**"SISTEMA DE BOSONS COM INTERAÇÃO
REPULSIVA FINITA : MÉTODO DO
CAMPO AUTOCONSISTENTE"**

Marta Maria Briscese Renatino

Dissertação apresentada ao
Instituto de Física e Química
de São Carlos , para
a obtenção do título de
Mestre em Física Básica

Orientadora: Profa.Dra. Vera Beatriz Freitas de Campos

**Departamento de Física e Ciência dos Materiais
São Carlos - 1983**

**BIBLIOTECA DO INSTITUTO DE FÍSICA E QUÍMICA DE SÃO CARLOS - USP
FÍSICA**

MEMBROS DA COMISSÃO JULGADORA DA DISSERTAÇÃO DE MESTRADO DE _____

MARTA MARIA B. RENATINO

APRESENTADA AO INSTITUTO DE FÍSICA E QUÍMICA DE SÃO CARLOS, DA
UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO, EM 16 DE dezembro DE 1983.

COMISSÃO JULGADORA:

Dr. Vera Beatriz F. de Campos - Orientador

Dr. Roberto Leal Lobo e Silva Filho

Dr. Gilmar Eugênio Marques

BIBLIOTECA DO INSTITUTO DE FÍSICA E QUÍMICA DE SÃO CARLOS - USP
FÍSICA

AGRADEÇO ,

à Profa.Dra. Vera Beatriz Freitas de Campos que me ori
entou neste trabalho, por seus ensinamentos, entusiasmo e cons-
tante apoio.

aos Professores ,

Dr. Sylvio Goulart Rosa Júnior e

Dr. Oscar Hipólito, pelo estímulo e amizade.

ao Prof.Dr. José Pedro Rino pela colaboração através
de proveitosas discussões.

a todo o Departamento de Física da UFSCAR e do IFQSC,
em especial ao seu Centro de Computação , pelo carinho e aten-
ção que sempre recebi.

ao CNPq e FAPESP pelo suporte financeiro.

Para meus pais

e Daniel

ÍNDICE

Lista de figuras.....	1
Resumo e abstract.....	ii
Capítulo I - INTRODUÇÃO.....	1
1.1 - Excitações de quasi-partículas.....	2
1.2 - Excitações coletivas.....	3
1.3 - Susceptibilidade e resposta linear.....	4
1.4 - Fator de estrutura.....	6
1.5 - Função de correlação dos pares.....	9
1.6 - Constante dielétrica.....	10
1.7 - Aproximação do campo autoconsistente.....	12
1.8 - Aproximação RPA.....	12
1.9 - Aproximação de Hubbard.....	14
Capítulo II - MÉTODO DO CAMPO AUTOCONSISTENTE (SCFA)...	15
2.1 - Aproximação semi-clássica.....	17
2.2 - Caso quântico.....	23
Capítulo III - MÉTODO DO CAMPO AUTOCONSISTENTE APLICADO A UM SISTEMA DE BOSONS.....	29
3.1 - Caso geral.....	29
3.2 - Potencial repulsivo finito.....	33
3.3 - Resultados.....	35
3.4 - Sistema de bosons puntual carregado.....	39
Apêndice I - LINEARIZAÇÃO DA EQUAÇÃO DE MOVIMENTO PARA A FUNÇÃO DISTRIBUIÇÃO CLÁSSICA DE UMA PAR TÍCULA E OBTENÇÃO DO POTENCIAL EFETIVO...	54
Apêndice II - OBTENÇÃO DA RELAÇÃO ENTRE O FATOR DE ES- TRUTURA E A ENERGIA DAS EXCITAÇÕES ELEMEN TARES DO SISTEMA.....	58

Apêndice III - CÁLCULO DO VALOR DA INTEGRAL DO POTENCIAL	
EFETIVO $\psi(\vec{r})$	60
Referências Bibliográficas.....	62

LISTA DE FIGURAS

Figura 1	-	Fator de estrutura vs. vetor de onda para razão ν_0/ν_c igual a 1.0	41
Figura 2	-	Fator de estrutura vs. vetor de onda para razão ν_0/ν_c igual a 1.5	42
Figura 3	-	Função de correlação dos pares vs. distância para razão ν_0/ν_c igual a 1.0	43
Figura 4	-	Função de correlação dos pares vs. distância para razão ν_0/ν_c igual a 1.5	44
Figura 5	-	Energia das excitações elementares vs. vetor de onda para a razão ν_0/ν_c igual a 1.0	45
Figura 6	-	Energia das excitações elementares vs. vetor de onda para a razão ν_0/ν_c igual a 1.5	46
Figura 7	-	Fator de estrutura vs. vetor de onda para RPA e SCFA com razão ν_0/ν_c igual a 1.0	47
Figura 8	-	Fator de estrutura vs. vetor de onda para RPA e SCFA com razão ν_0/ν_c igual a 1.5	48
Figura 9	-	Função de correlação dos pares vs. distância para RPA e SCFA com razão ν_0/ν_c igual a 1.0 ..	49
Figura 10	-	Função de correlação dos pares vs. distância para RPA e SCFA com razão ν_0/ν_c igual a 1.5 ..	50
Figura 11	-	Energia das excitações elementares vs. vetor de onda para RPA e SCFA com razão ν_0/ν_c igual a 1.0	51
Figura 12	-	Energia das excitações elementares vs. vetor de onda para RPA e SCFA com razão ν_0/ν_c igual a 1.5	52
Figura 13	-	Fator de estrutura vs. vetor de onda para razões ν_0/ν_c iguais a 1.0, 2.0 e 3.0	53

RESUMO

O objetivo deste trabalho é estudar algumas propriedades estáticas de um sistema de bosons a $T = 0K$, sob a ação de um potencial repulsivo. Consideramos que os pares de partículas estão sujeitos a uma interação repulsiva composta de uma parte constante de valor λ ($r < r_c$) e um comportamento tipo $1/r$ ($r > r_c$). Vamos utilizar o método do campo autoconsistente (SCFA), que leva em consideração as correlações de curto alcance através de uma correção de campo local, originando assim um campo efetivo entre as partículas. O fator de estrutura estático $S(\vec{q})$ e o potencial efetivo $V(\vec{q})$ são determinados por um esquema autoconsistente. A função de correlação dos pares $g(\vec{r})$ e o espectro de energia das excitações coletivas do sistema são também calculados a partir do fator de estrutura. Utilizamos como variáveis a densidade do sistema ($3/4\pi n_0^3$) e os parâmetros do potencial repulsivo, isto é, sua altura λ e o alcance r_c da parte constante. Os resultados obtidos para $S(\vec{q})$, $g(\vec{r})$ e $E(\vec{q})$ para uma razão n_0/r_c fixa e λ variando, indicam o aparecimento de uma maior estruturação no sistema, característica esta que se acentua à medida em que o potencial se torna mais repulsivo. Quando fixamos a altura λ do potencial e variamos a razão n_0/r_c vemos que no momento em que essa razão cresce, significando portanto uma diminuição de r_c para uma densidade fixa, há maior evidência do efeito de estrutura. Os resultados por nós obtidos são comparados com os encontrados através da aproximação das fases aleatórias (RPA). Diferenças significativas são notadas, indicando assim, a importância de se levar em conta os efeitos de correlações de curto alcance entre as partículas.

ABSTRACT

The purpose of this work was to study some static properties of a system of bosons ($T = 0^\circ\text{K}$), under the action of a repulsive potential. For the repulsive potential, our model consisted of a region where it is constant ($r < r_c$), and a decay like $1/r$ ($r > r_c$). We have used the self-consistent field approximation (SCFA), that takes into account this short range correlations through a local field correction, which leads to an effective field. The static structure factor $S(\vec{q})$ and the effective potential $V(\vec{q})$ are obtained through a self-consistent calculation. The pair-correlation function $g(r)$ and the energy of the collective excitations $E(\vec{q})$ are also obtained, from the structure factor. We have used as variables for the problem the density of the system and the parameters of the repulsive potential, that is, its height and the size of the constant region. The results obtained for $S(\vec{q})$, $g(r)$ and $E(\vec{q})$ for a fixed ratio r_0/r_c and a variable λ , indicates the raising of a system structure, which is more noticeable when the potential becomes more repulsive. For a fixed λ , and a variable ratio r_0/r_c , we notice that when this ratio increases, what implies in a decrease of λ for a fixed density, the structure effect becomes more evident. The results obtained are compared with those obtained using the random phase approximation (RPA). The improvement in the results is significant, indicating therefore the importance of the short-range correlations between the particles.

CAPÍTULO I

INTRODUÇÃO

O problema de muitos corpos se constitui no estudo da maneira com que a interação entre as partículas de um sistema denso altera o comportamento das partículas isoladas. Mas a inclusão de potencial entre as partículas leva-nos a um problema muito mais difícil, onde encontrar uma solução direta e exata torna-se geralmente impraticável. Baseando-se nesse fato, é necessário então desenvolver certas aproximações tão precisas quanto possível, com o objetivo de simplificar o cálculo de grandezas físicas importantes nestes sistemas de muitos corpos. As propriedades de maior interesse desse sistema são a energia do estado fundamental, o calor específico, os diagramas P-V de transições de fase, a condutividade e o espectro de excitações elementares.

Grande parte destas propriedades surge da mudança de estado de energia do sistema, ou seja, do processo de sair do estado fundamental e ir para um estado de maior energia. Tal processo de levar o sistema a um estado de energia mais alta é considerado como se algo fosse criado onde não havia nada antes. Dizemos então que assim surge uma excitação elementar. Devemos considerar que essa excitação tenha um tempo de vida longo e portanto, uma energia bem definida. Somente desta forma é que poderemos pensar no sistema como sendo constituído por um conjunto de excitações elementares que interagem fracamente entre si.

Para que as excitações elementares tenham vida longa ,

o sistema considerado deve estar a baixas temperaturas e os fenômenos físicos a serem estudados só devem envolver frequências suficientemente baixas e grandes comprimentos de onda. Mesmo quando não estamos nesse limite, ainda é possível descrever certas grandezas em termos das excitações elementares, mas é necessário considerarmos que as excitações tenham um tempo de vida finito.

Num sistema de muitas partículas que interagem entre si, as excitações elementares de baixa energia podem ser divididas em duas classes ⁽¹⁾ : excitações de quasi-partículas, que procedem das excitações de partícula única, e excitações coletivas, que surgem das correlações entre o movimento das partículas devido à interação entre elas. Esses modos coletivos de excitação são de grande importância na determinação da resposta do sistema a um estímulo externo e estão ausentes se não há interação entre as partículas.

1.1 - EXCITAÇÕES DE QUASI-PARTÍCULAS

Sabemos que, se um gás de partículas que não interagem entre si está no seu estado fundamental, podemos aumentar a energia de uma das partículas sem que isso afete em nada as demais. Esse processo é descrito então, como se fosse criada uma excitação elementar. Se aumentarmos agora a energia de outra partícula, as energias das excitações se somariam para dar a energia do sistema duplamente excitado acima do seu estado fundamental. Deste modo, estamos criando excitações de partículas. Mas, se levarmos em conta as interações entre as partículas do gás, devemos esperar que essas excitações de partículas vão decair, uma vez que a partícula excitada sofre espalhamento com as partículas não excitadas e portanto, sua energia e momentum seriam perdidos aos

poucos. Entretanto, se a energia das excitações for pequena e se as partículas obedecerem ao princípio de exclusão de Pauli, não haverá muitos estados vazios para os quais a partícula possa ser espalhada. Podemos considerar então, que a excitação tem um tempo de vida longo o suficiente, para que a descrição em termos de partículas seja adequada.

Em outras palavras, se uma partícula excitada se move através do sistema, ela empurra ou puxa as partículas de sua vizinhança e torna-se circundada por uma "nuvem" de partículas agitadas. A partícula real mais a "nuvem" ocasionada pela existência da interação entre as partículas, constituem a quasi-partícula. A "nuvem" de partículas protege a partícula real reduzindo muito o efeito de seu campo de força. Portanto, uma quasi-partícula interage fracamente com outras quasi-partículas e assim, podem ser consideradas como independentes entre si. A presença dessa "nuvem" de partículas também faz com que certas propriedades da quasi-partícula difiram daquelas da partícula real - por exemplo, massa efetiva e energia.

Podemos citar como sendo quasi-partículas, o polaron, o quasi-nucleon e o quasi-eletron.

1.2 - EXCITAÇÕES COLETIVAS

As excitações coletivas são os quanta associados com o movimento coletivo de grupos macroscópicos de partículas no sistema, isto é, com movimentos do sistema como um todo.

