\Omega} \sum_{\vec{k}} e^{i(\vec{r} - \vec{r}_i) \cdot \vec{k}} \right] = \\ &= \frac{1}{\Omega} \sum_{\vec{k}} \left[\sum_i e^{-i\vec{r}_i \cdot \vec{k}} \right] e^{i\vec{k}\vec{r}} = \frac{1}{\Omega} \sum_{\vec{k}} \rho_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\vec{r}} \end{aligned} \quad (2.5)$$

ou seja

$$\rho_{\vec{k}} = \sum_i e^{-i\vec{k}\vec{r}_i} \quad (2.6)$$

Admitindo que antes e depois do espalhamento a partícula de prova e o sistema estejam fracamente acoplados, podemos utilizar a aproximação de Bohr para calcular os elementos de matriz

da eq. (2.3). Nessa aproximação as autofunções dos estados inicial e final da partícula espalhada são simplesmente estados de onda plana correspondentes aos momentos $\vec{k}'$ e $\vec{k}' - \vec{k}$.

O elemento de matriz na eq. (2.3) pode então ser escrito como

$$\begin{aligned} \langle n, \vec{k}'' | V | 0, \vec{k}' \rangle &= \langle n | \frac{1}{\Omega} \int d^3r e^{-i(\vec{k}' - \vec{k}) \cdot \vec{r}} \frac{1}{\Omega} \sum_{\vec{q}} \phi_{\vec{q}} \rho_{\vec{q}}^+ e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}} e^{i\vec{k}' \cdot \vec{r}} | 0 \rangle = \\ &= \frac{1}{\Omega^2} \sum_{\vec{q}} \phi_{\vec{q}} \left(\rho_{\vec{q}}^+ \right)_{no} \int d^3r e^{i(\vec{k}' - \vec{q}) \cdot \vec{r}} = \frac{(2\pi)^3}{\Omega^2} \sum_{\vec{q}} \phi_{\vec{q}} \left(\rho_{\vec{q}}^+ \right)_{no} \delta(\vec{k}' - \vec{q}) = \\ &= \frac{1}{\Omega} \int d^3q \phi_{\vec{q}} \left(\rho_{\vec{q}}^+ \right)_{no} \delta(\vec{k}' - \vec{q}) = \frac{1}{\Omega} \phi_{\vec{k}'} \left(\rho_{\vec{k}'}^+ \right)_{no} \end{aligned} \quad (2.7)$$

Substituindo a eq. (2.7) na eq. (2.3) obtemos

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\omega} = \left| \phi_{\vec{k}'} \right|^2 \left(\frac{k''}{k'} \right) \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2} \right)^2 \sum_n \left| \left(\rho_{\vec{k}'}^+ \right)_{no} \right|^2 \delta(\omega - \omega_{no}) \quad (2.8)$$

ou

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\omega} = \frac{\left| \phi_{\vec{k}'} \right|^2}{\hbar} \left(\frac{k''}{k'} \right) \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2} \right)^2 \bar{S}(\vec{k}, \omega) \quad (2.9)$$

onde definimos o fator de estrutura dinâmico $\bar{S}(\vec{k}, \omega)$ como

$$\bar{S}(\vec{k}, \omega) = \frac{1}{\hbar} \sum_n \left| \left(\rho_{\vec{k}}^+ \right)_{no} \right|^2 \delta(\omega - \omega_{no}) \quad (2.10)$$

Embora essa função seja bem definida em $\vec{k}=0$, na eq. (2.9) sô nos interessam seus valores para $\vec{k} \neq 0$, pois a transferência nula de momento sô ocorre quando as partículas atravessam a amostra sem interagirem com ela, i.e., sem efetuarem nenhuma colisão. Mais adiante redefiniremos o fator de estrutura de forma a

que seja idêntico ao da eq. (2.10) para $\vec{k} \neq 0$ e zero para $\vec{k} = 0$.

Vemos que uma vez conhecido o fator de estrutura dinâmico podemos chegar à seção de choque diferencial parcial. Ele engloba todas as propriedades do sistema de muitos corpos relevantes para o espalhamento da partícula de prova e fornece informação completa sobre as correlações no espaço e no tempo entre diferentes partículas. $\bar{S}(\vec{k}, \omega)$ é real e positivo e é nulo para $\omega < 0$, uma vez que à temperatura zero todas as frequências de excitação ω_{no} são sempre positivas.

Nos casos em que não se distinguem as energias das partículas espalhadas, como, por exemplo, nos experimentos de raios-X, devemos integrar em ω para obter a seção de choque diferencial

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left| \phi_{\vec{k}} \right|^2 \left(\frac{k''}{k'} \right) \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2} \right)^2 N \bar{S}(\vec{k}) \quad (2.11)$$

onde

$$\bar{S}(\vec{k}) = \frac{\hbar}{N} \int_0^{\infty} \bar{S}(\vec{k}, \omega) d\omega \quad (2.12)$$

é o fator de estrutura estático do sistema.

Substituindo a eq. (2.10) na eq. (2.12) vemos que o fator de estrutura pode ser escrito como

$$\bar{S}(\vec{k}) = \frac{1}{N} \langle 0 | \rho_{\vec{k}}^+ \rho_{\vec{k}} | 0 \rangle \quad (2.13)$$

Apesar de termos obtido um resultado formalmente simples para o fator de estrutura, avançamos ainda pouco no sentido de obtermos informações concretas sobre o sistema de muitos corpos. Ocorre que dada a complexidade do sistema é impossível o cálculo exato da eq. (2.13) e a única saída que se apresenta para o

problema é a de se propor alguma forma de cálculo aproximado. A aproximação da resposta linear, que apresentaremos na próxima seção, além de ser, talvez, a forma mais natural de se atacar o problema, serve também de base para aproximações mais refinadas.

2.2 - Aproximação da resposta linear e função resposta densidade-densidade

A idéia da aproximação da resposta linear consiste em que se a perturbação a que foi submetido o sistema for muito fraca, por exemplo, o espalhamento de uma única partícula pelo sistema, então a sua resposta a essa perturbação, tal como uma flutuação da densidade, pode ser descrita através de uma dependência linear dessa flutuação com o potencial de perturbação. Devemos então buscar um resultado da forma

$$\delta \langle \rho(\vec{k}, \omega) \rangle = \chi(\vec{k}, \omega) \phi(\vec{k}, \omega) \quad (2.14)$$

onde a função $\chi(\vec{k}, \omega)$ reflete as propriedades do sistema não perturbado, uma vez que pode ser obtida da divisão da resposta $\delta \langle \rho(\vec{k}, \omega) \rangle$ pelo potencial $\phi(\vec{k}, \omega)$ que a provocou, o que leva a uma grandeza independente desse potencial externo.

Essa grandeza

$$\chi(\vec{k}, \omega) = \frac{\delta \langle \rho(\vec{k}, \omega) \rangle}{\phi(\vec{k}, \omega)} \quad (2.15)$$

recebe o nome de função resposta densidade-densidade ou susceptibilidade generalizada.

Para calculá-la devemos inicialmente buscar o valor esperado das flutuações da densidade no instante t

$$\delta \langle \rho(\vec{k}, t) \rangle = \langle \psi(t) | \rho_{\vec{k}} | \psi(t) \rangle \quad (2.16)$$

com aproximação até termos de primeira ordem da hamiltoniana de perturbação.

Passemos então a esses cálculos partindo da definição da hamiltoniana de perturbação:

$$\begin{aligned} H_e &= \sum_i \phi(\vec{r}_i, t) = \sum_i \frac{1}{\Omega} \sum_{\vec{k}} \left[\frac{d\omega}{2\pi} \phi(\vec{k}, \omega) e^{i\vec{k}\vec{r}_i - i\omega t} \right] = \\ &= \frac{1}{\Omega} \sum_{\vec{k}} \left[\frac{d\omega}{2\pi} \rho_{\vec{k}}^+ \phi(\vec{k}, \omega) e^{-i\omega t} \right] \end{aligned} \quad (2.17)$$

O termo de $\vec{k}=0$ é equivalente à aplicação de um campo constante sobre todo o sistema e é excluído pois não oferece nenhuma contribuição para a resposta do sistema. Se $\phi(\vec{k}, \omega)$ é suficientemente fraco, cada componente de Fourier atua separadamente e podemos analisar somente uma delas somada à sua complexa conjugada para garantir que H_e seja real. É conveniente, ainda, introduzirmos condições de contorno adiabáticas que pressupõem que o potencial é zero para $t=-\infty$ e se liga lentamente, vindo a atuar por completo a partir do instante $t=0$. Isso pode ser obtido multiplicando-se H_e pelo fator $e^{\eta t}$, onde η é infinitamente pequeno. Temos então para a hamiltoniana de perturbação

$$H_e = \rho_{\vec{k}}^+ \phi(\vec{k}, \omega) e^{-i\omega t} e^{\eta t} + \text{c.c.} \quad (2.18)$$

A hamiltoniana do sistema não perturbado é dada por

$$H_o = T + H_{p-p} + H_{p-f} + H_{f-f} \quad (2.19)$$

onde T é o termo de energia cinética,

$$H_{p-p} = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \phi(\vec{r}_i - \vec{r}_j) = \frac{1}{2\Omega} \sum_{\vec{k}} \phi_{\vec{k}} (\rho_{\vec{k}}^+ \rho_{\vec{k}} - N) \quad (2.20)$$

representa a interação entre partículas, enquanto que H_{p-f} e H_{f-f} fornecem as interações partícula-fundo neutralizador e fundo-fundo respectivamente. Os dois últimos termos, ambos relacionados com o fundo homogêneo neutralizador, se anulam identicamente com o termo $\vec{k}=0$ da hamiltoniana de interação partícula-partícula⁽²⁸⁾, de modo que a hamiltoniana da eq. (2.19) se escreve como

$$H_0 = \sum_i \frac{p_i^2}{2m} + \frac{1}{2\Omega} \sum_{\vec{k}} \phi_{\vec{k}} (\rho_{\vec{k}}^+ \rho_{\vec{k}} - N) \quad (2.21)$$

O sistema deve satisfazer a equação de Schrödinger dependente do tempo

$$i\hbar \frac{\partial |\psi(t)\rangle}{\partial t} = [H_0 + H_e] |\psi(t)\rangle \quad (2.22)$$

onde

$$H_0 |n\rangle = E_n |n\rangle \quad (2.23)$$

A função de onda pode ser decomposta em termos das funções de onda estacionárias

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n a_n(t) e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}} |n\rangle \quad (2.24)$$

com os coeficientes $a_n(t)$ satisfazendo a condição de contorno

$$a_n(t = -\infty) = \delta_{n0} \quad (2.25)$$

Substituindo a Eq. (2.24) na Eq. (2.22) e levando em consideração a Eq. (2.23) obtemos:

$$\frac{\partial a_n(t)}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} \sum_{n'} a_{n'}(t) \langle n | H_e | n' \rangle e^{i\omega_{nn'}t} \quad (2.26)$$

onde

$$\omega_{nn'} = \frac{E_n - E_{n'}}{\hbar} \quad (2.27)$$

Integrando a eq. (2.26) no tempo desde $-\infty$ até t obtemos

$$a_n(t) - \delta_{n0} = \frac{1}{i\hbar} \sum_{n'} \int_{-\infty}^t a_{n'}(t') \langle n | H_e | n' \rangle e^{i\omega_{nn'}t'} dt' \quad (2.28)$$

Uma vez que estamos interessados somente em termos lineares em H_e , podemos resolver a eq. (2.28) iterativamente e obter

$$a_n(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t \langle n | H_e | 0 \rangle e^{i\omega_{n0}t'} dt' \quad (2.29)$$

Substituindo a eq. (2.18) na eq. (2.29) e resolvendo as integrais, obtemos a solução para os coeficientes $a_n(t)$ com aproximação até a primeira ordem em $\phi(\vec{k}, \omega)$

$$a_n(t) = \frac{1}{\hbar\Omega} \left[\frac{\begin{pmatrix} \rho^+ \\ \vec{k} \end{pmatrix}_{n0} \phi(\vec{k}, \omega) e^{(-i\omega + \eta + i\omega_{n0})t}}{\omega - \omega_{n0} + i\eta} - \frac{\begin{pmatrix} \rho \\ \vec{k} \end{pmatrix}_{n0} \phi^+(\vec{k}, \omega) e^{(i\omega + \eta + i\omega_{n0})t}}{\omega + \omega_{n0} + i\eta} \right] \quad (n \neq 0) \quad (2.30)$$

A eq. (2.16) pode ser escrita com a ajuda da eq. (2.24)

na forma

$$\delta \langle \rho(\vec{k}, t) \rangle = \sum_{nn'} \langle n | e^{\frac{iE_n t}{\hbar}} a_n^\dagger(t) \rho_{\vec{k}}^+ a_{n'}(t) e^{-\frac{iE_{n'} t}{\hbar}} | n' \rangle \quad (2.31)$$

Tomando somente os termos lineares em $\phi(\vec{k}, t)$ obtemos

$$\delta \langle \rho(\vec{k}, t) \rangle = \sum_n' \left(\rho_{\vec{k}} \right)_{no} a_n^\dagger(t) e^{i\omega_{no} t} + \sum_n' \left(\rho_{\vec{k}} \right)_{on} a_n(t) e^{-i\omega_{no} t} \quad (2.32)$$

onde a linha nas somatórias indica a exclusão do termo $n=0$, pois num sistema com invariança translacional $\langle 0 | \rho_{\vec{k}} | 0 \rangle$ é nulo.

Substituindo a eq. (2.30) na eq. (2.32) e levando em conta que os termos que contêm simultaneamente $\left(\rho_{\vec{k}} \right)_{no}$ e $\left(\rho_{\vec{k}}^+ \right)_{no} \equiv \left(\rho_{-\vec{k}} \right)_{no}$ se anulam, uma vez que o momento não pode ser ao mesmo tempo $+\vec{k}$ e $-\vec{k}$, obtemos

$$\delta \langle \rho(\vec{k}, t) \rangle = \frac{1}{\hbar \Omega} \phi(\vec{k}, \omega) e^{-i\omega t + \eta t} \sum_n' \left\{ \frac{\left| \left(\rho_{\vec{k}}^+ \right)_{no} \right|^2}{\omega - \omega_{no} + i\eta} - \frac{\left| \left(\rho_{\vec{k}} \right)_{no} \right|^2}{\omega + \omega_{no} + i\eta} \right\} \quad (2.33)$$

Supondo ainda que o sistema é invariante por uma reflexão temporal temos que

$$\left| \left(\rho_{\vec{k}} \right)_{no} \right|^2 = \left| \left(\rho_{\vec{k}}^+ \right)_{on} \right|^2 = \left| \left(\rho_{\vec{k}}^+ \right)_{no} \right|^2 \quad (2.34)$$

e tomando $\delta \langle \rho(\vec{k}, t) \rangle$ em termos da sua transformada de Fourier temporal

$$\delta \langle \rho(\vec{k}, t) \rangle = \delta \langle \rho(\vec{k}, \omega) \rangle e^{-i\omega t} \quad (2.35)$$

chegamos à seguinte expressão para a função resposta densidade-den

sidade

$$\chi(\vec{k}, \omega) = \frac{\delta \langle \rho(\vec{k}, \omega) \rangle}{\phi(\vec{k}, \omega)} = \frac{1}{\hbar \Omega} \sum_n' \left| \left(\begin{smallmatrix} \rho^+ \\ \vec{k} \end{smallmatrix} \right)_{no} \right|^2 \left\{ \frac{1}{\omega - \omega_{no} + i\eta} - \frac{1}{\omega + \omega_{no} + i\eta} \right\} \quad (2.36)$$

Como $\eta \rightarrow 0$ podemos utilizar a relação de Dirac

$$\lim_{\eta \rightarrow 0} \frac{1}{x - a + i\eta} = P \left(\frac{1}{x - a} \right) - i\pi \delta(x - a) \quad (2.37)$$

e escrever

$$\text{Re } \chi(\vec{k}, \omega) = \frac{1}{\hbar \Omega} P \sum_n' \left| \left(\begin{smallmatrix} \rho^+ \\ \vec{k} \end{smallmatrix} \right)_{no} \right|^2 \frac{2\omega_{no}}{\omega^2 - \omega_{no}^2} \quad (2.38)$$

e

$$\text{Im } \chi(\vec{k}, \omega) = \frac{-\pi}{\hbar \Omega} \sum_n' \left| \left(\begin{smallmatrix} \rho^+ \\ \vec{k} \end{smallmatrix} \right)_{no} \right|^2 \left[\delta(\omega - \omega_{no}) - \delta(\omega + \omega_{no}) \right] \quad (2.39)$$

Tanto a função resposta densidade-densidade quanto o fator de estrutura refletem as propriedades do sistema não perturbado e é, portanto, de se esperar que haja uma relação entre essas duas funções. Essa relação se obtém facilmente da eq. (2.39) e da eq. (2.10) resultando

$$\text{Im } \chi(\vec{k}, \Omega) = \frac{-\pi}{\Omega} \left[\bar{S}(\vec{k}, \omega) - \bar{S}(\vec{k}, -\omega) \right] \quad (2.40)$$

enquanto que a eq. (2.36) pode ser expressa na forma

$$\chi(\vec{k}, \omega) = \frac{e^{\eta t}}{\Omega} \int_{-\infty}^{+\infty} \bar{S}(\vec{k}, \omega') \left\{ \frac{1}{\omega - \omega' + i\eta} - \frac{1}{\omega + \omega' + i\eta} \right\} d\omega' \quad (2.41)$$

O fator de estrutura estático definido na eq. (2.12) pode agora ser escrito como

$$\bar{S}(\vec{k}) = \frac{-\hbar}{\pi\rho} \int_0^\infty \text{Im } \chi(\vec{k}, \omega) d\omega \quad (2.42)$$

para valores de $\vec{k} \neq 0$.

Vemos então que o problema de se encontrar o fator de estrutura que nos leva ao cálculo da seção de choque diferencial estará resolvido se encontrarmos a função resposta densidade-densidade. Para chegarmos a ela trataremos nosso sistema pelo método do campo auto-consistente (SCFA - self-consistent-field approximation) desenvolvido por Singwi et al⁽¹⁰⁾, que exporemos em linhas gerais na próxima seção.

