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

ANIHILAÇÃO DE POSITRONS EM METAIS ALCALINOS

OSCAR HIPÓLITO

- INSTITUTO DE FÍSICA E QUÍMICA DE SÃO CARLOS - USP -
Departamento de Física e Ciência dos Materiais
- BIBLIOTECA -

Tese apresentada ao
Instituto de Física e Química de São
Carlos, USP, para obtenção do título
de Doutor em Ciências (FÍSICA).

DEPARTAMENTO DE FÍSICA E CIÊNCIA DOS MATERIAIS

1973

Quero expressar ao Prof. Roberto Leal Lobo e Silva Filho meus agradecimentos pela orientação, apoio e incentivo constantes que dispensou na realização deste trabalho.

Ao Prof. Silvestre Ragusa, pelas valiosas discussões, muito obrigado.

Agradeço também ao Sr. Antonio Gallo pelo excelente trabalho de datilografia, ao Paulo R. S. Beatrice pela presteza com que executou os desenhos e ao Centro de Processamento de Dados, Campus de São Carlos, pelos cálculos efetuados.

Este trabalho foi realizado sob o patrocínio dos seguin
tes órgãos:

FAPESP, CNPq, CAPES, CAPES/F.FORD, BNDE/FUNTEC, OEA e FULBRIGHT.

CONTRIBUIÇÕES ORIGINAIS

As contribuições deste trabalho são as seguintes:

- a. O estudo comparativo da interação δ tridimensional em um gás de Fermi, usando a aproximação do campo auto-consistente e o método de função de Green.
- b. O cálculo numérico das razões de aniquilação de positrons em metais alcalinos, utilizando um potencial efetivo elétron-positron obtido pelo método da transformação canônica.
- c. O estudo da formação de positrônio, a partir do potencial efetivo mencionado acima, e sua contribuição para a razão de aniquilação obtida através de um cálculo variacional.
- d. A introdução de um novo modelo para a interpretação da razão de aniquilação de positrons em metais alcalinos de baixa densidade.

RESUMO

Estudamos o problema de um potencial tridimensional δ -atrativo embebido em um gás de Fermi. Calculamos a função de correlação exata gás-impureza em um formalismo de função de Green. Os resultados são comparados com aqueles obtidos na aproximação do campo auto-consistente (SCA). Analisamos o limite de validade da SCA e discutimos o problema do crescimento anômalo da razão de aniquilação de pósitrons em metais de baixa densidade.

Usando como interação elétron-pósitron um potencial efetivo obtido pelo método da transformação canônica, calculamos numericamente as razões de aniquilação de pósitrons em metais alcalinos. Analisamos também, para essa interação efetiva, a possibilidade de formação de positrônio como função da densidade dos metais.

Admitindo a existência de positrônio em metais de baixa densidade, $r_s > 4,5$, apresentamos uma nova interpretação para as razões de aniquilação em metais alcalinos. A justificação desse modelo é baseada em argumentos microscópicos e em dados experimentais. Nosso modelo concorda muito bem com os resultados experimentais.

ABSTRACT

An attractive tridimensional δ -function potential is introduced in a Fermi gas. The contribution to the gas-impurity correlation function of bound states is calculated exactly in a Green's function formalism. The exact results are compared with those obtained in the self consistent field approximation(SCA). The range of validity of the SCA is analysed and the problem of the anomalous enhancement of the positron annihilation rate for a low density electron gas is discussed.

Positron annihilation rates in metals are calculated using the effective electron-positron interaction obtained by the canonical transformation method. The possibility of formation of positronium for such interaction is discussed. An alternative interpretation for the positron annihilation rates in alkali metals is presented assuming the existence of positronium even at metallic densities. This assumption is discussed based on microscopic arguments. The model fits very nicely the experimental points.

ÍNDICE

	Pág.
<u>PREFÁCIO</u>	IV
<u>CAPÍTULO 1 - INTRODUÇÃO À ANIQUILAÇÃO DE POSITRONS EM METAIS</u>	
<u>ALCALINOS</u>	1
1.1 - Regras de seleção para a aniquilação de positrons	3
1.2 - Medidas da vida média	5
1.3 - Correlação angular de dois fótons	8
1.4 - Teoria de aniquilação de positrons em metais	11
<u>CAPÍTULO 2 - POSITRÔNIO E ESTADOS LIGADOS</u>	21
2.1 - O potencial δ para partículas livres	24
2.2 - Aproximação do campo auto-consistente	27
2.3 - Método de função de Green para o potencial δ	33
2.4 - Discussão e comparação dos resultados. Caso das partículas com interação	41
<u>CAPÍTULO 3 - FORMAÇÃO DE POSITRÔNIO E TEORIA DE ANIQUILAÇÃO</u>	
<u>DE POSITRONS EM METAIS ALCALINOS</u>	44
3.1 - Método da transformação canônica	45
3.2 - Interação efetiva elétron-positron	47
3.3 - Razão de aniquilação de positrons	51
3.4 - Cálculo numérico de λ	53
3.5 - Formação de positrônio	58

<u>CAPÍTULO 4 - CONCLUSÕES E SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS</u>	68
<u>APÊNDICE A</u>	
A.1 - Função de Green	70
A.2 - Aproximação de Hartree	72
A.3 - Aproximação de Hartree-Fock	75
A.4 - Aproximação RPA	76
<u>APÊNDICE B</u>	
B.1 - Determinação da energia, E_ℓ , do estado ligado	78
B.2 - Cálculo exato de $f(q, E_\ell)$	79
<u>APÊNDICE C</u>	
- Integração	82
<u>APÊNDICE D</u>	
- Equação integral - solução numérica	85
<u>LISTA DE FIGURAS</u>	89
<u>BIBLIOGRAFIA</u>	93
<u>FIGURAS</u>	95

PREFÁCIO

O estudo do comportamento de positrons em um gás de elétrons de condução se constitui, provavelmente, no problema mais fundamental da física de positrons lentos.

Em metais alcalinos, a distribuição de Fermi dos elétrons de condução tem sido obtida de forma clara através de medidas de correlação angular dos fótons emitidos na aniquilação dos positrons. Para esses metais, a aniquilação ocorre exclusivamente com os elétrons de condução. Esse fato é entendido considerando-se que os "cores" iônicos são pequenos e, sendo positivamente carregados, repelem o positron.

O comportamento de um positron em um gás de Fermi é essencialmente um problema de muitos corpos que apesar de ter sido objeto de muitos trabalhos experimentais e teóricos não está totalmente esclarecido.

Utilizando as técnicas de muitos corpos, vários trabalhos teóricos foram realizados para calcular as razões de aniquilação em metais alcalinos. Dentre os trabalhos que melhores resultados apresentaram podemos citar os de Kahana (15), Sjölander e Stott (26) e Bhattacharyya e Singwi (5).

Neste trabalho, apresentamos uma contribuição para o entendimento do comportamento do positron em metais alcalinos, propondo uma nova interpretação para a razão de aniquilação em metais de baixa densidade, onde as teorias apresentam falhas.

Com o intuito de esclarecer o problema da existência e cálculo de estados ligados em metais, estudamos inicialmente o problema de um gás de Fermi livre interagindo com uma impureza, representada por um potencial tridimensional δ -atrativo. No formalismo de função de Green calculamos exatamente as contribuições, tanto dos estados ligados quanto dos estados de espalhamento para a função de correlação gás-impureza. Os resultados são comparados com aqueles obtidos para a partícula livre e para um gás de Fermi na aproximação do campo auto-consistente, SCA, de Singwi et al (25). A região de validade da SCA é também analisada. Concluindo esse estudo discutimos rapidamente o caso de um gás de Fermi com interação.

Tendo em mente que o estado ligado, positrônio, deve existir em metais de baixa densidade, usamos o método variacional para determinar sua contribuição à razão de aniquilação. O cálculo é efetuado usando como interação elétron-positron o potencial efetivo obtido por L. G. de Freitas (11) através do método da transformação canônica. Obtivemos como resultados: uma indicação da formação de positrônio em metais de densidade r_s , no mínimo, maior $r_s?$ que 6; as razões de aniquilação em boa concordância com os dados experimentais na região de $r_s < 5$ e, um crescimento anômalo em baixas densidades.

Considerando que esse método apresenta as mesmas falhas que as outras teorias, construímos então um modelo onde a aniquilação em metais de baixa densidade é devida a aniquilação do positrônio livre mais a aniquilação dos elétrons livres de Sommerfeld.

VI

Nossos resultados concordam plenamente com os dados experimentais. Na região de altas densidades as teorias existentes são satisfatórias, mostrando que os estados de espalhamento descrevem corretamente a aniquilação.

Os assuntos estão discutidos na seguinte ordem: no Capítulo 1 apresentamos um resumo da aniquilação de positrons em metais, particularmente nos alcalinos. As regras de seleção na aniquilação, os métodos experimentais de medidas de vida média e correlação angular, bem como as teorias mais fundamentais, são apresentados.

No Capítulo 2 discutimos a interação tridimensional δ -atrativa embebida em um gás de Fermi. Analisamos as soluções exatas, obtidas na aproximação do campo auto-consistente (SCA) e no formalismo de função de Green. Os resultados numéricos são comparados e mostrados em gráficos.

No Capítulo 3 calculamos as razões de aniquilação em metais alcalinos, assumindo uma interação efetiva elétron-positron, derivada pelo método da transformação canônica e analisamos a possibilidade da formação de positrônio para essa interação. Propomos uma interpretação alternativa para as razões de aniquilação em metais de baixa densidade, admitindo a existência de positrônio e baseando-nos nas medidas experimentais de correlação angular.

No Capítulo 4 apresentamos as conclusões e algumas sugestões para trabalhos futuros.

VII

No Apêndice A resumimos o cálculo da função de Green de uma partícula e as aproximações de Hartree, Hartree-Fock e RPA.

A bibliografia e as figuras estão situadas no final do trabalho.

CAPÍTULO 1

INTRODUÇÃO À ANIQUILAÇÃO DE POSITRONS EM METAIS

ALCALINOS

A existência do positron como a antipartícula do elétron é uma consequência fundamental da teoria de Dirac. Após sua descoberta por Anderson (1) em 1932, foram realizadas muitas experiências para comprovar as predições da teoria tais como, a igualdade entre as massas de repouso do elétron e do positron, a aniquilação do par elétron-positron com a emissão de dois raios- γ , cada um de energia $mc^2 = 511 \text{ keV}$, etc.

Em 1949, Shearer e Deutsch (23), investigando a aniquilação de positrons em gases diluídos verificaram que o decaimento não era proporcional à pressão do gás, o que contrariava a teoria. A explicação era que a aniquilação ocorria em um sistema ligado, o positrônio, um sistema idêntico ao átomo de hidrogênio, onde o positron ocupa o lugar do próton.

Os trabalhos em aniquilação de positrons em gases contribuíram consideravelmente para que o processo de aniquilação fosse usado como uma técnica nas investigações das interações dos positrons com a matéria. As primeiras experiências em sólidos foram realizadas por De Benedetti e Richings (9) e Bell e Graham (4). Uma das grandes virtudes do uso de positrons como uma técnica é que um positron de alta energia pode penetrar no interior da

amostra e se tornar um membro real de seu sistema eletrônico.

Fundamentalmente há dois tipos de experiências com positrons interagindo com a matéria, a saber, medidas da vida média dos positrons e medidas da correlação angular dos fótons emitidos na sua aniquilação. Em metais, as medidas da vida média dão informações sobre a interação do positron com os elétrons enquanto em outras substâncias, obtêm-se informações sobre os processos de colisões, como por exemplo, a seção de choque de espalhamento médio do positron pelos átomos. As medidas de correlação angular revelam a distribuição de momentos dos elétrons na matéria o que é de grande interesse no estudo da superfície de Fermi dos metais.

Uma limitação no uso de positrons para estudar a estrutura eletrônica dos sólidos deve-se ao fato de que a forte interação coulombiana do positron modifica as funções de onda dos elétrons.

Neste capítulo limitaremos a discussão à aniquilação em dois fótons, pois, além de conter, em princípio, todas as informações do sistema, é o processo de aniquilação observado nos metais.

Faremos uma breve revisão da aniquilação de positrons em sólidos, particularmente em metais. Na seção 1.1 descrevemos as regras de seleção da aniquilação; na seção 1.2 apresentamos as medidas experimentais da vida média dos positrons em sólidos; na seção 1.3 é feito um estudo da correlação angular dos fótons emitidos na aniquilação, especialmente a correlação angular de dois fótons, e na seção 1.4 damos um breve resumo das teorias de aniquilação em metais.

1.1 - Regras de seleção para a aniquilação de positrons

(31)

Um par elétron-positron pode aniquilar-se emitindo ^{Novo} um, dois, três ou mais fótons. Para que haja conservação de energia e momento, a aniquilação em um fóton se dá na presença de uma terceira partícula. A aniquilação de um par elétron-positron ligado, em repouso, em dois fótons de mesmo comprimento de onda e caminhando em sentidos opostos, se dá com uma vida média da ordem de 10^{-10} seg. A aniquilação em três fótons ocorre em um tempo maior, $\sim 10^{-7}$ seg., pois o processo é de ordem mais alta.

Consideremos dois fótons de igual comprimento de onda propagando-se em sentidos opostos ao longo do eixo z. Para esse sistema há quatro estados possíveis; ψ^{RR} , ψ^{LL} , ψ^{RL} , ψ^{LR} , onde o primeiro índice se refere à polarização circular do fóton propagando-se na direção +z, e o segundo índice ao outro fóton. Esquemmatizando, temos:

O comportamento desses estados sob uma rotação de um ângulo σ , R_σ , em torno do eixo z, uma rotação de 180° , R_θ , em torno do eixo x e uma inversão, P, estão resumidos nas Tabelas I e II.

Tabela I - Autovalores das rotações R_σ e R_θ e da inversão P para os estados dos dois fótons

	$\psi^{RR} + \psi^{LL}$	$\psi^{RR} - \psi^{LL}$	ψ^{RL}	ψ^{LR}
R_σ	1	1	$e^{2i\sigma}$	$e^{-2i\sigma}$
R_θ	1	1		
P	1	-1	1	1

Tabela II - Momento angular J e paridade P dos estados dos dois fótons

$P \backslash J$	0	1	2, 4, 6, ...	3, 5, 7, ...
par	$\psi^{RR} + \psi^{LL}$	proibida	$\psi^{RR} + \psi^{LL}, \psi^{RL}, \psi^{LR}$	ψ^{RL}, ψ^{LR}
ímpar	$\psi^{RR} - \psi^{LL}$	proibida	$\psi^{RR} - \psi^{LL}$	proibida

Como partículas e antipartículas (férmions) têm paridades opostas, a paridade intrínseca do par elétron-positron, no estado fundamental, é ímpar com a convenção de que o vácuo tenha paridade par. O par elétron-positron tanto no estado singleto (spin zero) como no estado triplete (spin 1) tem paridade ímpar. Entretanto, como mostram as Tabelas acima, o estado triplete não pode decair em dois fótons pois não conserva momento angular, enquanto que o estado singleto pode decair em dois fótons sem violar as re

gras de seleção. O estado triplete poderá decair no mínimo em três fótons através de interações de ordem mais alta e então terá vida média mais longa.

A razão de decaimento do estado singlete, λ_s , em dois fótons é igual a

$$\lambda_s = 0,804 \times 10^{10} \text{ seg}^{-1}$$

e para o triplete, λ_T , decaindo em três fótons

$$\lambda_T = 7,2 \times 10^6 \text{ seg}^{-1} .$$

1.2 - Medidas da vida média

As primeiras medidas de vida média de positrons foram realizadas por Bell e Graham (4) utilizando um par de espectrômetros de raios β colocados extremidade a extremidade como esquematizado na Figura 1. Os positrons emitidos pela fonte passam pelo cristal de estilbene acusando um tempo zero em um circuito de coincidência ao qual os dois contadores de cintilação estão conectados. Ao passar pelo espectrômetro esquerdo, os positrons além de serem selecionados em energia e trajetória, são focalizados na fenda do diafragma central que separa os espectrômetros.