Um exemplo desse tipo de excitação são as ondas sonoras num sólido. Como as forças entre os átomos do sólido são muito fortes, não há nenhuma vantagem de se considerar o movimento de um átomo no cristal em termos do movimento de partículas indi

viduais. Qualquer momentum adquirido por um átomo é rapidamente transmitido a seus vizinhos e portanto, torna-se difícil dizer qual átomo foi inicialmente deslocado. Uma vez que as ondas sonoras num sólido possuem um tempo de vida suficientemente longo, é de grande interesse estudarmos o material em termos dessas excitações coletivas. A amplitude de tais movimentos é quantizada e um quantum da onda sonora é conhecido como um fonon. Outros exemplos de excitações coletivas em sistemas de muitas partículas são os plasmons, os magnons e os excitons.

1.3 - SUSCEPTIBILIDADE E RESPOSTA LINEAR⁽²⁻⁵⁾

Quando efetuamos um experimento qualquer em um sistema físico, estamos interessados na maneira pela qual o sistema vai reagir a esse estímulo externo. Se a interação entre o sistema e a excitação externa for suficientemente fraca, a resposta do sistema pode ser considerada linear⁽⁵⁾ e é calculada facilmente através da aplicação de uma teoria de perturbação.

Seja a hamiltoniana do sistema completo escrita como $H = H_0 + H_1$, onde H_0 é a hamiltoniana do sistema não perturbado, cuja equação de Schrödinger associada pode ser resolvida. O outro termo H_1 é considerado pequeno o suficiente para poder ser tratado como uma perturbação em H_0 . Assim, as autofunções e os autovalores para o sistema perturbado podem ser expandidos como séries de potências em H_1 . É mais conveniente escrever $H_1 = \lambda H'$, onde λ é uma constante real e constitui uma "medida" de quão pequena é a hamiltoniana de perturbação. Os autovalores e as autofunções de H são, naturalmente, funções de λ .

A equação de autovalores que desejamos resolver é

$H\Psi_n = E_n\Psi_n$. Vamos supor que se conheça a solução da equação de Schrödinger para o sistema não perturbado $H_0\Psi_n^{(0)} = E_n^{(0)}\Psi_n^{(0)}$, ou seja, já é conhecido o conjunto completo das autofunções $\Psi_n^{(0)}$ e respectivas energias $E_n^{(0)}$.

A idéia fundamental é assumir que tanto os autovalores quanto as autofunções de H possam ser expandidas em potências de λ , isto é,

$$E_n = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots$$

e (1.1)

$$\Psi_n = \Psi_n^{(0)} + \lambda \Psi_n^{(1)} + \lambda^2 \Psi_n^{(2)} + \dots$$

Portanto, se a perturbação sentida pelo sistema for fraca, é válido considerar apenas os dois primeiros termos das expansões (1.1), ou seja, $E_n \cong E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)}$ e $\Psi_n \cong \Psi_n^{(0)} + \lambda \Psi_n^{(1)}$. Nesse caso, a resposta do sistema ao estímulo externo será dita linear, correspondendo assim à teoria de perturbação de primeira ordem. Consequentemente, experimentos envolvendo "interações fracas" se constituem no método ideal para se estudar o comportamento de sistemas com muitas partículas.

Vamos supor que um sistema quântico esteja sujeito a uma perturbação externa $\phi(\vec{r}, t)$. Por exemplo, no caso de um sistema constituído por partículas carregadas eletricamente, um potencial eletromagnético externo aplicado é considerado como sendo uma perturbação. A simples existência dessa perturbação dará origem a uma flutuação $\rho(\vec{r}, t)$ na densidade do sistema:

$$\rho(\vec{r}, t) = \sum_{\vec{q}} \int d\omega \rho(\vec{q}, \omega) e^{i(\vec{q} \cdot \vec{r} - \omega t)} \quad , \quad (1.2)$$

onde cada componente de Fourier $\rho(\vec{q}, \omega)$ atua independentemente, ou seja, cada $\rho(\vec{q}, \omega)$ induz sua própria flutuação de densidade no sistema com vetor de onda $\vec{q}$ e frequência ω . A flutua

ção total é então representada pela equação (1.2).

Supondo uma aproximação linear, a resposta $\chi(\vec{q}, \omega)$ à perturbação será dada por :

$$\chi(\vec{q}, \omega) = \frac{\langle \rho(\vec{q}, \omega) \rangle}{\phi(\vec{q}, \omega)} \quad , \quad (1.3)$$

onde $\phi(\vec{q}, \omega)$ é a transformada de Fourier no espaço e no tempo do potencial $\phi(\vec{r}, t)$ e $\langle \rho(\vec{q}, \omega) \rangle$, que caracteriza a resposta do sistema, é o valor médio da componente de Fourier da flutuação de densidade. Logo, $\chi(\vec{q}, \omega)$ é a susceptibilidade generalizada do sistema.⁽²⁻⁴⁾

Digamos que esse sistema esteja inicialmente no seu estado fundamental e que a perturbação externa, considerada fraca, seja introduzida de maneira adiabática. Uma vez que estamos interessados somente na resposta linear do sistema, para calcularmos $\chi(\vec{q}, \omega)$ é suficiente usarmos teoria de perturbação de primeira ordem. Assim, obteremos a seguinte expressão para a susceptibilidade^(2,3) :

$$\chi(\vec{q}, \omega) = \sum_n \left| (\rho_{\vec{q}}^+)_{n0} \right|^2 \frac{2\omega_{n0}}{(\omega + i\eta)^2 - \omega_{n0}^2} \quad , \quad (1.4)$$

onde $(\rho_{\vec{q}}^+)_{n0}$ são os elementos de matriz entre as autofunções da hamiltoniana sem perturbação, sendo $\rho_{\vec{q}} = \sum_i \exp(-i\vec{q} \cdot \vec{r}_i)$ o operador densidade; e ω_{n0} são as correspondentes frequências de excitação $\omega_{n0} = (E_n - E_0)/\hbar$.

1.4 - FATOR DE ESTRUTURA^(2,3)

Para estudar certas propriedades de sistemas de muitos corpos utiliza-se frequentemente, experimentos relacionados com

o espalhamento inelástico de um feixe de partículas, pretendendo-se com isso, calcular a energia e a distribuição angular das partículas espalhadas. Como exemplo, podemos citar o espalhamento de elétrons com altas energias num sólido, ou de neutrons com baixas energias num líquido de hélio.

Suponhamos que o potencial de interação entre o sistema e o estímulo externo seja fraco e dependa somente da posição relativa das partículas do sistema e do feixe incidente. De acordo com a Regra de Ouro da teoria de perturbação de segunda ordem ⁽⁶⁾, a probabilidade por unidade de tempo $P(\vec{q}, \omega)$ de que uma partícula incidente transfira momentum $\hbar\vec{q}$ e energia $\hbar\omega$ para o sistema é dada por

$$P(\vec{q}, \omega) = 2\pi / |\phi_{\vec{q}}|^2 \sum_n |(\rho_{\vec{q}}^+)_{n0}|^2 \delta(\omega - \omega_{n0}) \quad , \quad (1.5)$$

onde $\phi_{\vec{q}}$ e $\rho_{\vec{q}}$ são respectivamente a transformada de Fourier da excitação externa e da densidade de partículas $\rho(\vec{r}) = \sum_i \delta(\vec{r} - \vec{r}_i)$. Assim, $(\rho_{\vec{q}}^+)_{n0}$ são os elementos de matriz da flutuação de densidade $\rho_{\vec{q}}^+$ tomados entre os autoestados do sistema de muitas partículas na ausência do estímulo externo. A função delta expressa a conservação de energia e $\omega_{n0} = (E_n - E_0)/\hbar$.

A probabilidade de transição (1.5) pode ser escrita como

$$P(\vec{q}, \omega) = 2\pi / |\phi_{\vec{q}}|^2 S(\vec{q}, \omega) \quad , \quad (1.6a)$$

onde o fator $S(\vec{q}, \omega)$ é definido por

$$S(\vec{q}, \omega) = \sum_n |(\rho_{\vec{q}}^+)_{n0}|^2 \delta(\omega - \omega_{n0}) \quad . \quad (1.6b)$$

O fator de estrutura dinâmico $S(\vec{q}, \omega)$ engloba todas as propriedades do sistema de muitos corpos que são relevantes no espalhamento do feixe de partículas. Ele representa a máxima informação que se pode obter sobre o comportamento do sistema, quando submetido a tal experimento. Além disso, o fator de estrutura dinâmico fornece uma medida direta do espectro de excitação das flutuações de densidade. Uma vez que para $T=0^\circ\text{K}$ todas as frequências de excitação ω_{n0} são necessariamente positivas, então $S(\vec{q}, \omega)$ será real e positivo mas em compensação será nulo para $\omega < 0$.

Em muitos casos, não é possível analisar a energia das partículas emergentes, podendo-se somente medir a seção de choque diferencial como uma função do ângulo de espalhamento θ . Se considerarmos também que o momentum e a energia transferidos durante o espalhamento sejam essencialmente independentes, a probabilidade correspondente tem a forma

$$\sigma(\theta) \propto |\phi_{\vec{q}}|^2 N S(\vec{q}) \quad , \quad (1.7)$$

onde o fator de estrutura estático do sistema é definido por

$$S(\vec{q}) = \frac{1}{N} \int_0^\infty d\omega S(\vec{q}, \omega) \quad , \quad (1.8)$$

sendo N o número total de partículas.

A relação entre o fator de estrutura $S(\vec{q})$ e a susceptibilidade $\chi(\vec{q}, \omega)$ é dada por

$$S(\vec{q}) = \frac{\hbar}{\pi \rho} \int_0^\infty d\omega \operatorname{Im} \chi(\vec{q}, \omega) \quad , \quad (1.9)$$

onde ρ é a densidade numérica de partículas.

1.5 - FUNÇÃO DE CORRELAÇÃO DOS PARES⁽⁷⁾

Suponhamos que uma partícula está fixa num dado ponto, que por conveniência, tomaremos como sendo a origem. Devido às interações existentes entre as partículas, a probabilidade de encontrar outras partículas ao redor da escolhida não é aleatória.

A função de correlação dos pares $g(r)$ pode ser pensada como sendo o fator que multiplica a densidade ρ do sistema, para dar a densidade local $\rho(r) = \rho g(r)$, ao redor de alguma partícula fixa. Assim, $\rho g(r) dr$ é igual ao número de partículas num certo elemento de volume dr , quando se considera uma partícula na origem.

Portanto, se não há interação entre as partículas, ou seja, se elas são independentes entre si, teremos que a densidade local não irá depender da posição da partícula considerada, isto é, $\rho(r) = \rho$, logo $g(r) = 1$. Por outro lado, se existem fortes forças repulsivas de curto alcance entre as partículas, $g(r)$ será menor do que a unidade nessa região. É importante notar que a função de correlação dos pares $g(r)$ é independente da origem somente em meios homogêneos.

De modo geral, podemos dizer que $g(r)$ expressa a probabilidade de que se uma partícula é observada na origem, outra partícula será encontrada em r .

Para um sistema onde o número de partículas é muito grande, o fator de estrutura $S(q)$ e a função de correlação dos pares $g(r)$ estão relacionados através da integral de Fourier, ou seja,

$$\frac{1}{\rho} [S(q) - 1] = \int dr e^{-iq \cdot r} [g(r) - 1] \quad (1.10)$$

1.6 - CONSTANTE DIELETRICA ⁽⁸⁾

Várias propriedades dos metais são calculadas através de um modelo de muitas partículas constituído por um gás de elétrons e um fundo positivo uniforme, que garante a neutralidade do sistema como um todo.

Vamos supor um campo elétrico longitudinal aplicado ao sistema de elétrons. O vetor deslocamento elétrico $\vec{D}$ está relacionado apenas com a densidade de carga externa ρ_{ext} (carga livre) introduzida no gás. Assim, pela equação de Poisson teremos que

$$\nabla \cdot \vec{D} = 4\pi \rho_{ext} \quad (1.11)$$

O campo externo atuará no sentido de polarizar o sistema de elétrons, ou seja, os elétrons serão deslocados no sentido oposto ao do campo, enquanto que seu efeito nos núcleos, muito mais pesados, pode ser desprezível. Cada íon adquire então um momento de dipolo elétrico com a mesma direção do campo aplicado. A flutuação de carga induzida produz um campo de polarização $\vec{P}$, que surge em resposta ao campo elétrico externo. Esta polarização não vai depender somente do campo elétrico, mas também das propriedades das moléculas que compõem tal sistema.

Assim, o campo elétrico total dentro do sistema é dado por

$$\vec{E} = \frac{\vec{D} - 4\pi \vec{P}}{\epsilon_0} \quad (1.12)$$

onde ϵ_0 é a permissividade do espaço livre.

O vetor $\vec{P}$ está relacionado somente com as cargas de

polarização, enquanto que o campo $\vec{E}$ está relacionado com todas as cargas presentes, ou seja, com a densidade de carga total.