2.3 - Método do Campo Autoconsistente

Como já dissemos anteriormente um sistema de muitos corpos pode ser estudado através da sua resposta a uma perturbação fraca. Nessa aproximação linear a função resposta densidade-densidade é obtida como

$$\chi(\vec{k}, \omega) = \frac{\delta \langle \rho(\vec{k}, \omega) \rangle}{\phi(\vec{k}, \omega)} \quad (2.43)$$

Para um estudo correto do sistema devemos desenvolver um método que descreva a resposta das partículas a uma perturbação que varia no tempo. Vamos assim partir da equação que nos fornece a evolução temporal das flutuações da densidade

$$i \hbar \dot{\rho}_{\vec{k}} = [\rho_{\vec{k}}, \hat{H}] \quad (2.44)$$

onde

$$\hat{H} = \sum_{j=1}^N \frac{\hat{p}_j^2}{2m} + \frac{1}{2\Omega} \sum_{\vec{k}} \phi_{\vec{k}} \left(\rho_{\vec{k}}^+ \rho_{\vec{k}} - N \right) \quad (2.45)$$

com $\hat{p}_j = -i\hbar \vec{\nabla}_j$ e $\rho_{\vec{k}}$ dado pela eq. (2.6).

A segunda parte de $\hat{H}$ comuta com $\rho_{\vec{k}}$ de modo que o comutador se reduz à parte da energia cinética e a eq. (2.44) pode ser escrita como

$$i \hbar \dot{\rho}_{\vec{k}} = \sum_i \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \frac{\hbar \vec{k} \cdot \vec{p}_i}{m} \right) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}_i} \quad (2.46)$$

Para analisarmos o caráter oscilatório do sistema, bem como, para chegarmos a uma equação que envolva o potencial de interação, é conveniente calcularmos a segunda derivada

$$i \hbar \ddot{\rho}_{\vec{k}} = [\dot{\rho}_{\vec{k}}, \hat{H}] \quad (2.47)$$

que resulta em

$$\ddot{\rho}_{\vec{k}} = - \sum_i \left(\frac{\hbar k^2}{2m} + \frac{\vec{k} \cdot \vec{p}_i}{m} \right)^2 e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}_i} - \frac{1}{\Omega} \sum_{\vec{q}} \phi_{\vec{q}} \frac{\vec{k} \cdot \vec{q}}{m} \rho_{\vec{k}-\vec{q}} \rho_{\vec{q}} \quad (2.48)$$

Separando no segundo termo à direita a parcela em que $\vec{q} = \vec{k}$ podemos escrever

$$\ddot{\rho}_{\vec{k}} = - \sum_i \left(\frac{\hbar k^2}{2m} + \frac{\vec{k} \cdot \vec{p}_i}{m} \right)^2 e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}_i} - \frac{\phi(\vec{k}) k^2 \rho}{m} \rho_{\vec{k}} -$$

$$- \frac{1}{\Omega} \sum_{\vec{q} \neq \vec{k}}' \phi(\vec{q}) \frac{\vec{k} \cdot \vec{q}}{m} \rho_{\vec{k}-\vec{q}} \rho_{\vec{q}} \quad (2.49)$$

onde passamos a adotar a notação $\phi(\vec{k})$ para $\phi_{\vec{k}}$ e $\rho = \frac{N}{\Omega}$ representa a densidade numérica média de partículas.

Uma primeira aproximação que se pode fazer na eq. (2.49) é desprezar-se o seu último termo em comparação com o que o antecede. Essa aproximação recebe o nome de aproximação das fases aleatórias (RPA - random-phase approximation), pois o termo abandonado na eq. (2.48) por força da eq. (2.6) consiste na soma de um número imenso de exponenciais com fases que variam aleatoriamente, de modo que grande parte dessas parcelas tendem a se anular, enquanto que o termo anterior é da ordem de N . Essa aproximação tem demonstrado bons resultados no limite de altas densidades, mas torna-se extremamente ruim à medida que se passa para a região de densidades intermediárias.

A equação nessa aproximação toma então a forma

$$\ddot{\rho}_{\vec{k}} + \omega_p^2 \rho_{\vec{k}} = - \sum_i \left(\frac{\hbar k^2}{2m} + \frac{\vec{k} \cdot \vec{p}_i}{m} \right)^2 e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}_i} \quad (2.50)$$

onde

$$\omega_p = \sqrt{\frac{\phi(\vec{k}) k^2 \rho}{m}} \quad (2.51)$$

é a frequência de plasma do sistema.

A teoria do campo auto-consistente desenvolvida por Singwi et al.⁽¹⁰⁾ se propõe a levar em conta o termo que foi abandonado em RPA e que pode ser escrito como

$$- \frac{1}{\Omega m} \sum_{\vec{q} \neq \vec{k}}' \phi(\vec{q}) \vec{q} \cdot \vec{k} \sum_i e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}_i} \sum_j e^{i(\vec{k}-\vec{q}) \cdot (\vec{r}_i - \vec{r}_j)} \quad (2.52)$$

Se a soma em j for substituída por sua média estática ,
i.e.,

$$\left\langle \sum_j \exp \left[i (\vec{k} - \vec{q}) (\vec{r}_i - \vec{r}_j) \right] \right\rangle = \frac{1}{N} \left\langle \sum_{ij} \exp \left[i (\vec{k} - \vec{q}) (\vec{r}_i - \vec{r}_j) \right] \right\rangle = \bar{S}(\vec{k} - \vec{q}) \quad (2.53)$$

podemos reescrever a eq. (2.52) como

$$\begin{aligned} \frac{-\rho \vec{k}}{\Omega m} \sum_{\vec{q}}' \phi(\vec{q}) \vec{q} \cdot \vec{k} \left[\bar{S}(\vec{k} - \vec{q}) - N \delta_{\vec{k} - \vec{q}, 0} \right] = \\ = \frac{-\rho \vec{k}}{\Omega m} \sum_{\vec{q}}' \phi(\vec{q}) \vec{q} \cdot \vec{k} S(\vec{k} - \vec{q}) \end{aligned} \quad (2.54)$$

onde o termo $N \delta_{\vec{k} - \vec{q}, 0}$ foi introduzido para eliminar a ressalva de $\vec{q} \neq \vec{k}$ que havia na somatória. Definimos aqui um novo fator de estrutura estático que se relaciona com aquele definido anteriormente pela eq. (2.13) como

$$S(\vec{k}) = \bar{S}(\vec{k}) - N \delta_{\vec{k}, 0} \quad (2.55)$$

A adoção de $S(\vec{k})$, que é zero para $\vec{k}=0$ e coincide com $\bar{S}(\vec{k})$ para valores não nulos de $\vec{k}$, implica na prática na exclusão de todas as partículas que passando pelo sistema não sofreram nenhuma colisão e não contribuíram portanto para a resposta do sistema. Com essa nova definição a eq. (2.42) passa a ser válida inclusive para $\vec{k}=0$.

A eq. (2.49) pode então ser escrita como

$$\ddot{\rho}_{\vec{k}} = - \sum_i \left(\frac{\hbar k^2}{2m} + \frac{\vec{k} \cdot \vec{p}_i}{m} \right) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}_i} - \psi(\vec{k}) \frac{k^2 \rho}{m} \rho_{\vec{k}} \quad (2.56)$$

onde

$$\psi(\vec{k}) = \phi(\vec{k}) + \frac{1}{\rho} \left[\frac{\vec{q} \cdot \vec{k}}{k^2} \phi(\vec{q}) \left[s(\vec{k}-\vec{q}) - 1 \right] \frac{d\vec{q}}{(2\pi)^3} \right] \quad (2.57)$$

A parcela -1 dentro dos colchetes quando integrada dá zero e é introduzida por conveniências numéricas.

A eq. (2.56) é formalmente igual à obtida no caso de RPA e pode ser tratada igualmente, apenas substituindo em toda parte $\phi(\vec{k})$ por $\psi(\vec{k})$.

No formalismo de RPA, a partir da equação de movimento para as flutuações da densidade $\rho_{\vec{k}}$ na presença de um campo externo, calcula-se o valor esperado da transformada de Fourier da variação da densidade numérica de partículas $\delta\langle\rho(\vec{k},\omega)\rangle$, que dividida pela transformada de Fourier do campo externo $\phi(\vec{k},\omega)$ nos fornece a função resposta densidade-densidade na forma ⁽²⁹⁾

$$\chi(\vec{k},\omega) = \frac{\chi_0(\vec{k},\omega)}{1 - \phi(\vec{k}) \chi_0(\vec{k},\omega)} \quad (2.58)$$

onde $\chi_0(\vec{k},\omega)$ é a função resposta densidade-densidade na aproximação de Hartree-Fock, ou seja, do sistema sem interação.

Na aproximação do campo auto-consistente a função resposta densidade-densidade se escreve portanto, de forma análoga

$$\chi(\vec{k},\omega) = \frac{\chi_0(\vec{k},\omega)}{1 - \psi(\vec{k}) \chi_0(\vec{k},\omega)} \quad (2.59)$$

Usualmente o potencial efetivo $\psi(\vec{k})$ é escrito na forma

$$\psi(\vec{k}) = \phi(\vec{k}) \left[1 - G(\vec{k}) \right] \quad (2.60)$$

onde

$$G(\vec{k}) = \frac{-1}{\rho} \int \frac{\vec{q} \cdot \vec{k}}{k^2} \frac{\phi(\vec{q})}{\phi(\vec{k})} \left[s(\vec{k}-\vec{q}) - 1 \right] d\vec{q} \quad (2.61)$$

Vemos da eq. (2.60) que o RPA é formalmente obtido do SCFA fazendo a correção de campo local $G(\vec{k}) = 0$.

Essas equações juntamente com a eq. (2.42) formam um sistema de equações auto-consistentes que deve ser resolvido pelos métodos normais de iteração.

O método auto-consistente já foi amplamente aplicado a diferentes sistemas de gás de elétrons apresentando excelentes resultados na região de densidades intermediárias, onde falha o RPA. Mostraremos em nosso trabalho que também para sistemas de bosons essa aproximação se apresenta como um excelente aprimoramento dos resultados de RPA.

CAPÍTULO III

APLICAÇÃO DA APROXIMAÇÃO DO CAMPO AUTOCONSISTENTE A UM GÁS
DE BOSE CARREGADO TRIDIMENSIONAL À $T=0$

Passamos agora a considerar um sistema tridimensional de N partículas quânticas de massa m e carregadas com carga e , que interagem através de um potencial Coulombiano obedecendo à estatística de Bose e estão confinadas a um volume Ω , movendo-se num fundo estático uniforme neutralizador⁽³⁰⁾. Tal sistema pode ser caracterizado por um único parâmetro adimensional $r_s = r_0/a_0$, onde $r_0 = (3/4\pi\rho)^{1/3}$ é a distância média entre as partículas, $\rho = N/\Omega$ é a densidade numérica de partículas e $a_0 = \hbar^2/me^2$ é o raio de Bohr pertinente a essas partículas.

Seguindo os passos desenvolvidos no capítulo anterior, escreveremos um sistema de equações transcendentes que nos fornecerá o fator de estrutura estático, que engloba todas as propriedades do sistema não perturbado. Como ponto de partida calcularemos a função resposta densidade-densidade $\chi_0^{\rightarrow}(K, \omega)$ para um sistema de partículas livres.

3.1 - Suscetibilidade de um sistema de partículas livres

Para um sistema de bosons à temperatura zero no estado fundamental todas as partículas se encontram no mesmo estado de energia nula. Como estamos trabalhando numa aproximação de primeira ordem, supomos que a partícula de prova realizará uma única colisão com uma das partículas do sistema, a qual passará a ter um momento $\hbar\vec{K}$, enquanto todas as demais permanecerão com momento zero. Assim sendo, todos os possíveis estados finais do sistema terão energia

$\frac{\hbar^2 k^2}{2m}$, que corresponde à energia de partícula livre do único boson que foi excitado. Os elementos de matriz $(\rho_{\vec{k}}^+)_{n0}$ que figuram na Eq. (2.36) sã serão diferentes de zero para os estados em que $\hbar\omega_{n0} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ e serão nulos para todos os demais. Podemos então escrever a Eq. (2.36) para um sistema de bosons sem interação como

$$\chi_0(\vec{k}, \omega) = \frac{1}{\Omega} \frac{2\varepsilon(\vec{k})}{\hbar^2(\omega+i\eta)^2 - [\varepsilon(\vec{k})]^2} \sum_n |(\rho_{\vec{k}}^+)_{n0}|^2, \quad (3.1)$$

onde $\varepsilon(\vec{k}) = \hbar^2 k^2 / 2m$.

Como a soma na Eq. (3.1) é feita sobre todos os possíveis estados do sistema, inclusive o estado fundamental, pois $(\rho_{\vec{k}}^+)_{00} = 0$ por invariância translacional, podemos utilizar a completude do conjunto das funções $|n\rangle$ para afirmar que

$$\frac{1}{\Omega} \sum_n |(\rho_{\vec{k}}^+)_{n0}|^2 = \frac{1}{\Omega} \sum_n \langle 0 | \rho_{\vec{k}}^+ | n \rangle \langle n | \rho_{\vec{k}}^+ | 0 \rangle = \frac{1}{\Omega} \langle 0 | \rho_{\vec{k}}^+ \rho_{\vec{k}}^+ | 0 \rangle = \rho \quad (3.2)$$

e obtermos então a função resposta densidade-densidade de um sistema de bosons sem interação como

$$\chi_0(\vec{k}, \omega) = \frac{2\rho\varepsilon(\vec{k})}{\hbar^2(\omega+i\eta)^2 - [\varepsilon(\vec{k})]^2} \quad (3.3)$$

3.2 - Cálculo do Fator de Estrutura Estático

Uma vez conhecida a função resposta densidade-densidade de um sistema de bosons sem interação podemos substituir a Eq. (3.3) na Eq. (2.59) para obtermos uma expressão para a função resposta densidade-densidade de um sistema com interação

$$\chi(\vec{k}, \omega) = \frac{2\rho\varepsilon(\vec{k})}{\hbar^2\omega^2 - \varepsilon(\vec{k})^2 - 2\rho\psi(\vec{k})\varepsilon(\vec{k}) + i\eta} \quad (3.4)$$

Substituindo agora a Eq. (3.4) na Eq. (2.42) e utilizando a relação de Dirac da Eq. (2.37) obtemos, após efetuarmos a integração o fator de estrutura estático como

$$S(\vec{k}) = \left[1 + \frac{2\rho\psi(\vec{k})}{\epsilon(\vec{k})} \right]^{-1/2} \quad (3.5)$$

Finalmente, substituindo na Eq. (3.5) a Eq. (2.60) e, ainda, $\rho = 3/4\pi r_0^3$ e $\epsilon(\vec{k}) = \hbar^2 k^2 / 2m$ chegamos à expressão

$$S(k) = \left[1 + \frac{12r_0}{k^4} S \left[1 - G(k) \right] \right]^{-1/2} \quad (3.6)$$

onde $G(k)$ se escreve da Eq. (2.61) como

$$G(k) = \frac{-1}{3\pi} \int_0^\infty dk k^2 \left[1 + \frac{q^2 - k^2}{2qk} \ln \left| \frac{q+k}{q-k} \right| \right] (S(k) - 1) \quad (3.7)$$

A Eq. (3.6) e a Eq. (3.7) formam um sistema, cuja solução numérica auto-consistente obtivemos no computador através de um método iterativo. Fazendo inicialmente $G(k)$ igual a zero na Eq. (3.6), o que corresponde ao resultado de RPA, substituímos a função $S(k)$ resultante na Eq. (3.7) para obtermos um novo $G(k)$ que por sua vez foi substituído na Eq. (3.6) e assim por diante. O limite superior da integral foi escolhido de forma a que $S(k)$ fosse igual à unidade ou muito próximo dela, de forma a garantir que para valores superiores de k o integrando fosse nulo ou praticamente nulo. O fator de estrutura foi dessa forma calculado para um amplo conjunto de valores de r_s . Para todos esses valores o limite superior da integral escolhido foi 10.0. No limite de densidades altas, isto é, para pequenos r_s , a convergência no processo iterativo é facilmente obtida após poucas iterações. No entanto, à medida que aumentamos o valor de r_s , pas-

sando para a região das densidades intermediárias, a convergência vai se tornando cada vez mais difícil, até que para valores de $r_s \gtrsim 25$ os resultados iterativos entram num processo aproximadamente cíclico não chegando a qualquer convergência mesmo para um número muito grande de iterações. No intervalo das densidades intermediárias, onde a convergência já é obtida com dificuldade, conseguimos uma redução sensível no número de iterações necessárias utilizando a seguinte expressão para a entrada da n -ésima iteração

$$S^{(n)}(k) = S^{(n-1)}(k) + \left[S^{(n-2)}(k) - S^{(n-1)}(k) \right] / N \quad (3.8)$$

onde $N > 1$ e depende da densidade do sistema, sendo tanto maior quanto mais baixa for a densidade do sistema, permanecendo, porém, inferior a 2. A precisão exigida para a função $G(k)$ foi da ordem de 0,01% e verificamos que a precisão para o fator de estrutura $S(k)$ acabou sendo muito superior.

Os resultados auto-consistentes obtidos para o fator de estrutura $S(k)$ como função do vetor de onda k são mostrados na Fig. 1. Ao contrário do que acontece com sistemas clássicos, em que o fator de estrutura ultrapassa a unidade exibindo um pico bem pronunciado, no gás de bósons carregados, assim como no de elétrons, o potencial de interação é muito suave e os efeitos quânticos não favorecem um comportamento de localização bem definida das partículas. Para facilitar a comparação dos nossos resultados com os obtidos em RPA traçamos também na Fig. 1 os gráficos correspondentes a essa aproximação. Na Fig. 2 apresentamos a diferença entre o fator de estrutura auto-consistente e o de RPA em função dos vetores de onda k para diferentes valores do parâmetro r_s . Na Fig. 3 a função de correção de campo-local $G(\vec{k})$ é apresentada para dois valores de r_s .

Ao encontrarmos o fator de estrutura atingimos o objetivo inicial por nós colocado, uma vez que substituindo $S(k)$ na Eq. (2.11) obtemos a seção de choque diferencial. Entretanto, não se resume a isso a importância do resultado de nossos cálculos, pois conhecendo as funções $S(k)$ e $G(k)$ podemos aplicá-las para investigar várias propriedades importantes do sistema tais como as correlações entre as partículas, a energia do estado fundamental, a pressão do gás de Bose carregado, a resposta do sistema a uma impureza fixa carregada e o espectro de excitações elementares.