Removendo a amostra, os positrons chocam-se diretamente com o cristal cintilador direito e os dois contadores acionam o circuito de coincidência. As medidas da razão da contagem da coincidência como uma função do tempo de atraso inserido no circuito

de coincidência, são usadas para determinar a curva de resolução de coincidência $P(x)$.

Quando a amostra for colocada em sua posição, os positrons serão absorvidos por ela e o contador da direita detetará u ma fração dos fótons da aniquilação. Consequentemente o circuito de coincidência irá registrar atrasos na coincidência resultando em uma curva transladada para a direita com relação a $P(x)$.

O deslocamento no pico da curva de resolução de coincidência dá a vida média do positron na amostra. Na Figura 2 mostramos a curva obtida para o alumínio a qual é uma curva típica para metais e cristais iônicos. Essa curva de resolução não é suficiente para indicar se a aniquilação de positrons segue ou não uma lei exponencial simples.

Em contraste com isso, na curva de resolução de coincidência para o quartzo fundido, Figura 3, há uma cauda bem definida correspondendo a um decaimento exponencial, de vida média mais longa que a do alumínio.

A curva é vista naturalmente como tendo duas componentes, a saber, uma de vida média $\tau_1 \approx 3,5 \times 10^{-10}$ seg e a outra, um decaimento aparentemente exponencial, de vida média $\tau_2 \approx 1,8 \times 10^{-9}$ seg. Esses valores são obtidos da seguinte maneira. Da inclinação da cauda e do conhecimento da curva padrão $P(x)$ podemos calcular a parte da curva de resolução devida somente a τ_2 (linha interrompida na Figura 3); a parte associada com a vida média curta τ_1 é obtida por subtração (linha pontilhada na Figura 3).

A vida média curta, τ_1 , é característica de metal homogêneo, enquanto que a vida média longa, τ_2 , é caracterizada pela aniquilação na superfície, bem como pelos defeitos na rede, em metais. As razões de aniquilação, isto é, o inverso da vida média, para os metais alcalinos Li, Mg, Na, K, Rb e Cs caem em uma curva suave, Figura 7, que se aproxima da razão de aniquilação do positrônio para os metais de baixa densidade eletrônica.

Weisberg e Berko (32) repetindo, com maior precisão, as medidas em metais alcalinos, obtiveram uma boa concordância com as vidas médias curtas determinadas anteriormente por Bell e Jorgensen (3). Entretanto, o Li apresentou vida média longa com uma intensidade de 0,6%, uma ordem de grandeza mais baixa que a da Ref. (3).

Em halogenetos alcalinos os positrons decaem em pelo menos dois processos diferentes (6). A vida média curta, $\tau_1 \approx 2 \times 10^{-10}$ seg, é atribuída à aniquilação dos positrons quando livres. A vida média longa, $\tau_2 \approx 4$ a 8×10^{-10} seg, ocorre com uma intensidade entre 25 e 85% e é correlacionada com a densidade molecular. Observou-se que o "quenching" magnético da componente τ_2 é muito menor que aquele esperado quando se atribui essa componente ao decaimento do positrônio. Esse fato reforçou mais uma vez que um sistema ligado tem as mesmas propriedades do positrônio livre e, não pode existir em halogenetos alcalinos.

1.3 - Correlação angular de dois fótons

A correlação angular de dois fótons emitidos na aniquilação de positrons em sólidos foi primeiramente discutida por De Benedetti, Cowan, Konneker e Primakoff (8) em 1949. Daí para frente, um grande número de trabalhos apareceu. Os mais extensivos experimentos usando metais foram realizados por Stewart (12,27,28) e pelo grupo de De Benedetti (16,17).

Resumiremos aqui as idéias centrais do método de correlação angular de dois fótons.

Se o sistema elétron-positron estivesse em repouso os dois fótons sairiam exatamente opostos e poderiam ser detetados por dois contadores, montados entre duas fendas em um plano horizontal. Entretanto, na aniquilação, o par tem, em geral, momento não nulo implicando em um certo ângulo entre os fótons emitidos. Um dos contadores pode-se mover verticalmente e a curva de coincidência irá indicar o número de pares com uma certa componente do momento ao longo do eixo vertical, z .

Se o par que se aniquilar tiver momento p ($\ll mc$), o ângulo entre os fótons será $\theta \approx p/mc$. A componente z do momento poderá então ser obtida em termos da distância d entre os contadores e da altura do contador móvel, como sendo

$$p_z = 2 mc \left(\frac{z}{d} \right) \quad (1.3.1)$$

Definindo $p(p)$ como a distribuição de probabilidade de

encontrar um par de fótons com momento entre $\underline{p}$ e $\underline{p} + d\underline{p}$, a razão da contagem $\rho_o(p_z)$ será então

$$\begin{aligned}\rho_o(p_z) &= \int \rho(\underline{p}) \, dp_x \, dp_y \\ &= \int_0^\infty \rho(\underline{p}) \, 2\pi p \, dp\end{aligned}\tag{1.3.2}$$

onde

$$p^2 = p_x^2 + p_y^2$$

A eq. (1.3.2) pode ser escrita como

$$\rho_o(p_z) = 2\pi \int_{p_z}^\infty \rho(\underline{p}) \, p \, dp\tag{1.3.3}$$

com $p^2 = p_z^2 + p_z^2$. Se $\rho(\underline{p})$ for uma função isotrópica, então $\rho(p_z)$ pode ser encontrado como sendo

$$\begin{aligned}\rho(p_z) &= - \frac{1}{2\pi p_z} \frac{d\rho_o(p_z)}{dp_z} \\ &= \frac{\text{const}}{z} \frac{dI(z)}{dz}\end{aligned}\tag{1.3.4}$$

onde $I(z)$, razão da contagem, é uma função da elevação z do contador e é proporcional a $\rho_o(p_z)$. Combinando a eq. (1.3.1) com a eq. (1.3.4) podemos determinar a densidade ρ .

De acordo com a teoria de Sommerfeld, a curva da razão da contagem como função do ângulo entre os fótons é uma parábola invertida que podemos obter da eq. (1.3.3) como

$$\rho_0(p_z) = \begin{cases} \pi(p_F^2 - p_z^2) & \text{para } p_z \leq p_F \\ 0 & \text{para } p_z > p_F \end{cases} \quad (1.3.5)$$

Lang e De Benedetti (16) analisando as curvas de correlação angular distinguiram entre metais para os quais a curva de distribuição angular consiste em uma parábola invertida com uma cauda para ângulos grandes e metais em que a curva se aproxima melhor a uma gaussiana.

Nas figuras 4, 5 e 6 mostramos tanto as densidades de momentos $\rho(p)$ quanto as distribuições de momentos, $N(p)$, definidas como

$$N(p) = 4\pi p^2 \rho(p).$$

Esses resultados são notáveis por mostrar que os fótons têm uma distribuição de momento de elétrons livres superposta a uma distribuição achatada. Isso implica que a maior parte dos positrons se aniquilam com elétrons livres e com aproximadamente a mesma probabilidade.

Em metais de grande "gaussiana", a maior parte da "gaussiana" é atribuída à aniquilação dos positrons com elétrons do "core". Entretanto, não há uma correspondência direta entre a parte parabólica e a aniquilação com os elétrons de condução, bem como entre a componente "gaussiana" e a aniquilação com elétrons do "core".

Como a distância que o positron penetra no interior da

matéria é limitada pelo valor da blindagem da carga nuclear, então, ele terá maior chance de penetrar no "core" de um metal monovalente do que em um material de valência mais alta, como o carbono, por exemplo. Acontece, porém, que exatamente nos metais alcalinos a correlação angular é melhor explicada em termos da teoria do elétron livre. As camadas internas contribuem apenas para as pequenas caudas da distribuição, que são insignificantes nesses metais. Consequentemente, a aniquilação com elétrons do "core" não dá uma explicação das grandes caudas encontradas em alguns elementos da Figura 4 e em todos da Figura 5.

Weisberg e Berko (32) analisando as medidas experimentais das razões de aniquilação nos metais K, Rb e Cs concluíram que uma parte apreciável da componente "gaussiana" desses metais deveria ser devido a aniquilação na banda de condução. Em outras palavras, a "gaussiana" é muito grande para ser devida somente a aniquilação com elétrons do "core".

Como vamos mostrar no Capítulo 3, acreditamos na formação de positrônio nesses metais e ele seria responsável pela maior contribuição da razão de aniquilação.

1.4 - Teorias de aniquilação de positrons em metais

As teorias de aniquilação de positrons em metais, particularmente em metais alcalinos, tem sido muito elaboradas recentemente e os resultados obtidos concordam razoavelmente bem com os dados experimentais.

O ponto de partida para o cálculo da razão de aniquilação em metais foi a teoria do elétron livre de Sommerfeld. Nessa teoria um metal se distingue do outro apenas pela densidade eletrônica que, convenientemente, é especificada por r_s , uma grandeza adimensional definida como $r_s = r_o/a_o$, onde r_o é a distância média entre os elétrons e a_o o raio de Bohr.

Como foi discutido por Ferrell (10), a razão de aniquilação de positrons é proporcional à densidade de elétrons em torno do positron, tomando-se a média sobre todas as posições dos positrons. A razão de aniquilação λ , é obtida então como

$$\lambda = \frac{1}{4} \lambda_{\text{pos}} \frac{n}{n_{\text{pos}}} \quad (1.4.1)$$

onde

$$\lambda_{\text{pos}} = 0,804 \times 10^{10} \text{ seg}^{-1}$$

e

$$n_{\text{pos}} = 1/8\pi a_o^3$$

são a razão de aniquilação e a densidade do positrônio, respectivamente. n é a densidade dos elétrons em torno do positron e o fator $1/4$ vem da média em spin, lembrando que a aniquilação em dois fótons ocorre no estado singleto.

Na teoria de Sommerfeld, a densidade de elétrons é

$$n = 1/(4\pi r_o^3/3) = 3/4\pi a_o^3 r_s^3 \quad (1.4.2)$$

resultando para a razão de aniquilação λ_{Somm} , o valor

$$\lambda_{\text{Somm}} = \frac{12,0}{r_s^3} \times 10^9 \text{ seg}^{-1} \quad (1.4.3)$$

Os valores teóricos obtidos da eq. (1.4.3) para vários metais estão muito abaixo dos dados experimentais, como mostra a Figura 7. Essencialmente a falha dessa teoria consiste em considerar a densidade dos elétrons em torno do positron como sendo a densidade média. Na realidade a densidade em torno do positron deve ser muito maior do que a densidade eletrônica média, devido a atração coulombiana positron-elétrons.

O cálculo da polarização do gás de elétrons em torno do positron é inerentemente um problema quântico de muitos corpos que deve levar em consideração, além da atração elétron-positron, os seguintes efeitos: a interação coulombiana elétron-elétron, o princípio de incerteza de Heisenberg e o princípio de exclusão de Pauli.

A inclusão de tais efeitos na teoria foi realizada por Ferrell (10) seguindo o trabalho de Bohm e Pines (7) para o gás de elétrons. Aqui, a interação coulombiana de longo alcance é removida restando uma parte de curto alcance que é suficientemente fraca, possibilitando que o problema seja tratado em termos da teoria de perturbação.

A parte de curto alcance da interação coulombiana elétron-positron é a mesma, exceto em sinal, que aquela entre elétrons da Ref. (7), sendo dada por

$$H_{c.a}(\underline{r}) = - \sum_{\underline{p} > \underline{p}_c} \frac{4\pi e^2}{p^2} e^{i\underline{p} \cdot \underline{r}} \quad (1.4.4)$$

onde $\underline{p}_c$ é o número de onda crítico de Bohm e Pines, acima do qual não há oscilação no gás, e $\underline{r}$ é a coordenada relativa do par.

Introduzindo as coordenadas do positron e do elétron, $\underline{r}_0$ e $\underline{r}_1$, a função de onda do par, em primeira ordem de perturbação, pode ser escrita como

$$\begin{aligned} \psi(\underline{r}_0, \underline{r}_1) &= \psi_0 + \psi_1 \\ &= \psi_0 + \frac{4\pi}{a_0} \sum_{\substack{\underline{p} > \underline{p}_c \\ |\underline{p}_1 + \underline{p}| > p_F}} \frac{e^{-i\underline{p} \cdot (\underline{r}_0 - \underline{r}_1)}}{p^2 (p^2 + \underline{p} \cdot \underline{p}_1)} \psi_0 \end{aligned} \quad (1.4.5)$$

onde ψ_0 , a função de onda de ordem zero, é um produto de ondas planas para o positron e o elétron. Os limites do somatório correspondem às restrições à interação de curto alcance e ao princípio de exclusão de Pauli.

A densidade de elétrons em torno do positron ($\underline{r}_1 = \underline{r}_0$) é então obtida e conseqüentemente a razão de aniquilação é determinada. Os resultados desses cálculos apesar de indicarem que a correção estava na direção certa, mostraram que a razão de aniquilação para elétrons rápidos era da ordem de 10 a 20% maior do que para elétrons lentos. Isso contradiz a expectativa desde que quanto mais lentos forem os elétrons, mais defletidos eles serão pelo

campo coulombiano. Essa teoria falha porque trata a interação como uma perturbação, subestimando a blindagem eletrônica do positron.

A primeira teoria bem sucedida para a aniquilação de positrons em metais de alta densidade, $r_s < 4$, é devida a Kahana (15). A teoria consiste em determinar a função de correlação do par elétron-positron através de uma equação de dois corpos que contenha tanto a interação coulombiana blindada quanto o princípio de exclusão de Pauli.

A função de correlação do par elétron-positron é definida como

$$g_{ep}(\underline{x}_e - \underline{x}_p) = \langle \psi^+(\underline{x}_e t) \psi(\underline{x}_e t) \phi^+(\underline{x}_p t) \phi(\underline{x}_p t) \rangle \quad (1.4.6)$$

onde $\psi^+(\underline{x}_e t)$ é, no formalismo de Heisenberg, o operador que cria elétrons enquanto $\phi^+(\underline{x}_p t)$ cria positrons. Essa função dá a densidade eletrônica em $\underline{x}_e$ quando um positron se encontrar em $\underline{x}_p$.

$g_{ep}(\underline{x}_e - \underline{x}_p)$ está relacionada com a função de Green, G_{ep} , do par elétron-positron pela expressão

$$g_{ep}(\underline{x}_e - \underline{x}_p) = (-i)^2 G_{ep}(\underline{x}_e t, \underline{x}_p t; \underline{x}_e t^+, \underline{x}_p t^+) \quad (1.4.7)$$

onde, por definição

$$G_{ep}(\underline{x}_1, \underline{x}_2; \underline{x}'_1, \underline{x}'_2) = (-i)^2 \langle T(\psi(\underline{x}_1) \phi(\underline{x}_2) \phi^+(\underline{x}'_2) \psi^+(\underline{x}'_1)) \rangle \quad (1.4.8)$$

T em (1.4.8) é o operador cronológico que ordena os operadores de campo em ordem decrescente no tempo.

A densidade eletrônica n em torno do positron é dada pelo limite da função de correlação do par elétron-positron,

$$g_{ep}(\underline{x}_e - \underline{x}_p)$$

quando

$$\underline{x}_e - \underline{x}_p \rightarrow 0$$

Se as interações forem desprezadas (teoria de Sommerfeld)

$$G_{ep}(x_1, x_2 ; x'_1, x'_2)$$

aparece como

$$G_{ep}(x_1, x_2 ; x'_1, x'_2) = G_e^0(x_1, x'_1) G_p^0(x_2, x'_2)$$

(1.4.9)

onde

$$G_e^0(x_1, x'_1) = (-i) \langle T(\psi(x_1) \psi^+(x'_1)) \rangle$$

(1.4.10)

$$G_p^0(x_2, x'_2) = (-i) \langle T(\phi(x_2) \phi^+(x'_2)) \rangle$$

são as funções de Green para o elétron e positron livres, respectivamente.