Portanto,

$$\nabla \cdot \vec{E} = 4\pi \rho_{total} = 4\pi (\rho_{ext} + \rho_{ind}) \quad , \quad (1.13)$$

onde ρ_{total} é igual à soma da densidade de carga externa com a densidade de carga induzida.

Vamos supor que o campo elétrico externo seja suficientemente fraco para que a resposta dielétrica dos elétrons possa ser considerada como sendo proporcional ao campo $\vec{D}$. Assumindo que $\vec{E}$ seja somente proporcional a $\vec{D}$, isto é, desprezando os termos não lineares e como ambos são campos puramente longitudinais, podemos escrever :

$$\vec{D} = \epsilon \vec{E} \quad , \quad (1.14)$$

onde a constante de proporcionalidade, chamada constante dielétrica do sistema, depende do vetor de onda $\vec{q}$ e da frequência ω do campo elétrico aplicado, ou seja, $\epsilon = \epsilon(\vec{q}, \omega)$.

A constante dielétrica é uma importante grandeza no estudo de propriedades físicas de um sistema de muitos corpos.

Através de $\epsilon(\vec{q}, \omega)$, que fornece uma medida direta da resposta de um sistema a um campo elétrico aplicado, podemos estudar certas propriedades do gás de elétrons, como por exemplo, a energia do estado fundamental, a função de correlação dos pares, o fator de estrutura estático e dinâmico e outras propriedades que dependem fortemente das interações elétron-elétron.

1.7 - APROXIMAÇÃO DO CAMPO AUTOCONSISTENTE

Singwi e seus colaboradores ^(9,10) desenvolveram o método do campo autoconsistente (SCFA) para o cálculo da constante dielétrica e do fator de estrutura num sistema de um gás de elétrons tridimensional na região de densidades metálicas(isto é, para valores $r_s = r_0/a_0$ tais que $2 < r_s < 6$ onde r_0 é a separação média entre as partículas e a_0 é o raio de Bohr para o elétron).

Nessa teoria são consideradas, de forma aproximada, as interações de curto alcance devidas ao potencial de Coulomb e de troca. Tais interações são responsáveis pelo aparecimento de certas correções de campo local. Isso porque, ao se levar em conta as correlações de curto alcance, ocorre uma diminuição da densidade eletrônica ao redor de cada partícula associada à repulsão de troca(exchange hole) e à repulsão coulombiana (Coulomb hole). Porisso, o campo efetivo que atua sobre cada partícula não é igual ao campo médio macroscópico, sendo essa diferença a correção de campo local.

Anteriormente à SCFA outras aproximações foram desenvolvidas, porém seus resultados, em um sistema tridimensional de elétrons na região de densidades metálicas, são bastante insatisfatórios. Nesta situação encontram-se métodos comumente utilizados, como a aproximação das fases aleatórias (RPA) e a aproximação de Hubbard.

1.8 - APROXIMAÇÃO RPA ⁽¹¹⁾

A aproximação das fases aleatórias (RPA) consiste em desprezar, numa soma de exponenciais com diferentes fases, os ter

mos de fases aleatórias, quando comparados com N , o número total de partículas.

Nesta teoria não é considerada nenhuma correção de campo local, resultando numa superestimação da energia de correlação entre as partículas. Isso ocorre porque na aproximação RPA não é feita a distinção entre a contribuição proveniente dos elétrons de spins paralelos e antiparalelos para o efeito de correlação. Por outro lado, uma vez que o princípio de exclusão de Pauli faz com que os elétrons de spins paralelos fiquem afastados uns dos outros, o que se espera é que estes não sintam a parte de curto alcance da interação coulombiana. Portanto, num sistema com baixa densidade e grande transferência de momentum, a interação de troca cancela a parte do processo atribuída à interação dos elétrons com spins paralelos, ou seja, aproximadamente metade da interação direta. Como resultado deste fato, a principal contribuição para a energia de correlação é devida somente à interação entre os elétrons de spins antiparalelos.

Assim sendo, em sistemas com densidades metálicas onde as contribuições das grandes transferências de momentum tornam-se apreciáveis, devemos ir além da aproximação RPA para obtermos bons resultados.

A validade do método RPA se restringe ao limite de altas densidades ($r_s \ll 1$) e baixas transferências de momentum, onde somente a parte de longo alcance da interação coulombiana torna-se importante e os termos de troca não são consideráveis. Como exemplo, podemos citar a boa descrição dada pela RPA para os fenômenos de blindagem a grandes comprimentos de onda e para os modos de excitação de plasmons⁽⁹⁾.

1.9 - APROXIMAÇÃO DE HUBBARD⁽¹²⁾

Hubbard propôs uma modificação na RPA, com o objetivo de melhorar os resultados até então obtidos para a energia de correlação do gás de elétrons em densidades metálicas. Em sua aproximação são incluídas correções de campo local relacionadas unicamente com a interação de troca no método de Hartree-Fock. Portanto, são apenas consideradas as correlações dos elétrons com spins paralelos devidas ao princípio de Pauli e são totalmente desprezadas as correlações de Coulomb, cujo efeito consiste em relacionar os movimentos eletrônicos individuais a fim de reduzir a probabilidade de dois elétrons se aproximarem.

CAPÍTULO II

MÉTODO DO CAMPO AUTOCONSISTENTE (SCFA)

O estudo de sistemas de muitos corpos baseia-se no conhecimento das forças entre as partículas, ou seja, de que maneira a inclusão do potencial entre elas afeta o comportamento do sistema. A dificuldade é que temos, em estado sólido, um grande número de partículas por cm^3 e portanto torna-se necessário que se procure desenvolver modelos aproximados para resolver tais sistemas.

Para tratar esse problema, Singwi e seus colaboradores^(9,10) desenvolveram o método do campo autoconsistente (SCFA) para estudar o gás de elétrons tridimensional na região de densidades metálicas. Esse método foi aplicado a outros sistemas clássicos e quânticos com interações descritas por potenciais singulares⁽¹³⁾. E os resultados obtidos são muito mais satisfatórios comparados àqueles conseguidos através de outras aproximações, em especial, a aproximação de Hubbard⁽¹²⁾ e a aproximação das fases aleatórias (RPA)⁽¹¹⁾, comumente utilizadas na teoria de muitas partículas.

A ineficiência da RPA para o estudo das propriedades de um gás de elétrons se manifesta principalmente nos resultados obtidos para a função de correlação dos pares $g(\vec{r})$, que nesse caso apresenta valores bastante negativos para pequenas separações de partículas em densidades metálicas ($2 \leq r_s \leq 6$). Entretanto, como $g(\vec{r})$ exprime a probabilidade de se encontrar duas partículas separadas por uma distância $\vec{r}$, essa função deveria ser sempre positiva.

Para altas densidades de elétrons ($r_s \ll 1$) a aproximação RPA dá bons resultados, já que nesse caso a influência dos

termos de troca e de curto alcance na interação coulombiana não é significativa.

Tentando melhorar os resultados conseguidos através da RPA para a energia de correlação do gás de elétrons em densidades metálicas, Hubbard incluiu correções de campo local somente associadas com a interação de troca na aproximação de Hartree-Fock⁽¹⁴⁾. Mas os resultados, embora um pouco melhores que os de RPA, não são ainda satisfatórios, uma vez que a função $g(\vec{r})$ permanece bastante negativa para pequenos valores da distância entre as partículas na região de densidades metálicas, o que não é admissível.

Singwi et al. propuseram então, um método de campo autoconsistente (SCFA) para o cálculo de propriedades de um gás de elétrons degenerado em densidades metálicas, com o objetivo de melhorar os resultados obtidos por outras aproximações.

Em SCFA são consideradas, de modo aproximado, as correlações de curto alcance devidas ao potencial de Coulomb e de troca através de uma correção de campo local (como definida por Nozières e Pines⁽¹⁵⁾), que depende da função de correlação dos pares $g(\vec{r})$.

A aproximação SCFA introduz nos cálculos um potencial efetivo autoconsistente $\psi(\vec{q})$, que representa a interação entre as partículas do sistema. Este potencial permite relacionar a constante dielétrica $\epsilon(\vec{q}, \omega)$ com o fator de estrutura $S(\vec{q})$, formando portanto, um esquema de equações cuja solução é obtida de modo autoconsistente.

Esta aproximação aplicada a um gás de elétrons na região de densidades metálicas, apresenta resultados bastante satisfatórios⁽⁹⁾. Com relação à função de correlação dos pares $g(\vec{r})$, o que se nota é que para pequenas separações entre as partículas,

seu valor é sempre positivo ou levemente negativo (em módulo é cerca de 40 a 80 vezes menor do que os valores preditos por Hubbard e RPA, respectivamente).

2.1 - APROXIMAÇÃO SEMI-CLÁSSICA

Se considerarmos um sistema clássico, a hipótese fundamental da aproximação SCFA consiste em substituir a função distribuição de duas partículas $f^{(2)}(\vec{r}, \vec{p}; \vec{r}', \vec{p}'/t)$ pelo produto das funções distribuição de cada partícula, introduzindo-se nesse desacoplamento a função correlação estática de equilíbrio dos pares $g^0(|\vec{r}-\vec{r}'|)$. Essa função de correlação expressa a probabilidade combinada de termos uma partícula na posição $\vec{r}$ e outra em $\vec{r}'$, levando-se assim em conta, as correlações de curto alcance do sistema.

Podemos escrever então

$$f^{(2)}(\vec{r}, \vec{p}; \vec{r}', \vec{p}'/t) = f^{(1)}(\vec{r}, \vec{p}/t) f^{(1)}(\vec{r}', \vec{p}'/t) g^0(|\vec{r}-\vec{r}'|) \quad (2.1)$$

Dessa forma, consegue-se quebrar a sequência infinita relacionando a função distribuição de N partículas com a função distribuição de (N + 1) partículas.

A justificativa da introdução da função de correlação estática na expressão da função distribuição de duas partículas será feita a posteriori, através dos resultados obtidos. A expressão mais simples que se poderia supor para $f^{(2)}(\vec{r}, \vec{p}; \vec{r}', \vec{p}'/t)$ seria considerar somente o produto das funções distribuição de cada partícula, o que corresponderia à aproximação RPA.

A hamiltoniana clássica de N partículas interagindo entre si através do potencial $\phi(|\vec{r}-\vec{r}'|)$ e na presença de um poten-

cial externo $\phi_{ext}(\vec{r}, t)$ é

$$H = \sum_{i=1}^N H_i \quad , \quad (2.2)$$

onde a hamiltoniana de cada partícula é expressa por:

$$H_i = \frac{\vec{p}_i^2}{2m} + \phi_{ext}(\vec{r}_i, t) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j}^N \phi(\vec{r}_i - \vec{r}_j) \quad . \quad (2.3)$$

Não há necessidade de explicitarmos agora qual a forma da interação $\phi(\vec{r}_i - \vec{r}_j)$ dos pares de partículas. No caso de um gás de elétrons, por exemplo, essa interação é a coulombiana.

A equação de Liouville não relativística para a função distribuição de N partículas $f^{(N)}(\vec{r}_1, \vec{p}_1; \vec{r}_2, \vec{p}_2; \dots \vec{r}_N, \vec{p}_N/t)$ pode ser escrita como ⁽¹⁶⁾:

$$\frac{\partial}{\partial t} f^{(N)} + \sum_{i=1}^N \left(\nabla_{\vec{r}_i} f^{(N)} \cdot \nabla_{\vec{p}_i} H_i - \nabla_{\vec{p}_i} f^{(N)} \cdot \nabla_{\vec{r}_i} H_i \right) = 0 \quad , \quad (2.4)$$

onde $f^{(N)} \equiv f^{(N)}(\vec{r}_1, \vec{p}_1; \vec{r}_2, \vec{p}_2; \dots \vec{r}_N, \vec{p}_N/t)$,

H_i é dada pela equação (2.3) e os outros símbolos têm o seu significado usual.

A equação de movimento para a função distribuição clássica de uma partícula $f^{(1)}(\vec{r}, \vec{p}/t)$ na presença de um potencial externo é obtida pela integração da equação de Liouville nas coordenadas e momenta de N - 1 partículas, ou seja,

(2.5)

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} f^{(1)}(\vec{r}, \vec{p}/t) + \vec{v} \cdot \nabla_{\vec{r}} f^{(1)}(\vec{r}, \vec{p}/t) - \nabla_{\vec{r}} \phi(\vec{r}, t) \cdot \nabla_{\vec{p}} f^{(1)}(\vec{r}, \vec{p}/t) - \\ - \int d\vec{r}' d\vec{p}' \nabla_{\vec{r}} \phi(\vec{r} - \vec{r}') \cdot \nabla_{\vec{p}} f^{(2)}(\vec{r}, \vec{p}; \vec{r}', \vec{p}'/t) = 0 , \end{aligned}$$

que depende da função distribuição de duas partículas $f^{(2)}(\vec{r}, \vec{p}; \vec{r}', \vec{p}'/t)$.