3.3 - Função de correlação dos pares

Quando observamos o comportamento de uma única partícula num gás podemos afirmar que todas as posições do volume são para ela igualmente prováveis. Já as posições de uma segunda partícula a partir do fato da primeira estar em local conhecido não podem ter a mesma probabilidade por força da interação que existe entre elas. A probabilidade de se encontrar uma partícula qualquer do sistema num volume elementar $d\vec{r}_1$ é dada com aproximação até a primeira ordem em $d\vec{r}_1$, isto é, admitindo-se que nesse volume elementar não pode ser encontrada mais que uma partícula, por $N \frac{d\vec{r}_1}{\Omega} = \rho d\vec{r}_1$. Podemos levar em conta a correlação entre as partículas escrevendo a probabilidade de se encontrar uma partícula no volume $d\vec{r}_2$, com a condição de que já existe uma no volume $d\vec{r}_1$ como $\rho g(\vec{r}_2 - \vec{r}_1) d\vec{r}_2$. A função $g(\vec{r}_2 - \vec{r}_1)$ depende exclusivamente da distância relativa entre as partículas devido à isotropia do sistema e tende a 1 quando $r = |\vec{r}_2 - \vec{r}_1| \rightarrow \infty$, caracterizando a independência dos dois eventos no caso de uma separação muito grande entre as partículas. Damos a ela o nome de função de correlação dos pares. A probabilidade de que ocorram os dois eventos ao mes

Figura 1 - Fator de estrutura auto-consistente de um sistema tridimensional de bosons carregados em função de kr_0 para vários valores de r_s . Os resultados de RPA são apresentados para comparação.

Figura 2 - Diferença entre o fator de estrutura auto-consistente e o de RPA: $\Delta S(\vec{k}) = S(\vec{k}) - S_{\text{RPA}}(\vec{k})$ em função de kr_0 para vários valores de r_s .

Figura 3 - Correção de campo local de um sistema tridimensional de bosons carregados em função de kr_0 para $r_s=1$ e 20. As linhas pontilhadas mostram o comportamento quadrático, $G(k) = \gamma k^2$, junto à origem. Os valores de γ estão na tabela III.

mo tempo, ou seja, de termos uma partícula no volume $d\vec{r}_1$ e outra no volume $d\vec{r}_2$ será dada pelo produto das duas probabilidades e pode ser escrita como

$$\rho d\vec{r}_1 \cdot \rho g(\vec{r}) d\vec{r}_2 = \langle 0 | \rho(\vec{r}_1) d\vec{r}_1 \rho(\vec{r}_2) d\vec{r}_2 | 0 \rangle - \rho \delta(\vec{r}) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \quad (3.9)$$

O segundo termo do lado direito é para anular o termo de auto-correlação que é a soma dos N termos em que os índices nas somatórias das duas densidades coincidem (vide Eq. (2.5)) e não deve obviamente figurar na expressão da probabilidade. Da Eq. (3.9) podemos escrever a função de correlação dos pares como

$$g(\vec{r}) = \frac{1}{\rho^2} \langle 0 | \rho(\vec{r}_1) \rho(\vec{r}_2) | 0 \rangle - \frac{1}{\rho} \delta(\vec{r}) \quad (3.10)$$

Substituindo na Eq. (3.10) as densidades $\rho(\vec{r}_1)$ e $\rho(\vec{r}_2)$ de acordo com a Eq. (2.5), multiplicando-a por $d\vec{r}_1$, integrando por todo o volume e levando em consideração as identidades.

$$\delta(\vec{r}) = \frac{1}{\Omega} \sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k}\vec{r}} \quad (3.11)$$

e

$$\delta_{\vec{k}, -\vec{k}'} = \frac{1}{\Omega} \int e^{i(\vec{k} + \vec{k}')\vec{r}} d\vec{r} \quad (3.12)$$

obtemos,

$$g(\vec{r}) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \left[\frac{1}{N} \langle 0 | \rho_{\vec{k}}^+ \rho_{\vec{k}} | 0 \rangle - 1 \right] e^{-i\vec{k}\vec{r}} \quad (3.13)$$

Finalmente, com o auxílio das equações (2.13) e (2.55) encontramos a função de correlação dos pares basicamente como sendo a transformada inversa de Fourier do fator de estrutura

$$g(r) = 1 + \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} [S(\vec{k}) - 1] e^{-i\vec{k}\vec{r}} \quad (3.14)$$

Conhecida a função de correlação dos pares podemos então afirmar que estando uma determinada partícula num ponto conhecido, por exemplo na origem, a probabilidade de se encontrar uma outra partícula dentro de um volume dV em torno de um ponto a uma distância r da origem é dada por $\rho g(r) dV$.

A função de correlação dos pares para nosso sistema de bosons carregados foi obtida a partir da Eq. (3.14), que após a substituição da somatória por uma integral tripla e a efetuação da integração angular toma a forma

$$g(r) = 1 + \frac{2}{3\pi r} \int_0^\infty dq \, q \, \sin(qr) [S(q) - 1] \quad (3.15)$$

onde r se expressa em unidades de r_0 e q em unidades de r_0^{-1} . Os valores de $S(q)$ são os obtidos da resolução auto-consistente do sistema formado pela Eq. (3.6) e pela Eq. (3.7). Os resultados que obtivemos estão apresentados na Fig. 4 para diferentes valores de r_s . Os resultados de RPA estão também mostrados para comparação. A exemplo do gás de elétrons, para densidades baixas a função de correlação dos pares torna-se negativa para valores muito pequenos de r . Se compararmos o comportamento de $g(0)$ do nosso sistema de bosons carregados com o do gás de elétrons veremos que a sua variação em função de r_s é muito mais ampla. Para altas densidades a função de correlação do sistema de bosons carregados se encontra acima da sua análoga para o gás de elétrons, partindo de 0,55 para $r=0$, enquanto que esta parte de 0,24⁽¹⁰⁾. Não obstante, com o aumento de r_s o $g(0)$ do sistema de bosons carregados tende a zero mais rápido que o do gás de elétrons atingindo o zero por volta de $r_s = 3$ e para r_s maiores torna-se negati-

Figura 4 - Função de correlação dos pares $g(r)$ do gás de Bose carregado tridimensional em função de r/r_0 para diferentes valores de r_s . Os resultados de RPA são apresentados para comparação.

vo. Para o gás de elétrons a passagem pelo zero ocorre por volta de $r_s=4$. Daí para frente o valor da função de correlação na origem para o sistema de bosons é sempre mais negativo que o da função de correlação do gás de elétrons. Vemos, portanto, que os resultados do SCFA para o gás de elétrons são ligeiramente melhores que para o gás de bosons carregados. Isso se deve ao fato de que não havendo no gás de bosons o princípio da exclusão de Pauli as interações de curto alcance são mais importantes e a aproximação torna-se menos abrangente que no caso do gás de elétrons. Mesmo assim, nossos resultados são ainda muito bons, pois quando os comparamos com RPA vemos que nessa aproximação a função de correlação não só se torna negativa, mas cresce rapidamente em valores absolutos para pontos próximos da origem à medida que se diminui a densidade. Como no SCFA a função de correlação dos pares, apesar de negativa para valores próximos da origem, permanece, mesmo assim, muito perto de zero, é razoável esperarmos que grandezas como, por exemplo, a energia do estado fundamental e a pressão, que dependem de uma integração de $r^2 g(r)$ para todos os valores de r possam ainda ser obtidas de forma adequada. O cálculo da energia do estado fundamental e da pressão são o tema de nossa próxima seção.

3.4 - Energia do estado fundamental e pressão do gás

A energia do estado fundamental é o valor esperado no estado fundamental da hamiltoniana total do sistema não perturbado

$$E_0 = \langle \psi_0 | H_0 | \psi_0 \rangle \quad (3.16)$$

com H_0 dada pela Eq. (2.21).

A energia E_0 pode ser facilmente calculada através do teorema da energia fundamental. Nesse teorema a grandeza física e^2 é formalmente substituída por um parâmetro λ que vamos admitir variável. Ele estaria relacionado com a intensidade da interação entre as partículas. Em H_0 somente a parte da energia potencial depende de e^2 . Vamos dar ao seu valor esperado no estado fundamental o nome de energia de interação

$$E_{\text{int}} = \frac{1}{2\Omega} \langle \psi_0 | \sum_{\vec{k}} \phi(\vec{k}) \left(\rho_{\vec{k}}^+ \rho_{\vec{k}} - N \right) | \psi_0 \rangle = \frac{N}{2\Omega} \sum_{\vec{k}} \phi(\vec{k}) [S(\vec{k}) - 1] \quad (3.17)$$

Derivando a energia do estado fundamental

$$E_0 = \langle \psi_0 | \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m} | \psi_0 \rangle + E_{\text{int}} \quad (3.18)$$

com relação a λ obtemos

$$\begin{aligned} \frac{\partial E_0}{\partial \lambda} &= \langle \psi_0 | \frac{\partial H_0}{\partial \lambda} | \psi_0 \rangle + \langle \psi_0 | H_0 | \frac{\partial \psi_0}{\partial \lambda} \rangle + \langle \frac{\partial \psi_0}{\partial \lambda} | H_0 | \psi_0 \rangle = \\ &= \frac{E_{\text{int}}}{\lambda} + E_0 \frac{\partial}{\partial \lambda} \langle \psi_0 | \psi_0 \rangle \end{aligned} \quad (3.19)$$

Como a função de onda do estado fundamental é normalizada, o último termo na Eq. (3.19) é nulo e temos, portanto,

$$\frac{\partial E_0}{\partial \lambda} = \frac{E_{\text{int}}}{\lambda} \quad (3.20)$$

Se agora integramos ambos os lados dessa equação em λ desde $\lambda=0$ até $\lambda=e^2$ teremos

$$E_0(e^2) - E_0(0) = \int_0^{e^2} \frac{d\lambda}{\lambda} E_{\text{int}}(\lambda) \quad (3.21)$$

$E_0(e^2)$ é a energia do estado fundamental que buscamos, enquanto que $E_0(0)$ é a energia do estado fundamental na ausência de interação, que no caso de um sistema de bosons é simplesmente zero.

Substituindo na Eq. (3.17) a somatória por uma integral e ainda escrevendo explicitamente o argumento λ obtemos a energia de interação na forma

$$E_{\text{int}}(\lambda) = \frac{N}{4\pi^2} \int_0^\infty \phi(k, \lambda) [S(k, \lambda) - 1] k^2 dk \quad (3.22)$$

ou, alternativamente, escrevendo $\phi(\vec{k}, \lambda)$ formalmente como a transformada de Fourier de $\phi(r, \lambda)$, obtemos a Eq. (3.22) como

$$E_{\text{int}}(\lambda) = 2\pi\rho N \int_0^\infty \phi(r, \lambda) [g(r, \lambda) - 1] r^2 dr \quad (3.23)$$

Como vemos, a energia do estado fundamental é obtida através de uma integração envolvendo a função de correlação dos pares.

Em nosso problema calculamos a energia do estado fundamental efetivando numericamente a integral da Eq. (3.21) utilizando $E_{\text{int}}(\lambda)$ na forma da Eq. (3.22). Escrevendo o vetor de onda k em unidades de $(m\omega_p/\hbar)^{1/2}$ e λ em unidades de e^2 chegamos à seguinte expressão para a energia do estado fundamental por partícula

$$E_0 = \frac{2}{\pi} 3^{1/4} r_s^{-3/4} \int_0^1 d\lambda \int_0^\infty dk [S(k, \lambda) - 1] \quad (\text{ryd}) \quad (3.24)$$

Nesse caso não pudemos utilizar diretamente a solução auto-consistente do sistema da Eq. (3.6) e da Eq. (3.7), pois ela corresponde apenas aos valores de $S(k)$ para $\lambda=1$. Para que a integração em λ pudesse ser efetuada tivemos que inserir no pro-

grama um sub-programa semelhante ao programa que nos forneceu as soluções auto-consistentes de $S(k)$ e $G(k)$, porém com as equações (3.6) e (3.7) escritas na forma:

$$S(k, \lambda) = \left[1 + \frac{4\lambda}{k^4} [1 - G(k, \lambda)] \right]^{-1/2} \quad (3.25)$$

e

$$G(k, \lambda) = \frac{-3^{-1/4} r_s^{3/4}}{\pi} \int_0^\infty dk k^2 \left[1 + \frac{q^2 - k^2}{2qk} \ln \left| \frac{q+k}{q-k} \right| \right] (S(k, \lambda) - 1) \quad (3.26)$$

onde k e q estão em unidades de $(m\omega_p/\hbar)^{1/2}$ e λ em unidades de e^2 .

Esse programa é naturalmente muito mais moroso que o primeiro programa auto-consistente, uma vez que a convergência deve ser atingida para cada ponto diferente de λ .

No formalismo de RPA, que se obtém formalmente fazendo $G(k)=0$ na expressão de $S(k, \lambda)$, as integrais na Eq. (3.24) podem ser efetuadas diretamente resultando

$$E_O^{RPA} = \frac{2}{\pi} 3^{1/4} r_s^{-3/4} \int_0^\infty dq q^2 \left[\sqrt{\frac{q^4}{4} + 1} - \frac{q^2}{2} - \frac{1}{q^2} \right] = 0,8031 r_s^{-3/4}, \quad (3.27)$$

que no limite de altas densidades coincide com o resultado de Bogoliubov^(4,31).

Os dados que obtivemos numericamente através da Eq. (3.24) para a energia do estado fundamental do gás de Bose carregado como uma função de r_s são apresentados resumidamente na Tabela I que traz também as energias obtidas por Hansen e Mazighi⁽⁹⁾, Lee e Ree⁽⁷⁾, Monnier⁽⁸⁾ e os resultados de RPA que são dados pela Eq. (3.27) e são válidos no limite de altas densidades. Como podemos observar, nossos resultados para as energias do estado fundamental concordam muito bem com os obtidos através do método de Monte Carlo por Hansen e Mazighi ficando ligeira

mente acima dos seus valores e diferindo em menos de 3% no pior dos casos, isto é, para $r_s = 20$. Os resultados de RPA encontram-se para todos valores de r_s acima dos calculados por SCFA, porém enquanto para $r_s = 1$ a diferença é de apenas 4%, para $r_s = 20$ ela é superior a 30%. É curioso entretanto notar a grande concordância existente entre os resultados de RPA e os resultados de Monte-Carlo obtidos por Monnier.

TABELA I

$r_s \backslash -E_0$	Nosso trabalho	Hansen e Mazighi	Lee e Ree	Monnier	RPA Eq. (3.27)
1	0,7712	0,7810	0,7767	0,8074	0,8031
2	0,4472	0,4547	0,4516	0,4788	0,4775
3	0,3231	0,3288	0,3270	0,3645	0,3523
5	0,2129	0,2170	0,2159	0,2435	0,2401
10	0,1188	0,1216	0,1209	0,1338	0,1428
20	0,06486	0,06667	0,06626	0,0725	0,08491

A partir da energia do estado fundamental pudemos calcular a pressão do gás de Bose. Derivando a energia em relação ao volume obtemos:

$$\frac{P}{\rho} = - \left(\frac{\partial E}{\partial V} \right)_N = - \frac{r_s}{3} \frac{dE_0}{dr_s} \quad (3.28)$$

No caso de RPA a derivada pode ser efetuada diretamente na Eq. (3.27) e temos como resultado

$$\frac{P^{RPA}}{\rho} = \frac{2}{\pi} \cdot 3^{1/4} \cdot \frac{1}{4} r_s^{-3/4} \int_0^\infty dq q^2 \left[\sqrt{\frac{q^4}{4} + 1} - \frac{q^2}{2} - \frac{1}{q^2} \right] = 0.20077 r_s^{-3/4} \quad (3.29)$$

Já para obtermos os resultados de SCFA derivamos numericamente a energia do estado fundamental. Os resultados obtidos são apresentados na Tabela II em comparação com os resultados de Monte-Carlo de Hansen e Mazighi⁽⁹⁾ e os de RPA calculados pela Eq. (3.29). Novamente a concordância com os resultados de Monte-Carlo é muito boa, diferindo em geral em menos de 1%.

TABELA II

$r_s \backslash -P/\rho$	Nosso trabalho	Hansen e Mazighi	RPA Eq. (3.29)
1	0.20053	0.20105	0.20077
2	0.11860	0.11939	0.11938
5	0.05867	0.05911	0.06004
10	0.03390	0.03448	0.03570
20	0.01933	0.01954	0.02122

3.5 - Resposta a uma impureza carregada fixa na origem

Uma outra aplicação importante que podemos fazer dos resultados do cálculo auto-consistente do fator de estrutura é o cálculo da densidade de blindagem que envolve uma impureza carregada com carga Ze situada na origem. Essa densidade induzida nada mais é que a resposta do sistema à presença dessa impureza interagindo com as partículas através do potencial Coulombiano. Na aproximação da resposta linear podemos, de acordo com a Eq. (2.14) escrever

$$\delta\rho(\vec{k},\omega) = -\chi(\vec{k},\omega) e\phi_{\text{ext}}(\vec{k},\omega) \quad (3.30)$$

onde

$$\phi_{\text{ext}}(\vec{k}, \omega) = \frac{8\pi^2 Z e}{k^2} \delta(\omega) \quad (3.31)$$

e $\chi(\vec{k}, \omega)$ é a função resposta densidade-densidade, que pode ser escrita como um funcional de $G(\vec{k})$ a partir da Eq. (3.4) e levando-se em conta a Eq. (2.60).

A densidade da blindagem é a transformada inversa de Fourier da Eq. (3.30). Efetuando inicialmente a integração em ω chegamos a um resultado estritamente real, pois a expressão já não apresenta polos e a contante η ligada às condições adiabáticas de contorno pode ser levada a zero sem que surja a parte imaginária oriunda da relação de Dirac. Após a integração da parte angular a densidade de blindagem toma a forma

$$\delta\rho(r) = \frac{-Z}{2\pi^2 r} \int dq \frac{q \sin(qr)}{G(q) - \frac{1}{4} \left(\frac{q}{\lambda} \right)^4 - 1} \quad (3.32)$$

onde $\lambda^4 = \frac{4\pi\rho}{a_0}$.

Para podermos utilizar na Eq. (3.32) os arquivos numéricos de $G(k)$, obtidos da solução auto-consistente, a variável de integração deve ser escrita em unidades de r_0^{-1} , pois foi a unidade utilizada para o vetor de onda no sistema auto-consistente.

Em unidades adimensionais, a densidade de blindagem em termos da própria densidade média de partículas é dada por

$$\frac{\delta\rho(r)}{\rho} = \frac{2}{3\pi r} \int dq \frac{q \sin(qr)}{1 + \frac{q^4}{12r_s^4} - G(q)} \quad (3.33)$$

onde comprimento é medido em unidades de r_0 .

A carga total induzida é dada por

$$Q_T = -e \int d\vec{r} \delta\rho(\vec{r}) = Ze \int d\vec{q} \frac{\delta(\vec{q})}{G(q) - \frac{1}{4}\left(\frac{q}{\lambda}\right)^4 - 1} = -Ze \quad (3.34)$$

o que mostra que a impureza carregada fica totalmente blindada a grandes distâncias.