As equações de movimento para o sistema com interação a coplam a função de Green do par elétron-positron às funções que envolvem uma, duas ou três partículas. Entretanto restringiremos nossa atenção à equação integral para G_{ep} na sua forma mais sim-

ples. Formalmente temos

$$G_{ep}(x_1, x_2; x'_1, x'_2) = G_e^0(x_1, x'_1) G_p^0(x_2, x'_2) + (-i) \times \int d^4 y d^4 z d^4 y' d^4 z' G_e^0(x_1, y) G_p^0(x_2, z) I(yz; y'z') G_{ep}(y', z'; x'_1, x'_2) \quad (1.4.11)$$

I é escolhido como sendo a interação efetiva elétron-po-
sitron dado por

$$I(x_1 x_2; x'_1 x'_2) = u(x_1 - x_2) \delta^4(x_1 - x'_1) \delta^4(x_2 - x'_2) \quad (1.4.12)$$

com $u(x_1 - x_2)$ satisfazendo a seguinte equação integral

$$u(x_1 - x_2) = v_{ep}(x_1 - x_2) + (-i) \int d^4 y d^4 y' \times v_{ee}(x_1 - y) G_e^0(y, y') G_p^0(y, y') u(y' - x_2) \quad (1.4.13)$$

onde $v_{ee} = -v_{ep}$ é o potencial coulombiano elétron-elétron.

Introduzindo as transformadas de Fourier, a eq.(1.4.13) pode ser escrita como

$$u_{\underline{p}}(\omega) = v_{\underline{p}} / \varepsilon(\underline{p}, \omega) \quad (1.4.14)$$

$$\varepsilon(\underline{p}, \omega) = 1 + 2 v_{\underline{p}} Q_{\underline{p}}(\omega) \quad (1.4.15)$$

$$Q_{\underline{p}}(\omega) = \frac{1}{(2\pi)^4} \int d\underline{q} dE G_{\underline{q}+\underline{p}}^0(\omega+E) G_{\underline{q}}^0(E) \quad (1.4.16)$$

onde $\epsilon(p, \omega)$ é a constante dielétrica do gás de elétrons.

Conhecida a função de Green do par elétron-positron, obtem-se então a densidade de elétrons em torno do positron

$$n = (-i)^2 \int d\tilde{x} \lim_{t' \rightarrow t^+} G_{ep}(\tilde{x}t, \tilde{x}t; \tilde{x}t', \tilde{x}t') \quad (1.4.17)$$

O cálculo numérico da razão de aniquilação foi então efetuado, utilizando como interação o potencial coulombiano blindado pela constante dielétrica do R P A. Os resultados obtidos estão em boa concordância com os dados experimentais na região de alta densidade. Na região de baixa densidade, essa teoria superestima a blindagem da interação acarretando em um crescimento anômalo da razão de aniquilação. Ver Figura 7.

Em 1972, Sjölander e Stott (26) apresentaram uma extensão da teoria do campo auto-consistente de Singwi et al (25) para calcular a densidade da carga induzida em torno de uma partícula carregada em um gás de elétrons. Na seção 2.2 apresentamos um breve resumo dessa aproximação.

A aplicação desse método na determinação da densidade eletrônica em torno do positron e consequentemente da razão de aniquilação apresentou as mesmas falhas, como nas mais convencionais aproximações de matriz T, isto é, mostra um aumento anômalo na região de baixa densidade, Figura 7. Por outro lado, essa teoria também não prevê a existência de estado ligado.

Em um trabalho mais recente, Bhattacharyya e Singwi (5) usaram a generalização de Sjölander e Stott com a função de correlação do par,

$$g_{ep}(\underline{x}_e, \underline{x}_p; t)$$

sendo dada por

$$g_{ep}(\underline{x}_e, \underline{x}_p; t) = g_{ep}^e(\underline{x}_e - \underline{x}_p) + an \frac{\partial}{\partial n} g_{ep}^e(\underline{x}_e - \underline{x}_p) \quad (1.4.18)$$

onde $g_{ep}^e(\underline{x}_e - \underline{x}_p)$ é a função de correlação estática, de equilíbrio, n é a densidade de elétrons e a é um parâmetro. Para $a = 0$, obtém-se o trabalho de Sjölander e Stott.

O ponto importante a ser notado nessa nova formulação é que ela contém explicitamente os efeitos da função de correlação de três partículas através da derivada da função de correlação de duas partículas (30).

Os resultados obtidos para a razão de aniquilação de positrons em metais alcalinos concordam muito bem com os dados experimentais, como mostra a Figura 7. Entretanto, essa teoria está sujeita a duas críticas fundamentais. A primeira delas é a provável inexistência de estado ligado em baixa densidade e a outra é relativa ao parâmetro a que foi ajustado para que os resultados concordassem com os dados experimentais. O parâmetro a foi escolhido nesse cálculo como sendo $a = 0,11$ contrariando os resultados previstos por Vashishta e Singwi (30), no qual eles mostram

que a depende de r_s e deve satisfazer a inigualdade

$$1 \geq a(r_s) > 1/2 \quad (1.4.19)$$

CAPÍTULO 2

POSITRÔNIO E ESTADOS LIGADOS

O problema de muitas partículas tem sido a grande dificuldade para o entendimento da física da matéria condensada. Há muitos anos que ele vem sendo objeto de uma extensa literatura (21).

Muitas técnicas teóricas foram elaboradas, tais como funções de Green, gráficos, teoria do campo auto-consistente e outras, contribuindo substancialmente para se entender melhor os sistemas de muitas partículas. Uma das teorias mais bem sucedidas no tratamento de líquidos quânticos é a teoria da aproximação do campo auto-consistente, desenvolvida por Singwi et al (25), que abreviaremos como SCA (Self Consistent Approximation). Relembramos que a teoria de Singwi é uma das muitas teorias de aproximação de campo auto-consistente mas, como seus resultados para o gás de elétrons são extremamente bons, ela será assunto de discussão neste trabalho.

A hipótese considerada na SCA tem sido discutida sob diferentes formas. Entretanto, damos uma breve explicação do método, usando a hipótese original que nos parece a mais intuitiva. A idéia central consiste em considerar que campos macroscópicos de longo alcance, bem como as funções de correlação que os geram, possam ser tratados semiclassicamente.

Para obter um campo auto-consistente agindo na função distribuição de uma partícula, desacoplamos, e essa é a hipótese, a função distribuição de duas partículas em um produto de funções de distribuição de uma partícula vezes a função de correlação estatística $g(r)$

$$f_2(r_1, p_1 ; r_2, p_2 | t) = f_1(r_1, p_1 ; t) f_1(r_2, p_2 ; t) \\ \times g(r_1 - r_2)$$

Esse desacoplamento deixa para $g(r)$ uma equação integral que pode ser resolvida numericamente.

Sjölander e Stott estenderam a SCA para o caso da interação de um gás de elétrons com impurezas. O método é muito atraente porém, como mencionam os autores, não foi bem sucedido no tratamento de impurezas positivas e de massa infinita. Por outro lado, a razão de aniquilação de positron em metais alcalinos sofreu também das mesmas falhas, como nas mais convencionais aproximações de matriz T , isto é, ela mostra um crescimento anômalo na região de baixa densidade (26).

Pouco tempo após o trabalho de Sjölander e Stott, Bhattacharyya e Singwi (5) calcularam outra vez a razão de aniquilação de positrons em metais alcalinos obtendo, através de uma hipótese ligeiramente diferente, uma excelente concordância com os dados experimentais. Entretanto, não ficou claro se a teoria pode ou não englobar estados ligados e, de uma maneira mais geral, quando

a SCA seria correta, mesmo na ausência de estados ligados.

Com o objetivo de esclarecer alguns desses problemas, decidimos escolher um sistema muito simples; um gás de Fermi com um potencial fixo dado por uma função δ atrativa - na prática o potencial de uma impureza pode ser idealizado como uma função δ . A razão para essa escolha se prende à possibilidade de encontrarmos soluções fechadas para a densidade de partículas induzidas em torno do potencial.

Um problema bem conhecido do potencial δ atrativo tridimensional é que ele deve ser renormalizado para que tenhamos resultados finitos. O procedimento para a renormalização bem como a solução para partículas livres, estão descritos na seção 2.1.

Na seção 2.2, apresentamos uma rápida explicação da SCA, a renormalização é discutida outra vez e uma solução fechada para a densidade de partículas é encontrada.

Na seção 2.3 tratamos o problema pelo método de funções de Green e encontramos uma solução exata. Discutimos quatro possíveis casos para o potencial δ renormalizado e mostramos que a solução para estado ligado está fora do escopo da SCA. Entretanto, para potenciais fracos e repulsivos a SCA é correta e mais, nesse caso, ela é exata em primeira ordem na interação. Em uma região intermediária a SCA não é exata, mas pode ser considerada uma boa aproximação se a contribuição do estado ligado não for preponderante. O caso de um sistema de Fermi com interação é rapidamente discutido na seção 2.4, onde os resultados são analisados.

Os resultados numéricos tanto para a SCA quanto para a solução exata da função de Green são comparados e mostrados em gráficos.

2.1 - O potencial δ para partículas livres

A existência de estados ligados para potencial δ atrativo tridimensional é bem conhecida na literatura. Güttinger et al (13) mostraram que o problema do estado ligado está essencialmente relacionado a efeitos de ressonância e que, para um potencial δ atrativo tridimensional, a existência do estado ligado requer uma interação que, em um processo limite vá a zero, de tal maneira que os estados de ressonância sejam preservados.

Nesta seção recalculamos esses resultados com o intuito de tornar a exposição completa e, ao mesmo tempo, introduzir o processo de renormalização que será efetuado outras vezes neste trabalho.

Consideremos então uma partícula sem spin, na presença de um potencial atrativo muito localizado $\phi(\underline{r})$, de intensidade A , que é colocado no ponto $\underline{r} = 0$, dado por uma função δ , como

$$\phi(\underline{r}) = A \delta(\underline{r}) \quad (2.1.1)$$

Em um sistema de unidades em que $2m = \hbar = 1$, a equação de Schrödinger para aquela partícula, no espaço de coordenadas é dada por

$$-\nabla^2 \psi(\underline{r}) + A \delta(\underline{r}) \psi(\underline{r}) = E \psi(\underline{r}) \quad (2.1.2)$$

Reescrevendo a eq.(2.1.2) no espaço de momentos, obtemos para $\psi(\underline{p})$ a expressão

$$\psi(\underline{p}) = \frac{A \sum_{\underline{p}'} \psi(\underline{p}')} {E - p^2} \quad (2.1.3)$$

Somando os dois membros da eq.(2.1.3) para todo $\underline{p}$, obtemos uma equação implícita para a energia E dada por

$$\frac{1}{A} = \sum_{\underline{p}} \frac{1}{E - p^2} \quad (2.1.4)$$

Como vemos, o lado direito dessa equação é divergente para todo E . Entretanto, essa divergência pode ser eliminada adicionando e subtraindo à eq.(2.1.4) um termo da forma

$$\sum_{\underline{p}}^K \frac{1}{p^2}$$

Então, podemos reescrever a eq.(2.1.4) em termos de uma interação renormalizada, β , definida como

$$\frac{1}{A} + \sum_{\underline{p}=0}^K \frac{1}{p^2} = \sum_{\underline{p}=0}^K \frac{E}{p^2 (E - p^2)} = \frac{1}{\beta} \quad (2.1.5)$$

onde $K \rightarrow \infty$ no final dos cálculos.

Calculando as integrais em $\underline{p}$ dessa última equação, encontramos para a energia E do estado ligado a seguinte expressão

$$\frac{1}{A} + \frac{1}{2\pi^2} K = \frac{|E|^{1/2}}{2\pi^2} \operatorname{tg}^{-1} \left(\frac{K}{|E|^{1/2}} \right) + \quad (2.1.6)$$

Efetuada agora o processo limite $A \rightarrow 0$ e $K \rightarrow \infty$ de tal forma que

$$\lim_{A \rightarrow 0 \quad K \rightarrow \infty} \left[\frac{1}{A} + \frac{1}{2\pi^2} K \right] = \frac{1}{\beta} \quad (2.1.7)$$

onde $1/\beta$ é finito e positivo, determinamos o valor da energia E_ℓ para o estado ligado

$$E_\ell = \frac{-16 \pi^2}{\beta^2} \quad (2.1.8)$$

Se $\beta < 0$, a eq.(2.1.5) não admite solução para estado ligado.

Na Figura 8 mostramos esquematicamente a solução gráfica da eq.(2.1.5) para $\beta > 0$.

Com a finalidade de verificar a possibilidade de ressonância, definimos em um poço quadrado um potencial de alcance $1/K$ como sendo

$$V = -2 A K^3 \quad (2.1.9)$$

O vetor de onda k , no interior desse potencial será então

$$k = (E - V)^{1/2} = (E - 2AK^3)^{1/2} \quad (2.1.10)$$

Requerendo que um comprimento de onda esteja contido nesse potencial, isto é, que $2\pi/k \rightarrow 1/K$, encontramos imediatamente que essa condição combinada com a eq.(2.1.10) implicam em

$$AK/2\pi^2 \rightarrow -1$$

Essa forma de obter esse limite, $AK/2\pi^2 \rightarrow -1$, é precisamente caracterizada por $1/\beta$ na eq.(2.1.7), isto é, $1/\beta = \lim(1/A + K/2\pi^2)$. Vamos então que os estados de ressonância são preservados no processo limite, eq.(2.1.7), com $1/\beta$ sendo uma medida da proximidade para a ressonância. Quando $1/\beta \rightarrow 0$ temos seguramente uma ressonância verdadeira.

2.2 - Aproximação do campo auto-consistente

Recentemente Singwi et al (25) desenvolveram um novo tratamento para a função dielétrica de metais, na região de densidade dos metais alcalinos ($1 \leq r_s \leq 6$). Nessa teoria as correlações de curto alcance, responsáveis pela correção de campo local, são calculadas de uma forma auto-consistente, resultando para a função dielétrica uma funcional da função de auto-correlação $g(\underline{r})$ do gás de elétrons.

A hipótese, no caso semi-clássico, é substituir a função distribuição de duas partículas, na equação de Liouville, pela função distribuição de uma partícula,

$$f_2(\underline{r}, \underline{p} ; \underline{r}', \underline{p}' | t) = f_1(\underline{r}, \underline{p} | t) f_1(\underline{r}', \underline{p}' | t) g(\underline{r} - \underline{r}') \quad (2.2.1)$$

o que torna possível obter um esquema fechado para calcular a função de correlação $g(\underline{r})$ como se segue.

A transformada de Fourier de $g(r)-1$ é

$$\frac{1}{\rho} [S(q) - 1] \quad (2.2.2)$$

onde ρ é a densidade média do fluido e $S(q)$ o fator de estrutura estática. O fator de estrutura está relacionado com a suscetibilidade do fluido através da relação

$$S(q) = - \frac{1}{\pi \rho} \int_0^\infty d\omega \operatorname{Im} [\chi(q, \omega)] \quad (2.2.3)$$

Com a hipótese usada acima a suscetibilidade do fluido é

$$\chi(q, \omega) = \frac{\chi_0(q, \omega)}{1 - \psi(q) \chi_0(q, \omega)} \quad (2.2.4)$$

onde $\chi_0(q, \omega)$ é a suscetibilidade do sistema sem interação, com a mesma massa, densidade e estatística daquele em consideração. $\psi(q)$ é o potencial auto-consistente, dado por

$$\psi(q) = \phi(q) + \frac{1}{\rho} \int \frac{dq'}{(2\pi)^3} \frac{q \cdot q'}{q^2} \phi(q') [S(q-q') - 1] \quad (2.2.5)$$

onde $\phi(q)$ é o potencial nu de interação partícula-partícula.

A suscetibilidade passa a ser agora uma funcional de $S(q)$ fechando então o esquema.

A SCA representa um aperfeiçoamento substancial na teoria do gás de elétrons, explicando, a partir de primeiros princípios, muitos resultados experimentais, como podemos verificar pelo grande número de trabalhos que usam essa teoria como ponto de partida (20, 24, 26).

Sjölander e Stott (26) estenderam a teoria para o caso de diferentes partículas a e b, e em um procedimento auto-consistente calcularam a função de correlação $g^{ab}(\underline{r})$. Essa nova aproximação pode ser utilizada para tratar partículas de massas finita ou infinita, bem como carregadas, positiva ou negativamente.