Obtendo a equação de movimento para $f^{(2)}(\vec{r}, \vec{p}; \vec{r}', \vec{p}'/t)$ vemos que

esta vai depender da função distribuição de três partículas e assim sucessivamente. Cria-se dessa forma, um conjunto infinito de equações, onde cada uma delas depende da próxima para sua solução.

Na aproximação SCFA esta sequência infinita de equações é truncada, desacoplando a função distribuição de duas partículas em um produto de duas funções distribuição de uma partícula e uma função de correlação dos pares (equação(2.1)). Desse modo, as correlações de curto alcance do sistema são consideradas, aproximadamente, através da função $g(|\vec{r}-\vec{r}'|)$.

Fazendo $g(\vec{r}) = 1$ para todo $\vec{r}$ na equação(2.1), obteremos o desacoplamento usado na aproximação RPA, uma vez que, desse modo, não estão sendo levadas em conta as correlações entre as partículas.

Considerando um potencial externo fraco, podemos escrever a função distribuição de uma partícula como :

$$f^{(1)}(\vec{r}, \vec{p}/t) = f_0(\vec{p}) + f_1(\vec{r}, \vec{p}/t) \quad , \quad (2.6)$$

onde $f_0(\vec{p})$ é a função distribuição de equilíbrio e $f_1(\vec{r}, \vec{p}/t)$ representa a variação de $f_0(\vec{p})$ induzida pelo potencial externo fraco.

Usando as equações (2.1) e (2.6), podemos linearizar a equação de movimento (2.5) obtendo (vide apêndice I) :

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla_{\vec{r}} \right] f_1(\vec{r}, \vec{p}/t) - \nabla_{\vec{r}} \left[\phi(\vec{r}, t) + \int d\vec{r}' n(\vec{r}', t) \psi(\vec{r}-\vec{r}') \right] \cdot \nabla_{\vec{p}} f_0(\vec{p}) = 0 \quad (2.7)$$

sendo

$$\nabla_{\vec{r}} \psi(\vec{r}-\vec{r}') = g(\vec{r}-\vec{r}') \nabla_{\vec{r}} \phi(\vec{r}-\vec{r}') \quad (2.8)$$

e $n(\vec{r}, t) = \int d\vec{p} f_i(\vec{r}, \vec{p}/t)$ é a densidade de partículas induzidas em $(\vec{r}, t)$.

Assim, o campo efetivo que age sobre uma partícula é dado por

$$\vec{E}_{ef}(\vec{r}, t) = -\nabla_{\vec{r}} \phi(\vec{r}, t) - \int d\vec{r}' \nabla_{\vec{r}} \phi(\vec{r} - \vec{r}') n(\vec{r}', t) - \int d\vec{r}' [g(\vec{r} - \vec{r}') - 1] \nabla_{\vec{r}} \phi(\vec{r} - \vec{r}') n(\vec{r}', t) \quad (2.9)$$

Os dois primeiros termos do lado direito da Eq.(2.9) correspondem ao campo efetivo na aproximação RPA, ou seja, o campo macroscópico usual composto pelo campo externo e o termo de campo médio de interação entre as partículas. O último termo corresponde, na aproximação SCFA, à correção de campo local. Portanto, neste termo já estão incorporadas as correlações de curto alcance do sistema.

Devido à linearidade da Eq.(2.7), podemos tomar uma única componente de Fourier do potencial externo para encontrar sua solução, isto é,

$$\phi_{ext}(\vec{r}, t) = \phi_{ext}(\vec{q}, \omega) e^{i(\vec{q} \cdot \vec{r} - \omega t)} + c.c. \quad (2.10)$$

A susceptibilidade do sistema com interação, calculada a partir da densidade de carga induzida⁽²⁾ na aproximação SCFA, é expressa em termos do potencial efetivo autoconsistente $\psi(\vec{q})$ e da susceptibilidade do gás sem interação $\chi^0(\vec{q}, \omega^*)$:

$$\chi(\vec{q}, \omega^*) = \frac{\chi^0(\vec{q}, \omega^*)}{1 - \psi(\vec{q}) \chi^0(\vec{q}, \omega^*)} \quad (2.11)$$

onde $\omega^* = \omega + i\eta$ é a frequência complexa e $\vec{q}$ é o vetor de onda.

O potencial efetivo $\mathcal{V}(\vec{q})$ é obtido a partir da transformada de Fourier do potencial de interação entre as partículas $\phi(\vec{q})$ e da função de correlação estática de equilíbrio dos pares $g(\vec{r})$ através da equação (2.8). Para um sistema clássico de gás de elétrons onde o potencial de interação é coulombiano, $\phi(\vec{q}) = 4\pi e^2/q^2$, obtemos que o potencial efetivo autoconsistente $\mathcal{V}(\vec{q})$ é simplesmente dado por (vide apêndice I) :

$$\mathcal{V}(\vec{q}) = \phi(\vec{q}) [1 - G(\vec{q})] \quad , \quad (2.12)$$

onde

$$G(\vec{q}) = -\frac{1}{\rho} \int \frac{d\vec{q}'}{(2\pi)^3} \frac{\vec{q} \cdot \vec{q}'}{q'^2} [S(\vec{q} - \vec{q}') - 1] \quad (2.13)$$

é a correção de campo local, sendo ρ a densidade numérica de partículas.

A constante dielétrica $\epsilon(\vec{q}, \omega^*)$ é dada pela expressão

$$\epsilon(\vec{q}, \omega^*) = \frac{1}{1 + \phi(\vec{q}) \chi(\vec{q}, \omega^*)} \quad , \quad (2.14)$$

e assim, pela Eq. (2.11) obtemos :

$$\epsilon(\vec{q}, \omega^*) = 1 - \phi(\vec{q}) \frac{\chi^0(\vec{q}, \omega^*)}{1 + \phi(\vec{q}) G(\vec{q}) \chi^0(\vec{q}, \omega^*)} \quad \dots (2.15)$$

O fator de estrutura $S(\vec{q})$ pode ser calculado a partir da susceptibilidade completa do sistema ⁽³⁾ :

$$S(\vec{q}) = -\frac{\hbar}{\pi \rho} \int_0^\infty d\omega \operatorname{Im} \chi(\vec{q}, \omega) \quad . \quad (2.16)$$

E pela Eq. (2.14) encontramos que

$$S(\vec{q}) = \frac{\hbar}{\pi \rho \Phi(\vec{q})} \int_0^\infty d\omega \operatorname{Im} [E(\vec{q}, \omega)]^{-1} \quad (2.17)$$

As correlações de curto alcance do sistema com densidade ρ são descritas diretamente pela função de correlação dos pares $g(\vec{r})$, que é obtida da transformada de Fourier do fator de estrutura $S(\vec{q})$, ou seja,

$$g(\vec{r}) = 1 + \frac{1}{(2\pi)^3 \rho} \int d\vec{q} e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} [S(\vec{q}) - 1] \quad (2.18)$$

Chegamos então, a um conjunto fechado formado pelas Eqs.(2.13), (2.15) e (2.17). Resolvendo essas equações de modo autoconsistente, obteremos o fator de estrutura $S(\vec{q})$ para o sistema considerado. Assim, a função $g(\vec{r})$ será calculada usando-se na Eq.(2.18) o fator de estrutura obtido.

Cabe ressaltar que apesar do método SCFA ter sido desenvolvido para um potencial específico (no caso, o coulombiano), podemos utilizar tal método para outros tipos de potenciais de interação entre as partículas, até mesmo para aqueles que apresentam singularidades.

Das Eqs.(2.12) e (2.13) vemos que, de modo geral, o potencial efetivo é dado pela expressão

$$\mathcal{V}(\vec{q}) = \Phi(\vec{q}) + \frac{1}{(2\pi)^3 \rho} \int d\vec{q}' \frac{\vec{q} \cdot \vec{q}'}{(\vec{q})^2} \Phi(\vec{q}') [S(\vec{q} - \vec{q}') - 1] \quad , \quad (2.19)$$

que envolve diretamente a transformada de Fourier do potencial de interação.

Mas, através da Eq.(2.8), encontramos que $\mathcal{V}(\vec{q})$ também pode ser escrito como

$$\psi(\vec{q}) = \frac{-i\vec{q}}{q^2} \int e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} g(r) \nabla_{\vec{r}} \phi(r) d\vec{r} \quad (2.20)$$

ou, para potenciais com simetria esférica,

$$\psi(q) = -\frac{4\pi}{q} \int_0^\infty g(r) r^2 \frac{d\phi(r)}{dr} j_1(qr) dr \quad (2.21)$$

onde $j_1(x) = (\sin x - x \cos x)/x^2$ é a função de Bessel de primeira ordem.

Como podemos ver, a Eq.(2.21) depende somente da função de correlação entre as partículas $g(r)$ e da derivada do potencial real $\phi(r)$. Assim, para calcularmos $\psi(\vec{q})$, basta que $\phi(r)$ seja diferenciável e que o integrando permaneça finito.

2.2 - CASO QUÂNTICO

Vamos considerar um sistema neutro de volume unitário formado por N elétrons de massa m e por uma distribuição uniforme (fixa) de cargas positivas.

Sabemos que a hamiltoniana para esse sistema é :

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j}^N \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \quad (2.22)$$

Expandindo a energia potencial coulombiana dos elétrons em série de Fourier⁽¹⁴⁾, teremos que

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m} + \sum_{i \neq j}^N \sum_{\vec{q}}' \frac{2\pi e^2}{q^2} e^{i\vec{q}\cdot(\vec{r}_i - \vec{r}_j)} \quad (2.23)$$

onde o símbolo $\sum'$ denota que os termos com $\vec{q} = 0$ são ex-

cluídos do somatório, uma vez que estes são cancelados pelo efeito do fundo positivo.

Considerando os elétrons como partículas pontuais, a densidade de carga eletrônica presente num dado instante pode ser escrita como $-e\rho(\vec{r})$,

onde

$$\rho(\vec{r}) = \sum_{i=1}^N \delta(\vec{r} - \vec{r}_i) \quad , \quad (2.24)$$

com $\delta(\vec{r} - \vec{r}_i)$ = função delta de Dirac tridimensional.

A função densidade de partícula $\rho(\vec{r})$ pode ser expandida em série de Fourier :

$$\rho(\vec{r}) = \sum_{\vec{q}} \rho_{\vec{q}} e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} \quad , \quad (2.25)$$

onde

$$\rho_{\vec{q}} = \int \rho(\vec{r}) e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}} d\vec{r} = \sum_{i=1}^N e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}_i} \quad (2.26)$$

é chamada de matriz densidade.

Assim, a Eq.(2.23) fica :

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m} + \sum_{\vec{q}}' \frac{2\pi e^2}{q^2} (\rho_{\vec{q}}^+ \rho_{\vec{q}} - N) \quad , \quad (2.27)$$

onde o fator N é subtraído porque queremos considerar apenas os termos $i \neq j$.

Da mecânica quântica, temos que

$$\frac{d}{dt} \rho_{\vec{q}} \equiv \dot{\rho}_{\vec{q}} = \frac{1}{i\hbar} [\rho_{\vec{q}}, H] \quad (2.28a)$$

Logo,

$$\dot{\rho}_{\vec{q}} = -i \sum_{i=1}^N e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}_i} \left(\vec{q} \cdot \vec{v}_i - \frac{\hbar q^2}{2m} \right) \quad , \quad (2.28b)$$

onde $\vec{v}_i = \vec{p}_i/m = \dot{\vec{r}}_i$ é a velocidade do i-ésimo elétron.