Para pontos muito afastados da impureza a integral da Eq. (3.32) é dominada pelo comportamento do integrando para pequenos valores do vetor de onda q . Nesse caso a correção de campo local $G(q)$ pode ser escrita na aproximação de grandes comprimentos de onda como

$$G(q) = \gamma q^2 \quad (3.35)$$

onde

$$\gamma = - \frac{2}{9\pi} \int_0^\infty [S(q) - 1] dq \quad (3.36)$$

Nesse limite assintótico a integral da Eq. (3.32) pode ser efetuada por resíduos e a densidade induzida toma a forma

$$\delta\rho(r) = \frac{Z}{2\pi r} \frac{\lambda^2 e^{-\lambda(1-\gamma\lambda^2)^{1/2}r}}{(1-\gamma^2\lambda^4)^{1/2}} \operatorname{sen}\left[\lambda(1+\gamma\lambda^2)^{1/2}r\right] \quad (3.37)$$

Na Tabela III fornecemos os valores de γ para diferentes valores de r_s em unidades de r_o^2 e na Fig. 3 as curvas pontilhadas mostram o comportamento quadrático de $G(k)$ junto à origem.

Já no limite de densidades muito altas podemos desprezar por completo a correção de campo local fazendo $G(\vec{q})=0$ na Eq. (3.32) e efetuar a integração, o que equivale a fazer $\gamma=0$ na Eq. (3.37). O resultado é a forma exponencial de RPA

$$\delta\rho(r) = \frac{Z}{2\pi r} e^{-\lambda r} \lambda^2 \operatorname{sen}(\lambda r) \quad .$$

(3.38)

TABELA III

r_s	$\gamma \quad (r_o^2)$	r_s	$\gamma \quad (r_o^2)$	r_s	$\gamma \quad (r_o^2)$
0,2	0,07310	1,0	0,10461	5,0	0,13874
0,4	0,08578	2,0	0,11968	10,0	0,15088
0,6	0,09387	3,0	0,12838	15,0	0,15669
0,8	0,09985	4,0	0,13433	20,0	0,16018

Os nossos resultados auto-consistentes e os de RPA para a densidade de blindagem de uma impureza fixa carregada são apresentados graficamente na Fig. 5 para $r_s = 5$ e $r_s = 20$. Como vimos, a incorporação da correção de campo local nos cálculos aumenta significativamente a densidade de blindagem nas proximidades da impureza, resultando daí que a blindagem total ocorre a uma distância inferior àquela prevista em RPA.

3.6. Espectro de excitações elementares.

A função resposta densidade-densidade traz em si ainda uma informação de grande importância - o espectro de excitações elementares.

A Eq. (2.36) pode ser escrita na forma

$$\chi(\vec{k},\omega) = \frac{1}{\Omega} \sum_n \left| \left(\rho_{\vec{k}}^+ \right)_{no} \right|^2 \frac{2\hbar\omega_{no}}{(\hbar\omega+i\eta)^2 - \hbar^2\omega_{no}^2} \quad ,$$

(3.39)

de onde vemos claramente que as energias de excitação do sistema

correspondem justamente aos polos da função resposta densidade-densidade. Tomando agora $\chi(\vec{k}, \omega)$ na forma da Eq. (3.4) chegamos à seguinte equação para as energias de excitação do gás de bosons carregados

$$\hbar^2 \omega^2 - \epsilon(\vec{k})^2 - 2\rho\psi(\vec{k})\epsilon(\vec{k}) + i\eta = 0 \quad (3.40)$$

Ao tomarmos o limite de $\eta \rightarrow 0$ obtemos o espectro de excitações elementares $E(\vec{k}) = \hbar\omega(\vec{k})$ como solução da Eq. (3.40)

$$E(\vec{k}) = \hbar\omega(\vec{k}) = \left[\epsilon(\vec{k})^2 + 2\rho\psi(\vec{k})\epsilon(\vec{k}) \right]^{1/2} \quad (3.41)$$

Se levarmos em consideração a Eq. (3.5) veremos que $E(k)$ se expressa de forma muito simples através do fator de estrutura e a Eq. (3.41) se escreve como

$$E(\vec{k}) = \hbar\omega(\vec{k}) = \frac{\epsilon(\vec{k})}{S(\vec{k})} \quad (3.42)$$

Essa relação é conhecida como a expressão de Bijl-Feynman^(32, 33).

Podemos notar também que a Eq. (3.41) recai na energia de excitação de Bogoliubov⁽⁴⁾ para um gás de Bose carregado em altas densidades quando desprezamos as correções de campo local, isto é, quando fazemos $\psi(\vec{k}) = \phi(\vec{k})$. Nossos cálculos, por levarem em consideração as correlações de curto-alcance entre os bosons carregados, representam um notável aprimoramento do método de RPA.

O espectro de excitações elementares pode ser escrito em unidades de $\hbar\omega_p$, onde $\omega_p = (4\pi\rho e^2/m)^{1/2}$ é a frequência de plasma. A fórmula resultante para fins de cálculos computacionais

Figura 5 - Densidade de blindagem $\delta\rho(r)/\rho$ do gás de Bose carregado tridimensional a uma impureza carregada fixa, em função de r/r_0 para $r_s=5$ e 20. Os resultados de RPA são também apresentados para comparação.

vem então a ser

$$\frac{E(\vec{k})}{\hbar\omega_p} = \frac{k^2}{(12r_s)^{1/2}S(k)} \quad (3.43)$$

O espectro de excitações elementares foi obtido para vários valores do parâmetro r_s . A solução da Eq. (3.40) mostra a existência de apenas um modo de excitações elementares, o plasmon, mesmo na ordem de aproximação mais baixa, isto é, em RPA. Esse resultado está em perfeito acordo com o trabalho de Lee⁽³⁴⁾, mas contrasta com os resultados de Carmi e Lock⁽³⁵⁾ que encontraram um segundo modo de excitação elementar diferente do plasmon.

Na Fig. 6 apresentamos as energias de excitação como funções de $\vec{k}$ para vários valores de r_s .

Como se pode notar, a diferença entre essas curvas e as correspondentes de RPA se torna mais pronunciada a medida que a densidade do gás de Bose decresce. Ao contrário do gás de elétrons, mesmo na região de altas densidades, as energias de excitação inicialmente decrescem com o aumento de $\vec{k}$, muito embora esse decréscimo seja mais nitidamente perceptível para valores mais elevados de r_s . Desse modo, é necessário menos energia para excitar um modo coletivo em que os bosons estejam de certa forma localizados que para excitar um modo coletivo de comprimento de onda infinito. Além disso, no caso do espectro de excitações elementares de um sistema de bosons carregados não faz sentido a analogia com o par de excitação elétron-buraco como no caso do gás de elétrons.

Na aproximação de longos comprimentos de onda em que a correção de campo local $G(\vec{k})$ é dada pela Eq. (3.35) obtém-se a seguinte expressão para a energia de excitação

$$E(\vec{k}) = \hbar\omega_p \left[1 - \frac{\gamma k^2}{2} + \frac{\hbar^2 k^4}{8m^2 \omega_p^2} \right] \quad (3.44)$$

É interessante notar que ao levarmos em consideração as correlações de curto alcance obtivemos uma correção aos resultados de RPA que faz com que $E(\vec{k})$ inicialmente decresça com o aumento de k . O espectro de excitações elementares atinge um mínimo e volta depois a crescer tendendo assintoticamente para o espectro de excitação de partícula livre.

Figura 6 - Energias de excitação do gás de Bose carregado tridimensional em função dos vetores de onda kr_0 em unidades de $\omega_p = (4\pi e^2/m)^{1/2}$ para diversos valores de r_s . As curvas correspondentes de RPA são apresentadas para comparação.

CAPÍTULO IV

SISTEMA BIDIMENSIONAL DE BÓSONS CARREGADOS
COM INTERAÇÃO LOGARÍTMICA

Em um sistema de partículas estritamente bidimensional não apenas o seu movimento, mas o próprio campo eletromagnético está confinado a somente duas dimensões. O potencial de interação coulombiana é então obtido através da equação de Poisson a duas dimensões

$$\Delta V = -2\pi \frac{e^2}{a_0} \delta(\vec{r}) \quad (4.1)$$

onde $\vec{r}$ é um vetor bidimensional.

A solução da Eq. (4.1) é dada por

$$V(r) = \frac{-e^2}{a_0} \ln \frac{r}{L} \quad (4.2)$$

onde L é um comprimento arbitrário e a_0 é o raio de Bohr, que, em princípio surge aqui também arbitrariamente e relacionado apenas com a escolha da escala de energia.

Escrevendo $V(r)$ na forma

$$V(r) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int v(\vec{k}) e^{i\vec{k}\vec{r}} d\vec{k} \quad (4.3)$$

e substituindo na Eq. (4.1) encontramos facilmente a transformada de Fourier do potencial na forma

$$v(\vec{k}) = \frac{2\pi e^2}{a_0 k^2} \quad , \quad (4.4)$$

ou seja, com a mesma dependência do vetor de onda que no caso

tridimensional.

Neste capítulo vamos estudar o gás de Bose bidimensional usando o mesmo método aplicado para o caso tridimensional. Assim, a formulação obtida no capítulo anterior será apenas adaptada ao sistema bidimensional. Vamos escrever inicialmente o sistema de equações que nos permite o cálculo auto-consistente do fator de estrutura. A seguir calcularemos a função de correlação dos pares, a resposta do sistema a uma impureza fixa e o espectro de excitações elementares.

4.1 - Fator de estrutura

Consideremos um sistema bidimensional de N bosons carregados confinados numa área A . Podemos aqui também definir uma distância média entre as partículas, relacionada com a densidade média de partículas $\rho = \frac{N}{A}$, como $r_0 = (\pi\rho)^{-1/2}$. A densidade do gás será dada nos nossos cálculos através do parâmetro adimensional $r_s = r_0/a_0$.

Levando em consideração as observações acima podemos escrever a Eq. (2.61) como

$$G(k) = \frac{-r_0^2}{4\pi} \int_0^\infty q \, dq [\bar{S}(q) - 1] \int_0^{2\pi} \frac{k^2 - kq \cos \theta}{k^2 + q^2 - 2kq \cos \theta} d\theta \quad (4.5)$$

A integral angular da Eq. (4.5) é facilmente efetuada por resíduos, dando como resultado

$$\int_0^{2\pi} \frac{k^2 - kq \cos \theta}{k^2 + q^2 - 2kq \cos \theta} d\theta = \pi \left[1 + \frac{k^2 - q^2}{|k^2 - q^2|} \right] = \pi \theta(k - q) \quad (4.6)$$

onde $\theta(x)$ é a função degrau,

$$\theta(x) = \begin{cases} 1 & x > 0 \\ 0 & x < 0 \end{cases} \quad (4.7)$$

O fator de estrutura é obtido da Eq. (3.5) que para o potencial logarítmico bidimensional se escreve como

$$S(k) = \left[1 + \frac{8r_s^2}{k^4} \left(1 - G(k) \right) \right]^{-1/2} \quad (4.8)$$

onde a correção de campo local $G(k)$ é dada por

$$G(k) = -\frac{1}{2} \int_0^\infty dq \cdot q \left[S(q) - 1 \right] \theta(k - q) \quad (4.9)$$

com k e q em unidades de r_0^{-1} .

As eqs. (4.8) e (4.9) formam o sistema de equações transcendentais, cuja solução numérica auto-consistente nos fornece o fator de estrutura. Dada a simplicidade da função degrau em comparação com toda a expressão do integrando da Eq. (3.7) do caso tridimensional o tempo gasto para cada iteração no presente caso é incomparavelmente menor que o outro e por isso foi praticamente desnecessária a aplicação de fatores de convergência.

O fator de estrutura foi calculado para vários valores de r_s sendo que o máximo valor para o qual ainda conseguimos a convergência da solução auto-consistente foi $r_s = 9$. Para valores de $r_s > 9$, a exemplo do que, no caso tridimensional, ocorreu para r_s superiores a 25, os resultados fornecidos pelo computador passam a se repetir periodicamente sem que haja convergência para uma única solução. Já dos resultados para o fator de estrutura vemos a nítida semelhança existente entre o potencial bidimensional logarítmico e o seu análogo tridimensional. A diferença mais

marcante fica por conta da densidade, uma vez que o fator de estrutura bidimensional para $r_s = 9$, por exemplo, se assemelha ao fator de estrutura tridimensional para $r_s = 25$. O limite superior da integral na Eq. (4.9) foi tomado igual a 15,0, valor para o qual $S(k)$ já é igual a 1,0 e o integrando se anula. A precisão dos cálculos foi da ordem de 10^{-6} para $G(k)$, o que assegura uma precisão ainda melhor para $S(k)$.

Os resultados obtidos para o fator de estrutura estão apresentados juntamente com os de RPA nos gráficos da Fig. 7. Na Fig. 8 apresentamos a função de correção de campo local para vários valores de r_s e frisamos através de um gráfico pontilhado o seu comportamento quadrático na origem.

4.2 - Função de correlação dos pares

A função de correlação dos pares definida no capítulo anterior, pode ser obtida da Eq. (3.14) tomando os vetores $\vec{k}$ e $\vec{r}$ bidimensionais e substituindo a somatória por uma integral. O resultado é

$$g(r) = 1 + \frac{1}{2} \int dk k J_0(kr) [S(k) - 1] \quad (4.10)$$

onde $J_0(x)$ é a função de Bessel de ordem zero. A coordenada r é medida em unidades de r_0 e o vetor de onda k , em unidades de r_0^{-1} que foi a unidade escolhida para a Eq. (4.8) e a Eq. (4.9), de onde obtivemos a solução auto-consistente de $S(k)$ que compõe o integrando da Eq. (4.10). No cálculo numérico, a função de Bessel foi substituída por aproximações polinomiais que garantem um erro inferior a $1,6 \times 10^{-8}$ (36). A função de correlação dos pares foi calculada para vários valores de r_s e os resultados obtidos são apresentados graficamente na Fig. 9. Na mesma figura apresen

Figura 7 - Fator de estrutura auto-consistente de um sistema bidimensional de bosons carregados com interação $\ln(r)$ em função de kr_0 para vários valores de r_s . Os resultados de RPA são apresentados para comparação.

Figura 8 - Correção de campo local de um sistema bidimensional de bosons carregados com interação $\ln(r)$ em função de kr_0 para $r_s=1,3$ e 9 . A linha pontilhada mostra o comportamento quadrático, $G(k) = \frac{k^2}{4}$, junto à origem, que é o mesmo para todas as curvas.

Figura 9 - Função de correlação dos pares $g(\vec{r})$ do gás de Bose carregado bidimensional com interação $\ln(r)$ em função de r/r_0 para diversos valores de r_s . Os resultados de RPA são apresentados para comparação.

tamos também para comparação os resultados correspondentes de RPA. Mais uma vez fica claro que a aproximação das fases aleatórias só é adequada para valores bem pequenos de r_s , isto é, no limite de densidades muito altas, pois basta diminuirmos um pouco a densidade para que a função de correlação dos pares apresente nessa aproximação valores negativos a pequenas distâncias. Já na aproximação do campo auto-consistente que é a adotada no trabalho presente $g(0)$ permanece positiva mesmo para valores elevados de r_s como, por exemplo, $r_s = 9$. Os resultados bidimensionais são semelhantes aos do sistema análogo tridimensional mas contrastam com os do gás de elétrons bidimensional com interação logarítmica onde $g(0)$ torna-se negativa já para valores de $r_s > 2^{(22)}$.

Na Fig. 10 apresentamos as funções de correlação do gás tridimensional e do bidimensional com potencial logarítmico calculadas para três valores diferentes de r_s . Comparando os gráficos vemos que em todas as densidades os efeitos de correlação são mais fortes no caso bidimensional que no caso tridimensional, embora o seu comportamento qualitativo seja o mesmo em ambos os sistemas.

4.3 - Blindagem de uma impureza carregada

Na aproximação da resposta linear a transformada de Fourier da densidade de blindagem em torno de uma impureza carregada fixa está relacionada com o seu potencial através da função resposta densidade-densidade como

$$\delta\rho(\vec{k},\omega) = -\chi(\vec{k},\omega) e \phi_{\text{ext}}(\vec{k},\omega) \quad (4.11)$$

onde

$$\phi_{\text{ext}}(\vec{k},\omega) = \frac{4\pi^2 e^2}{a_0 q^2} \delta(\omega) \quad (4.12)$$

Substituindo esse potencial na Eq. (4.11) e tomando a transformada inversa de Fourier obtemos a seguinte expressão para a densidade de blindagem a uma distância r da impureza carregada:

$$\delta\rho(\vec{r}) = -Ze \int dq \frac{q J_0(qr)}{\frac{q^4}{4r_s^2} + 2[1-G(q)]} \quad (4.13)$$

onde $J_0(x)$ é a função de Bessel de ordem zero e a distância r é medida em unidades de r_0 .

A carga total induzida é dada por

$$\begin{aligned} Q_T &= -e \int d\vec{r} \delta\rho(\vec{r}) = \\ &= -Ze \int d\vec{q} \frac{2\delta(\vec{q})}{\frac{q^4}{4r_s^2} + 2[1-G(q)]} = -Ze \end{aligned} \quad (4.14)$$

o que mostra que também no caso bidimensional a impureza carregada é totalmente blindada a grandes distâncias.

Mesmo no caso de uma aproximação mais simples como RPA não há solução analítica exata para a Eq. (4.13). Por isso a densidade de blindagem foi calculada numericamente como função da distância r à impureza para vários valores do parâmetro r_s . Na Fig. 11 apresentamos os resultados obtidos pelo método do campo auto-consistente juntamente com os correspondentes de RPA. Como se pode constatar a presença das correlações de curto alcance no sistema proporciona um aumento considerável na densidade de blindagem quando comparada com os resultados de RPA. Podemos observar também que com o aumento de r_s , ou seja, para densidades mais baixas, a densidade de blindagem torna-se maior a pequenas

Figura 10 - Gráficos comparativos das funções de correlação dos pares do sistema tridimensional de bosons carregados representadas por linhas pontilhadas com suas análogas do sistema bidimensional de bosons carregados com interação $\ln(r)$ traçadas em linha contínua. O sistema bidimensional mostra-se mais correlacionado que o tridimensional para todas as densidades.

Figura 11 - Densidade de blindagem $\delta\rho(r)/\rho$ do gás de Bose carregado bidimensional com interação $u(r)$ em torno de uma impureza carregada fixa, em função de r/r_0 para diferentes valores de r_s . Os resultados de RPA são também apresentados para comparação.

distâncias da impureza e cai rapidamente a zero para pontos mais distantes. De resto, o comportamento qualitativo da densidade de blindagem induzida é semelhante ao do seu análogo tridimensional.