Se um dos sistemas, b por exemplo, for muito diluído e tiver uma massa muito grande, o cálculo torna-se muito simplificado e a variação da densidade $\langle \rho^a(\underline{q}) \rangle$ do sistema a em torno da partícula b é determinada, no espaço de momentos, simplesmente como

$$\langle \rho^a(\underline{q}) \rangle = \psi^{ab}(\underline{q}) \chi^a(\underline{q}, 0) \quad (2.2.6)$$

ou ainda, explicitando o valor de $\chi^a(\underline{q}, 0)$

$$\langle \rho^a(\underline{q}) \rangle = \frac{\psi^{ab}(\underline{q}) \chi_0^a(\underline{q}, 0)}{1 - \psi^{aa}(\underline{q}) \chi_0^a(\underline{q}, 0)} \quad (2.2.7)$$

onde $\chi_0^a(\underline{q}, 0)$ é a suscetibilidade do sistema a sem interação e $\psi^{ab}(\underline{q})$ é a interação auto-consistente dada por

$$\psi^{ab}(\underline{q}) = \phi^{ab}(\underline{q}) \left[1 + \int \frac{d\underline{q}'}{(2\pi)^3} \frac{\underline{q} \cdot \underline{q}'}{q^2} \gamma^{ab}(\underline{q} - \underline{q}') \right] \quad (2.2.8)$$

$\gamma^{ab}(\underline{q})$ está relacionada com a função de correlação $g^{ab}(\underline{r})$ pela expressão

$$\gamma^{ab}(\underline{q}) = \int d\underline{r} e^{i \underline{q} \cdot \underline{r}} \left[g^{ab}(\underline{r}) - 1 \right] \quad (2.2.9)$$

e $\phi^{ab}(\underline{q})$ é a transformada de Fourier do potencial de interação entre partículas a e b.

A densidade de partículas a induzida, $\langle \rho^a(\underline{r}) \rangle$, está diretamente relacionada com a função de correlação $g^{ab}(\underline{r})$, através da densidade de equilíbrio ρ_o^a , por

$$\langle \rho^a(\underline{r}) \rangle = \rho_o^a \left[g^{ab}(\underline{r}) - 1 \right] \quad (2.2.10)$$

que no espaço de momentos fica sendo

$$\langle \rho^a(\underline{q}) \rangle = \rho_o^a \gamma^{ab}(\underline{q}) \quad (2.2.11)$$

Para atacar o problema que nós nos propuzemos discutir, assumimos uma interação δ atrativa tridimensional entre as partículas a e b e desprezamos as interações entre as partículas a.

Admitindo um potencial δ atrativo de intensidade A entre a e b, obtemos, a partir da eq. (2.2.11) a seguinte equação para a densidade induzida

$$\langle \rho^a(\underline{q}) \rangle = A \chi_o^a(\underline{q}, 0) \left[1 + \frac{1}{2\pi^2 \rho_o^a} \int dp p^2 \langle \rho^a(\underline{p}) \rangle \right] \quad (2.2.12)$$

Essa equação pode ser agora resolvida algebricamente. Integrando em $\underline{q}$ ambos os membros e reagrupando os termos, obtemos o seguinte resultado

$$\langle \rho^a(\underline{q}) \rangle = \frac{\chi_o^a(\underline{q}, 0)}{\frac{1}{A} - \frac{1}{2\pi^2 \rho_o^a} \int dp p^2 \chi_o^a(\underline{p}, 0)} \quad (2.2.13)$$

Como vemos, o segundo termo do denominador da equação (2.2.13) diverge no limite de p grande visto que para esse limite $\chi_o^a(\underline{p}, o)$ vai como $1/p^2$. Entretanto, essa divergência pode ser eliminada seguindo o mesmo procedimento da seção anterior, renormalizando o potencial.

Definimos então o potencial renormalizado, β , como sendo

$$\frac{1}{\beta} = \frac{1}{A} - \frac{1}{2\pi^2 \rho_o^a} \int_o^K dp p^2 \chi_o^a(\underline{p}, o) \quad (2.2.14)$$

de modo que no final dos cálculos faremos $A \rightarrow 0$ e $K \rightarrow \infty$ de tal maneira que $1/\beta$ seja finito.

Ficamos, então, com uma densidade de partículas $\underline{a}$ induzida dada por

$$\langle \rho^a(\underline{q}) \rangle = \beta \chi_o^a(\underline{q}, o) \quad (2.2.15)$$

Podemos calcular agora $\langle \rho^a(\underline{r}) \rangle$ tomando a transformada de Fourier inversa da eq.(2.2.15). Obtemos

$$\langle \rho^a(\underline{r}) \rangle = \frac{\beta p_F^3}{2\pi^2 r} \int dq q \sin(q r) \chi_o^a(\underline{q}, o) \quad (2.2.16)$$

onde q está sendo tomado em unidades do momento de Fermi, p_F , e r em termos de $1/p_F$.

Para explicitar a dependência em r da densidade induzida, separamos o lado direito da eq.(2.2.16) em duas partes, que têm diferentes comportamentos em r , como

$$\langle \rho^a(\underline{r}) \rangle = \frac{-\beta p_F^3 \tau}{2\pi^2 r} \int dq \frac{\sin qr}{q} + \frac{\beta p_F^3}{2\pi^2 r} \int dq q \sin(qr) \left[\chi_0^a(q, 0) + \frac{\tau}{q^2} \right] \quad (2.2.17)$$

onde

$$\tau = 2 p_F / 3\pi^2$$

O primeiro termo do lado direito da equação (2.2.17) diverge como $1/r$ quando $r \rightarrow 0$ enquanto que o segundo termo é bem comportado para todo r .

Finalmente podemos obter uma expressão para a função de correlação $g^{ab}(\underline{r})$, inserindo a densidade induzida, determinada pela eq. (2.2.17), na eq. (2.2.10). Ficamos então com

$$g^{ab}(\underline{r}) = 1 - \frac{\beta p_F^3 \tau}{4\pi \rho_0^a r} + \frac{\beta p_F^3}{2\pi^2 \rho_0^a r} \int dq q \sin(qr) \left[\chi_0^a(q, 0) + \frac{\tau}{q^2} \right] \quad (2.2.18)$$

Calculamos numericamente $g^{ab}(\underline{r})$ para um gás de Fermi sem interação. O cálculo foi feito para várias densidades do gás e na Figura 9 mostramos o resultado de $[g^{ab}(\underline{r}) - 1]/\beta p_F$ versus $p_F r$ para $r_s = 4$.

Para grandes valores de r , $g^{ab}(\underline{r})$ exibe um comportamento oscilatório que está inserido na Figura 9, expandido duas vezes horizontalmente e quarenta vezes verticalmente.

As curvas para outras densidades tanto quanto para um gás de Fermi com interação coulombiana blindada foram omitidas u-

ma vez que não diferem substancialmente daquela da Figura 9.

2.3 - Método de função de Green para o potencial δ

Um problema típico da teoria quântica de uma partícula é o problema de uma partícula livre colocada em um potencial local $\phi(\underline{r})$. A aproximação de função de Green é a técnica teórica conhecida de maior sucesso para tratar tal problema. Em geral podemos resolver, formalmente, a equação para a função de Green de um sistema arbitrário, usando a equação de Dyson, a saber,

$$G = G_0 + G_0 \Sigma G \quad (2.3.1)$$

onde G_0 é o propagador para a partícula livre e Σ é a soma de todos os gráficos irredutíveis da auto-energia, isto é, todos aqueles que não podem ser divididos em dois, por um corte na linha de uma partícula. No caso simples de um potencial externo agindo em um conjunto de partículas sem interação a equação de Dyson se reduz ao problema de uma partícula, onde G_0 é o propagador livre considerado no meio não perturbado e sem interação.

A equação de Dyson fica então em uma forma simples

$$G = G_0 + G_0 \phi G \quad (2.3.2)$$

que corresponde à conhecida série de perturbação de Brillouin-Wigner através do método do resolvente.

Consideremos agora um potencial δ atrativo agindo em um gás de Fermi sem interação. Localizemos esse potencial no ponto

$$\underline{r} = 0.$$

Resolveremos agora esse problema usando a equação de Dyson para a função de Green exata do gás, em termos da função de Green da partícula livre, $G_0(\underline{r}, \underline{r}', E)$, do meio não perturbado e sem interação

$$G(\underline{r}, \underline{r}', E) = G_0(\underline{r}, \underline{r}', E) + \int d\underline{r}'' G_0(\underline{r}, \underline{r}'', E) \phi(\underline{r}'') G(\underline{r}'', \underline{r}', E) \quad (2.3.3)$$

onde

$$\phi(\underline{r}) = A \delta(\underline{r}), \text{ com } A < 0 \quad (2.3.4)$$

e

$$G_0(\underline{r}, \underline{r}', E) = \int \frac{d\underline{p}}{(2\pi)^3} \frac{e^{i\underline{p} \cdot (\underline{r} - \underline{r}')}}{E - E_{\underline{p}} + i\eta_{\underline{p}}} \quad (2.3.5)$$

com

$$\begin{aligned} \eta_{\underline{p}} &= \eta > 0 \quad \text{se } p > p_F \\ &= -\eta \quad \text{se } p < p_F \end{aligned}$$

A equação (2.3.3) pode ser reescrita na forma

$$G(\underline{r}, \underline{r}', E) = G_0(\underline{r}, \underline{r}', E) + A G_0(\underline{r}, 0, E) G(0, \underline{r}', E) \quad (2.3.6)$$

de onde obtemos

$$G(0, \underline{r}', E) = \frac{G_0(0, \underline{r}', E)}{1 - A G_0(0, 0, E)} \quad (2.3.7)$$

Substituindo esse valor de $G(0, \underline{r}', E)$ na eq. (2.3.6) encontramos

$$G(\underline{r}, \underline{r}', E) = G_0(\underline{r}, \underline{r}', E) + \frac{A G_0(\underline{r}, 0, E) G_0(0, \underline{r}', E)}{1 - A G_0(0, 0, E)} \quad (2.3.8)$$

Estamos interessados na variação da densidade do gás devido ao potencial externo, isto é, queremos encontrar $\delta G(\underline{r}, \underline{r}, E)$, que pode ser obtido diretamente da eq.(2.3.8), como

$$\begin{aligned} \delta G(\underline{r}, \underline{r}, E) &= G(\underline{r}, \underline{r}, E) - G_0(\underline{r}, \underline{r}, E) \\ &= \frac{A G_0(\underline{r}, 0, E) G_0(0, \underline{r}, E)}{1 - A G_0(0, 0, E)} \end{aligned} \quad (2.3.9)$$

Definindo agora a transformada de Fourier de $\delta G(\underline{r}, \underline{r}, E)$ como sendo

$$\delta \tilde{G}(\underline{q}, E) = \int d\underline{r} e^{-i\underline{q} \cdot \underline{r}} \delta G(\underline{r}, \underline{r}, E) \quad (2.3.10)$$

e resolvendo essa integral, com $\delta G(\underline{r}, \underline{r}, E)$ dado pela eq. (2.3.9), obtemos

$$\delta \tilde{G}(\underline{q}, E) = \int \frac{d\underline{p}}{(2\pi)^3} \frac{\tilde{G}_0(\underline{p} + \underline{q}, E) \tilde{G}_0(\underline{p}, E)}{1/A - G_0(0, 0, E)} \quad (2.3.11)$$

onde $\tilde{G}_0(\underline{p}, E)$ é a transformada de Fourier de $G_0(\underline{r} - \underline{r}', E)$.

O denominador do segundo membro da eq.(2.3.11) pode ser calculado, notando que para E real, $G_0(0, 0, E)$ é obtido a partir da eq.(2.3.5) como sendo

$$G_0(0, 0, E) = \int \frac{d\underline{p}}{(2\pi)^3} \frac{1}{E - \epsilon_{\underline{p}}} + P \int \frac{d\underline{p}}{(2\pi)^3} \frac{E N(\epsilon_{\underline{p}})}{\epsilon_{\underline{p}}(E - \epsilon_{\underline{p}})} - i\delta_E \pi N(E) \quad (2.3.12)$$

onde P significa a parte principal da integral, $N(E)$ é a densidade de estados que para partículas sem spin é dado por

$$N(E) = \frac{1}{4\pi^2} |E|^{1/2} \quad (2.3.13)$$

e δ_E é definido como

$$\begin{aligned} \delta_E &= 1 && \text{para } E > E_F \\ &=-1 && \text{fora dessa região.} \end{aligned}$$

No caso em que E for complexo, mantemos $G_0(0,0,E)$ em sua representação complexa como dada pela eq.(2.3.5), para $\underline{r} = \underline{r}'$.

Por outro lado observamos que $G_0(0,0,E)$ diverge da mesma forma que as divergências encontradas nas seções 1 e 2. Para e eliminar essa divergência seguimos aqui o mesmo processo de renormalização das seções anteriores, definindo o potencial renormalizado, β , como

$$\frac{1}{\beta} = \lim_{A \rightarrow 0, K \rightarrow \infty} \left[\frac{1}{A} + \int_0^K \frac{dp}{(2\pi)^3} \frac{1}{E_p} \right] \quad (2.3.14)$$

A eq.(2.3.11) pode então, ser reescrita na seguinte forma

$$\begin{aligned} \delta \tilde{G}(\underline{q}, E) &= \int \frac{dp}{(2\pi)^3} \frac{1}{E - E_p + i\eta_p} \frac{1}{E - E_{p+q} + i\eta_{p+q}} \\ &\times \frac{1}{E N(E_p)} - i \delta_E \Pi N(E) \\ &\frac{1}{\beta} - P \int \frac{dE_p}{E_p} \frac{1}{E - E_p} \end{aligned} \quad (2.3.15)$$

A partir desse valor de $\delta\tilde{G}(\underline{q}, E)$ podemos agora encontrar a densidade induzida que é dada por

$$\langle \rho(\underline{q}) \rangle = -i \int \frac{dE}{2\pi} \delta\tilde{G}(\underline{q}, E) \quad (2.3.16)$$

onde a integral deve ser calculada para todos os E 's.

Se $\beta > 0$, a integração é efetuada fechando o contorno na metade superior do plano complexo, evitando o corte $0 < E < E_F$ e circundando o polo E_ℓ , como mostra a Figura 10. Se $1/\beta < 0$, não haverá polo e a integração será efetuada somente em torno do corte.

Com $\beta > 0$, a contribuição de $\underline{C}_2$ a $\langle \rho(\underline{q}) \rangle$, I_1 , é

$$I_1 = \frac{-f(\underline{q}, E_\ell)}{\int_0^\infty dE \frac{N(E_\ell)}{(E_\ell - E_\ell)^2}} \quad (2.3.17)$$

onde

$$f(\underline{q}, E) = \int_0^\infty dE \frac{N(E_\ell)}{(E - E_\ell)(E - E_{\ell+\underline{q}})} \quad (2.3.18)$$

e

$$E_\ell = -16\pi^2/\beta^2 \quad (2.3.19)$$

As integrais que aparecem nas equações (2.3.17) e (2.3.18) bem como a determinação da energia do estado ligado E_ℓ podem ser calculadas exatamente como está mostrado no Apêndice B. A equação (2.3.17) é então reescrita na forma

$$I_1 = \frac{2 |E_\ell|^{1/2}}{q} \left[\frac{\pi}{2} - \operatorname{tg}^{-1} \left(\frac{2 |E_\ell|^{1/2}}{q} \right) \right] \quad (2.3.20)$$

O cálculo de I_2 , a integral em torno do corte, está mostrado no Apêndice C. Sua contribuição para a densidade induzida $\langle \rho(q) \rangle$ é

$$I_2 = \frac{1}{\beta} P \int_0^\infty dE_p N(E_p) \left[\frac{n(E_p)}{(E_p - E_{p+q}) \left[\frac{1}{\beta^2} + \pi^2 N^2(E_p) \right]} + \frac{n(E_{p+q})}{(E_{p+q} - E_p) \left[\frac{1}{\beta^2} + \pi^2 N^2(E_{p+q}) \right]} \right] \quad (2.3.21)$$

onde $n(E_p) = 1$ para $E_p < E_{p_F}$ e $n(E_p) = 0$ para $E_p > E_{p_F}$, foi introduzido para evitar uma restrição explícita na região da integral em E_p .