Portanto,

$$\ddot{\vec{r}}_{\vec{q}} = - \sum_{i=1}^N \left(\frac{\vec{q} \cdot \vec{p}_i}{m} + \frac{\hbar q^2}{2m} \right) e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}_i} - \sum_{\vec{q}'} \frac{4\pi e^2}{(q')^2} \frac{\vec{q} \cdot \vec{q}'}{m} \rho_{\vec{q}'} \rho_{\vec{q}-\vec{q}'}, \quad (2.29)$$

onde usamos o fato de que $\dot{\vec{r}}_i$ é dada pela equação de movimento

$$m \dot{\vec{r}}_i = - \nabla_i \sum_{j \neq i} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} = - 4\pi e^2 i \sum_{j=1}^N \sum_{\vec{q}} \frac{\vec{q}}{q^2} e^{i\vec{q} \cdot (\vec{r}_i - \vec{r}_j)}. \quad (2.30)$$

O primeiro termo do lado direito da Eq.(2.29) vem da energia cinética das partículas e o segundo surge da interação entre elas. Este último termo pode ser decomposto em duas partes: uma para $\vec{q} = \vec{q}'$ e a outra formada pelo somatório com $\vec{q} \neq \vec{q}'$, ou seja,

$$\begin{aligned} \sum_{\vec{q}'} \frac{4\pi e^2}{(q')^2} \frac{\vec{q} \cdot \vec{q}'}{m} \rho_{\vec{q}'} \rho_{\vec{q}-\vec{q}'} &= \frac{4\pi e^2}{m} N \rho_{\vec{q}} + \\ &+ \sum_{\vec{q}' \neq \vec{q}} \frac{4\pi e^2}{(q')^2} \frac{\vec{q} \cdot \vec{q}'}{m} \rho_{\vec{q}'} \rho_{\vec{q}-\vec{q}'} \end{aligned} \quad (2.31)$$

Assim, a Eq.(2.29) fica

$$\begin{aligned} \ddot{\vec{r}}_{\vec{q}} &= - \sum_{i=1}^N \left(\frac{\vec{q} \cdot \vec{p}_i}{m} + \frac{\hbar q^2}{2m} \right) e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}_i} - \omega_p^2 \rho_{\vec{q}} - \\ &- \sum_{\vec{q}' \neq \vec{q}} \phi(\vec{q}') \frac{\vec{q} \cdot \vec{q}'}{m} \rho_{\vec{q}'} \rho_{\vec{q}-\vec{q}'} \end{aligned} \quad (2.32)$$

onde

$$\omega_p = \left(\frac{4\pi e^2 N}{m} \right)^{1/2} \quad \text{é a frequência de plasma}$$

e

$$\phi(\vec{q}') = \frac{4\pi e^2}{(q')^2} \quad \text{é a transformada de Fourier do potencial coulombiano.}$$

Somente o primeiro e segundo termo do lado direito da

Eq.(2.32) são considerados na aproximação RPA, enquanto que o terceiro termo, correspondente a uma correção de campo local, só é levado em conta na aproximação SCFA.

Segundo RPA, o último termo é excluído uma vez que, sendo os fatores de fase $e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}_i}$ números complexos cujo módulo é 1, $\rho_{\vec{q}}$ será igual à soma de uma grande quantidade de vetores unitários com direções aleatórias no plano complexo - para cada vetor com uma dada direção, deve haver outro numa direção oposta, de modo que a resultante será desprezível. Portanto, de acordo com a aproximação RPA, o último somatório da Eq.(2.32), que apresenta produtos de matrizes de densidade $\rho_{\vec{q}}\rho_{\vec{q}-\vec{q}'}$, será irrelevante em relação ao termo $\omega_p^2\rho_{\vec{q}}$, pelo menos para pequenos valores de $\vec{q}$. Se esses valores forem suficientemente pequenos a ponto de poder ser também desprezado o primeiro somatório, teremos que

$$\ddot{\rho}_{\vec{q}} + \omega_p^2 \rho_{\vec{q}} = 0 \quad (2.33)$$

Assim, $\rho_{\vec{q}}$ oscilará com a frequência de plasma ω_p .

Através da Eq.(2.26) obteremos :

$$\begin{aligned} \rho_{\vec{q}}\rho_{\vec{q}-\vec{q}'} &= \left(\sum_{i=1}^N e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}_i} \right) \left(\sum_{j=1}^N e^{-i(\vec{q}-\vec{q}')\cdot\vec{r}_j} \right) = \\ &= \left(\sum_{i=1}^N e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}_i} \right) \left(\sum_{j=1}^N e^{-i(\vec{q}'-\vec{q})\cdot(\vec{r}_i-\vec{r}_j)} \right) \end{aligned} \quad (2.34)$$

Substituindo o somatório em j pela média estática nas N partículas teremos que

$$\rho_{\vec{q}}\rho_{\vec{q}-\vec{q}'} = \rho_{\vec{q}} S(\vec{q}-\vec{q}') \quad (2.35)$$

Portanto, a equação de movimento para $\rho_{\vec{q}}$ pode ser

reescrita como :

$$\tilde{\vec{p}}_i = - \sum_{i=1}^N \left(\frac{\vec{q} \cdot \vec{p}_i}{m} + \frac{\hbar q^2}{2m} \right) e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}_i} - \psi(\vec{q}) \frac{q^2}{m} N(\vec{q}) \quad , \quad (2.36)$$

onde

$$\psi(\vec{q}) = \phi(\vec{q}) + \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}' \neq \vec{q}} \phi(\vec{q}') \frac{\vec{q} \cdot \vec{q}'}{q^2} [S(\vec{q} - \vec{q}') - 1] \quad , \quad (2.37)$$

é análoga à Eq.(2.19) para o caso clássico e $\phi(\vec{q})$ é a transformada de Fourier do potencial real de interação entre as partículas.

Se a interação entre as partículas é coulombiana, o potencial efetivo será dado por

$$\psi(\vec{q}) = \phi(\vec{q}) [1 - G(\vec{q})] \quad , \quad (2.38)$$

onde

$$G(\vec{q}) = -\frac{1}{N} \sum_{\vec{q}' \neq \vec{q}} \frac{\vec{q} \cdot \vec{q}'}{q^2} [S(\vec{q} - \vec{q}') - 1] \quad . \quad (2.39)$$

Se considerarmos $G(\vec{q}) = 0$, correspondente à aproximação de ordem zero em SCFA, a Eq.(2.38) se reduz à expressão para o potencial efetivo da RPA. Mas, se tomarmos o valor do fator de estrutura $S(\vec{q})$ de Hartree-Fock na Eq.(2.13), o que significa desprezarmos as interações de Coulomb, obteremos o potencial efetivo $G(\vec{q})$ e consequentemente a constante dielétrica $\epsilon(\vec{q}, \omega)$ na aproximação de Hubbard.

Tanto as expressões para a susceptibilidade $\chi(\vec{q}, \omega)$ quanto para a constante dielétrica $\epsilon(\vec{q}, \omega)$ na aproximação SCFA no caso quântico são análogas àsquelas obtidas para o caso clássico, ou seja, Eqs.(2.11) e (2.15) respectivamente.

Portanto, o esquema autoconsistente do método SCFA fica então formado pelas equações (2.13), (2.15) e (2.17).

CAPÍTULO III

MÉTODO DO CAMPO AUTOCONSISTENTE APLICADO
A UM SISTEMA DE BOSONS

O método do campo autoconsistente (SCFA) utilizado no estudo de um gás de elétrons degenerado, pode também ser estendido para sistemas de bosons em geral.

Pretendemos agora aplicar o método (SCFA) para um sistema tridimensional de bosons ($T = 0^\circ K$) formado por partículas sujeitas a um potencial repulsivo constante até uma certa distância r_c e do tipo coulombiano $1/r$ para distâncias maiores. Obteremos então, um esquema fechado de equações autoconsistentes envolvendo o potencial efetivo $V(\vec{q})$ e o fator de estrutura $S(\vec{q})$. A energia das excitações elementares $E(\vec{q})$ e a função de correlação dos pares $g(\vec{r})$ são calculadas através do fator de estrutura autoconsistente.

Como já mostramos anteriormente, a aproximação SCFA tem a característica de fornecer na sua primeira iteração os resultados correspondentes à aproximação RPA. Dessa forma, nos cálculos levados a efeito, vamos obter inicialmente os resultados da RPA e a seguir os da SCFA, sendo possível então, efetuarmos a comparação dos mesmos.

3.1 - CASO GERAL

A susceptibilidade completa do gás com interação é dada por

$$\chi(\vec{q}, \omega) = \frac{\chi^0(\vec{q}, \omega^*)}{1 - V(\vec{q}) \chi^0(\vec{q}, \omega^*)}, \quad (3.1)$$

onde $\psi(\vec{q})$ é o potencial efetivo de interação, $\omega^* = \omega + i\eta$ é a frequência complexa e $\chi^0(\vec{q}, \omega^*)$ é a susceptibilidade do gás livre, que para o caso de bosons é escrita como :

$$\chi^0(\vec{q}, \omega^*) = \frac{2\rho E(\vec{q})}{(\hbar\omega^*)^2 - [E(\vec{q})]^2}, \quad (3.2)$$

onde ρ é a densidade do gás e $E(\vec{q})$ é a energia de partícula única dada por $\hbar^2 q^2 / 2m$.

Portanto, a susceptibilidade do gás com interação fica

$$\chi(\vec{q}, \omega^*) = \frac{2\rho E(\vec{q})}{(\hbar\omega^*)^2 - [E(\vec{q})]^2 - 2\rho E(\vec{q})\psi(\vec{q})}. \quad (3.3)$$

Assim, a susceptibilidade $\chi(\vec{q}, \omega^*)$ apresenta polos que correspondem às frequências $\omega_0(\vec{q})$ que anulam o denominador, correspondendo conseqüentemente a excitações coletivas no sistema.

De acordo com a Eq.(3.3), esses polos vão acontecer quando

$$[\hbar\omega_0(\vec{q})]^2 - [E(\vec{q})]^2 - 2\rho E(\vec{q})\psi(\vec{q}) = 0, \quad (3.4)$$

sendo então a energia das excitações de modo coletivo dada por :

$$E(\vec{q}) = \hbar\omega_0(\vec{q}) = E(\vec{q}) \sqrt{1 + \frac{2\rho}{E(\vec{q})} \psi(\vec{q})} \quad (3.5)$$

Usando a Eq.(3.4), podemos escrever a susceptibilidade como

$$\chi(\vec{q}, \omega^*) = \frac{2\rho E(\vec{q})}{(\hbar\omega^*)^2 - [\hbar\omega_0(\vec{q})]^2} = \frac{2\rho E(\vec{q})}{(\hbar\omega^*)^2 - [E(\vec{q})]^2}, \quad (3.6)$$

onde $\chi(\vec{q}, \omega^*) = \text{Re} \chi(\vec{q}, \omega) + i \text{Im} \chi(\vec{q}, \omega)$,
e portanto, obtemos que

$$\text{Re} \chi(\vec{q}, \omega) = \frac{2\rho \epsilon(\vec{q}) \{(\hbar\omega)^2 - (\hbar\eta)^2 - [E(\vec{q})]^2\}}{\{(\hbar\omega)^2 - (\hbar\eta)^2 - [E(\vec{q})]^2\}^2 + 4(\hbar^2\omega\eta)^2} \quad (3.7)$$

e

$$\text{Im} \chi(\vec{q}, \omega) = \frac{-4\rho \hbar^2 \omega \eta \epsilon(\vec{q})}{\{(\hbar\omega)^2 - (\hbar\eta)^2 - [E(\vec{q})]^2\}^2 + 4(\hbar^2\omega\eta)^2} \quad (3.8)$$

Por outro lado, o fator de estrutura $S(\vec{q})$ está relacionado com a susceptibilidade da forma

$$S(\vec{q}) = -\frac{\hbar}{\pi\rho} \int_0^\infty d\omega \text{Im} \chi(\vec{q}, \omega) \quad (3.9)$$

Usando então as Eqs. (3.8) e (3.9) para $\eta \rightarrow 0$, obteremos a expressão de Feynman⁽¹⁷⁾ (vide apêndice II) :

$$E(\vec{q}) = \frac{\epsilon(\vec{q})}{S(\vec{q})} \quad (3.10)$$

e assim, o fator de estrutura pode ser escrito como

$$S(\vec{q}) = \left[1 + \frac{2\rho}{\epsilon(\vec{q})} \chi(\vec{q}) \right]^{-1/2} \quad (3.11)$$

Por sua vez, a função de correlação estática de equilíbrio dos pares $g(\vec{r})$ é calculada a partir da transformada de Fourier de $S(\vec{q})$:

$$g(\vec{r}) = 1 + \frac{1}{(2\pi)^3 \rho} \int d\vec{q} e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} [S(\vec{q}) - 1] \quad (3.12a)$$

ou, para o caso tridimensional,

$$g(\vec{r}) = 1 + \frac{2}{3\pi} \frac{r_0^3}{r} \int_0^\infty dq [S(\vec{q}) - 1] q \sin qr, \quad (3.12b)$$

onde r_0 é a distância média entre as partículas e $\rho = 3/4\pi r_0^3$ é a densidade do gás.

Vemos portanto, que para encontrarmos o fator de estrutura $S(\vec{q})$ e conseqüentemente o espectro de excitações $E(\vec{q})$ e a função de correlação $g(\vec{r})$ para o gás de Bose, é imprescindível conhecermos a expressão do potencial efetivo $\psi(\vec{q})$.

O potencial efetivo de interação entre as partículas $\psi(\vec{r})$ é obtido a partir da sua definição na aproximação SCFA, ou seja,

$$\nabla_{\vec{r}} \psi(\vec{r}-\vec{r}') = g(\vec{r}-\vec{r}') \nabla_{\vec{r}} \phi(\vec{r}-\vec{r}') \quad (3.13)$$

onde $\phi(\vec{r}-\vec{r}')$ é o potencial real de interação entre os pares de partículas.