4.4 - Espectro de excitações elementares

O espectro de excitações elementares é obtido dos polos da função resposta densidade-densidade como mostramos na seção 3.6 e pode ser calculado a partir da relação de Bijl-Feynman expressa na Eq. (3.42). O vetor de onda $\vec{k}$ deve ser medido em unidades de r_0^{-1} para ser compatível como os arquivos numéricos de $S(\vec{k})$.

No caso bidimensional que estudamos agora a frequência de plasma definida pela Eq. (2.51) tem a forma

$$\omega_p = \left(\frac{2\pi\rho e^4}{\hbar^2} \right)^{1/2} \quad (4.15)$$

e em unidades dessa frequência podemos, a partir da relação de Bijl-Feynman, chegar à seguinte forma adimensional para as energias do espectro de excitação

$$\frac{E(k)}{\hbar\omega_p} = \frac{k^2}{2\sqrt{2} r_s S(k)} \quad (4.16)$$

que foi a que utilizamos para nossos cálculos numéricos.

A relação de dispersão foi então calculada numericamente e os resultados obtidos estão apresentados nos gráficos da Fig. 12 em comparação com os de RPA. Como vemos, a altas densidades nossos resultados e os de RPA quase coincidem, o que mostra que nessa região de densidades os efeitos de correlação de curto alcance não são muito importantes e RPA se apresenta como uma boa aproximação. Entretanto, à medida que nos reportamos a re-

giões de densidades mais baixas surge uma nítida diferença entre as duas aproximações mostrando a importância de se considerar a correção de campo local.

No limite de grandes comprimentos de onda em que as oscilações são pouco amortecidas e se definem bem como quase partículas obtemos a seguinte expressão para as energias de excitação

$$E(\vec{k}) = \hbar \omega_p \left[1 - \frac{k^2}{4\pi\rho} + \frac{\hbar^2 k^4 a_0^2}{4m^2 \omega_p^2} \right] \quad (4.17)$$

Da mesma forma que no caso de um sistema tridimensional as correlações de curto alcance implicam numa correção a RPA que faz com que a energia inicialmente decresça com o aumento de k , atinja um mínimo e a seguir volte a crescer tendendo assintoticamente para o espectro de excitações elementares de partícula livre. Não obstante pode-se notar que essa diminuição de $E(k)$ devida aos efeitos de correlação é muito mais acentuada no sistema bidimensional que em seu análogo tridimensional.

Figura 12 - Espectros de excitações elementares do gás de Bose carregado bidimensional com interação $\ln(r)$ em função dos vetores de onda kr_0 em unidades de $\omega_p = (2\pi\rho e^4/\hbar^2)^{1/2}$ para diversos valores de r_s . As curvas correspondentes de RPA são apresentadas para comparação.

CAPÍTULO V

SISTEMA BIDIMENSIONAL DE BÔSÔNS CARREGADÔS
COM INTERAÇÃO COULOMBIANA TRIDIMENSIONAL

Nesse capítulo estudaremos o gás de Bose carregado com interação entre as partículas idêntica à adotada no capítulo III, isto é, coulombiana tridimensional, porém com o seu movimento restrito a duas dimensões. O sistema é formado por N bosons carregados confinados numa superfície de área A . A densidade de partículas é dada por $\rho = \frac{N}{A}$ e como nos capítulos anteriores estará relacionada com o parâmetro adimensional $r_s = r_o/a_o$, onde $r_o = (\pi\rho)^{-1/2}$ é a distância média entre as partículas e a_o é o raio de Bohr.

A interação entre dois bosons separados por uma distância r é dada por

$$V(r) = \frac{e^2}{r} \quad (5.1)$$

O vínculo que obriga as partículas a permanecerem num plano é levado em conta quando tomamos a transformada de Fourier do potencial dado pela Eq. (5.1) em duas dimensões e obtemos

$$\phi(k) = \frac{2\pi e^2}{k} \quad (5.2)$$

A seguir aplicaremos o método do campo auto-consistente a esse sistema e calcularemos o fator de estrutura, a função de correlação dos pares, a energia do estado fundamental, a resposta do sistema a uma impureza carregada localizada na origem e o espectro de excitações elementares.

5.1 - Fator de Estrutura

O fator de estrutura é obtido como a solução auto-consistente de duas equações transcendentais que contêm $S(\vec{k})$ e a função de correção de campo local $G(\vec{k})$. Uma delas é obtida reescrevendo a Eq. (2.61) para duas dimensões e substituindo o potencial de acordo com a Eq. (5.2) e resulta em

$$G(k) = \frac{-1}{4\pi} \int_0^{\infty} q dq \left[S(q) - 1 \right] \int_0^{2\pi} \frac{\left(1 - \frac{q}{k} \cos \theta \right) d\theta}{\sqrt{1 + \left(\frac{q}{k} \right)^2 - \frac{2q}{k} \cos \theta}} \quad (5.3)$$

onde k e q são medidos em unidades de r_0^{-1} .

A Eq. (5.3) pode também ser reescrita na forma

$$G(k) = \frac{-1}{\pi} \left\{ \int_0^k q dq E\left(\frac{q}{k}\right) \left[S(q) - 1 \right] + \int_k^{\infty} dq \left[\left(1 - \frac{q^2}{k^2} \right) K\left(\frac{k}{q}\right) + \frac{q^2}{k^2} E\left(\frac{k}{q}\right) \right] \left[S(q) - 1 \right] \right\} \quad (5.4)$$

onde $K(x)$ e $E(x)$ são as integrais elípticas de primeira e segunda espécie respectivamente.

A outra equação resulta da Eq. (3.5) que com as substituições correspondentes ao nosso problema atual se escreve como

$$S(k) = \left[1 + \frac{8r_s}{k^3} \left(1 - G(k) \right) \right]^{-1/2} \quad (5.5)$$

O sistema de equações é então formado pelas Eqs. (5.5) e (5.3) ou (5.4).

A forma da Eq. (5.4) oferece vantagens computacionais pois as funções $E(x)$ e $K(x)$ podem ser escritas sob a forma de ex

pansões polinomiais⁽³⁶⁾. Não obstante, apesar da alta precisão dessas aproximações a sua utilização no cálculo auto-consistente não apresentou bons resultados devido ao acúmulo de erros numéricos no decorrer das inúmeras iterações. Em face dessa dificuldade a alternativa foi optar pela Eq. (5.3), que por conter duas integrais aumentou sensivelmente o tempo de computador para efetuar cada iteração. Em vista disso volta a ter grande importância a utilização de dispositivos de aceleração de convergência e novamente utilizamos a fórmula da Eq. (3.8) para a entrada de cada nova iteração. Outro artifício utilizado foi o da extrapolação do $G(k)$ inicial para valores de r_s mais elevados em base das soluções auto-consistentes já obtidas. Com o aumento de r_s cresce consideravelmente o número de iterações necessárias para se atingir a convergência e a utilização de fatores de convergência, bem como a escolha de valores extrapolados para o início do cálculo tornam-se imprescindíveis, pois representam uma grande economia no tempo de CPU. As soluções auto-consistentes foram obtidas com uma precisão de 0,01% para a correção de campo local $G(k)$, o que garante uma precisão ainda maior para o fator de estrutura.

Como nos casos anteriores o método auto-consistente não é aplicável indefinidamente para quaisquer valores de r_s . À medida que o parâmetro r_s cresce o número de iterações necessárias para a convergência aumenta e a partir de um determinado valor já não se atinge mais uma solução convergente. No caso do potencial tridimensional para partículas vinculadas a um plano o valor máximo para o qual ainda conseguimos convergência foi $r_s = 7$. A região de aplicabilidade do método nesse caso é portanto bastante próxima da que obtivemos para o potencial logarítmico, de onde vemos que o que define essa região é a própria dimensionalidade adotada e não o potencial em si.

Os resultados que obtivemos para o fator de estrutu-

ra são apresentados na Fig. 13 juntamente com os de RPA. Na Fig. 14 apresentamos a função de correção de campo-local $G(k)$ para diferentes valores de r_s . Como podemos observar o comportamento de $G(k)$ no limite de grandes comprimentos de onda é linear. O comportamento de $G(\vec{k})$ para vetores de onda próximos da origem é dado por

$$G(k) = \gamma k \tag{5.6}$$

onde

$$\gamma = - \frac{1}{4} \int_0^\infty dq \left[S(q) - 1 \right] \tag{5.7}$$

Na Fig. 14 as retas pontilhadas mostram o comportamento linear de $G(k)$ para pequenos valores de k . Na Tabela IV apresentamos os valores de γ calculados para diferentes valores do parâmetro r_s em unidades de r_0 .

TABELA IV

r_s	$\gamma(r_0)$	r_s	$\gamma(r_0)$	r_s	$\gamma(r_0)$
0,2	0,23241	1,0	0,34674	5,0	0,44411
0,4	0,28011	2,0	0,39412	6,0	0,45188
0,6	0,30954	3,0	0,41839	7,0	0,45788
0,8	0,33057	4,0	0,43359	-	-

É interessante notar que tanto no gás tridimensional como também nos dois casos de gás bidimensional que estamos estudando, no limite de aplicabilidade do método auto-consistente, isto é, para os máximos r_s , para os quais ainda se obtém convergência, a função de correção do campo local $G(k)$ tende à unidade para $k \rightarrow \infty$, chegando mesmo a atingi-la. Observando a Eq. (2.60)

Figura 13 - Fator de estrutura auto-consistente de um sistema bidimensional de bosons carregados com interação $1/r$ em função de kr_0 para vários valores de r_s . Os resultados de RPA são apresentados para comparação.

Figura 14 - Correção de campo local de um sistema bidimensional de bosons carregados com interação $1/r$ em função de kr_0 para $r_s=1,3$ e 7 . As linhas pontilhadas mostram o comportamento linear, $G(k) = \gamma k$, junto à origem. Os valores de γ estão na tabela IV.

vemos que isso representa um corte na transformada de Fourier do potencial efetivo, o que leva $\psi(r)$ a ser substancialmente diferente de $\phi(r)$ para valores pequenos de r , uma vez que nessa região são os valores grandes de k que mais contribuem para a integral da transformada inversa de Fourier. Já para valores grandes de r o potencial efetivo tende ao potencial puro, não blindado, pois nesse caso a situação se inverte e são os valores pequenos de k que proporcionam as maiores contribuições na integração e, para qualquer r_s , a função $G(\vec{k})$ tende a zero para $k \rightarrow 0$.

5.2 - Correlações

O cálculo da função de correlação dos pares é feito, como nos casos anteriores, a partir da Eq. (3.14). Substituindo a somatória por uma integração no espaço bidimensional dos vetores de onda obtemos

$$g(r) = 1 + \frac{1}{2} \int_0^\infty k dk J_0(kr) [\bar{S}(k) - 1] \quad (5.8)$$

com k medido em unidades de r_0^{-1} e r em unidades de r_0 . Como a expressão de $g(r)$ não contém explicitamente o potencial, a Eq. (5.8) é idêntica à Eq. (4.10) que escrevemos para o potencial logarítmico estudado no capítulo anterior. A diferença entre os dois casos está contida no fator de estrutura. As funções de correlação resultantes para diferentes valores de r_s estão apresentadas na Fig. 15. Como podemos verificar o seu comportamento qualitativo é muito semelhante ao das funções de correlação que obtivemos para o caso tridimensional e para o bidimensional com potencial logarítmico. A exemplo do que ocorreu no gás tridimensional, a função de correlação dos pares torna-se negativa perto da origem para valores grandes de r_s . Essa é mais uma evidência do limite de

aplicabilidade do método auto-consistente. Ou seja, mesmo se conseguíssemos a convergência para valores mais elevados de r_s , os resultados já não seriam confiáveis.

Na Fig. 16 mostramos simultaneamente as funções de correlação dos pares do gás tridimensional e do bidimensional, ambos com interação $1/r$, para três valores diferentes de r_s . Verificamos da comparação dos gráficos que o sistema bidimensional é mais correlacionado que o tridimensional em todas as densidades. Comparando, entretanto, com a Fig. 10 vemos que com o aumento de r_s as diferenças entre as funções de correlação dos sistemas tridimensional e bidimensional são mais marcantes no potencial logarítmico que no potencial $1/r$.

Na Fig. 17 apresentamos as funções de correlação dos pares dos dois sistemas bidimensionais para três valores diferentes de r_s . Aqui nos deparamos com um fenômeno interessante. Para $r_s = 1$ o sistema bidimensional com interação $1/r$ é mais correlacionado que o bidimensional com interação logarítmica. Para $r_s = 3$ os dois sistemas são quase que igualmente correlacionados e, finalmente, para $r_s = 5$, a situação se inverte e o sistema com interação logarítmica se mostra mais correlacionado que o com interação $1/r$.

Outra observação que podemos fazer é que para $r_s = 5$ a função de correlação dos pares do sistema bidimensional com interação $1/r$ ainda permanece positiva na origem, enquanto que a do sistema tridimensional já se tornou negativa. Para valores de $r_s > 5$ a função de correlação do sistema bidimensional também se torna negativa junto à origem, mas os seus valores são mais próximos de zero que no caso tridimensional, o que reforça o argumento de que a energia do estado fundamental, por ser obtida através de uma integração de $rg(r)$ pode ser calculada e o resultado deve ser adequado.

Figura 15 - Função de correlação dos pares $g(\vec{r})$ do gás de Bose carregado bidimensional com interação $1/r$ em função de r/r_0 para diversos valores de r_s .

Figura 16 - Gráficos comparativos das funções de correlação dos pares do sistema tridimensional de bosons carregados representadas por linhas contínuas com suas análogas do sistema bidimensional de bosons carregados com interação $1/r$ traçadas em linha pontilhada. O sistema bidimensional mostra-se mais correlacionado que o tridimensional para todas as densidades.

Figura 17 - Gráficos comparativos das funções de correlação dos pares do sistema bidimensional de bosons carregados com interação $\ln(r)$ representadas por linhas contínuas com suas análogas do sistema bidimensional de bosons carregados com interação $1/r$ traçadas em linha pontilhada. Para $r_s=1$ o sistema bidimensional com interação $1/r$ é mais correlacionado que o bidimensional com interação $\ln(r)$. Para $r_s=3$ os dois sistemas são quase que igualmente correlacionados e, finalmente, para $r_s=5$, a situação se inverte e o sistema com interação logarítmica se mostra mais correlacionado que o com interação $1/r$.

5.3 - Energia do estado fundamental

O cálculo da energia do estado fundamental do sistema bidimensional de bosons carregados com interação coulombiana tri dimensional pode ser realizado através da aplicação do teorema da energia do estado fundamental expresso pela Eq. (3.21). A energia de interação, que é o integrando da Eq. (3.21), na situação presente tem a forma

$$E_{\text{int}}(\lambda) = \frac{N}{4\pi} \int_0^{\infty} \phi(k, \lambda) [S(k, \lambda) - 1] k dk \quad (5.9)$$

ou em termos da função de correlação dos pares

$$E_{\text{int}}(\lambda) = \pi \rho N \int_0^{\infty} \phi(r, \lambda) [g(r, \lambda) - 1] r dr \quad (5.10)$$

Substituindo a Eq. (5.2) na Eq. (5.9) e esta na Eq. (3.21) e expressando o vetor de onda em unidades de $(a_0 r_0^2)^{-1/3}$ e λ em unidades de e^2 obtemos a seguinte expressão para a energia do estado fundamental

$$E_0 = r_s^{-2/3} \int_0^1 d\lambda \int_0^{\infty} [S(k, \lambda) - 1] dk \quad (\text{Ryd}) \quad (5.11)$$

No programa para o cálculo da energia do estado fundamental o fator de estrutura que figura na Eq. (5.11) é calculado auto-consistentemente para cada valor diferente de λ necessário para a efetuação posterior da integral. O cálculo auto-consistente é feito em base de equações decorrentes das Eqs. (5.5) e (5.3) que se escrevem como

$$S(k, \lambda) = \left[1 + \frac{8\lambda}{k^3} \left(1 - G(k, \lambda) \right) \right]^{-1/2} \quad (5.12)$$

e

$$G(k, \lambda) = \frac{-r_s^{2/3}}{4\pi} \int_0^\infty q dq \left[S(k, \lambda) - 1 \right] \int_0^{2\pi} \frac{\left(1 - \frac{q}{k} \cos \theta \right) d\theta}{\sqrt{1 + \left(\frac{q}{k} \right)^2 - \frac{2q}{k} \cos \theta}} \quad (5.13)$$

O cálculo da energia do estado fundamental é extremamente demorado, gastando várias horas de CPU para a determinação da energia para cada valor diferente de r_s .

Como podemos ver da Eq. (5.12) a escolha da unidade $(a_0 r_0^2)^{-1/3}$ faz com que a dependência de r_s no fator de estrutura se restrinja à função $G(k, \lambda)$. Desta feita, a dependência explícita de $r_s^{-2/3}$ que figura na Eq. (5.11) corresponde ao comportamento da energia do estado fundamental em RPA, pois nessa aproximação $G(\vec{k}) \equiv 0$.

Para altas densidades a correção de campo local $G(\vec{k})$ torna-se muito pequena e pode realmente ser desprezada. Essa é a região de validade de RPA.

Nessa aproximação a integração em λ pode ser efetuada analiticamente resultando

$$E_O^{RPA} = \frac{r_s^{-2/3}}{4} \int_0^\infty \left[\sqrt{k^6 + 8k^3} - k^3 - 4 \right] dk = 1,2935 r_s^{-2/3} \quad (\text{Ryd}) \quad (5.14)$$

Na Tabela V apresentamos os valores obtidos em nossos cálculos para a energia do estado fundamental do gás de Bose bidimensional com interação coulombiana tridimensional para diferentes valores do parâmetro r_s . Em comunicação privada com o Prof. David M. Ceperley do Lawrence Berkeley Laboratory da Universidade da Califórnia obtivemos as energias para $r_s=2$ e $r_s=5$, calculadas por ele pelo método de Monte Carlo. Embora disponhamos apenas desses dois resultados, podemos por eles verificar que há uma boa concordância do método auto-consistente com os resul-

tados de Monte Carlo, sendo que esses últimos são cerca de 4% superiores aos nossos. Essa situação confirma os resultados que obtivemos para o gás tridimensional onde as energias calculadas por Hansen e Mazighi⁽⁹⁾ pelo método de Monte Carlo superavam as nossas em cerca de 3%. Já as energias calculadas em RPA divergem em muito dos nossos resultados sendo superiores a eles de 16% a 50% a medida que r_s varia de 1 a 7.