Agora que determinamos a densidade induzida de partículas de Fermi devido ao potencial δ atrativo, vamos examiná-la em detalhe como função do potencial renormalizado β . Consideremos os seguintes casos:

CASO I - $\frac{1}{\beta}$ grande : $\frac{1}{\beta^2} \gg \pi^2 N^2(E_F)$

A. $\frac{1}{\beta} > 0$

$$\langle \rho(q) \rangle = \frac{32 \pi^2 f(q, E_\ell)}{\beta} = \frac{8\pi}{q\beta} \left[\frac{\pi}{2} - \operatorname{tg}^{-1} \left(\frac{8\pi}{q\beta} \right) \right] \quad (2.3.22)$$

Aqui a contribuição mais importante para o aumento na densidade das partículas é do estado ligado, uma vez que as outras contribuições são de ordem mais elevada em β .

Analisando a eq.(2.3.22) vemos que para grandes q 's, $\langle \rho(q) \rangle$ vai como $1/q$ resultando para a densidade em torno da impureza uma divergência da forma $1/r^2$. Esse resultado limite é o mesmo que obtivemos na seção 1 para o problema de uma partícula.

A função de correlação $g(r)$ para esse caso é

$$g(r) - 1 = \frac{|\psi(r)|^2}{\rho_0} \quad (2.3.23)$$

ou, explicitamente

$$g(r) = 1 + \frac{1}{\rho_0} \int \frac{dq}{(2\pi)^3} e^{i q \cdot r} \langle \rho(q) \rangle \quad (2.3.24)$$

com $\langle \rho(q) \rangle$ dado pela eq.(2.3.22), e ρ_0 sendo a densidade de equilíbrio das partículas.

Efetuada a integral que aparece na eq.(2.3.24) obtemos

$$g(r) = 1 + \frac{2}{\beta \rho_0 r^2} \exp(-8\pi r/\beta) \quad (2.3.25)$$

o que resulta em

$$\int dr \rho_0 [g(r) - 1] = 1 \quad (2.3.26)$$

que é a contribuição do estado ligado.

$$\underline{\text{B. } 1/\beta < 0}$$

$$\langle \rho(q) \rangle = \beta P \int_0^\infty dE_p N(E_p) \frac{n(E_p) - n(E_{p+q})}{E_p - E_{p+q}} \quad (2.3.27)$$

ou ainda

$$\langle \rho(q) \rangle = \beta \chi_0(q, 0) \quad (2.3.28)$$

Neste caso não temos a contribuição do estado ligado. A penas os estados de espalhamento são importantes e a teoria da SCA de Singwi é exata em primeira ordem em β . A divergência de $g(r)$ para $r \rightarrow 0$ é da forma $1/r$, idêntica àquela obtida na equação (2.2.17). Na Figura 9 mostramos um traçado de $g(r)$ para $r_s = 4$.

CASO II

$$- \quad \underline{1/\beta \text{ pequeno} : 1/\beta^2 < \pi^2 N^2(E_F)}$$

$$\underline{\text{A. } 1/\beta > 0}$$

$$\begin{aligned} \langle \rho(q) \rangle &= \frac{8\pi}{q\beta} \left[\frac{\pi}{2} - \text{tg}^{-1} \left(\frac{8\pi}{q\beta} \right) \right] + \frac{2}{8\pi^2} P \int_{-\infty}^{\infty} dE_p \frac{n(E_p)}{N(E_p)} \\ &\times \frac{1}{E_p - E_{p+q}} \end{aligned} \quad (2.3.29)$$

ou, efetuando a integração

$$\begin{aligned} \langle \rho(q) \rangle &= \frac{8\pi}{q\beta} \left\{ \left[\frac{\pi}{2} - \text{tg}^{-1} \left(\frac{8\pi}{q\beta} \right) \right] + \frac{1}{2\pi} \int_0^{2p_F/q} dx \right. \\ &\times \left. \frac{1}{x} \ln \left| \frac{1+x}{1-x} \right| \right\} \end{aligned} \quad (2.3.30)$$

Como vemos, temos agora duas contribuições para $g(\underline{r})$, uma devida ao estado ligado e outra aos estados de espalhamento. Ambas as contribuições são da mesma ordem, $1/\beta$.

A contribuição do estado ligado é da mesma forma que aquela do Caso I-A, porém, a dos estados de espalhamento difere da daquela da teoria de Singwi. A diferença se prende ao fato de que no Caso I a matriz T é essencialmente independente das energias das ondas espalhadas enquanto que neste caso a matriz T efetiva é dependente da energia, o que invalida então a aproximação simples do potencial efetivo.

$g(\underline{r})$ tem um comportamento duplo a saber, a contribuição do estado ligado predominando para pequenos r 's, indo como $1/r^2$, e a contribuição das ondas de espalhamento indo como $1/r$ nesse limite. Ver Figura 11.

$$\text{B. } \underline{1/\beta < 0}$$

$$\langle \rho(\underline{q}) \rangle = \frac{-4}{q\beta} \int_0^{2p_F/q} dx \frac{1}{x} \ln \left| \frac{1+x}{1-x} \right| \quad (2.3.31)$$

Aplicam-se aqui os mesmos comentários do caso anterior, II.A, com a ressalva que não há contribuição do estado ligado.

2.4 - Discussão e comparação dos resultados. Caso das partículas com interação

Resumimos aqui os resultados que encontramos nas seções

anteriores. A aproximação do campo auto-consistente de Singwi e outros não leva em consideração os estados ligados para o potencial que escolhemos. Acreditamos, entretanto, que (isso) seja verdadeira para um potencial qualquer.

A SCA é correta para energias tais que a matriz T seja aproximadamente independente da energia. No caso em que a matriz T seja dependente da energia seus resultados são apenas qualitativamente corretos.

Poderíamos esperar que a interação partícula-partícula minimizasse as imperfeições da teoria e evitasse a formação de um estado ligado. Acreditamos contudo, que nossas conclusões seriam ainda as mesmas e, no caso do potencial δ , a substituição de $\phi(q) = \beta$ por

$$\phi(q) = \frac{\beta}{\epsilon(q)} \quad (2.4.1)$$

não afeta essencialmente nossos resultados. Nós poderíamos ter partido desde o início com um potencial blindado $\bar{\phi}(q)$ mas esse procedimento, no nosso ponto de vista, complicaria os cálculos tornando obscuras as interpretações. De passagem, queremos registrar que a forma correta de $\epsilon(q)$ seria a função dielétrica partícula-carga de prova que na teoria de Singwi é dada por

$$\epsilon(q,0) = 1 - \psi(q) \chi_0(q,0) \quad (2.4.2)$$

onde $\psi(q)$ está dado pela eq. (2.2.5). A forma e as propriedades dessa função dielétrica são discutidas no trabalho de Lobo (19).

O problema do aumento anômalo da razão de aniquilação de positron para baixas densidades do gás de elétrons pode ser devido a não aplicabilidade da teoria da aproximação do campo auto-consistente para tais densidades. Esse problema é objeto de discussão do próximo capítulo.

Um resultado anômalo, também, é o obtido por Sjölander e Stott no caso de uma interação coulombiana atrativa entre uma impureza de massa infinita e o gás de elétrons. Acreditamos, outra vez, que estados ligados ou potenciais efetivos dependentes da energia possam ser responsáveis pelos resultados incorretos obtidos.

CAPÍTULO 3

FORMAÇÃO DE POSITRÔNIO E TEORIA DE ANIQUILAÇÃO DE POSITRONS EM METAIS ALCALINOS

Como discutimos no Capítulo 1, seção 1.4, os cálculos teóricos da razão de aniquilação de positrons em metais alcalinos têm apresentado resultados satisfatórios para metais de alta densidade, falhando porém na região de baixa densidade.

Neste capítulo efetuamos um cálculo numérico da razão de aniquilação de positrons em metais, usando como interação elétron-positron, um potencial efetivo que foi obtido pelo método da transformação canônica (11). Para esse potencial efetivo, discutimos também a possibilidade de formação de positrônio e apresentamos ainda uma nova interpretação para a razão de aniquilação de positrons em metais alcalinos, admitindo a existência de positrônio em metais de baixa densidade.

Na seção 3.1 discutimos o método da transformação canônica com a finalidade de obter a interação efetiva elétron-positron na seção 3.2; na seção 3.3 apresentamos o cálculo numérico das razões de aniquilação; na seção 3.4 discutimos a possibilidade de formação de positrônio como função da densidade dos elétrons de condução e apresentamos uma nova interpretação para a razão de aniquilação de positrons em metais; na seção 3.5 apresentamos algumas conclusões.

Cap IV

3.1 - Método da transformação canônica

Consideremos um sistema descrito por uma hamiltoniana H do tipo

$$H = H_0 + V + H_i \quad (3.1.1)$$

onde H_0 é um termo de ordem zero, V uma interação externa e H_i corresponde às interações do próprio sistema.

A equação de Schrödinger dependente do tempo é

$$i \hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = H \psi = (H_0 + V + H_i) \psi \quad (3.1.2)$$

V poderá ser redescrito em outros termos se efetuarmos uma transformação canônica de H . Seja U um operador unitário dado por

$$U = e^{-i S} \quad (3.1.3)$$

onde S é hermitiano.

Multiplicando a eq.(3.1.2) por U e definindo ψ' como sendo

$$\psi' = U \psi \quad (3.1.4)$$

obtemos

$$\begin{aligned} i \hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi' &= H' \psi' \equiv U \left[H - \hbar \frac{\partial S}{\partial t} \right] U^\dagger \psi' = \{ H + i [H, S] + \\ &+ \frac{1}{2!} i^2 [[H, S], S] + \dots - \hbar \frac{\partial S}{\partial t} + \dots \} \psi' \end{aligned} \quad (3.1.5)$$

O método da transformação canônica consiste em determinar S tal que a hamiltoniana transformada H' não contenha termos em primeira ordem na interação externa V . Essa condição será satisfeita se S for tal que

$$V + i \left[H_0 + H_i, S \right] - \hbar \frac{\partial S}{\partial t} = 0 \quad (3.1.6)$$

resultando então para H' a expressão

$$\begin{aligned} H' = H_0 + H_i + \frac{i^2}{2} \left[\left[H_0 + H_i, S \right], S \right] + i \left[V, S \right] + \dots \\ \dots - \hbar \left[\frac{\partial S}{\partial t}, S \right] + \dots \end{aligned} \quad (3.1.7)$$

que começa com termos de ordem zero, $H_0 + H_i$, e continua com termos em segunda ordem em V (se S for de primeira ordem em V). Isso é equivalente a ter redescrito V por interações efetivas de segunda ordem (termos de ordem mais alta são usualmente desprezados).

Suponhamos agora que pudéssemos obter uma hamiltoniana $\bar{H}$, que não contivesse os termos H_i mas sim um V modificado, $\bar{V}$, tal que a mesma transformação canônica S produzisse o mesmo efeito, isto é, suponhamos

$$\bar{H} = H_0 + \bar{V} \quad (3.1.8)$$

e

$$\bar{H}' \psi' = \left[U \left(\bar{H} - \hbar \frac{\partial S}{\partial t} \right) U^\dagger \right] \psi' \equiv i \hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi' \quad (3.1.9)$$

onde admitimos que $\bar{H}'$, não dependa de $\bar{V}$ em primeira ordem, isto é,

$\bar{H}'$ é da forma

$$\bar{H}' = H_0 + \text{termos de 2ª ordem}$$

Isto sendo possível, $\bar{H}$ terá os mesmos efeitos sobre ψ (primeira ordem em V) com a hamiltoniana primitiva H . Os efeitos de H_i estão agora contidos diretamente na interação blindada $\bar{V}$.

$\bar{H}$ poderá ser determinado facilmente invertendo a equação (3.1.9),

$$\bar{H} = U^\dagger \bar{H}' U + \hbar \frac{\partial S}{\partial t} = H_0 - i [H_0, S] + \dots + \hbar \frac{\partial S}{\partial t} \quad (3.1.10)$$

de onde obtemos

$$\bar{V} = -i [H_0, S] + \hbar \frac{\partial S}{\partial t} \quad (3.1.11)$$

ou, da eq.(3.2.6)

$$\bar{V} = V + i [H_i, S] \quad (3.1.12)$$

Dessa forma, com uma expansão em V podemos obter S pela eq.(3.1.6) e conseqüentemente encontrar a interação blindada $\bar{V}$ através da eq.(3.1.12).

3.2 - Interação efetiva elétron-positron

Consideremos um sistema consistindo de um positron embebido em um gás de elétrons. A hamiltoniana desse sistema é dada

por

$$H = H_0^e + H_0^p + H_i^{e-e} + H_i^{e-p} \quad (3.2.1)$$

onde H_0^e é a parte do elétron livre, H_0^p do positron livre, H_i^{e-e} de interação elétron-elétron e H_i^{e-p} a parte de interação elétron-positron.

Os termos da eq.(3.2.1) podem ser escritos no formalismo de segunda quantização como

$$H_0^e = \sum_{\underline{k}\sigma} E_{\underline{k}\sigma}^e C_{\underline{k}\sigma}^+ C_{\underline{k}\sigma} \quad (3.2.2)$$

$$H_0^p = \sum_{\underline{k}\sigma} E_{\underline{k}\sigma}^p a_{\underline{k}\sigma}^+ a_{\underline{k}\sigma} \quad (3.2.3)$$

$$H_i^{e-e} = \frac{1}{2} \sum_{\underline{k}} v_{\underline{k}} \rho_{\underline{k}}^+ \rho_{\underline{k}} - \frac{1}{2} \sum_{\underline{k}} v_{\underline{k}} \sum_{\underline{q}} n_{\underline{q}}^o \quad (3.2.4)$$

$$H_i^{e-p} = \sum_{\substack{\underline{r} \quad \underline{s} \quad \underline{u} \\ \sigma \sigma'}} V(u) C_{\underline{r}+\underline{u},\sigma}^+ a_{\underline{s}-\underline{u},\sigma'}^+ C_{\underline{r}\sigma} a_{\underline{s}\sigma'} \quad (3.2.5)$$

onde

$$\rho_{\underline{k}} = \sum_{\underline{p}\sigma} C_{\underline{p}\sigma}^+ C_{\underline{p}+\underline{k},\sigma} \quad (3.2.6)$$

é a flutuação da densidade de elétrons e

$$n_{\underline{q}\sigma}^o = C_{\underline{q}\sigma}^+ C_{\underline{q}\sigma} \quad (3.2.7)$$

o número de ocupação do estado com momento $\hbar\mathbf{q}$ e spin σ .

$c_{\underline{k}\sigma}^+$ ($a_{\underline{k}\sigma}^+$) e $c_{\underline{k}\sigma}$ ($a_{\underline{k}\sigma}$) são, respectivamente, os operadores de criação e destruição de um elétron (positron) no estado de momento $\hbar\mathbf{k}$ e spin σ .

$v_{\underline{k}}$ e $V(u)$ são as transformadas de Fourier das interações elétron-elétron e elétron-positron respectivamente.

Nosso problema se resume em determinar uma transformação canônica S de tal forma que a nova hamiltoniana não contenha, em primeira ordem o termo H_i^{e-p} .

A transformação S é obtida a partir da eq.(3.1.6), que para esse caso é dada por

$$H_i^{e-p} + i \left[(H_0^e + H_0^p + H_i^{e-e}), S \right] - i\hbar \frac{\partial S}{\partial t} = 0 \quad (3.2.8)$$

O modo mais simples de encontrar S é considerá-lo em uma forma com coeficientes a determinar. Desde que o termo

$$i \left[(H_0^e + H_0^p + H_i^{e-e}), S \right]$$

contém os mesmos tipos de operadores que H_i^{e-p} , a eq.(3.2.8) será satisfeita se S também contiver os mesmos operadores.

Então, procuramos uma transformação canônica S da forma

$$S = i \sum_{\substack{\underline{r}, \underline{s}, \underline{u} \\ \sigma, \sigma'}} b_{\underline{r}+\underline{u}, \underline{s}-\underline{u}, \underline{r}, \underline{s}} c_{\underline{r}+\underline{u}, \sigma}^+ a_{\underline{s}-\underline{u}, \sigma'} c_{\underline{r}, \sigma} a_{\underline{s}, \sigma'} \quad (3.2.9)$$

onde os b 's são coeficientes a ser determinados.