Podemos então obter $\psi(\vec{q})$ através da equação (vide apêndice I) :

$$\psi(\vec{q}) = \phi(\vec{q}) + \frac{1}{(2\pi)^3 \rho} \int d\vec{q}' [S(\vec{q}-\vec{q}') - 1] \phi(\vec{q}') \frac{\vec{q} \cdot \vec{q}'}{q^2} \quad (3.14)$$

Então, o esquema autoconsistente para o sistema de bósons fica constituído pelas Eqs.(3.11) e (3.14). A energia das excitações elementares $E(\vec{q})$ é obtida através da Eq.(3.10) e a função de correlação dos pares $g(\vec{r})$ é calculada pela equação (3.12b), usando o fator de estrutura autoconsistente.

3.2 - POTENCIAL REPULSIVO FINITO

Vamos desenvolver agora o estudo de um sistema tridimensional de bosons de densidade $\rho = 3/4\pi n_0^3$, com interação repulsiva, sendo esta interação composta de duas partes distintas : para separações das partículas até um certo valor r_c , a interação é repulsiva e constante e para distâncias maiores, a repulsão tem a dependência $1/r$, como é mostrado no esquema abaixo.

Assim, o potencial real de interação entre os pares de partículas pode ser expresso por :

$$\phi(r) = \frac{\lambda \hbar^2}{2m n_0^2} \left[\theta(r_c - r) + \frac{r_c}{r} \theta(r - r_c) \right] \quad (3.15)$$

onde λ é a altura do potencial na região $r < r_c$ e $\theta(r)$ é a função de Heaviside. A constante $\hbar^2/2m n_0^2$ é colocada por conveniência futura.

A transformada de Fourier deste potencial é dada por

$$\phi(\vec{q}) = \frac{4\pi\lambda}{q^3} \left(\frac{\hbar^2}{2m n_0^2} \right) \sin q r_c \quad (3.16)$$

sendo então o potencial efetivo autoconsistente $\psi(\vec{q})$ obtido através da Eq.(3.14) :

$$\psi(\vec{q}) = \frac{\hbar^2}{2m\alpha_0^2} \psi_1(\vec{q}) \quad , \quad (3.17a)$$

onde

$$\psi_1(\vec{q}) = \frac{4\pi\lambda}{q^3} \sin q\alpha_0 + \frac{2\lambda\alpha_0^3}{3\pi} \int d\vec{q}' \left[S(\vec{q}-\vec{q}') - 1 \right] \frac{\sin q'\alpha_0}{(q')^3} \frac{\vec{q} \cdot \vec{q}'}{q^2 q'^2} \quad (3.17b)$$

Precisamos assim, calcular o valor da integral (vide apêndice III):

$$\begin{aligned} \int d\vec{q}' \left[S(\vec{q}-\vec{q}') - 1 \right] \frac{\sin q'\alpha_0}{(q')^3} \frac{\vec{q} \cdot \vec{q}'}{q^2 q'^2} &= \frac{\pi}{q^3 \alpha_0} \int dk \left[S(k) - 1 \right] k \left\{ \alpha_0^2 (q^2 - k^2) \times \right. \\ &\times \left[\frac{\sin(\alpha_0 |k-q|)}{\alpha_0 |k-q|} - \frac{\sin \alpha_0 (k+q)}{\alpha_0 (k+q)} + \int_{\alpha_0 |k-q|}^{\alpha_0 (k+q)} \frac{dy \cos y}{y} \right] + \cos(\alpha_0 |k-q|) - \cos \alpha_0 (k+q) \Big\}. \end{aligned} \quad (3.18)$$

Vamos utilizar o parâmetro α_0 para definir unidades adimensionais convenientes para o problema, isto é, α será expresso em unidade de α_0 e q em unidade de $(\alpha_0)^{-1}$.

Então, a Eq.(3.17b) pode ser escrita como :

$$\begin{aligned} \psi_1(q) &= \frac{4\pi\lambda\alpha_0^3}{q^3} \left\{ \sin q\alpha_0 + \frac{1}{3\pi} \left(\frac{\alpha_0}{\alpha_0} \right)^3 \int dk \left[S(k) - 1 \right] k \times \right. \\ &\times \left[\sin k \sin q\alpha_0 + k \cos k \sin q\alpha_0 - \frac{q\alpha_0}{\alpha_0} \sin k \cos q\alpha_0 + \right. \\ &\quad \left. \left. + \left(\frac{q^2 \alpha_0^2}{\alpha_0^2} - k^2 \right) \int_{|k-q\alpha_0|}^{(k+q\alpha_0)} \frac{dy \cos y}{y} \right] \right\} \quad , \quad (3.19) \end{aligned}$$

sendo $\alpha_0 = \alpha_0 a_0$ ($a_0 = \hbar^2 / me^2$ é o raio de Bohr da partícula)

Portanto, conhecemos agora a forma do potencial efetivo $\psi(q)$ para o sistema tridimensional de bosons com interação dada pela equação (3.15), podemos usar a teoria do campo autoconsistente para calcularmos o fator de estrutura $S(q)$, a função de correlação dos pares $g(r)$ e o espectro de energia das excitações elementares $E(q)$.

Através da Eq.(3.11) encontramos a expressão para o fator de estrutura

$$S(q) = \left\{ 1 + \frac{3}{2\pi n_s^3 q^2} \psi(q) \right\}^{-1/2}, \quad (3.20)$$

onde $\psi(q)$ é dado pela Eq.(3.19).

Dessa forma, a solução do problema será encontrada através da resolução autoconsistente das Eqs.(3.19) e (3.20), que nos permitirá obter o fator de estrutura autoconsistente. Com esse resultado, calcularemos a energia das excitações elementares $E(q)$ através da relação

$$E(q) = \frac{c^2}{2a n_s^2} \frac{q^2}{S(q)} \quad (3.21)$$

e a função de correlação dos pares $g(r)$:

$$g(r) = 1 + \frac{2}{3\pi n_s} \int_0^\infty q \sin qr [S(q) - 1] dq \quad (3.22)$$

3.3 - RESULTADOS

Uma vez que não é possível resolver esse conjunto de equações de uma maneira analítica, tornou-se então necessário utilizarmos técnicas de cálculo numérico. Como as equações envolvem soluções de integrais, usamos para isso o método de Gauss-

Legendre ⁽¹⁸⁾ .

A solução numérica autoconsistente das Eqs. (3.19) e (3.20) é obtida através de um processo iterativo.

A aproximação SCFA possui a conveniência de se obter na primeira iteração de seu cálculo, o resultado RPA, já que nesse caso ao fazermos $\psi(q) = \phi(q)$ na Eq.(3.14), todas as correções de campo local são desprezadas. Em vista disso, iniciamos o processo considerando $S(q) = 1.0$ na Eq.(3.19) e assim calculamos o primeiro $\psi(q)$, cujo valor foi inserido na Eq.(3.20) para se obter o novo $S(q)$. Tal processo continuou até encontrarmos convergência nos valores de $S(q)$ calculados em duas iterações consecutivas; para isso, definimos o critério de que a convergência ocorre quando a diferença entre as matrizes de $S(q)$ de duas iterações sucessivas é menor do que algum pequeno valor ϵ pré-determinado (em geral, 10^{-5}). Evidentemente, o processo não depende do valor dado inicialmente para $S(q)$.

Procedendo-se dessa maneira, calculamos o fator de estrutura em função do vetor de onda para diversos valores de λ , mantendo-se fixa a razão r_0/r_c . Isso porque, as equações envolvidas no cálculo autoconsistente não dependem de r_0 e r_c separadamente, mas apenas da razão entre ambos. Para cada razão r_0/r_c o cálculo numérico utilizado permitia variarmos λ até um certo valor máximo, quando então o potencial efetivo autoconsistente $\psi(q)$ (equação(3.19)) tornava-se muito negativo, causando problemas na obtenção de $S(q)$ pela equação(3.20).

Nas figuras 1 e 2 são mostrados os resultados para $S(q)$ com respectivamente $(r_0/r_c)=1.0$ e $(r_0/r_c)=1.5$, para diversos valores de λ . Vemos que $S(q)$ ultrapassa o valor da unidade quando o parâmetro λ se torna suficientemente grande, ou seja, $S(q)$ começa a apresentar um máximo que aumenta com o valor de λ .

Esses picos pronunciados de $S(q)$ indicam que há uma crescente tendência de localização das partículas, isto é, estão aparecendo efeitos de estrutura no sistema. Mas, para pequenos valores de λ ($\lambda \lesssim 1.0$), que correspondem a uma menor influência da parte mais repulsiva do potencial, o fator de estrutura não ultrapassa a unidade, indicando um comportamento semelhante ao de um líquido.

O fator de estrutura autoconsistente $S(q)$ foi usado para calcular a função de correlação dos pares $g(r)$ através da Eq.(3.22). Os resultados obtidos para $(r_0/r_c)=1.0$ e $(r_0/r_c)=1.5$ com diversos valores de λ são mostrados nas figuras 3 e 4 respectivamente.

Como podemos notar, à medida que λ aumenta, a probabilidade de encontrar uma partícula a uma distância r_c da outra diminui, o que é esperado, uma vez que o potencial repulsivo se torna muito mais forte, dificultando assim a aproximação entre as partículas. Nessas figuras vemos que a partir de um certo valor de λ , $g(r)$ vai oscilar em torno da unidade, indicando também o aparecimento de uma dada localização das partículas do sistema.

Através da Eq.(3.21) e usando o fator de estrutura autoconsistente, nos foi possível calcular o espectro de energia das excitações elementares $E(q)$ com diversos λ , para as razões $(r_0/r_c)=1.0$ e 1.5 , como mostradas nas figuras 5 e 6 respectivamente. Nestas figuras, os valores da energia foram normalizados para a unidade, a fim de facilitar a comparação entre eles. Vemos que à medida que λ cresce, é mais fácil criar uma excitação elementar coletiva na qual as partículas estão mais localizadas, do que excitar um modo coletivo de comprimento de onda infinito.

Para comparação, plotamos nas figuras 7, 8, 9 e 10 os correspondentes resultados das aproximações RPA e SCFA para $S(q)$ e $g(r)$ para vários λ , com $(r_0/r_c) = 1.0$ e 1.5 respectivamente.

Podemos observar que, o fato de considerarmos em SCFA as correlações de curto alcance através de correções de campo local, introduz sensíveis variações nas propriedades do sistema. Para pequenos valores de $r > r_c$, a função de correlação dos pares $g(r)$ apresenta valores menores na aproximação RPA do que na aproximação SCFA, o que acontece devido justamente por não serem levados em conta na RPA estes efeitos de curto alcance.

É importante ressaltar que para uma mesma razão r_0/r_c , a diferença entre os dois resultados se torna mais significativa à medida que λ cresce. Para pequenos valores de λ há uma maior coincidência entre as curvas obtidas para a função de correlação dos pares segundo as duas aproximações porque nesse caso, os efeitos de curto alcance são mínimos devido ao fato do potencial real ser relativamente fraco. Tanto nos resultados da RPA quanto nos da SCFA, verifica-se o aparecimento de efeitos de estrutura no sistema.

Plotamos também nas figuras 11 e 12, as curvas de $E(q)$ obtidas para RPA e SCFA com $(r_0/r_c) = 1.0$ e 1.5 respectivamente. É interessante notar que as correlações de curto alcance presentes na teoria SCFA são responsáveis pela existência de uma diminuição nos resultados SCFA quando comparados com os da RPA, para a região de pequenos vetores de onda. Além do mais, quanto maior o valor de λ , mais sensível é a diferença entre as duas aproximações.

A figura 13 representa o resultado do fator de estrutura $S(q)$ para uma certa altura do potencial fixa ($\lambda = 10.0$) e diversas razões r_0/r_c . Vemos então que, para um mesmo potencial

real entre as partículas, o efeito de localização se torna apreciável quando a razão λ_0/λ_c cresce. Isto significa que se considerarmos um sistema com densidade constante, isto é, λ_0 fixo, ao diminuirmos o valor do alcance λ_c da parte constante do potencial, vamos ter uma maior localização das partículas, para um mesmo valor de λ . Se, por outro lado, fixarmos λ_c e permitirmos que a densidade do sistema varie, então quanto menor a densidade, maior o efeito de localização.

3.4 - SISTEMA DE BOSONS PUNTUAL CARREGADO

Caparica e Hipólito⁽¹⁹⁾ estudaram certas propriedades dielétricas de um sistema formado por bosons de carga e e massa m , que interagem entre si através de um potencial do tipo coulombiano. A neutralidade do sistema é garantida pela presença de um fundo positivo, uniforme e estático.