TABELA V

r_s	$-E_o$	Nosso trabalho	Ceperley	RPA Eq. (5.14)
1		1,11410	-	1,29350
2		0,65217	0,6808	0,81485
3		0,47089	-	0,62185
4		0,37162	-	0,51333
5		0,30803	0,31941	0,44237
6		0,26370	-	0,39174
7		0,23087	-	0,35348

Comparando os valores das energias do estado fundamental do gás bidimensional com os das energias do gás tridimensional da Tabela I vemos que no gás bidimensional as energias são cerca de 45% superiores. Esse é um resultado natural do fato do gás bidimensional ser mais correlacionado que o gás tridimensional, pois a energia do estado fundamental num gás de Bose nada mais é que a energia de correlação entre as partículas.

5.4 - Densidade de Blindagem

Voltamos a aplicar a aproximação da resposta linear para calcular a densidade de blindagem a uma impureza carregada fixa na origem escrevendo a sua transformada de Fourier como

$$\delta\rho(\vec{k},\omega) = -\chi(\vec{k},\omega) \text{ e } \phi_{\text{ext}}(\vec{k},\omega) \quad (5.15)$$

onde, para o gás de Bose bidimensional com interação coulombiana tridimensional,

$$\phi_{\text{ext}} = \frac{4\pi^2 Ze}{q} \delta(\omega) \quad (5.16)$$

Transformando a Eq. (5.15) para o espaço real obtemos a seguinte expressão para a densidade de blindagem

$$\frac{\delta\rho(\vec{r})}{\rho} = Z \int_0^\infty \frac{J_0(kr) k dk}{\frac{k^3}{4r_s} + 2[1-G(k)]} \quad (5.17)$$

A carga total induzida é dada por

$$\begin{aligned} Q_T &= \int \delta\rho(\vec{r}) dr = \\ &= -Ze \int d\vec{q} \frac{2\delta(\vec{q})}{\frac{q^3}{4r_s} + 2[1-G(\vec{q})]} = -Ze \end{aligned} \quad (5.18)$$

mostrando que também no caso presente a impureza carregada é totalmente blindada a grandes distâncias.

A integral da Eq. (5.17) foi efetuada numericamente e os resultados obtidos são apresentados juntamente com os de RPA na Fig. 18. Analisando as figuras 5, 11 e 18 verificamos existir uma relação entre a correlação entre as partículas do sistema e a sua capacidade de blindagem de uma impureza carregada. Ou seja, os sistemas mais correlacionados blindam por completo a impureza a distâncias menores. Assim, vemos refletida também nos gráficos de densidade de blindagem a inversão de papéis entre os dois sis

Figura 18 - Densidade de blindagem $\delta\rho(r)/\rho$ do gás de Bose carregado bidimensional com interação $1/r$ em torno de uma impureza carregada fixa, em função de r/r_0 para diferentes valores de r_s . Os resultados de RPA são também apresentados para comparação.

temas bidimensionais. Para $r_s = 1$, quando o sistema com interação $1/r$ é mais correlacionado, a sua densidade de blindagem junto à impureza é maior que a do sistema com potencial logarítmico. Já para $r_s = 5$ o sistema com interação $1/r$ é menos correlacionado que o sistema com potencial logarítmico e também a sua densidade de blindagem para pontos próximos da impureza é menor que a desse sistema.

5.5 - Espectro de excitações elementares

O fator de estrutura fornece-nos através da expressão de Bijl-Feynman o espectro de excitações elementares para o presente gás de Bose bidimensional com interação coulombiana tridimensional entre as partículas. O procedimento nos cálculos deve no entanto ser diferente dos dois casos anteriores, pois a frequência de plasma não depende mais apenas da densidade do gás, mas também do vetor de onda. A sua forma obtida através das Eqs. (2.51) e (5.2) é a seguinte

$$\omega_p = \sqrt{\frac{2\pi e^2 \rho k}{m}} \quad (5.19)$$

Assim, como ω_p tende a zero quando o vetor de onda vai a zero, não mais teremos agora o "gap" no limite de grandes comprimentos de onda que caracterizava os espectros de excitação dos dois casos vistos anteriormente. Em vista da frequência de plasma não ser mais constante, para não mascararmos a real dependência do espectro de excitações elementares do vetor de onda, expressaremos as energias de excitação em rydbergs.

Partindo da Eq. (3.42) podemos escrever as energias de excitação como

$$E(k) = \frac{k^2}{r_s^2 S(k)} \quad (\text{Ryd}) \quad (5.20)$$

onde o vetor de onda k está medido em unidades de r_0^{-1} .

Na Fig. 19 apresentamos os resultados de nossos cálculos auto-consistentes para o espectro de excitações. Para conseguirmos uma melhor disposição das curvas no gráfico as energias de excitação figuram multiplicadas por r_s^2 . Com isso, como vemos da Eq. (5.20), a dependência da densidade fica restrita ao fator de estrutura e todas as curvas tendem a uma única curva de partícula livre quando o vetor de onda k tende a infinito.

No limite de grandes comprimentos de onda a função de correção de campo local pode ser escrita na forma da Eq. (5.6) e as energias de excitação do plasmon podem ser calculadas pela expressão:

$$E(k) = \hbar \sqrt{\frac{2\pi e^2 \rho k}{m}} \left(1 - \frac{\gamma k}{2} + \frac{\hbar^2 a_0}{16\pi \rho} k^3 \right) \quad (5.21)$$

O primeiro termo dessa expansão, que exhibe uma dependência da energia do plasmon da raiz quadrada do vetor de onda, coincide com os resultados de diferentes aproximações aplicadas ao gás de elétrons bidimensional. Esse resultado surgiu pela primeira vez em sistemas bidimensionais com interação coulombiana $1/r$ nos trabalhos de Ritchie⁽³⁷⁾ e Ferrel⁽³⁸⁾ na década de cinquenta. Posteriormente na década de setenta vários outros trabalhos sobre o gás de elétrons bidimensional foram publicados tais como o de Fetter⁽³⁹⁾, que utilizou a aproximação hidrodinâmica ou Beck e Kumar⁽⁴⁰⁾ que calcularam a dispersão do plasmon levando em consideração os efeitos de correlação e a extensão espacial finita da camada de inversão na interface entre um semiconductor

Figura 19 - Espectros de excitações elementares do gás de Bose carregado bidimensional com interação $1/r$ em função dos vetores de onda kr_0 em rydebergs para diversos valores de r_s . Para melhor disposição das curvas as energias foram multiplicadas por r_s^2 .

e um isolante. Em todos esses casos as modificações surgiram sempre no segundo termo da expansão da energia, confirmando sempre o primeiro termo que, como vemos em nosso trabalho, figura também no espectro de excitação do gás de Bose bidimensional.

CAPÍTULO VI

TERMODINÂMICA DO GÁS DE BOSE CARREGADO
A BAIXAS TEMPERATURAS

Até o momento estudamos o gás de Bose carregado com diferentes dimensionalidades e interações, mas exclusivamente à temperatura zero. Nesse capítulo introduziremos uma aproximação que permitirá obtermos resultados para temperaturas finitas próximas do zero absoluto.

Para chegarmos a essa aproximação partiremos do mesmo enfoque que demos à questão do estudo de um sistema de muitos corpos a partir do capítulo II. Existem porém algumas diferenças fundamentais.

Em primeiro lugar, a uma temperatura finita o sistema já não se encontra num estado único fundamental, com uma energia também única e bem definida. Temos portanto que dar um tratamento estatístico ao problema. Se descrevermos os estados do sistema através dos auto-estados da sua hamiltoniana $|m\rangle$, com energia E_m , e considerarmos que este se encontra em equilíbrio a uma temperatura T , então poderemos tratar convenientemente a questão através do ensemble canônico da mecânica estatística. A probabilidade de se encontrar o sistema no estado $|m\rangle$ é dada por

$$W(m) = \frac{e^{-\beta E_m}}{Z} \quad (6.1)$$

onde Z é a soma sobre todos os estados, ou seja,

$$Z = \sum_m e^{-\beta E_m}, \quad (6.2)$$

$\beta = (k_B T)^{-1}$ e k_B é a constante de Boltzman.

Um outro aspecto que deve ser considerado em se tratando de um sistema a temperatura finita é que enquanto no zero absoluto a partícula de prova sempre excitava o sistema e não havia qualquer possibilidade de ocorrer o inverso, agora tanto o sistema pode ser excitado pela partícula de prova recebendo energia dela, como pode também excitar a partícula transferindo-lhe energia. No equilíbrio térmico a probabilidade de que a partícula aqueça o sistema e a probabilidade inversa não são independentes e se relacionam através do princípio do balanceamento detalhado que exporemos oportunamente a seguir.

Vamos considerar novamente o espalhamento inelástico de um feixe externo de partículas por um sistema de muitos corpos. A seção de choque de espalhamento dentro de um ângulo sólido $d\Omega$ e com transferência de energia $d\omega$ tem a forma da Eq. (2.8) com o estado inicial do sistema tratado estatisticamente e se escreve como

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\omega} = \left| \phi_{\vec{k}} \right|^2 \left(\frac{k''}{k'} \right) \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2} \right)^2 Z^{-1} \sum_{nm} e^{-\beta E_m} \left| \left(\begin{matrix} \rho^+ \\ \vec{k} \end{matrix} \right)_{nm} \right|^2 \delta(\omega - \omega_{nm}) \quad (6.3)$$

onde $\hbar\omega_{nm} = E_n - E_m$ corresponde à variação de energia sofrida pelo sistema após a interação com a partícula de prova.

Assim como na Eq. (2.10) temos agora todas as propriedades do sistema de muitos corpos contidas no fator de estrutura dinâmico definido por

$$S(\vec{k}, \omega) = \frac{Z^{-1}}{\hbar} \sum_{nm} e^{-\beta E_m} \left| \left(\begin{matrix} \rho^+ \\ \vec{k} \end{matrix} \right)_{nm} \right|^2 \delta(\omega - \omega_{nm}) \quad (6.4)$$

Da mesma forma podemos obter a função resposta densidade-densidade tomando um conjunto de estados iniciais $|m\rangle$ ponde-

rados com probabilidades $W(m)$. Admitindo aqui também a reversibilidade temporal obtemos

$$\chi(\vec{k}, \omega) = \frac{Z^{-1}}{\hbar \Omega} \sum_{nm} e^{-\beta E_m} \left| \left(\rho_{\vec{k}} \right)_{nm} \right|^2 \left\{ \frac{1}{\omega - \omega_{nm} + i\eta} - \frac{1}{\omega + \omega_{nm} + i\eta} \right\} \quad (6.5)$$

Utilizando a relação de Dirac podemos escrever a parte imaginária de $\chi(\vec{k}, \omega)$ como

$$\text{Im} \chi(\vec{k}, \omega) = \frac{-\pi Z^{-1}}{\hbar \Omega} \sum_{nm} e^{-\beta E_m} \left| \left(\rho_{\vec{k}} \right)_{nm} \right|^2 \left\{ \delta(\omega - \omega_{nm}) - \delta(\omega + \omega_{nm}) \right\} \quad (6.6)$$

Comparando as Eqs. (6.4) e (6.6) vemos que a parte imaginária da função resposta densidade-densidade está relacionada com o fator de estrutura dinâmico através da expressão

$$\text{Im} \chi(\vec{k}, \omega) = \frac{-\pi}{\Omega} [S(\vec{k}, \omega) - S(\vec{k}, -\omega)] \quad (6.7)$$

No caso de $T=0$ é sempre o sistema que recebe energia da partícula de prova e, portanto, de acordo com a Eq. (2.10), $S(\vec{k}, \omega)$ é nulo para $\omega < 0$. Na situação presente, no entanto, ω_{nm} tanto pode ser positiva como negativa, dependendo do sistema ter recebido energia da partícula de prova ou vice-versa.

Na Eq. (6.7), $S(\vec{k}, \omega)$ corresponde ao espalhamento de uma partícula de prova, em que esta transferiu momento $\hbar \vec{k}$ e energia $\hbar \omega$ ao sistema, enquanto $S(\vec{k}, -\omega)$ corresponde a uma situação em que a partícula absorveu momento $-\hbar \vec{k}$ e energia $\hbar \omega$ do sistema.

Essas duas funções estão relacionadas entre si através do princípio do balanceamento detalhado. Para estabelecer esta relação vamos reescrever a Eq. (6.4) invertendo os índices na

somatória

$$\begin{aligned}
 S(\vec{k}, \omega) &= \frac{Z^{-1}}{\hbar} \sum_{mn} e^{-\beta E_n} \left| \left(\rho_{\vec{k}}^+ \right)_{mn} \right|^2 \delta(\omega + \omega_{nm}) = \\
 &= \frac{Z^{-1}}{\hbar} \sum_{mn} e^{-\beta(E_n - E_m)} e^{-\beta E_m} \left| \left(\rho_{\vec{k}} \right)_{nm} \right|^2 \delta(\omega + \omega_{nm}) = \\
 &= e^{\beta \hbar \omega} S(-\vec{k}, -\omega)
 \end{aligned} \tag{6.8}$$

A Eq. (6.8) é uma das formas de se expressar o princípio do balanceamento detalhado. Ele pode ser escrito também em termos da razão entre a probabilidade $P(\vec{k}, \omega)$ de que a partícula de prova transmita momento $\hbar k$ e energia $\hbar \omega$ ao sistema e a probabilidade $P(-\vec{k}, -\omega)$ de que esta absorva momento $\hbar k$ e energia $\hbar \omega$ do sistema, dada por

$$\frac{P(\vec{k}, \omega)}{P(-\vec{k}, -\omega)} = e^{\beta \hbar \omega} \tag{6.9}$$

Admitindo que o sistema é invariante frente a uma inversão temporal podemos estabelecer que

$$S(\vec{k}, -\omega) = S(-\vec{k}, -\omega) \tag{6.10}$$

de onde a Eq. (6.8) pode ser escrita na forma

$$S(\vec{k}, \omega) = e^{\beta \hbar \omega} S(\vec{k}, -\omega) \tag{6.11}$$

Levando em conta a Eq. (6.11) podemos escrever a Eq. (6.7) como

$$\text{Im}\chi(\vec{k}, \omega) = \frac{-\pi}{\Omega} \left[1 - e^{-\beta\hbar\omega} \right] S(\vec{k}, \omega) \quad (6.12)$$

O fator de estrutura estático dependente da temperatura pode ser definido de forma análoga à da Eq. (2.12), porém agora a integração em ω deve ser efetuada desde $-\infty$ até $+\infty$. Temos então

$$S(\vec{k}) = \frac{\hbar}{N} \int_{-\infty}^{+\infty} S(\vec{k}, \omega) d\omega \quad (6.13)$$

Vemos da Eq. (6.4) que o fator de estrutura estático não se altera se substituirmos $S(\vec{k}, \omega)$ por $S(\vec{k}, -\omega)$ na Eq. (6.13). Podemos escrever

$$S(\vec{k}) = \frac{\hbar}{N} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{S(\vec{k}, \omega) + S(\vec{k}, -\omega)}{2} d\omega \quad (6.14)$$

Utilizando as Eqs. (6.11) e (6.12) obtemos finalmente o fator de estrutura estático na seguinte forma

$$S(\vec{k}, T) = \frac{-\hbar}{N} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \text{Im}\chi(\vec{k}, \omega, T) \coth \frac{\beta\hbar\omega}{2} \quad (6.15)$$

onde escrevemos explicitamente o argumento T para salientar o fato de que tanto o fator de estrutura estático como a parte imaginária da função resposta densidade-densidade dependem da temperatura.

A aproximação que vamos fazer consiste em considerar que para temperaturas muito próximas de zero por força da condensação de Bose-Einstein a grande maioria das partículas do sistema se encontra no nível de energia zero, de forma que podemos na Eq. (6.15) substituir a parte imaginária da função resposta densidade-

-densidade dependente da temperatura por sua análoga para $T=0$. Assim, a dependência da temperatura fica restrita à cotangente hiperbólica. Substituindo, então a Eq. (2.39) na Eq. (6.15) e efetuando a integração obtemos

$$\begin{aligned}
 S(\vec{k}, T) &= \frac{1}{N} \sum_n \left| \left(\rho_{\vec{k}} \right)_{no} \right|^2 \coth \frac{\beta \hbar \omega_{no}}{2} = \\
 &= \coth \frac{\beta E(\vec{k}, 0)}{2} \frac{1}{N} \sum_n \left| \left(\rho_{\vec{k}} \right)_{no} \right|^2 = \\
 &= S(\vec{k}, 0) \coth \frac{\beta E(\vec{k}, 0)}{2} \quad (6.16)
 \end{aligned}$$

Utilizando ainda a relação de Bjil-Feynman dada pela Eq. (3.42) obtemos um fator de estrutura estático dependente da temperatura aproximado, calculado a partir da relação de dispersão do sistema para $T=0$:

$$S(\vec{k}, T) = \frac{\hbar^2 k^2}{2mk_B T} \frac{\coth \frac{E(\vec{k}, 0)}{2 k_B T}}{\frac{E(\vec{k}, 0)}{2 k_B T}} \quad (6.17)$$

A fórmula a que chegamos vem reforçar a argumentação a favor da aproximação que fizemos, pois é bastante razoável admitir que o espectro de excitações elementares do sistema seja pouco dependente da temperatura.

Através da relação de Bjil-Feynman podemos alternativamente escrever a Eq. (6.17) em função do fator de estrutura estático para obtermos

$$S(\vec{k}, T) = S(\vec{k}, 0) \coth \left(\frac{\hbar^2 k^2}{4mk_B T S(\vec{k}, 0)} \right) \quad (6.18)$$

As Eqs. (6.17) e (6.18) nos fornecem uma forma, ainda que aproximada, de estender o nosso estudo sobre o gás de bosons carregados para a região das temperaturas finitas próximas do zero absoluto.

6.1 - Funções termodinâmicas do gás tridimensional

A três dimensões o gás de Bose sofre a partir de uma temperatura crítica a chamada condensação de Bose-Einstein⁽⁴¹⁾. Trata-se de uma transição de fase de 1.ª ordem. A temperatura crítica é dada por

$$T_c = \frac{2\pi\hbar^2/k_B m}{[\zeta(3/2)/\rho]^{2/3}} \quad (6.19)$$

onde $\zeta(x)$ é a função zeta de Riemann.

Para temperaturas superiores a T_c nenhum dos níveis de energia é ocupado por uma fração finita de todas as partículas. Elas se encontram espalhadas por igual por todos os níveis de energia. Para $T < T_c$, no entanto, existe uma fração finita dada por $1 - (T/T_c)^{3/2}$ de partículas que ocupam o nível com momento nulo, enquanto que as demais estão espalhadas por igual por todos os níveis de momentos não nulos. Já no zero absoluto todas as partículas ocupam o nível com momento nulo.