Como mostra L. G. de Freitas(11), uma solução auto-con-

sistente pode ser encontrada assumindo uma forma especial para os b 's dada por

$$b_{\underline{q}', \underline{K}', \underline{q}, \underline{K}} = \bar{V}_{\underline{K}, \underline{q}' - \underline{q}} (\tilde{E}_{\underline{q}', \underline{K}'} - \tilde{E}_{\underline{q}, \underline{K}})^{-1} \quad (3.2.10)$$

onde

$$\tilde{E}_{\underline{q}', \underline{K}'} = E_{\underline{q}'}^e + E_{\underline{K}'}^p - \sum_{\underline{k}} \tilde{v}_{\underline{k}} n_{\underline{q}' - \underline{k}}^o \quad (3.2.11)$$

com $\underline{K}' = \underline{K} + \underline{q} - \underline{q}'$. $\tilde{v}_{\underline{k}}$ é o potencial coulombiano blindado e é responsável pela renormalização das energias dos elétrons na aproximação blindada de Hartree-Fock.

A expressão para a interação efetiva elétron-positron é então obtida, após algumas manipulações algébricas, como

$$\bar{V}_{\underline{K}, \underline{Q}} = \frac{V_{\underline{Q}}}{1 - \frac{4\pi e^2}{Q^2} \tilde{\chi}_{\underline{K}}^o(\underline{Q}) \left[1 - \frac{1}{4} \left(\frac{Q^2}{k_F^2 + K_S^2} + \frac{Q^2}{k_F^2 + K_S^2 + Q^2} \right) \right]} \quad (3.2.12)$$

onde

$$\tilde{\chi}_{\underline{K}}^o(\underline{Q}) = \sum_{\underline{k}, \sigma} \frac{n_{\underline{k}, \sigma}^o - n_{\underline{k} + \underline{Q}, \sigma}^o}{\tilde{E}_{\underline{k} + \underline{Q}, \underline{K}'} - \tilde{E}_{\underline{k}, \underline{K}}} \quad (3.2.13)$$

A massa finita do positron é levada em consideração em um termo de recuo que aparece no denominador da eq.(3.2.13) como uma variação na energia cinética do positron correspondendo por-

tanto a uma suscetibilidade eletrônica dependente da frequência.

3.3 - Razão de aniquilação de positrons

O cálculo da razão de aniquilação reduz-se essencialmente em determinar a densidade de elétrons em torno do positron que é obtida como

$$n = \sum_{p < p_F} |\psi_p(\underline{x}, \underline{x})|^2 \quad (3.3.1)$$

onde $\psi_p(\underline{x}, \underline{x})$ são as funções de onda do par elétron-positron.

Usando o formalismo de matriz T e admitindo que o positron tenha momento inicial zero*, podemos encontrar as funções de onda $\psi_p(\underline{x}, \underline{x})$ resolvendo a equação de Schrödinger para o sistema elétron-positron interagindo via potencial dado pela eq.(3.2.12). Uma dificuldade que aparece é devido ao potencial de interação ser não-local como podemos verificar transformando a interação efetiva

$$H_{int} = \sum_{\underline{Q}, \underline{K}} \bar{V}_{\underline{Q}, \underline{K}} a_{\underline{K}+\underline{Q}}^+ c_{\underline{k}-\underline{Q}}^+ c_{\underline{k}} a_{\underline{K}} \quad (3.3.2)$$

para o espaço de coordenadas, onde H_{int} fica sendo

$$H_{int} = \int d\underline{r} d\underline{r}' d\underline{r}'' \sum_{\underline{Q}, \underline{K}} \bar{V}(\underline{Q}, \underline{K}) e^{i\underline{Q} \cdot (\underline{r}'' - \underline{r}')} \\ \times e^{i\underline{K} \cdot (\underline{r} - \underline{r}')} \psi_e^+(\underline{r}'') \psi_e(\underline{r}'') \psi_p^+(\underline{r}') \psi_p(\underline{r}') \quad (3.3.3)$$

* O positron é considerado termalizado na aniquilação (18).

Contudo, essa dificuldade pode ser contornada fazendo-se uma aproximação de tal forma que o potencial torne-se local. A aproximação mais simples é admitir

$$\bar{V}(\underline{Q}, \underline{K}) \approx \bar{V}(\underline{Q}) \quad (3.3.4)$$

que corresponde considerar a suscetibilidade elétrica independente da frequência, na expressão do potencial efetivo.

Nesse formalismo, e com essa aproximação, as funções de onda $\psi_{\underline{p}}$ do par elétron-positron obedecem a equação de Lippmann-Schwinger que, no espaço de momentos, é dada por

$$\psi_{\underline{p}}(\underline{p}', \underline{q}) = \delta_{\underline{p}, \underline{p}'} \delta_{\underline{q}, 0} - \frac{(1 - n_{\underline{p}'}) (1 - \delta_{\underline{q}, 0})}{\bar{E}_{\underline{p}', \underline{q}} - \bar{E}_{\underline{p}, 0}} \quad .$$

$$\delta_{\underline{p}'+\underline{q}, \underline{p}''+\underline{q}'} \sum_{\underline{q}'} \bar{V}(\underline{q}' - \underline{q}) \psi_{\underline{p}}(\underline{p}'', \underline{q}') \quad (3.3.5)$$

onde o termo $(1 - n_{\underline{p}'}) (1 - \delta_{\underline{q}, 0})$ é zero se $\underline{p}' < \underline{p}_F$ ou se $\underline{q} = 0$, o que corresponde ao princípio de exclusão de Pauli, proibindo transições para estados ocupados.

À densidade de elétrons em torno do positron, equação (3.3.1), devemos acrescentar a contribuição correspondente ao plásmon que, dos trabalhos de Ferrell e Kahana, é relativamente pequena.

Uma vez obtida a densidade eletrônica em torno do positron podemos determinar então, a razão de aniquilação, por comparação com a densidade e razão de aniquilação do positrônio, Ref.

(10), como sendo

$$\lambda = \frac{1}{4} \lambda_{\text{positrônio}} \frac{n}{n_{\text{positrônio}}} \quad (3.3.6)$$

onde o fator $1/4$ vem da média feita sobre os spins, lembrando que a aniquilação de positrons, com a emissão de dois raios- γ , ocorre no estado singlete.

3.4 - Cálculo numérico de λ

Para calcular numericamente a razão de aniquilação λ , reduzimos a equação integral, eq.(3.3.5), a uma forma mais conveniente, tomando seu limite para volume infinito. Então, a equação (3.3.5) pode ser reescrita como

$$\psi_{\underline{p}}(\underline{p}') = \delta(\underline{p}' - \underline{p}) - \theta(\underline{p}' - p_F) \chi_{\underline{p}}(\underline{p}') \quad (3.4.1)$$

onde $\theta(\underline{p}' - p_F)$ é uma função degrau, sendo igual a 1 para $p' > p_F$ e zero fora dessa região, e

$$\begin{aligned} \chi_{\underline{p}}(\underline{p}') &= \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{\bar{V}(\underline{p}' - \underline{p})}{\tilde{E}_{\underline{p}', \underline{p} - \underline{p}'} - \tilde{E}_{\underline{p}, 0}} + \frac{1}{\tilde{E}_{\underline{p}', \underline{p} - \underline{p}'} - \tilde{E}_{\underline{p}, 0}} \\ &\times \int_{q' > p_F} \frac{dq'}{(2\pi)^3} \bar{V}(\underline{p}' - \underline{q}') \chi_{\underline{p}}(\underline{q}') \end{aligned} \quad (3.4.2)$$

Na obtenção da eq.(3.4.1) consideramos explicitamente a conservação de momento e suprimimos a notação para momento do positron.

Inicialmente notamos que a eq.(3.4.2) pode ser resolvida numericamente com relativa facilidade se considerarmos o elétron no centro do mar de Fermi, isto é, $\underline{p} = 0$ e admitirmos $\chi_0(q')$ depender apenas do módulo de q' . Para valores de $\underline{p} \neq 0$ a situação não é tão simples, porém, procedendo como no trabalho de Kahana (15), tomamos a média angular da eq.(3.4.2), que é

$$\begin{aligned} \chi_p(p') = & \frac{1}{4\pi} \int \frac{d\Omega_p}{(2\pi)^3} \frac{\bar{V}(|\underline{p}' - \underline{p}|)}{\tilde{E}_{\underline{p}', \underline{p} - \underline{p}'} - \tilde{E}_{\underline{p}, 0}} \\ & + \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\Omega_p \frac{1}{\tilde{E}_{\underline{p}', \underline{p} - \underline{p}'} - \tilde{E}_{\underline{p}, 0}} \\ & \times \int d\mathbf{q}' \, q'^2 \, \bar{V}_0(p', q') \, \chi_p(q') \end{aligned} \quad (3.4.3)$$

com

$$\bar{V}_0(p', q') = \frac{1}{4\pi} \int d\Omega_{q'} \, \bar{V}(|\underline{p}' - \underline{q}'|) \quad (3.4.4)$$

O cálculo numérico da eq.(3.4.3) foi efetuado para várias densidades eletrônicas, na região dos metais alcalinos. Em cada densidade o cálculo foi processado para três valores do momento do elétron, $p = 0,3 p_F$; $0,5 p_F$ e $0,7 p_F$. Esse cálculo foi realizado em um computador IBM-1130. Os detalhes da solução numérica discutimos no Apêndice D.

A partir das soluções para $\psi_{\underline{p}}$, calculamos o fator de aumento $\epsilon(\gamma)$, $\gamma = p/p_F$, que é uma medida do acréscimo da densidade

dos elétrons em torno do positron.

$$\epsilon(\gamma) = |\psi_p(\underline{x}, \underline{x})|^2 + \epsilon_{\text{plásmon}} \quad (3.4.5)$$

$\epsilon(\gamma)$ foi determinado para cada densidade e momento do elétron e os resultados obtidos estão indicados na Tabela 1.

Finalmente, determinamos a razão de aniquilação toman do uma média sobre o mar de Fermi dada por

$$\lambda = 3 R^0 \int_0^1 d\gamma \gamma^2 \epsilon(\gamma) \quad (3.4.6)$$

onde

$$R^0 = \frac{12,0}{r_s^3} \times 10^9 \text{ seg}^{-1} \quad (3.4.7)$$

é a razão de aniquilação de Sommerfeld.

A integral na eq.(3.4.6) poderia ser resolvida numéricamente, contudo preferimos seguir o trabalho de Kahana e assumir $\epsilon(\gamma)$ como sendo

$$\epsilon(\gamma) = a + b \gamma^2 + c \gamma^4 \quad (3.4.8)$$

onde a, b e c são constantes que foram determinadas dos dados da Tabela 1. e que são listadas na Tabela 2.

A possibilidade de aniquilação envolvendo elétron de momento $p > p_F$ foi artificialmente excluída nesse trabalho. Tais estados de momento poderiam estar populados devido a interação de elétrons com a rede ou pelas interações elétron-elétron no gás.

Tabela 1 - Fator de aumento $\epsilon(\gamma)$ como função de $\gamma = p/p_F$ para vários valores de r_s

r_s	$\gamma = 0,3$	$\gamma = 0,5$	$\gamma = 0,7$
2	3,694	3,821	4,051
3	6,630	6,917	7,449
4	12,415	13,112	14,449
5	25,426	27,401	31,373
6	61,932	69,367	85,707

Tabela 2 - Razões de aniquilação de positrons em metais de diferentes densidades obtidas a partir do fator de aumento dependente do momento, $\epsilon(\gamma) = a + b\gamma^2 + c\gamma^4$

r_s	a	b	c	λ (10^9 seg^{-1})
2	3,569	0,645	0,398	6,190
3	6,380	1,406	1,047	3,409
4	11,881	3,269	2,978	2,835
5	24,127	8,614	10,344	3,238
6	57,947	27,609	53,104	5,404

Os resultados numéricos que obtivemos para a razão de aniquilação como função da densidade eletrônica do gás são mostrados na Figura 12.

Se compararmos com os resultados existentes na literatura, vemos que obtivemos valores maiores para a razão de aniquilação na região de densidade metálicas. Nossos resultados, para altas densidades, estão à meia distância entre os resultados experimentais e aqueles estimados, subtraindo a contribuição dos elétrons do "core". Na região de baixa densidade ($r_s > 4,5$), nossos resultados apresentam o mesmo crescimento anômalo, como em outras teorias, embora a razão de crescimento seja ligeiramente menor neste trabalho.

Observando os valores experimentais, traçados na Figura 12, notamos que eles convergem para a razão de aniquilação do pósitronio livre ($2,01 \times 10^9 \text{ seg}^{-1}$). Se considerarmos um gás muito diluído, essa convergência é facilmente entendida desde que um par elétron-positron ligado é esperado estar presente e sua contribuição para λ seria a mais importante.

A aproximação de matriz T que usamos neste trabalho não permite a formação de estados ligados. Dessa forma acreditamos que o crescimento anômalo da razão de aniquilação previsto aqui seja devido à não aplicabilidade da teoria em regiões de baixa densidade onde os estados ligados devem estar presentes.

3.5 - Formação de positrônio

Os resultados da seção anterior mostram-nos que, se a a niquilação do positron se der por estados de espalhamento, o sistema elétron-positron em um metal não formará um estado ligado a nálogo ao positrônio. Porém, sabemos que em um gás diluído o esta do ligado estará presente, devendo ser, portanto, a parte que mais contribuirá para a razão de aniquilação. Assim sendo é necessário determinar em que densidade do gás existirá o positrônio e como e le pode influenciar a razão de aniquilação.

O positrônio em um metal pode ser descrito por um estado ligado da equação de Schrödinger para a função de onda efetiva do par elétron-positron.

Investigamos a possibilidade da existência de positrônio em metais como função da densidade dos elétrons de condução bem como apresentamos uma nova interpretação para a razão de aniquilação na região de baixa densidade.

Nossos cálculos são muito simples, reduzindo-se a um cálculo variacional para a energia de um par elétron-positron. Co mo função variacional escolhemos uma função de onda do estado s parametrizada, que no espaço de coordenadas tem a forma

$$\psi(r) = e^{-\beta r} \quad (3.5.1)$$

onde β é tratado como um parâmetro variável.

A hamiltoniana do sistema elétron-positron é

$$H = \frac{p^2}{2m^*} + \bar{V}(\underline{r}) \quad (3.5.2)$$

onde a massa reduzida, m^* , é metade da massa do elétron, $\underline{r}$ é a separação elétron-positron e $\bar{V}(\underline{r})$ a interação efetiva dada por

$$\bar{V}(\underline{r}) = \int \frac{d\underline{q}}{(2\pi)^3} e^{i\underline{q} \cdot \underline{r}} \bar{V}(\underline{q}) \quad (3.5.3)$$

com $\bar{V}(\underline{q})$, independente da frequência, obtido da eq.(3.2.12) como sendo

$$\bar{V}(\underline{q}) = - \frac{4\pi e^2}{q^2} \frac{1}{\epsilon(\underline{q})} \quad (3.5.4)$$

onde $\epsilon(\underline{q})$ é a constante dielétrica dada pela eq.(D.10) do Apêndice D.

A energia E do par elétron-positron é

$$E = \frac{\int \psi^*(\underline{r}) H \psi(\underline{r}) d\underline{r}}{\int \psi^*(\underline{r}) \psi(\underline{r}) d\underline{r}} \quad (3.5.5)$$

que, sem dificuldades, pode ser escrita na forma

$$E = \frac{4}{\pi^2 \tau} \left[\frac{x^2}{\tau} - 4 x^3 \int dR dQ e^{-2 R x} R \frac{\sin Q R}{Q \epsilon(Q)} \right] \quad (3.5.6)$$

onde

$$\tau = 2/\pi a_0 p_F \sim 0,33 r_s$$

$$x = \beta/p_F \quad R = r p_F \quad Q = q/p_F$$

com E em unidades de e^2/a_0 .

Como podemos verificar a integral em Q na eq.(3.5.6) diverge no limite $Q \rightarrow \infty$. Contudo tal divergência será eliminada se somarmos e subtrairmos o termo assintótico, resultando para E a expressão

$$E = \frac{4}{\pi^2 \tau} \left\{ \frac{x^2}{\tau} - \frac{\pi x}{2} - 4 x^3 \int dR e^{-2 R x} R \right. \\ \left. \times \int dQ \frac{\sin Q R}{Q} \left(\frac{1}{\epsilon(Q)} - 1 \right) \right\} \quad (3.5.7)$$

A determinação numérica de E foi realizada como função de β , para uma dada densidade do metal. As integrais em R e Q da eq.(3.5.7) foram calculadas numericamente pelo método de integração de Gauss com 40 pontos.