A partir das equações encontradas para o sistema que estudamos, onde o potencial de interação entre as partículas é dado pela Eq.(3.15), foi possível obtermos as expressões para $S(\vec{q})$, $G(\vec{q})$ e $g(\vec{r})$ para o caso do gás de bosons puntual carregado, fazendo para isso os limites $\lambda \rightarrow \infty$ e $\lambda_c \rightarrow 0$. Para que $\psi(\vec{q})$ permanecesse finito nesse limite, tornou-se necessário que o produto $(\lambda \cdot \lambda_c)$ fosse igual a uma constante, que neste caso, deve ser $\lambda \lambda_c \equiv e^2$.

Dessa maneira, vamos reproduzir as equações do esquema autoconsistente para o sistema de bosons puntual carregado. Comparando os resultados publicados por Caparica e Hipólito e aqueles obtidos neste trabalho, vemos que o efeito de estruturação encontrado no nosso caso parece ser produzido pelo fato do potencial possuir uma região constante e ser finito. Em ambos os pro-

blemas, a aproximação SCFA mostra resultados melhores do que os da RPA, evidenciando que esta teoria, realmente, considera de uma forma mais adequada as interações existentes entre as partículas do sistema.

FIG. 1 - Fator de estrutura autoconsistente $S(q)$ como função de q/q_0 para a razão $(r_0/r_c)=1.0$ e $\lambda = 1.0, 10.0, 40.0$ e 80.0 .

FIG. 2 - Fator de estrutura autoconsistente $S(q)$ como função de q/q_0 para a razão $(r_0/r_c) = 1.5$ e $\lambda = 1.0, 10.0$ e 35.0 .

FIG. 3 - Função de correlação dos pares $g(r)$ como função de r/r_c para a razão $(r_0/r_c)=1.0$ e $\lambda = 1.0, 10.0, 40.0$ e 80.0 .

FIG. 4 - Função de correlação dos pares $g(r)$ como função de r/r_c para a razão $(r_0/r_c) = 1.5$ e $\lambda = 1.0, 10.0$ e 35.0 .

FIG. 5 - Energia das excitações $E(q)$ como função dos vetores de onda, em unidades de $\omega_p = \left(\frac{4\pi e^2}{m}\right)^{1/2}$, para a razão $(n_0/\kappa) = 1.0$ e $\lambda = 1.0, 10.0, 40.0, 80.0$. O fator de normalização usado é $\left(\frac{n_0}{6\lambda\kappa}\right)^{1/2}$.

FIG. 6 - Energia das excitações $E(q)$ como função dos vetores de onda , em unidades de $\omega_p = \left(\frac{4\pi\rho e^2}{m} \right)^{1/2}$, para a razão $(\epsilon_0/\epsilon_c) = 1.5$ e $\lambda = 1.0, 10.0$ e 35.0 .

FIG. 7 - Fator de estrutura autoconsistente $S(q)$ como função de q/a_0 para a razão $(n_0/n_c)=1.0$ e $\lambda=1.0, 40.0, 80.0$. As correspondentes curvas tracejadas do resultado RPA estão plotadas para comparação. Para $\lambda=1.0$ as curvas praticamente coincidem.

FIG. 8 - Fator de estrutura autoconsistente $S(q)$ como função de $q r_0$ para a razão $(r_0/r_c) = 1.5$ e $\lambda = 1.0, 10.0, 35.0$. As linhas tracejadas correspondem ao resultado RPA. Para $\lambda = 1.0$ as curvas coincidem.

FIG. 9 - Função de correlação dos pares $g(r)$ como função de r/r_c para a razão $(r_0/r_c) = 1.0$ e $\lambda = 1.0, 40.0, 80.0$. Para comparação estão plotadas as curvas tracejadas de RPA. Para $\lambda = 1.0$ as curvas são praticamente coincidentes.

FIG. 10 - Função de correlação dos pares $g(r)$ como função de r/r_c para a razão $(n_0/n_c)=1.5$ e $\lambda=1.0, 10.0, 35.0$. Para comparação estão plotadas as curvas tracejadas de RPA. Para $\lambda=1.0$ as curvas são praticamente coincidentes.

FIG. 11 - Energia das excitações $E(q)$ como função de $q r_0$ em unidades de $\omega_p = \left(\frac{4\pi e^2 \rho}{m} \right)^{1/2}$, para a razão $(r_0/r_e) = 1.0$ e $\lambda = 1.0, 10.0, 40.0, 80.0$. As linhas tracejadas correspondem ao resultado RPA. Para $\lambda = 1.0$ as curvas coincidem.

FIG. 12 - Energia das excitações $E(q)$ como função de q/a_0 em unidades de $\omega_p = \left(\frac{4\pi\rho e^2}{m}\right)^{1/2}$, para a razão $(n_0/n_c) = 1.5$ e $\lambda = 1.0, 10.0, 35.0$. As linhas tracejadas correspondem ao resultado RPA. Para $\lambda = 1.0$ as curvas coincidem.

FIG. 13 - Fator de estrutura autoconsistente $S(q)$ como função de q/q_0 para $\lambda = 10.0$ e razão $\frac{\rho_0}{\rho_c} = 1.0; 2.0; 3.0$.

APENDICE I

LINEARIZAÇÃO DA EQUAÇÃO DE MOVIMENTO PARA A FUNÇÃO DISTRIBUIÇÃO CLÁSSICA DE UMA PARTÍCULA E OBTENÇÃO DO POTENCIAL EFETIVO

Quando estudamos problema de muitos corpos, vemos que a equação de movimento para a função distribuição clássica de uma partícula $f^{(1)}(\vec{r}, \vec{p}/t)$ sujeita a um potencial externo $\phi_{ext}(\vec{r}, t)$ é dada por :

$$\frac{\partial}{\partial t} f^{(1)}(\vec{r}, \vec{p}/t) + \vec{v} \cdot \nabla_{\vec{r}} f^{(1)}(\vec{r}, \vec{p}/t) - \nabla_{\vec{r}} \phi_{ext}(\vec{r}, t) \cdot \nabla_{\vec{p}} f^{(1)}(\vec{r}, \vec{p}/t) - \int d\vec{r}' d\vec{p}' \nabla_{\vec{r}} \phi(\vec{r} - \vec{r}') \cdot \nabla_{\vec{p}} f^{(2)}(\vec{r}, \vec{p}; \vec{r}', \vec{p}'/t) = 0 \quad , \quad (I.1)$$

onde $\phi(\vec{r} - \vec{r}')$ é o potencial real de interação entre as partículas do sistema e $f^{(2)}(\vec{r}, \vec{p}; \vec{r}', \vec{p}'/t)$ é a função distribuição de duas partículas.

Logo, a equação de movimento da função distribuição de uma partícula envolve a função distribuição de duas partículas. Da mesma forma, a equação de movimento para $f^{(2)}(\vec{r}, \vec{p}; \vec{r}', \vec{p}'/t)$ depende da função distribuição de três partículas e assim sucessivamente. Para resolver a equação(I.1) é preciso então quebrar essa sequência infinita de equações.

A hipótese fundamental do formalismo do campo autoconsistente (SCFA) é utilizar a função de correlação estática de equilíbrio dos pares $g(\vec{r} - \vec{r}')$ para desacoplar a função distribuição de duas partículas em termos do produto das funções distribuição de cada partícula, ou seja,

$$f^{(2)}(\vec{r}, \vec{p}; \vec{r}', \vec{p}'/t) = f^{(1)}(\vec{r}, \vec{p}/t) f^{(1)}(\vec{r}', \vec{p}'/t) g(\vec{r} - \vec{r}') \quad . \quad (I.2)$$

A sequência infinita de equações é portanto truncada , uma vez que a função distribuição de N partículas está relacionada com a função distribuição de $N + 1$ partículas.

Considerando um potencial externo fraco, a função distribuição de uma partícula pode ser escrita como :

$$f^{(1)}(\vec{r}, \vec{p}/t) = f_0(\vec{p}) + f_1(\vec{r}, \vec{p}/t) \quad , \quad (I.3)$$

onde $f_0(\vec{p})$ é a função distribuição de equilíbrio e $f_1(\vec{r}, \vec{p}/t)$ é um termo de correção que exprime a variação de $f_0(\vec{p})$ induzida pelo potencial externo fraco.

Usando as Eqs.(I.1) e (I.2) teremos que

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla_{\vec{r}} - \nabla_{\vec{r}} \phi_{ext}(\vec{r}, t) \cdot \nabla_{\vec{p}} \right] f^{(1)}(\vec{r}, \vec{p}/t) - \int d\vec{r}' d\vec{p}' [g(\vec{r}-\vec{r}') \nabla_{\vec{r}} \phi(\vec{r}-\vec{r}') \cdot \nabla_{\vec{p}'} f^{(1)}(\vec{r}', \vec{p}'/t) f^{(1)}(\vec{r}, \vec{p}/t) = 0 \quad (I.4)$$

A expressão $g(\vec{r}-\vec{r}') \nabla_{\vec{r}} \phi(\vec{r}-\vec{r}')$ pode ser considerada como proveniente de um potencial efetivo $\psi(\vec{r}-\vec{r}')$, que é então definido como :

$$\nabla_{\vec{r}} \psi(\vec{r}-\vec{r}') = g(\vec{r}-\vec{r}') \nabla_{\vec{r}} \phi(\vec{r}-\vec{r}') \quad . \quad (I.5)$$

Portanto, usando as Eqs.(I.3) e (I.4) juntamente com a definição (I.5) teremos

$$\begin{aligned} & \left[\frac{\partial}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla_{\vec{r}} \right] f_1(\vec{r}, \vec{p}/t) - \nabla_{\vec{r}} \phi_{ext}(\vec{r}, t) \cdot \nabla_{\vec{p}} f_0(\vec{p}) + \left[\int d\vec{r}' \nabla_{\vec{r}} \psi(\vec{r}-\vec{r}') \right] \left[\int d\vec{p}' f_0(\vec{p}') \right] \cdot \\ & \cdot \nabla_{\vec{p}} f_0(\vec{p}) + \left[\int d\vec{r}' \nabla_{\vec{r}} \psi(\vec{r}-\vec{r}') \right] \left[\int d\vec{p}' f_0(\vec{p}') \right] \cdot \nabla_{\vec{p}} f_1(\vec{r}, \vec{p}/t) + \\ & + \left[\int d\vec{r}' d\vec{p}' \nabla_{\vec{r}} \psi(\vec{r}-\vec{r}') f_1(\vec{r}', \vec{p}'/t) \right] \cdot \nabla_{\vec{p}} f_0(\vec{p}) = 0 \end{aligned} \quad (I.6)$$

Mas, por simetria translacional, a integral $\int d\vec{r}' \psi(\vec{r}-\vec{r}')$ não depende de $\vec{r}$. Então, $\nabla_{\vec{r}} \int d\vec{r}' \psi(\vec{r}-\vec{r}') = 0$.

Assim, a Eq.(I.6) fica :

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla_{\vec{r}} \right] f_1(\vec{r}, \vec{p}/t) - \nabla_{\vec{r}} \left[\phi(\vec{r}, t) + \int d\vec{r}' n(\vec{r}', t) \psi(\vec{r}-\vec{r}') \right] \cdot \nabla_{\vec{p}} f_0(\vec{p}) = 0, \quad (I.7)$$

onde $n(\vec{r}, t) = \int d\vec{p} f_1(\vec{r}, \vec{p}/t)$ é a densidade de partículas em $(\vec{r}, t)$.