A energia livre de Helmholtz é em nosso problema o potencial termodinâmico mais fácil de ser calculado. Se levarmos em consideração somente a energia cinética das partículas estaremos calculando a energia livre de um gás de Bose ideal. Esse cálculo pode ser encontrado na literatura e, na sua forma final, a energia livre de Helmholtz é dada por

$$\frac{F_O}{N} = \frac{-\zeta(5/2)k_B T}{\rho \lambda^3} \quad (6.20)$$

onde $\lambda = \sqrt{2\pi\hbar^2/mk_B T}$ é o comprimento de onda térmico.

A energia livre do sistema é dada por

$$F = -k_B T \ln Z \quad (6.21)$$

Para calcular o seu valor para um gás de bosons com interação procederemos de forma análoga à adotada no teorema do estado fundamental. Ou seja, vamos considerar formalmente que o parâmetro de acoplamento e^2 pode variar desde zero até e^2 e vamos calcular a derivada da energia livre em função desse parâmetro

$$\begin{aligned} \frac{\partial F}{\partial \lambda} &= Z^{-1} \sum_m e^{-\beta E_m} \frac{\partial}{\partial \lambda} \langle \psi_m | H | \psi_m \rangle = \\ &= Z^{-1} \sum_m e^{-\beta E_m} \left[\left\langle \frac{\partial \psi_m}{\partial \lambda} \right| H | \psi_m \right\rangle + \langle \psi_m | \frac{\partial H}{\partial \lambda} | \psi_m \rangle + \\ &+ \langle \psi_m | H | \frac{\partial \psi_m}{\partial \lambda} \rangle \right] = Z^{-1} \sum_m e^{-\beta E_m} \left[\frac{1}{\lambda} \langle \psi_m | E_{\text{int}} | \psi_m \rangle + \right. \\ &\left. + E_m \frac{\partial}{\partial \lambda} \langle \psi_m | \psi_m \rangle \right] = \frac{Z^{-1}}{\lambda} \sum_m e^{-\beta E_m} \langle \psi_m | E_{\text{int}} | \psi_m \rangle \quad (6.22) \end{aligned}$$

onde a hamiltoniana de interação é dada pela Eq. (2.20). Substituindo E_{int} na Eq. (6.22) podemos escrevê-la na forma

$$\begin{aligned} \frac{\partial F}{\partial \lambda} &= \frac{1}{2\Omega} \sum_{\vec{k}} \frac{\phi(\vec{k}, \lambda)}{\lambda} \left[Z^{-1} \sum_m e^{-\beta E_m} \langle \psi_m | \rho_{\vec{k}}^+ \rho_{\vec{k}} | \psi_m \rangle - N \right] = \\ &= \frac{N}{4\pi^2} \int_0^\infty dk k^2 \frac{\phi(\vec{k}, \lambda)}{\lambda} [S(\vec{k}, \lambda, T) - 1] \quad (6.23) \end{aligned}$$

onde a somatória em $\vec{k}$ foi substituída por uma integral e utilizamos a definição do fator de estrutura estático para temperaturas finitas dada por

$$S(\vec{k}, T) = \frac{1}{N} Z^{-1} \sum_m e^{-\beta E_m} \langle \psi_m | \rho_{\vec{k}}^+ \rho_{\vec{k}} | \psi_m \rangle \quad (6.24)$$

que decorre das Eqs. (6.4) e (6.13).

A energia livre do gás de bosons com interação pode então ser obtida da Eq. (6.23) se a integrarmos em λ desde zero até e^2 . Nessa integração a energia livre varia desde o seu valor para o gás ideal dado pela Eq. (6.20) até o valor que queremos calcular, resultando

$$\frac{F}{N} = \frac{-\zeta(5/2) k_B T}{\rho \lambda^3} + \frac{1}{\pi} \int_0^{e^2} d\lambda \int_0^\infty dk \left[S(\vec{k}, \lambda, T) - 1 \right] \quad (6.25)$$

Substituindo $S(\vec{k}, \lambda, T)$ por sua forma aproximada dada pela Eq. (6.18) chegamos à seguinte expressão para a energia livre de Helmholtz escrita em unidades de Rydbergs:

$$\frac{F}{N} = \frac{-\zeta(5/2) r_s^3}{3(4\pi)^{1/2}} T^{5/2} + \frac{2}{\pi r_s} \int_0^1 d\lambda \int_0^\infty dk \left[S(k, \lambda) \coth \left(\frac{k^2}{2r_s^2 S(k, \lambda) T} \right) - 1 \right] \quad (\text{Ryd}) \quad (6.26)$$

onde a temperatura se expressa em unidades de Ryd/k_B , o vetor de onda em termos de r_s^{-1} e λ em unidades de e^2 .

A partir da energia livre de Helmholtz podemos encontrar todas as demais funções termodinâmicas, em particular, a entropia, a energia interna e o calor específico.

A entropia por partícula em unidades de k_B tem a

forma

$$\frac{S}{Nk_B} = - \left. \frac{\partial F}{\partial T} \right|_V = \frac{5\zeta(5/2)r_s^3}{6(4\pi)^{1/2}} T^{3/2} -$$

$$- \frac{1}{\pi r_s^3} \frac{1}{T^2} \int_0^1 d\lambda \int_0^\infty dk k^2 \cos^2 \left(\frac{k^2}{2r_s^2 S(k, \lambda) T} \right) \quad (6.27)$$

e a energia interna pode ser calculada a partir da energia livre e da entropia através da relação

$$U = F + TS \quad (6.28)$$

Obtemos, assim, a seguinte expressão para a energia interna por partícula

$$\frac{U}{N} = \frac{\zeta(5/2)r_s^3}{2(4\pi)^{1/2}} T^{5/2} +$$

$$+ \frac{2}{\pi r_s^3} \int_0^1 d\lambda \int_0^\infty dk \left\{ S(k, \lambda) \left[\coth \left(\frac{k^2}{2r_s^2 S(k, \lambda) T} \right) - \right. \right.$$

$$\left. \left. - \frac{k^2}{2r_s^2 S(k, \lambda) T} \cos^2 \left(\frac{k^2}{2r_s^2 S(k, \lambda) T} \right) \right] - 1 \right\} \text{ (Ryd)} \quad (6.29)$$

Para $T \rightarrow 0$ e o vetor de onda medido não em unidades de r_0 , mas de $(m\omega_p/\hbar)^{1/2}$, a Eq. (6.29) reproduz a Eq. (3.24) que nos dá a energia do estado fundamental, o que é natural, pois para $T=0$ o sistema se encontra necessariamente no estado fundamental.

O calor específico a volume constante se escreve como

$$\begin{aligned}
\frac{C_v}{Nk_B} &= T \left. \frac{\partial S}{\partial T} \right|_V = \frac{5\zeta(5/2)r_s^3}{4(4\pi)^{1/2}} T^{3/2} + \\
&+ \frac{2}{\pi r_s^3} \frac{1}{T^2} \int_0^1 d\lambda \int_0^\infty dk k^2 \cos^2 \text{ch} \left(\frac{k^2}{2r_s^2 S(k,\lambda)T} \right) - \\
&- \frac{1}{\pi r_s^5 T^3} \int_0^1 d\lambda \int_0^\infty dk \frac{k^4}{S(k,\lambda)} \cos^2 \text{ch} \left(\frac{k^2}{2r_s^2 S(k,\lambda)T} \right) \coth \left(\frac{k^2}{2r_s^2 S(k,\lambda)T} \right)
\end{aligned}
\tag{6.30}$$

Nas últimas quatro equações expressamos a temperatura em unidades de Ryd/k_B . É conveniente analisar um caso concreto de gás de Bose carregado para se ter idéia da grandeza dessa unidade. Se considerarmos como exemplo um gás de Bose carregado formado por partículas α (núcleos de He^4) veremos que para esse sistema a temperatura de $1 \text{ Ryd}/k_B$ equivale a $1,86 \times 10^{10} \text{ }^\circ\text{K}$. Essa temperatura fantástica para as condições terrestres é no entanto característica do sistema de bosons carregados que só pode existir sob pressões altíssimas dadas no caso de um sistema de partículas α por

$$\rho = \frac{4,1 \times 10^{37}}{r_s^3} \text{ part./cm}^3 \tag{6.31}$$

Para $r_s = 2$, por exemplo, a temperatura crítica para a condensação de Bose-Einstein do gás ideal é de

$$T_c(r_s=2) = 0,64 \text{ ryd}/k_B = 1,18 \times 10^{10} \text{ }^\circ\text{K} \tag{6.32}$$

Na Figura 20 apresentamos os resultados obtidos para

Figura 20 - Calor específico a volume constante de um gás de Bose carregado tridimensional para vários valores de r_s em função da temperatura medida em unidades de ryd/k_B . As linhas pontilhadas representam o calor específico do gás ideal.

o calor específico para diferentes valores de r_s . Como se pode ver, inicialmente o gás se comporta como um gás ideal, mas com o aumento da temperatura o calor específico se torna menor que o previsto para o gás ideal devido à presença da interação coulombiana. As curvas foram traçadas até a temperatura em que o calor específico do gás com interação se torna 20% menor que o do gás ideal. Para temperaturas mais altas o resultado se afasta em demasia do valor para o gás ideal, chegando mesmo a decrescer e tornar-se negativo, o que atesta a não validade da aproximação para essa região de temperatura.

Embora tenhamos com essa aproximação atingido somente temperaturas da ordem de 10^{-2} ryd/ k_B , é importante lembrar que a fizemos a partir da temperatura zero e, para um gás formado por partículas α , por exemplo, essas temperaturas são da ordem de 10^7 K.

6.2 - Funções termodinâmicas do gás bidimensional com interação $1/r$

O gás de Bose a duas dimensões com interação $1/r$ tem um comportamento completamente distinto do gás tridimensional, pois, não sofre a condensação de Bose-Einstein para nenhuma temperatura finita. Ou seja, a não ser que o gás esteja no zero absoluto, nenhum nível de energia, nem mesmo o de energia zero é ocupado por uma fração finita de partículas. No Apêndice de nosso trabalho de duzimos a equação de estado e as funções termodinâmicas do gás de Bose ideal a duas dimensões e mostramos que nessa dimensionalidade não ocorre a condensação de Bose-Einstein.

Procedendo como no ítem anterior pode-se escrever a energia livre de Helmholtz como

$$\begin{aligned} \frac{F}{N} = & \frac{-k_B T}{\lambda^2 \rho} g_2(1 - e^{-\lambda^2 \rho}) + k_B T \ln(1 - e^{-\lambda^2 \rho}) + \\ & + \frac{e^2}{2} \int_0^1 d\alpha \int_0^\infty dk \left[S(k, \alpha, T) - 1 \right] \end{aligned} \quad (6.33)$$

onde α e k são medidos em unidades de e^2 e r_0^{-1} respectivamente e utilizamos a Eq. (A.29) do Apêndice.

Aplicando também para o caso bidimensional a aproximação da Eq. (6.18) chegamos à seguinte expressão para a energia livre de Helmholtz por partícula em Rydbergs:

$$\begin{aligned} \frac{F}{N} = & \frac{-T^2 r_s^2}{4} g_2 \left(1 - e^{-\frac{4}{r_s^2 T}} \right) + T \ln \left(1 - e^{-\frac{4}{r_s^2 T}} \right) + \\ & + \frac{1}{r_s} \int_0^1 d\alpha \int_0^\infty dk \left[S(k, \alpha) \coth \left(\frac{k^2}{2r_s^2 S(k, \alpha) T} \right) - 1 \right] \text{ (Ryd)} \end{aligned} \quad (6.34)$$

com a temperatura medida em unidades de Ryd/ k_B .

A entropia por partícula é obtida através da derivada da energia livre em função da temperatura e tem a forma

$$\begin{aligned} \frac{S}{Nk_B} = & - \left. \frac{\partial F}{\partial T} \right|_{A, N} = \frac{Tr_s^2}{2} g_2 \left(1 - e^{-\frac{4}{r_s^2 T}} \right) - \ln \left(1 - e^{-\frac{4}{r_s^2 T}} \right) - \\ & - \frac{1}{2r_s^3 T^2} \int_0^1 d\alpha \int_0^\infty dk k^2 \operatorname{cosec}^2 \operatorname{ch} \left(\frac{k^2}{2r_s^2 S(k, \alpha) T} \right) \end{aligned} \quad (6.35)$$

A energia interna por partícula pode ser escrita na forma da Eq. (6.28) e resulta na expressão

$$\begin{aligned}
\frac{U}{N} = & \frac{T^2 r_s^2}{4} g_2 \left(1 - e^{-\frac{4}{r_s^2 T}} \right) + \\
& + \frac{1}{r_s} \int_0^1 d\alpha \int_0^\infty dk \left\{ S(k, \alpha) \left[\coth \left(\frac{k^2}{2r_s^2 S(k, \alpha) T} \right) - \right. \right. \\
& \left. \left. - \frac{k^2}{2r_s^2 S(k, \alpha) T} \operatorname{csch}^2 \left(\frac{k^2}{2r_s^2 S(k, \alpha) T} \right) \right] - 1 \right\} \text{ (Ryd)} \quad (6.36)
\end{aligned}$$

Vemos também aqui que para $T \rightarrow 0$ e k medido em unidades de $(a_0 r_0)^{-1/3}$ a Eq. (6.36) reproduz a Eq. (5.11) que nos dá a energia do estado fundamental.

Finalmente podemos calcular o calor específico a área constante como

$$\begin{aligned}
\frac{C_A}{Nk_B} = & \frac{T r_s^2}{2} g_2 \left(1 - e^{-\frac{4}{r_s^2 T}} \right) - \frac{4}{r_s^2 T} \frac{e^{-\frac{4}{r_s^2 T}}}{1 - e^{-\frac{4}{r_s^2 T}}} + \\
& + \frac{1}{r_s^3 T^2} \int_0^1 d\alpha \int_0^\infty dk k^2 \operatorname{csch}^2 \left(\frac{k^2}{2r_s^2 S(k, \alpha) T} \right) - \\
& - \frac{1}{2r_s^5 T^3} \int_0^1 d\alpha \int_0^\infty dk \frac{k^4}{S(k, \alpha)} \operatorname{csch}^2 \left(\frac{k^2}{2r_s^2 S(k, \alpha) T} \right) \cdot \coth \left(\frac{k^2}{2r_s^2 S(k, \alpha) T} \right)
\end{aligned} \quad (6.37)$$

A figura 21 mostra os resultados que obtivemos para o calor específico a área constante do gás de Bose bidimensional com interação $1/r$ juntamente com os gráficos correspondentes do

gás ideal. Também nesse caso as curvas são apresentadas até a temperatura em que o calor específico do gás com interação fica 20% menor que o calor específico do gás ideal. Para temperaturas mais elevadas os resultados de nossa aproximação já não são confiáveis.

Comparando as figuras 20 e 21 verificamos que o limite de validade de nossa aproximação é maior no caso tridimensional que no bidimensional. Isso se deve ao fato de que no caso tridimensional há a condensação de Bose-Einstein e para temperaturas muito baixas a grande maioria das partículas ocupa o nível de energia mínima de forma que o comportamento do gás se assemelha ao seu comportamento no zero absoluto. Já no caso bidimensional, mesmo para temperaturas baixas todas as partículas do gás se encontram em algum estado excitado distinguindo-o mais do seu estado no zero absoluto.

Figura 21 - Calor específico a área constante de um gás de Bose carregado bidimensional com interação $1/r$ para vários valores de r_s em função da temperatura medida em unidades de ryd/k_B . As linhas pontilhadas representam o calor específico do gás ideal bidimensional.

CAPÍTULO VII

CONCLUSÕES

Estudamos em nosso trabalho diferentes sistemas de gás de Bose carregado. Todos os nossos cálculos foram baseados no método do campo auto-consistente que leva em consideração as correlações de curto alcance através de uma correção de campo local.

Inicialmente investigamos o gás de bosons carregados tridimensional. O fator de estrutura $S(\vec{k})$ foi calculado juntamente com a correção de campo local $G(\vec{k})$ de forma auto-consistente. A partir do fator de estrutura calculamos a função de correlação dos pares, a densidade de blindagem a uma carga fixa na origem e o espectro de excitações elementares. Comparamos nossos resultados com os de RPA que é uma aproximação amplamente difundida no estudo de sistemas de muitos corpos. Verificamos que nossos resultados são próximos dos de RPA na região de altas densidades, que é a região onde o RPA apresenta resultados confiáveis, mas se distinguem sensivelmente desses últimos na região das densidades intermediárias. A função de correlação dos pares calculada pelo método auto-consistente mostrou de forma evidente a superioridade desse formalismo em comparação com o de RPA. Embora com a diminuição da densidade assumam valores negativos a pequenas distâncias, ela se mantém bem próxima de zero, enquanto que a função dada por RPA não só se torna negativa nas proximidades da origem, como cresce muito em valores absolutos. Pudemos ainda notar da comparação dos nossos resultados com os de RPA que a introdução da correção de campo local aumenta sensivelmente a densidade de blindagem a uma impureza carregada fixa na origem, de onde decorre que a sua blindagem total ocorre a

distâncias menores. Calculamos ainda a energia do estado fundamental que para o sistema de bosons é simplesmente a energia de correlação. Nossos resultados apresentaram excelente concordância com os obtidos na aproximação de HNC e pelo método de Monte Carlo, enquanto que o RPA só apresenta bons resultados para densidades muito altas.

Do gás de Bose carregado tridimensional passamos ao estudo de sistemas de bosons carregados bidimensionais. Consideramos inicialmente o sistema estritamente bidimensional com interação logarítmica. Nesse caso não só o movimento das partículas se restringe a duas dimensões, mas também o campo eletromagnético e as funções de onda são bidimensionais. Ele é o análogo exato a duas dimensões do sistema tridimensional. Nossos resultados apresentam um comportamento qualitativamente semelhante aos do sistema tridimensional. Pudemos entretanto notar que as partículas no sistema bidimensional estão mais correlacionadas que no gás tridimensional.

O segundo sistema bidimensional que estudamos foi o gás de bosons carregado a duas dimensões com interação coulombiana tridimensional $1/r$. Nossos resultados mostraram que esse sistema também é mais correlacionado que o tridimensional. Já quando comparamos com o sistema com interação logarítmica notamos que a altas densidades as correlações são mais fortes no sistema com interação $1/r$, enquanto que para densidades baixas ocorre o contrário.

As regiões de aplicabilidade do método auto-consistente foram de $0 \lesssim r_s \lesssim 25$ para o caso tridimensional e chegaram a 7 e 9 para os sistemas bidimensionais com interação $1/r$ e $\ln(r)$, respectivamente. Para valores de r_s superiores a esses limites os sistemas de equações auto-consistentes já não convergem para uma única solução. De qualquer forma nessa região as funções de correla -

ção dos pares já se tornam negativas nas proximidades da origem, o que é um indício de que a aproximação está chegando ao seu limite de validade.