Mostramos na Figura 13 a energia em unidades de e^2/a_0 , como função de β/p_F para várias densidades, indicando um limite superior para a existência de estado ligado que corresponde a $r_s \sim 6$.

A razão de aniquilação do estado ligado é obtida comparando a densidade dos elétrons em torno do positron com aquela do positrônio livre. Dessa forma obtemos

$$\lambda = \frac{1}{4} \frac{|\psi(0)|^2}{|\psi(0)_{\text{positrônio livre}}|^2} \lambda_{\text{positrônio}} \quad (3.5.8)$$

Na Figura 14 mostramos a contribuição do positrônio à

razão de aniquilação, para várias densidades. Como vemos, o valor do positrônio livre é atingido no limite de muito baixa densidade.

Em nossos cálculos evitamos o problema da ortogonalidade entre o elétron ligado e os restantes elétrons de condução admitindo que todos os momentos estão presentes na função de onda do estado ligado. Admitir que a função de onda do estado ligado ocupe apenas momentos $p > p_F$, como no trabalho de Held e Kahana (14), não é uma aproximação muito boa uma vez que as funções de onda dos elétrons de condução também se acomodam ao estado ligado modificando a constante dielétrica local o que torna o cálculo incorreto.

Desde que o cálculo que efetuamos foi um cálculo variacional, nós não excluimos a possibilidade da existência de estados ligados, para densidades mais altas do que $r_s = 6$, os quais dariam a mais importante contribuição para a razão de aniquilação em tais regiões. Em outras palavras, esse modelo é ainda insuficiente para descrever o comportamento da razão de aniquilação para $r_s > 4$.

Reexaminando então, cuidadosamente as razões de aniquilação de positrons em metais alcalinos, obtidas experimentalmente por Weisberg e Berko (32), vemos que elas convergem rapidamente para a razão de aniquilação do positrônio livre. Admitindo que esse comportamento não seja uma coincidência e com o intuito de compreendê-lo, nós voltamos a explorar a possibilidade da formação de positrônio em metais.

Podemos considerar dois aspectos, a saber: os resultados experimentais de Weisberg e Berko e os resultados obtidos teoricamente no trabalho de Held e Kahana no qual a existência de positrônio só ocorreria em regiões de $r_s > 8,5$.

Analizando inicialmente o trabalho teórico, construímos um modelo simples para verificar qualitativamente a validade da aproximação macroscópica utilizada.

Na Figura 15 mostramos a distribuição eletrônica $g^{+-}(r)$ em torno de um positron (curvas 2), para três densidade metálicas, calculada por Sjölander e Stott. Para o positrônio, a distribuição eletrônica $g^{+-}(r)$ é dada por (curvas 1)

$$g^{+-}(r) - 1 = \frac{|\psi(r)|^2}{n_o} \quad (3.5.9)$$

onde

$$\psi(r) = \left(\frac{1}{8\pi a_o^3}\right)^{1/2} e^{-r/2a_o} \quad (3.5.10)$$

e a densidade do elétron em torno do positron, n_o , é

$$n_o = 3/4\pi a_o^3 r_s^3 \quad (3.5.11)$$

Com esses valores, $g^{+-}(r)$ fica sendo

$$g^{+-}(r) = 1 + \frac{r_s^3}{6} e^{-\alpha q_F r_s r} \quad (3.5.12)$$

onde

$$\alpha = (4/9\pi)^{1/3}$$

Como podemos verificar pelas figuras, para r_s pequeno o aumento da densidade de elétrons em torno do positron é muito maior na teoria do campo auto-consistente do que para o positrônio livre. Isso quer dizer que muitas cargas circundam o positron, blindando-o efetivamente e prevenindo portanto a formação de um positrônio. Para $r_s \sim 4$, as duas correlações são aproximadamente as mesmas ficando difícil decidir se os estados de espalhamento estariam ainda predominando sobre um estado ligado. Com a exclusão (devido à ortogonalidade e neutralidade do positrônio) de muitas das partículas quase-livres das vizinhanças do positron, formar-se-á um par elétron-positron ligado que interage através de um potencial coulombiano ligeiramente modificado por alguns elétrons quase-livres, restantes nas vizinhanças do positrônio. Na Tabela 3 comparamos os valores de $g^{+-}(0)$ obtidos na SCA com aqueles do estado ligado, eq.(3.5.12). Para $r_s > 4$ os valores de $g^{+-}(0)$ calculados na SCA não são, entretanto, corretos desde que esse método falha nessa região de densidade.

Se isso for verdadeiro, a aproximação do potencial blindado falhará, uma vez que ela é uma aproximação macroscópica. Consequentemente um outro modelo deverá ser considerado.

Admitimos que a aproximação macroscópica seja válida na região de r_s onde a função de correlação elétron-elétron, $g(r)$, seja grande (~ 1) para r igual ao raio a do positrônio livre. Quando $g(a) \ll 1$, um positrônio livre poderá ser formado desde que nenhum outro elétron estará nas vizinhanças daquele a ser ligado

ao positron. Dessa forma encontramos que a aproximação macroscópica seria válida para $r_s < 4$, tomando para $g(r)$ as curvas obtidas da aproximação do campo auto-consistente como mostradas na Figura 16.

Tabela 3 - Função de correlação, $g^{+-}(0)$, calculada em torno do positron para várias densidades eletrônicas.

r_s	g_{SCA}	$g_{Est.Lig.}$	$\frac{g_{SCA} - g_{Est.Lig.}}{g_{SCA}}$
2,0	3,78	2,33	0,38
3,0	6,70	5,50	0,18
4,0	12,90	11,60	0,10
4,5	18,30	15,10	0,17
5,0	26,30	20,80	0,20
6,0	95,40	36,00	0,62

A região de densidade eletrônica $r_s \sim 4$ é muito interessante desde que nessa região teoria e experiência começam a divergir, em muitas das teorias. Experimentalmente, Weisberg e Berko, a partir das curvas de correlação angular para dois fótons, determinaram as razões de aniquilação para o K, Rb e Cs. Seus resultados mostram que a contribuição da componente gaussiana das curvas de correlação angular, é muito grande para ser devida somente aos e-

lêtrons de "core". Uma grande parte da gaussiana, assumem eles, corresponde à aniquilação com elétrons de condução.

Varlashkin e Stewart (29) investigaram a distribuição de momentos dos fótons emitidos na aniquilação de positrons em soluções lítio-amônia, para duas concentrações, 2,39 e 19,1%, do metal. Os resultados obtidos não indicaram nenhuma dependência com a densidade de elétrons livres. As medidas de correlação angular são as mesmas para as duas concentrações do metal. Os autores atribuem essa não dependência com a concentração do metal à formação de estado ligado. Como mostramos na Figura 17, as curvas de correlação angular para o potássio e o césio se assemelham muito à obtida para a solução lítio-amônia, sugerindo-nos que nesses metais o positrônio esteja presente.

Considerando-se esses resultados, construímos um modelo para a razão de aniquilação na região de $r_s > 4$. Admitimos a não aplicabilidade da aproximação macroscópica e consideramos que o positrônio livre esteja presente nessa região de densidade. Então, a aniquilação é essencialmente a soma das contribuições de dois mecanismos possíveis, a saber: a razão de aniquilação do positrônio livre λ_0 , mais a razão de aniquilação com os elétrons livres, considerados como no modelo de Sommerfeld, uma vez que o positrônio sendo neutro não haverá atração coulombiana com os elétrons de condução restantes.

Nessa região λ será dado por

$$\lambda = \lambda_0 + \frac{12,0}{3} \times 10^9 \times \frac{1}{r_s} \quad (3.5.13)$$

A utilização do modelo de Sommerfeld na região onde existe positrônio deve-se aos seguintes fatos:

- 1) o modelo não é correto para explicar a aniquilação de positrons em metais porque não leva em consideração a interação coulombiana entre o positron e os elétrons de condução;
- 2) por outro lado, se o positrônio já existe no metal, os elétrons de condução veem-no como um átomo neutro, e o modelo de Sommerfeld pode agora ser aplicado desde que a restrição 1) deixa de existir.

Em altas densidades as teorias existentes concordam muito bem com os resultados experimentais sendo portanto correto o mecanismo de espalhamento para $r_s < 4$. Em baixas densidades nosso modelo além de reproduzir os pontos experimentais converge naturalmente para o positrônio livre. A região intermediária pode ser entendida como sendo resultado tanto do mecanismo de espalhamento quanto do positrônio.

Então, unimos lentamente as curvas para altas e baixas densidades e mostramos as razões de aniquilação para todas as densidades metálicas na Figura 18.

CAPÍTULO 4

CONCLUSÕES E SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

Neste trabalho estudamos o problema do potencial δ -atr_ativo tridimensional em um gás de Fermi sem interação. O problema foi discutido na aproximação do campo auto-consistente (SCA) e no formalismo de funções de Green. Nesse formalismo obtivemos resultados exatos para a função de correlação que foram comparados aos da SCA e aos resultados para partícula livre.

Analizamos a região de validade da SCA e concluímos que essa aproximação não permite a formação de estado ligado e que sua validade se restringe à região onde o potencial efetivo é essencialmente independente da energia. Concluimos também que, se nosso tratamento for estendido a outros potenciais, a SCA continuará sendo correta se o sistema se encontrar longe do estado ligado e, melhor ainda, para potenciais fortes e repulsivos. Por ou_tro lado, mostramos que não é permissível adicionar os resultados do estado ligado e da SCA visto que na região onde ambos aparecem a matriz T é dependente da energia e a SCA falha.

Julgamos que o crescimento anômalo da razão de aniquila_ação de positrons em um gás de elétrons de baixa densidade pode ser devido a inaplicabilidade da aproximação auto-consistente em tais densidades. A existência de um estado ligado ou de um potencial e_tfetivo dependente da energia poderiam ser responsáveis pelos resultados incorretos.

Com o objetivo de determinar a contribuição do positrônio à razão de aniquilação, estudamos a possibilidade de sua formação em metais. Encontramos, através de um cálculo variacional, usando como interação elétron-positron um potencial efetivo derivado do método da transformação canônica, que o positrônio se formará em um metal de densidade $r_s > 6$. Entretanto, esse cálculo não exclui a possibilidade da existência do positrônio em regiões de maior densidade.

As razões de aniquilação em metais foram também determinadas, usando o mesmo potencial efetivo. Nossos resultados concordam muito bem com os dados experimentais na região $r_s < 5$ e apresentam o mesmo crescimento anômalo em baixa densidade.

Admitindo, porém, a existência de positrônio em metais de densidade $r_s > 4,5$, propuzemos um modelo para interpretar a razão de aniquilação nessa região de densidade. Essa suposição é baseada em argumentos microscópicos e em dados experimentais.

Consideramos que a razão de aniquilação é dada pela razão de aniquilação do positrônio livre mais a razão de aniquilação de positrons com os elétrons livres de Sommerfeld. Nossos resultados concordam plenamente com os dados experimentais.

Com relação a este trabalho, podemos sugerir alguns novos problemas, a saber:

- a. Introduzir de início a matriz T de espalhamento na teoria do campo auto-consistente. A interação efetiva poderia ser então dependente da energia, eliminando a deficiência discutida neste

trabalho.

b. Estudar o problema do estado ligado em líquidos quânticos para outros potenciais, tais como, o coulombiano, puro ou blindado, esfera dura, Lennard-Jones, etc., tanto na aproximação do campo auto-consistente quanto no formalismo de função de Green.

c. A solução do problema da aniquilação de positrons em metais alcalinos continua, no entanto, incompleta, particularmente na região de densidades intermediárias. O método variacional, especialmente para o cálculo de funções de onda, deixa muito a desejar e o problema da ortogonalidade entre os estados ligados e de espalhamento é de solução extremamente difícil.

APÊNDICE A

A.1 - Função de Green

As propriedades de um sistema de muitas partículas são convenientemente descritas no formalismo de segunda quantização em termos dos operadores de campo, criação e destruição, que na representação de Heisenberg são dados por

$$\psi^+(\underline{r}, t) = \sum_{\underline{p}} \phi_{\underline{p}}^+(\underline{r}) e^{iE_{\underline{p}} t} C_{\underline{p}}^+ \quad (\text{A.1.1})$$

e

$$\psi(\underline{r}, t) = \sum_{\underline{p}} \phi_{\underline{p}}(\underline{r}) e^{-iE_{\underline{p}} t} C_{\underline{p}} \quad (\text{A.1.2})$$

onde C^+ e C são operadores criação e destruição de partículas, $\phi(\underline{r})$ são funções de onda de uma partícula e $E_{\underline{p}} = p^2$, em um sistema em que $\hbar^2 = 2m = 1$.

A função de Green de uma partícula $G(x_1, x'_1)$, é definida como

$$G(x_1, x'_1) = -i \langle T(\psi(x_1) \psi^+(x'_1)) \rangle \quad (\text{A.1.3})$$

e a função de Green de duas partículas $G_2(x_1 x_2; x'_1 x'_2)$ é definida por

$$G_2(x_1 x_2; x'_1 x'_2) = \langle T(\psi(x_1) \psi(x_2) \psi^+(x'_2) \psi^+(x'_1)) \rangle \quad (\text{A.1.4})$$

onde a média é tomada sobre o estado fundamental do sistema, $x = (x, t)$ e T é o operador cronológico de Wick que aplicado a um produto de operadores, arranja-os, da esquerda para a direita, em ordem decrescente no tempo, como por exemplo

$$\begin{aligned} T (\psi(x_1) \psi^+(x'_1)) &= \psi(x_1) \psi^+(x'_1) \quad \text{para } t_1 > t'_1 \\ &= \pm \psi^+(x'_1) \psi(x_1) \quad \text{para } t_1 < t'_1 \end{aligned}$$

onde o sinal superior refere-se a bósons e o inferior a fêrmions.

Suponhamos agora, que Φ_0 seja a função de onda do estado fundamental de um sistema de fêrmions sem interação. Neste caso,

$$\begin{aligned} c_p^+ \Phi_0 &= 0 \quad \text{para } p < p_F \\ c_p \Phi_0 &= 0 \quad \text{para } p > p_F \end{aligned} \tag{A.1.5}$$

A função de Green, para uma partícula desse sistema, $G_0(x_1, x'_1)$, será

$$\begin{aligned} G_0(x_1, x'_1) &= - \frac{i}{V} \sum_p \langle \Phi_0 | T \{ e^{ip \cdot (x_1 - x'_1)} \\ &\times e^{-iE_p(t_1 - t'_1)} c_p c_p^+ \} | \Phi_0 \rangle \end{aligned} \tag{A.1.6}$$

No limite de volume infinito e de acordo com a equação (A.1.5), podemos reescrever a eq. (A.1.6) como

$$\begin{aligned}
G_0(x_1, x'_1) = & -i \int \frac{dp}{(2\pi)^3} e^{ip \cdot (x_1 - x'_1)} e^{-iE_p(t_1 - t'_1)} \\
& \times \left[\theta(t_1 - t'_1) \theta(p - p_F) - \theta(t'_1 - t_1) \theta(p_F - p) \right]
\end{aligned}
\tag{A.1.7}$$

onde $\theta(t)$, função degrau, é

$$\theta(t - t') = - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi i} \frac{e^{-i\omega(t-t')}}{\omega + i\eta}
\tag{A.1.8}$$

η é um infinitesimal positivo.