Vamos agora obter a expressão para o potencial efetivo $\psi(\vec{q})$ a partir da definição (I.5), que pode ser escrita como

$$\nabla_{\vec{r}} \psi(\vec{r}) = [g(\vec{r}) - 1] \nabla_{\vec{r}} \phi(\vec{r}) + \nabla_{\vec{r}} \phi(\vec{r}) \quad (I.8)$$

e multiplicando por $\int e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}} d\vec{r}$ teremos

$$\int e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}} d\vec{r} \nabla_{\vec{r}} \psi(\vec{r}) = \int e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}} d\vec{r} [g(\vec{r}) - 1] \nabla_{\vec{r}} \phi(\vec{r}) + \int e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}} d\vec{r} \nabla_{\vec{r}} \phi(\vec{r}) \quad (I.9)$$

Usando as expressões das transformadas de Fourier de $\psi(\vec{r})$ e $\phi(\vec{r})$, vemos que

$$\nabla_{\vec{r}} \psi(\vec{r}) = \frac{i}{(2\pi)^3} \int \psi(\vec{q}') \vec{q}' e^{i\vec{q}' \cdot \vec{r}} d\vec{q}'$$

e (I.10)

$$\nabla_{\vec{r}} \phi(\vec{r}) = \frac{i}{(2\pi)^3} \int \phi(\vec{q}') \vec{q}' e^{i\vec{q}' \cdot \vec{r}} d\vec{q}'$$

Assim,

$$\begin{aligned} \iint \vec{q}' \psi(\vec{q}') e^{i(\vec{q}' - \vec{q}) \cdot \vec{r}} d\vec{q}' d\vec{r} &= \iint \vec{q}' \phi(\vec{q}') e^{i(\vec{q}' - \vec{q}) \cdot \vec{r}} [g(\vec{r}) - 1] d\vec{q}' d\vec{r} + \\ &+ \iint \vec{q}' \phi(\vec{q}') e^{i(\vec{q}' - \vec{q}) \cdot \vec{r}} d\vec{q}' d\vec{r} \end{aligned} \quad (I.11)$$

Como o fator de estrutura $S(\vec{q})$ está relacionado com a função de correlação dos pares $g(\vec{r})$ através da expressão

$$\int [g(\vec{r}) - 1] e^{-i(\vec{q} - \vec{q}') \cdot \vec{r}} d\vec{r} = \frac{1}{\rho} [S(\vec{q} - \vec{q}') - 1] \quad , \quad (\text{I.12})$$

onde ρ é a densidade de partículas, e usando propriedades da função delta, chegamos a

$$\vec{q} \psi(\vec{q}) = \frac{1}{(2\pi)^3 \rho} \int [S(\vec{q} - \vec{q}') - 1] \phi(\vec{q}') \vec{q}' d\vec{q}' + \vec{q} \phi(\vec{q}) \quad (\text{I.13a})$$

ou

$$\psi(\vec{q}) = \phi(\vec{q}) + \frac{1}{(2\pi)^3 \rho} \int [S(\vec{q} - \vec{q}') - 1] \phi(\vec{q}') \frac{\vec{q} \cdot \vec{q}'}{(q')^2} d\vec{q}' \quad (\text{I.13b})$$

Quando o potencial entre as partículas for coulombiano, sua transformada de Fourier em três dimensões vale

$$\phi(\vec{q}) = \frac{4\pi e^2}{(q)^2} \quad , \quad (\text{I.14})$$

e então podemos escrever

$$\psi(\vec{q}) = \phi(\vec{q}) [1 - G(\vec{q})] \quad , \quad (\text{I.15a})$$

onde

$$G(\vec{q}) = \frac{1}{(2\pi)^3 \rho} \int [S(\vec{q} - \vec{q}') - 1] \frac{\vec{q} \cdot \vec{q}'}{(q')^2} d\vec{q}' \quad (\text{I.15b})$$

APENDICE II

OBTENÇÃO DA RELAÇÃO ENTRE O FATOR DE ESTRUTURA E A ENERGIA DAS EXCITAÇÕES ELEMENTARES DO SISTEMA

A expressão de Feynman, que relaciona a energia das excitações elementares do sistema $E(\vec{q})$ com o fator de estrutura $S(\vec{q})$, pode ser obtida através do formalismo do campo autoconsistente para um sistema de bosons.

O fator de estrutura está relacionado com a susceptibilidade através da equação

$$S(\vec{q}) = -\frac{\hbar}{\pi\rho} \int_0^\infty d\omega \operatorname{Im} \chi(\vec{q}, \omega) \quad , \quad (\text{II.1})$$

onde ρ é a densidade numérica de partículas ,

e

$$\operatorname{Im} \chi(\vec{q}, \omega) = \frac{-4\rho\hbar^2\eta\omega\epsilon(\vec{q})}{\{\hbar^2\omega^2 - \hbar^2\eta^2 - [E(\vec{q})]^2\}^2 + 4(\hbar^2\omega\eta)^2} \quad (\text{II.2})$$

com $\omega = \omega(\vec{q})$.

Considerando o limite para $\eta \rightarrow 0$ teremos que

$$\operatorname{Im} \chi(\vec{q}, \omega) = \frac{-4\rho\hbar^2\omega\epsilon(\vec{q})}{4(\hbar^2\omega)^2 - 2\hbar^2\{\hbar^2\omega^2 - [E(\vec{q})]^2\}} \left[\lim_{\eta \rightarrow 0} \frac{\eta}{\eta^2 + \frac{\hbar^2\omega^2 - [E(\vec{q})]^2}{4(\hbar^2\omega)^2 - 2\hbar^2\{\hbar^2\omega^2 - [E(\vec{q})]^2\}}} \right]$$

$$= \frac{-4\rho\hbar^2\omega\epsilon(\vec{q})}{4(\hbar^2\omega)^2 - 2\hbar^2\{\hbar^2\omega^2 - [E(\vec{q})]^2\}} \pi \delta\left(\frac{\hbar^2\omega^2 - [E(\vec{q})]^2}{\sqrt{4(\hbar^2\omega)^2 - 2\hbar^2\{\hbar^2\omega^2 - [E(\vec{q})]^2\}}} \right) \quad (\text{II.3})$$

Da teoria das distribuições⁽²⁰⁾ vem a seguinte propriedade :

dade :

$$\delta[f(x)] = \sum_n \frac{1}{|f'(x_n)|} \delta(x - x_n) \quad , \quad (\text{II.4})$$

com $f(x_n) = 0$ e $f'(x_n) \neq 0$.

Portanto, uma vez que $E(\vec{q}) = \hbar\omega_0(\vec{q})$, a Eq.(II.3) pode ser escrita como

$$\mathcal{I}_m \chi(\vec{q}, \omega) = \frac{-2\pi\omega\rho \mathcal{E}(\vec{q}) \delta(\omega - \omega_0)}{\hbar^2 \omega^2 + [E(\vec{q})]^2} \quad (\text{II.5})$$

E assim,

$$S(\vec{q}) = \frac{\hbar}{\pi\rho} \cdot 2\pi\rho \mathcal{E}(\vec{q}) \int_0^\infty \frac{\omega \delta(\omega - \omega_0) d\omega}{\hbar^2 \omega^2 + [E(\vec{q})]^2} = 2\hbar \mathcal{E}(\vec{q}) \frac{1}{2\hbar^2 \omega_0(\vec{q})} \quad (\text{II.6})$$

Dessa forma, obteremos

$$S(\vec{q}) = \frac{\mathcal{E}(\vec{q})}{\hbar\omega_0(\vec{q})} = \frac{\mathcal{E}(\vec{q})}{E(\vec{q})}, \quad (\text{II.7})$$

que é a relação de Feynman⁽¹⁷⁾.

APENDICE III

CÁLCULO DO VALOR DA INTEGRAL DO POTENCIAL EFETIVO $\mathcal{V}(\vec{q})$

Vamos calcular o valor de

$$I = \int d\vec{q} \left[S(\vec{q} - \vec{q}') - 1 \right] \frac{\sin q' r_c}{(q')^3} \frac{\vec{q} \cdot \vec{q}'}{q^2} \quad (\text{III.1})$$

Como o fator de estrutura é função do módulo da diferença entre os vetores de onda $\vec{q}$ e $\vec{q}'$, definiremos $\vec{k} = \vec{q} - \vec{q}'$.

Desse modo, teremos

$$I = \int d\vec{k} \left[S(k) - 1 \right] \frac{\sin(r_c \sqrt{q^2 + k^2 - 2qk \cos \alpha})}{(q^2 + k^2 - 2qk \cos \alpha)^{3/2}} \vec{q} \cdot (\vec{q} - \vec{k}) \quad (\text{III.2})$$

onde α é o ângulo formado entre os vetores $\vec{k}$ e $\vec{q}$.

Considerando $c \equiv k/q$, $a \equiv (q^2 + k^2) r_c^2$, $b \equiv -2kq r_c^2$, e fazendo a substituição $y = (a + b \cos \alpha)^{1/2}$, chegamos a

$$I = 2\pi r_c^3 \int_0^\infty dk \left[S(k) - 1 \right] k^2 \left(\frac{-2}{b} \right) \int_{y_1}^{y_2} dy \frac{\sin y}{y^2} \left[1 - c \left(\frac{y^2 - a}{b} \right) \right] \quad (\text{III.3})$$

onde $y_1 \equiv (a + b)^{1/2} = r_c |k - q|$

(III.4)

e $y_2 \equiv (a - b)^{1/2} = r_c (k + q)$

Assim,

$$\begin{aligned} I &= 2\pi r_c^3 \int_0^\infty dk \left[S(k) - 1 \right] k^2 \left(\frac{-2}{b} \right) \left\{ \left(1 + \frac{ac}{b} \right) \int_{y_1}^{y_2} dy \frac{\sin y}{y^2} - \frac{c}{b} \int_{y_1}^{y_2} dy \sin y \right\} = \\ &= 2\pi r_c^3 \int_0^\infty dk \left[S(k) - 1 \right] k^2 \left(\frac{-2}{b} \right) \left\{ \left(1 + \frac{ac}{b} \right) \left[\frac{\sin y_1}{y_1} - \frac{\sin y_2}{y_2} + \int_{y_1}^{y_2} dy \frac{\cos y}{y} \right] - \right. \\ &\quad \left. - \frac{c}{b} (\cos y_1 - \cos y_2) \right\}. \quad (\text{III.5}) \end{aligned}$$

Desta forma, obtemos o resultado da integral (III.1),

ou seja,

$$I = \frac{\pi}{q^3 \epsilon_0} \int_0^\infty dk [S(k) - 1] k \left\{ \epsilon^2 (q^2 - k^2) \left[\frac{\sin(\epsilon |k - q|)}{\epsilon |k - q|} - \frac{\sin \epsilon(k + q)}{\epsilon(k + q)} + \right. \right. \\ \left. \left. + \int_{\epsilon |k - q|}^{\epsilon(k + q)} dy \frac{\cos y}{y} \right] + \cos(\epsilon |k - q|) - \cos \epsilon(k + q) \right\} \quad (\text{III.6})$$

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

1. PINES, D. - "The many-body problem" (W.A.Benjamin Inc., New York, 1964).
MATTUCK, R.D. - "A Guide to Feynman Diagrams in the Many - Body Problem" (McGraw-Hill, London, 1967).
TAYLOR, P.L. - "A quantum approach to the solid state" (Prentice-Hall, Englewood Cliffs, New Jersey, 1970).
2. PINES, D. - "Elementary excitations in solids" (W.A.Benjamin Inc., New York, 1964).
3. PINES, D. & NÓZIERES, P. - "The theory of quantum liquids" (W.A.Benjamin Inc., New York, 1966).
4. CAIANIELLO, E.R. - "Lectures on the many-body problem" (Academic Press Inc., USA, 1964).
5. MERZBACHER, E. - "Quantum Mechanics" (Wiley International Edition, USA, second edition, 1970).
6. SCHIFF, L.I. - "Quantum Mechanics" (McGraw-Hill Inc., Japan, third edition, 1968).
7. BROUT, R. & CARRUTHERS, P. - "Lectures on the many-electron problem" (Interscience Publishers, New York, 1963).
MC.QUARRIE, D.A. - "Statistical Mechanics" (Harper & Row Publishers, USA, 1976).
8. ICHIMARU, S. - "Basic principles of plasma physics a statistical approach" (W.A.Benjamin Inc., USA, 1973).
BLEANEY, B.I. & BLEANEY, B. - "Electricity and Magnetism" (Oxford University Press, England, 1968).
9. SINGWI, K.S. ; TOSI, M.P. ; LAND, R.H. & SJÖLANDER, A. - Phys.Rev. 176, 589 (1968).
10. SINGWI, K.S. ; TOSI, M.P. & SJÖLANDER, A. - Nuovo Cimento 54, B160 (1968).

- SINGWI, K.S. , SJÖLANDER, A. , TOSI, M.P. & LAND, R.H. -
Phys.Rev. B1, 1044 (1970).
11. PINES, D. & BOHM, D. - Phys.Rev. 85, 338 (1952)
Phys.Rev. 92, 609 (1953)
Phys.Rev. 92, 626 (1953).
12. HUBBARD, J. - Proc.Roy.Soc. A243, 336 (1957).
13. CAMPOS, V.B. ; HIPÓLITO, O. & LOBO, R. -
Phys.Rev. B15, 4234 (1977)
Phys.stat.solidi (b)81, 657 (1977).
14. RAIMES, S. - "The wave mechanics of electrons in metals"
(Interscience Publishers Inc., New York, 1961).
15. NOZIERES, p. & PINES, D. - Nuovo Cimento 9, 470 (1958).
16. REIF, F. - "Fundamentals of statistical and thermal physics"
(McGraw-Hill Inc., Japan, 1965).
17. FEYNMAN, R.P. - Phys.Rev. 94, 262 (1954).
18. SCHEID, F. - "Theory and problems of numerical analysis"
(McGraw-Hill Book Company, USA, 1968).
19. CAPARICA, A.A. & HIPÓLITO, O. - Phys.Rev. A26, 2832 (1982).
20. MESSIAH, A. - "Quantum Mechanics"
(John Wiley & Sons Inc., USA, 1966) apêndice A .