A partir dos espectros de excitações elementares que obtivemos para os sistemas bi e tridimensionais à temperatura zero calculamos de forma aproximada os respectivos fatores de estrutura desses sistemas a temperaturas finitas próximas do zero absoluto. Calculamos a seguir as energias livres, as energias internas, as entropias e os calores específicos a volume e área constantes. Verificamos de nossos resultados que a aproximação adotada tem um domínio maior de validade no caso tridimensional que no bidimensional. É razoável esperar tal comportamento, pois a presença da condensação de Bose-Einstein no sistema tridimensional faz com que a temperaturas finitas ele se assemelhe ao seu estado no zero absoluto devido à fração elevada de partículas que ocupam o estado de energia mínima.

Nosso trabalho veio preencher uma lacuna que havia no estudo de sistemas de muitos corpos, pois a aproximação do campo auto-consistente não havia sido aplicada até agora a qualquer sistema de bosons carregados.

Finalmente gostaríamos de chamar a atenção para um problema nessa linha, no qual seria interessante aplicarmos o método do campo auto-consistente. Trata-se de um plasma formado por N_b bosons de massa M carregados com carga e_b e N_f fermions de massa m carregados com carga $-e_f$ satisfazendo a condição de neutralidade do sistema: $N_b e_b - N_f e_f = 0$. Um modelo desse tipo deve se aplicar com maior fidelidade ao núcleo de estrelas anãs onde os bosons não se encontram imersos num fundo neutralizador fixo, mas sim num gás de elétrons com todas as suas propriedades dielétricas.

APÊNDICE

GÁS DE BOSE IDEAL BIDIMENSIONAL

O gás de Bose ideal bidimensional é um sistema de N partículas não interagentes confinadas numa área A e obedecendo a estatística de Bose. A hamiltoniana desse sistema é dada por

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m} \quad (\text{A.1})$$

onde $\vec{p}_i$ é o operador momento da partícula i .

Se adotarmos condições periódicas de contorno teremos os auto-valores do momento de partícula livre dados por

$$\vec{p} = \frac{2\pi\hbar}{L} \vec{n} \quad (\text{A.2})$$

onde $\vec{n}$ é um vetor bidimensional cujas componentes são zero ou inteiros positivos ou negativos e L é a raiz quadrada da área do sistema

$$L \equiv A^{1/2} \quad (\text{A.3})$$

No limite em que $A \rightarrow \infty$ os valores possíveis de $\vec{p}$ formam um contínuo e a soma em $\vec{p}$ pode, quando for conveniente, ser substituída por uma integral

$$\sum_{\vec{p}} \longrightarrow \frac{A}{(2\pi\hbar)^2} \int d^2p \quad (\text{A.4})$$

O estado de um gás ideal pode ser especificado através de um conjunto de números de ocupação $\{n_{\vec{p}}\}$ que define a quantidade

de de partículas do sistema que ocupa cada nível de energia

$$\epsilon_{\vec{p}} = \frac{p^2}{2m} \quad (\text{A.5})$$

onde $\vec{p}$ é dado pela Eq. (A.2).

A energia total do sistema é então dada por

$$E = \sum_{\vec{p}} \epsilon_{\vec{p}} n_{\vec{p}} \quad (\text{A.6})$$

e o número total de partículas desse estado por

$$N = \sum_{\vec{p}} n_{\vec{p}} \quad (\text{A.7})$$

Para um sistema de bosons os valores permitidos para qualquer $n_{\vec{p}}$ são

$$n_{\vec{p}} = 0, 1, 2, \dots \quad (\text{A.8})$$

A função de partição do gás ideal é dada por

$$Z_N(A, T) = \sum_{\{n_{\vec{p}}\}} e^{-\beta \sum_{\vec{p}} \epsilon_{\vec{p}} n_{\vec{p}}} \quad (\text{A.9})$$

onde a somatória inferior percorre todos os possíveis conjuntos de números de ocupação.

Devido à existência da condição da Eq. (A.7) é mais conveniente trabalharmos com a função de grande partição

$$\Xi(z, A, T) = \sum_{N=0}^{\infty} z^N Z_N(A, T) = \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{\substack{\{n_{\vec{p}}\} \\ \sum_{\vec{p}} n_{\vec{p}} = N}} z^N e^{-\beta \sum_{\vec{p}} \epsilon_{\vec{p}} n_{\vec{p}}} =$$

$$= \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{\{n_{\vec{p}}\}} \prod_{\vec{p}} \left[z e^{-\beta \epsilon_{\vec{p}}} \right]^{n_{\vec{p}}} \quad (A.10)$$

$$\sum_{\vec{p}} n_{\vec{p}} = N$$

onde $z = e^{\beta \mu}$ é a fugacidade e μ é o potencial químico.

Efetuar a somatória dupla nessa equação é equivalente a somar cada $n_{\vec{p}}$ independentemente. Para provar isso basta mostrar que cada termo em um caso aparece uma única vez no outro. Temos então

$$\begin{aligned} \Xi(z, A, T) &= \sum_{n_0=0}^{\infty} \sum_{n_1=0}^{\infty} \dots \left[\left(z e^{-\beta \epsilon_0} \right)^{n_0} \left(z e^{-\beta \epsilon_1} \right)^{n_1} \dots \right] = \\ &= \left[\sum_{n_0=0}^{\infty} \left(z e^{-\beta \epsilon_0} \right)^{n_0} \right] \left[\sum_{n_1=0}^{\infty} \left(z e^{-\beta \epsilon_1} \right)^{n_1} \right] \dots = \\ &= \prod_{\vec{p}} \left[\sum_{n=0}^{\infty} \left(z e^{-\beta \epsilon_{\vec{p}}} \right)^n \right] \quad (A.11) \end{aligned}$$

A somatória nos colchetes nada mais é que a soma dos termos de uma progressão geométrica e pode ser efetuada dando como resultado

$$\Xi(z, A, T) = \prod_{\vec{p}} \frac{1}{1 - z e^{-\beta \epsilon_{\vec{p}}}} \quad (A.12)$$

A equação de estado é obtida como

$$\frac{PA}{k_B T} = \ln \Xi(z, A, T) = - \sum_{\vec{p}} \ln \left(1 - z e^{-\beta \epsilon_{\vec{p}}} \right) \quad (A.13)$$

de onde z deve ser eliminada por meio da equação

$$N = z \frac{\partial}{\partial z} \ln \Xi(z, A, T) = \sum_{\vec{p}} \frac{z e^{-\beta \epsilon_{\vec{p}}}}{1 - z e^{-\beta \epsilon_{\vec{p}}}} \quad (A.14)$$

e a pressão P é entendida como força por unidade de comprimento.

Se tomarmos $A \rightarrow \infty$ podemos substituir nas Eqs. (A.13) e (A.14) a somatória por uma integral, de acordo com a Eq. (A.4), desde que tenhamos o cuidado de escrever separadamente em ambas as equações os termos para $p=0$, pois estes divergem quando $z \rightarrow 1$ e podem, portanto, ser tão importantes quanto a própria soma de todos os outros termos. As Eqs. (A.13) e (A.14) se escrevem então como

$$\frac{P}{k_B T} = - \frac{1}{2\pi\hbar^2} \int_0^\infty dp \, p \ln \left(1 - z e^{-\frac{\beta p^2}{2m}} \right) - \frac{1}{A} \ln(1-z) \quad (\text{A.15})$$

$$\rho = \frac{1}{2\pi\hbar^2} \int_0^\infty dp \, p \frac{1}{z^{-1} e^{-\frac{\beta p^2}{2m}} - 1} + \frac{1}{A} \frac{z}{1-z} \quad (\text{A.16})$$

Fazendo em ambas as integrais a substituição $x = (\beta p^2 / 2m)^{1/2}$ podemos escrever as Eqs. (A.15) e (A.16) na forma

$$\frac{P}{k_B T} = \frac{1}{\lambda^2} g_2(z) - \frac{1}{A} \ln(1-z) \quad (\text{A.17})$$

$$\rho = \frac{1}{\lambda^2} g_1(z) + \frac{1}{A} \frac{z}{1-z} \quad (\text{A.18})$$

onde $\lambda = (2\pi\hbar^2 / mk_B T)^{1/2}$,

$$g_1(z) = \sum_{\ell=1}^{\infty} \frac{z^\ell}{\ell} = -\ln(1-z) = 2 \int_0^\infty \frac{z e^{-x^2}}{1 - z e^{-x^2}} x dx \quad (\text{A.19})$$

$$g_2(z) = \sum_{\ell=1}^{\infty} \frac{z^{\ell}}{\ell^2} = -2 \int_0^{\infty} dx \, x \ln \left(1 - z e^{-x^2} \right) \quad . \quad (A.20)$$

Da Eq. (A.18) vemos que o primeiro termo à direita pode atingir qualquer valor de ρ para $z < 1$ e, portanto, o segundo termo desaparece quando $A \rightarrow \infty$. O mesmo ocorre, consequentemente, com o segundo termo à direita da Eq. (A.17).

O desaparecimento do segundo termo à direita da Eq. (A.18) mostra que no gás de Bose ideal bidimensional não ocorre a condensação de Bose-Einstein, pois o número médio de ocupação dos níveis de energia é dado por

$$\begin{aligned} \langle n_{\vec{p}} \rangle &= \frac{1}{2} \sum_{N=0}^{\infty} z^N \sum_{\substack{\{n_{\vec{p}}\} \\ \sum_{\vec{p}} n_{\vec{p}} = N}} n_{\vec{p}} e^{-\beta \sum_{\vec{p}} \epsilon_{\vec{p}} n_{\vec{p}}} = - \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \epsilon_{\vec{p}}} \ln \Xi = \\ &= \frac{z e^{-\beta \epsilon_{\vec{p}}}}{1 - z e^{-\beta \epsilon_{\vec{p}}}} \end{aligned} \quad (A.21)$$

de onde vemos que

$$\frac{\langle n_o \rangle}{A} = \frac{1}{A} \frac{z}{1-z} \quad (A.22)$$

e tende a zero no limite termodinâmico para qualquer temperatura finita.

Com o desaparecimento do segundo termo à direita na Eq. (A.18) podemos encontrar o valor de z nessa equação e substituí-lo na Eq. (A.17) e obter, finalmente, a equação de estado do gás de Bose ideal bidimensional na forma

$$\frac{PA}{Nk_B T} = \frac{1}{\lambda^2 \rho} g_2 \left(1 - e^{-\lambda^2 \rho} \right) \quad . \quad (A.23)$$

A energia interna do gás de Bose ideal bidimensional é dada por

$$U(z, A, T) = \frac{1}{\Xi} \sum_{N=0}^{\infty} z^N \sum_{\substack{\{n_{\vec{p}}\} \\ \sum_{\vec{p}} n_{\vec{p}} = N}} \left[e^{-\beta \sum_{\vec{p}} \epsilon_{\vec{p}} n_{\vec{p}}} \sum_{\vec{p}} \epsilon_{\vec{p}} n_{\vec{p}} \right] =$$

$$= - \frac{\partial}{\partial \beta} \left[\ln \Xi(z, A, T) \right] \quad . \quad (A.24)$$

Como $\ln \Xi = PA/k_B T$ e lembrando que β aparece explicitamente somente no primeiro fator da Eq. (A.23) pois o argumento de g_2 é a fugacidade z , obtemos a energia interna por partícula na forma

$$\frac{U}{N} = - \frac{\partial}{\partial \beta} \left[\ln \Xi(z, A, T) \right] = \frac{k_B T}{\lambda^2 \rho} g_2 \left(1 - e^{-\lambda^2 \rho} \right) \quad . \quad (A.25)$$

A entropia pode ser obtida do potencial termodinâmico $\Omega = -PA$ como

$$S = - \left(\frac{\partial \Omega}{\partial T} \right)_{A, \mu} = \left(\frac{\partial PA}{\partial T} \right)_{A, \mu} \quad (A.26)$$

resultando na expressão

$$\frac{S}{Nk_B} = \frac{2}{\lambda^2 \rho} g_2 \left(1 - e^{-\lambda^2 \rho} \right) - \ln \left(1 - e^{-\lambda^2 \rho} \right) \quad . \quad (A.27)$$

Uma vez conhecidas a energia interna e a entropia, a energia livre pode ser escrita a partir de sua própria definição

$$F = U - TS \quad (\text{A.28})$$

e tem a forma

$$\frac{F}{N} = - \frac{k_B T}{\lambda^2 \rho} g_2 \left(1 - e^{-\lambda^2 \rho} \right) + k_B T \ln \left(1 - e^{-\lambda^2 \rho} \right) \quad (\text{A.29})$$

Finalmente podemos calcular o calor específico a área constante a partir da Eq. (A.25) como

$$C_A = \left. \frac{\partial U}{\partial T} \right|_{A,N} \quad (\text{A.30})$$

ou, alternativamente, da Eq. (A.27) como

$$C_A = T \left. \frac{\partial S}{\partial T} \right|_{A,N}$$

e o resultado é o seguinte:

$$\begin{aligned} C_A &= \frac{2}{\lambda^2 \rho} g_2 \left(1 - e^{-\lambda^2 \rho} \right) - \frac{g_1 \left(1 - e^{-\lambda^2 \rho} \right)}{g_0 \left(1 - e^{-\lambda^2 \rho} \right)} = \\ &= \frac{2}{\lambda^2 \rho} g_2 \left(1 - e^{-\lambda^2 \rho} \right) - \frac{\lambda^2 \rho e^{-\lambda^2 \rho}}{1 - e^{-\lambda^2 \rho}} \quad (\text{A.31}) \end{aligned}$$

Na figura 22 apresentamos um gráfico do calor específico do gás de Bose ideal bidimensional. Com a temperatura medida em unidades de $T_0 = \frac{2\pi\hbar^2 \rho}{k_B m}$ essa curva independe da densidade do gás. Para temperaturas elevadas o gás de bosons passa a se comportar como um gás clássico e o calor específico por partícula tende a k_B , que é o esperado para um gás clássico bidimensional.

Figura 22 - Calor específico de um gás de Bose ideal bidimensional em função da temperatura medida em unidades de $T_0 = 2\pi\hbar^2\rho/k_B m$, que torna a curva válida para todas as densidades.

REFERÊNCIAS

1. V.L.GINZBURG, J. Stat. Phys. 1, 3 (1969).
2. M.R.SCHAFROTH, Phys. Rev. 100, 463 (1955).
3. J.BARDEEN, L.N.COOPER e J.R.SCHRIEFFER, Phys. Rev. 106, 162 (1957); 108, 1175 (1957).
4. L.L.FOLDY, Phys. Rev. 124, 649 (1961).
5. N.N.BOGOLIUBOV, J. Phys. Moscou 11, 23 (1947).
6. D.K.LEE, Phys. Rev. A 2, 278 (1970).
7. D.L.LEE e F.H.REE, Phys. Rev. A 5, 814 (1972).
8. R.MONNIER, Phys. Rev. A 6, 393 (1972).
9. J.P.HANSEN e R.MAZIGHI, Phys. Rev. A 18, 1282 (1978).
10. K.S.SINGWI, M.P.TOSI, R.H.LAND e A.SJÖLANDER, Phys. Rev. 176, 589 (1968).
11. K.S.SINGWI, A.SJÖLANDER, M.P.TOSI e R.H.LAND, Phys. Rev. B1, 1044 (1970).
12. P.VASHISHTA, K.S.SINGWI, Phys. Rev. B6, 875 (1972).
13. K.F.BERGGREN, Phys. Rev. A 1, 1783 (1970).
14. O.HIPÓLITO e R. LOBO, Phys. Rev. B14, 9, 3892 (1976)
15. R.BANSAL e N.AILAWADI, Phys. Rev. A16, 1228 (1977).
16. N.STUDART e O.HIPÓLITO, Phys. Rev. A 19, 1970 (1979).
17. N.STUDART e O.HIPÓLITO, Phys. Rev. A 22, 2860 (1980).
18. T.ANDO, A.B.FOWLER e F.STERN, Rev. Mod. Phys. 54, 437 (1982).
19. J.P.RINO, N.STUDART e O.HIPÓLITO, Phys. Rev. B 29, 2584 (1984).
20. R.CALINON, K.I.GOLDEN, G.KALMAN e D.MERLINI, Phys. Rev. A 20, 329 (1979).

21. P.BAKSHI, R.CALINON, K.I.GOLDEN, G.KALMAN e D.MERLINI, Phys. Rev. A 20, 336 (1979).
22. J.S.THAKUR e K.N.PATHAK, J. Phys. C 16, 6551 (1983).
23. J.M.KOSTERLITZ e D.J.TOULESS, Prog. Low Temp. Phys. 7B, 371 (1978).
24. S.DONIACH e B.A.HUBERMAN, Phys. Rev. Lett. 42, 1169 (1979).
25. D.S.FISCHER, Phys. Rev. B 22, 1190 (1980).
26. A.F.HEBARD e A.T.FIORI, em "Ordering in Two Dimensions" editado por S.K.SINHA (North Holland, New York, 1980) p. 181.
27. W.MARSHALL e S.W.LOVESEY, "Theory of Thermal Neutron Scattering" (Oxford University Press, London, 1971) p.4.
28. A.L.FETTER e J.D.WALECKA, "Quantum Theory of Many-Particle Systems" (McGraw Hill, New York, 1971) p. 21.
29. D.PINES e P.NOZIÈRES, "The Theory of Quantum Liquids" (Benjamin, New York, 1966) p. 281.
30. A.A.CAPARICA e O.HIPÓLITO, Phys. Rev. A26, 2832 (1982).
31. D.K.LEE e E.FEENBERG, Phys. Rev. 137, A731 (1965).
32. A.BIJL, Physica 7, 869 (1940).
33. R.P.FEYNMAN e M.COHEN, Phys. Rev. 102, 1189 (1956).
34. J.C.LEE, Phys. Rev. B 12, 2644 (1975).
35. G.CARMI e A.J.LOCK, Phys. Rev. A 5, 1447 (1972).
36. M.ABRAMOWITZ e I.A.STEGUM, "Handbook of Mathematical Functions" (Dover, New York, 1970) p. 369 e p. 387.
37. R.H.RITCHIE, Phys. Rev. 106, 874 (1957).
38. R.A. FERREL, Phys. Rev. 111, 1214 (1958).
39. A.L.FETTER, Ann. Phys. (N.Y.) 81, 367 (1973).

40. D. E. BECK e P. KUMAR, Phys. Rev. B13, 2859 (1976).

41. K. HUANG, "Statistical Mechanics" (John Wiley & Sons, Inc., New York, 1963) p. 262.