Combinando as equações (A.1.8) com (A.1.7), obtemos

$$\begin{aligned}
G_0(x_1, x'_1) = & \int \frac{dp}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE}{2\pi} e^{ip \cdot (x_1 - x'_1)} e^{-iE(t_1 - t'_1)} \\
& \times \left[\frac{\theta(p - p_F)}{E - E_p + i\eta} + \frac{\theta(p_F - p)}{E - E_p - i\eta} \right]
\end{aligned}
\tag{A.1.9}$$

resultando

$$G_0(p, E) = \frac{\theta(p - p_F)}{E - E_p + i\eta} + \frac{\theta(p_F - p)}{E - E_p - i\eta}
\tag{A.1.10}$$

A.2 - Aproximação de Hartree

Consideremos um sistema de partículas que se interagem via um potencial v . A equação de movimento para a função de Green

mação corresponde a

$$\begin{aligned}
 G_2(x_1 x_2; x'_1 x'_2) &= \begin{array}{c} \xrightarrow{x'_1} \quad \xrightarrow{x_1} \\ | \quad | \\ G_2 \\ | \quad | \\ \xrightarrow{x'_2} \quad \xrightarrow{x_2} \end{array} \\
 &= \begin{array}{c} \xrightarrow{x'_1} \quad \xrightarrow{x_1} \\ \xrightarrow{x'_2} \quad \xrightarrow{x_2} \end{array} = G(x_1, x'_1) G(x_2, x'_2)
 \end{aligned}
 \tag{A.2.2}$$

Substituindo a eq.(A.2.2) na eq.(A.2.1), obtemos uma equação para $G(x_1, x'_1)$

$$\left[\left(i \frac{\partial}{\partial t_1} + \nabla_1^2 \right) - i \int d\tilde{x}_2 v(\tilde{x}_1 - \tilde{x}_2) G(x_2, x_2^+) \right] G(x_1, x'_1) = \delta(x_1 - x'_1)
 \tag{A.2.3}$$

Desde que $\pm i G(x_2, x_2^+) = \langle n(\tilde{x}_2) \rangle$ a eq.(A.2.3) pode ser reescrita como

$$\left[\left(i \frac{\partial}{\partial t_1} + \nabla_1^2 \right) - \int d\tilde{x}_2 v(\tilde{x}_1 - \tilde{x}_2) \langle n(\tilde{x}_2) \rangle \right] G(x_1, x'_1) = \delta(x_1 - x'_1)
 \tag{A.2.4}$$

O potencial $U(\tilde{x}_1)$

$$U(\tilde{x}_1) = \int d\tilde{x}_2 v(\tilde{x}_1 - \tilde{x}_2) \langle n(\tilde{x}_2) \rangle
 \tag{A.2.5}$$

$\tilde{e}$ é o chamado campo auto-consistente de Hartree e $\tilde{e}$ é o campo médio

gerado por todas as outras partículas no sistema. Vemos então que a aproximação de Hartree descreve o sistema de muitas partículas como um conjunto de partículas independentes, cada uma movendo-se em um campo médio produzido pelas outras.

A aproximação de Hartree é muito menos trivial se o sistema de partículas estiver em um potencial externo $U_{\text{ext}}(\underline{x})$. Nesse caso, as partículas movem-se como partículas independentes em um potencial efetivo $U_{\text{ef}}(\underline{x}_1)$ dado por

$$U_{\text{ef}}(\underline{x}_1) = U_{\text{ext}}(\underline{x}_1) + \int d\underline{x}_2 v(\underline{x}_1 - \underline{x}_2) \langle n(\underline{x}_2) \rangle$$

(A.2.6)

A.3 - Aproximação de Hartree-Fock

A aproximação de Hartree-Fock consiste em levar em consideração a identidade das partículas na função de Green de duas partículas, isto é, tomar $G_2(x_1 x_2; x'_1 x'_2)$ como sendo

$$\begin{aligned}
 G_2(x_1 x_2; x'_1 x'_2) &= \begin{array}{c} \xrightarrow{x'_1} \quad \text{---} \quad \xrightarrow{x_1} \\ | \qquad \qquad | \\ \xrightarrow{x'_2} \quad \text{---} \quad \xrightarrow{x_2} \end{array} \\
 &= \begin{array}{c} \xrightarrow{x'_1} \quad \text{---} \quad \xrightarrow{x_1} \\ \xrightarrow{x'_2} \quad \text{---} \quad \xrightarrow{x_2} \end{array} \quad \begin{array}{c} \xrightarrow{x'_1} \quad \text{---} \quad \text{---} \quad \xrightarrow{x_1} \\ \quad \quad \quad \diagdown \quad \quad \diagup \\ \xrightarrow{x'_2} \quad \text{---} \quad \text{---} \quad \xrightarrow{x_2} \end{array} \\
 &= G(x_1, x'_1)G(x_2, x'_2) \pm G(x_1, x'_2)G(x_2, x'_1) \quad (A.3.1)
 \end{aligned}$$

A equação para $G(x_1, x'_1)$ é então obtida substituindo a eq. (A.3.1) na eq. (A.2.1). Encontramos

$$(i \frac{\partial}{\partial t_1} + \nabla_1^2) G(x_1, x'_1) + \int d\underline{x}_2 <\underline{x}_1 | U | \underline{x}_2 > G(x_2, x'_1)_{t_2=t_1} = \delta(x_1 - x'_1) \quad (A.3.2)$$

onde

$$\begin{aligned} <\underline{x}_1 | U | \underline{x}_2 > = \delta(\underline{x}_1 - \underline{x}_2) \int d\underline{x}_3 v(\underline{x}_1 - \underline{x}_3) <n(\underline{x}_3)> \\ &+ i v(\underline{x}_1 - \underline{x}_2) G(x_1, x_2^+)_{t_2=t_1} \end{aligned} \quad (A.3.3)$$

é o potencial auto-consistente, interpretado como um potencial médio através do qual as partículas se movem. Observe que a introdução do termo de troca em G_2 resultou em um potencial U , não local no espaço.

Concluindo, verificamos que as aproximações de Hartree e Hartree-Fock descrevem as partículas movendo-se independentemente umas das outras em um potencial médio.

A.4 - Aproximação RPA

A aproximação de Hartree dependente do tempo, linearizada no campo externo é chamada RPA (random phase approximation). Nesta aproximação o potencial efetivo é dado por

$$U_{ef}(\underline{x}_1, t) = U_{ext}(\underline{x}_1, t) + \int d\underline{x}_2 v(\underline{x}_1 - \underline{x}_2) <n(\underline{x}_2, t)> \quad (A.4.1)$$

ou

$$U_{\text{ef}}(\underline{p}, \omega) = U_{\text{ext}}(\underline{p}, \omega) + v(\underline{p}) \langle n(\underline{p}, \omega) \rangle \quad (\text{A.4.2})$$

onde a densidade $\langle n(\underline{p}, \omega) \rangle$ é

$$\langle n(\underline{p}, \omega) \rangle = \chi^0(\underline{p}, \omega) U_{\text{ef}}(\underline{p}, \omega) \quad (\text{A.4.3})$$

com $\chi^0(\underline{p}, \omega)$ sendo a polarizabilidade livre.

A partir das equações (A.4.2) e (A.4.3) determinamos a constante dielétrica $\epsilon(\underline{p}, \omega)$, como sendo

$$\epsilon(\underline{p}, \omega) = \frac{U_{\text{ef}}(\underline{p}, \omega)}{U_{\text{ext}}(\underline{p}, \omega)} = 1 - v(\underline{p}) \chi^0(\underline{p}, \omega) \quad (\text{A.4.4})$$

Podemos então dizer que a diferença entre o RPA e a aproximação de Hartree-Fock é que, no RPA o sistema responde ao campo efetivo enquanto em HF o sistema responde ao campo externo. Em ambos os casos, a resposta é dada em termos de polarizabilidade livre.

APÊNDICE B

B.1 - Determinação da energia, E_ℓ , do estado ligado

A variação da densidade de partículas $\delta\tilde{G}(q, E)$, devido ao potencial externo, é dada pela eq.(2.3.15) como sendo

$$\begin{aligned} \delta\tilde{G}(q, E) = & \int \frac{dp}{(2\pi)^3} \frac{1}{E - E_{\underline{p}} + i\eta_{\underline{p}}} \frac{1}{E - E_{\underline{p}+q} + i\eta_{\underline{p}+q}} \\ & \times \frac{1}{\frac{1}{\beta} - P \int dE_{\underline{p}} \frac{EN(E_{\underline{p}})}{E_{\underline{p}}(E - E_{\underline{p}})}} - i \delta_E N(E) \end{aligned} \quad (B.1.1)$$

Notamos que, para $\beta > 0$ a integral na eq.(B.1.1) tem um polo na região de E real e negativa. A energia, E_ℓ , associada a esse polo é obtida quando

$$\frac{1}{\beta} - \int dE_{\underline{p}} \frac{E_\ell N(E_{\underline{p}})}{E_{\underline{p}}(E_\ell - E_{\underline{p}})} = 0 \quad (B.1.2)$$

onde

$$N(E_{\underline{p}}) = \frac{1}{4\pi^2} |E_{\underline{p}}|^{1/2} \quad (B.1.3)$$

é a densidade de estados para partículas sem spin. Com esse valor de $N(E_{\underline{p}})$ a eq.(B.1.2) pode ser reescrita na forma

$$\frac{1}{\beta} = \frac{-|E_\ell|^{1/2}}{4\pi^2} \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{1}{1+x^2} \quad (B.1.4)$$

Essa última integral é agora facilmente calculada por resíduos, fechando o contorno de integração na metade superior do plano complexo, envolvendo o polo $x = i$.

Obtemos então o valor para E_ℓ dado por

$$E_\ell = -\frac{16\pi^2}{\beta^2} \quad (\text{B.1.5})$$

B.2 - Cálculo exato de $f(q, E_\ell)$

Estamos interessados em obter a solução da integral dada pela eq.(2.3.18) cuja expressão, para $E = E_\ell$, é

$$f(q, E_\ell) = \int_0^\infty dE_p \frac{N(E_p)}{(E_\ell - E_p)(E_\ell - E_{p+q})} \quad (\text{B.2.1})$$

Reescrevendo essa equação em termos de p e q , ficamos com

$$f(q, E_\ell) = \int \frac{dp}{(2\pi)^3} \frac{1}{(E_\ell - p^2) [E_\ell - (p+q)^2]} \quad (\text{B.2.2})$$

Efetuada a integração da parte angular e verificando que o integrando é uma função par de p , a eq.(B.2.2) reduz-se a expressão

$$f(q, E_\ell) = \frac{1}{16\pi^2 q} \int_{-\infty}^{\infty} dp \frac{p}{(|E_\ell| + p^2)} \ln \frac{|E_\ell| + (p - q)^2}{|E_\ell| + (p + q)^2} \quad (\text{B.2.3})$$

Para obtermos uma simplificação nos cálculos, usamos a seguinte igualdade

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{x}{1+x^2} \ln [1+(x-y)^2] = \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{x}{1+x^2} \ln [1+(x+y)^2] \quad (\text{B.2.4})$$

Essa igualdade é facilmente verificada. Basta efetuarmos a integração, por partes, de uma das integrais que obteremos a outra.

Usando, então, essa relação escrevemos a eq.(B.2.3) na forma

$$f(q, E_\ell) = \frac{1}{8\pi^2 q} I(q, E_\ell) \quad (\text{B.2.5})$$

onde

$$I(q, E_\ell) = \int_{-\infty}^{\infty} dp \frac{p}{(|E_\ell| + p^2)} \ln [|E_\ell| + (p-q)^2] \quad (\text{B.2.6})$$

O valor dessa última integral é obtido tomando inicialmente a derivada em q , $I'(q, E_\ell)$, de $I(q, E_\ell)$ que encontramos ser

$$I'(q, E_\ell) = \int_{-\infty}^{\infty} dp \frac{-2p(p-q)}{(|E_\ell| + p^2) [|E_\ell| + (p-q)^2]} \quad (\text{B.2.7})$$

Essa integral é agora resolvida por resíduos. Fechando o contorno de integração na metade superior do plano complexo, envolvendo os polos $E = i |E_\ell|^{1/2}$ e $E = q + i |E_\ell|^{1/2}$, encontramos o seguinte resultado para $I'(q, E_\ell)$,

$$I'(q, E_\ell) = \frac{-4\pi |E_\ell|}{4 |E_\ell| + q^2} \quad (\text{B.2.8})$$

$I(q, E_\ell)$ é determinado, integrando a eq.(B.2.8) com a condição $I(0, E_\ell) = 0$ dada pela eq.(B.2.6). Obtemos dessa forma

$$I(q, E_\ell) = 2\pi \operatorname{tg}^{-1} \frac{2 |E_\ell|^{1/2}}{q} - \pi^2 \quad (\text{B.2.9})$$

Finalmente a eq.(B.2.5) para $f(q, E_\ell)$ fica sendo

$$f(q, E_\ell) = \frac{1}{4\pi q} \left(\operatorname{tg}^{-1} \frac{2 |E_\ell|^{1/2}}{q} - \frac{\pi}{2} \right) \quad (\text{B.2.10})$$

APÊNDICE C

I_2 , a integral em E de $\delta\tilde{G}(\underline{q}, E)$ calculada ao longo das curvas C_3 e C_4 mostradas na Figura 10, é dada por

$$I_2 = -i \int_0^{E_F} \frac{dE}{2\pi} \left[\delta\tilde{G}(\underline{q}, E) - \delta\tilde{G}^*(\underline{q}, E) \right] \quad (C.1)$$

onde $\delta\tilde{G}(\underline{q}, E)$, para E complexo, é

$$\begin{aligned} \delta\tilde{G}(\underline{q}, E) = & \int_0^\infty dE_{\underline{p}} \frac{N(E_{\underline{p}})}{E - E_{\underline{p}} + i\eta_{\underline{p}}} \frac{1}{E - E_{\underline{p}+\underline{q}} + i\eta_{\underline{p}+\underline{q}}} \\ & \times \frac{1}{\frac{1}{\beta} - \int dE_{\underline{p}} \frac{EN(E_{\underline{p}})}{E_{\underline{p}}(E - E_{\underline{p}} - i\eta)}} \end{aligned} \quad (C.2)$$

e $\delta\tilde{G}^*(\underline{q}, E)$ é seu complexo conjugado.

Inserindo a eq.(C.2) na eq.(C.1) obtemos

$$\begin{aligned} I_2 = & -i \int_0^{E_F} \frac{dE}{2\pi} \int_0^{E_F} dE_{\underline{p}} \, 2i \operatorname{Im} \left[\frac{N(E_{\underline{p}})}{E - E_{\underline{p}} + i\eta_{\underline{p}}} \right. \\ & \left. \times \frac{1}{E - E_{\underline{p}+\underline{q}} + i\eta_{\underline{p}+\underline{q}}} \frac{1}{\frac{1}{\beta} - P(E) - i\pi N(E)} \right] \end{aligned} \quad (C.3)$$

onde

$$P(E) = P \int dE_{\underline{p}} \frac{EN(E_{\underline{p}})}{E_{\underline{p}}(E - E_{\underline{p}})} \quad (C.4)$$

P significa a parte principal da integral.

Sendo $P(E) = 0$ para $E > 0$, o cálculo da integral em E da eq.(C.3) resulta

$$\begin{aligned}
 I_2 = P \int_0^{E_F} dE_p N(E_p) & \left[\frac{1}{E_p - E_{p+q}} \frac{1/\beta}{\frac{1}{\beta^2} + \pi^2 N^2(E_p)} \right. \\
 & + \frac{1}{E_{p+q} - E_p} \frac{1/\beta}{\frac{1}{\beta^2} + \pi^2 N^2(E_{p+q})} \\
 & \left. + \int_0^{E_F} dE \frac{N(E)}{(E - E_p)(E - E_{p+q})} \frac{1}{\frac{1}{\beta^2} + \pi^2 N^2(E)} \right] \quad (C.5)
 \end{aligned}$$

A eq.(C.5) pode ser reescrita como

$$\begin{aligned}
 I_2 = \frac{1}{\beta} P \int_0^\infty dE_p N(E_p) & \left[\frac{n(E_p)}{(E_p - E_{p+q}) \left[\frac{1}{\beta} + \pi^2 N^2(E_p) \right]} \right. \\
 & + \frac{n(E_{p+q})}{(E_{p+q} - E_p) \left[\frac{1}{\beta^2} + \pi^2 N^2(E_{p+q}) \right]} \left. \right] \\
 & + P \int_0^\infty dE_p N(E_p) \int_0^{E_F} dE \frac{N(E)}{(E - E_p)(E - E_{p+q})} \\
 & \times \frac{1}{\left[\frac{1}{\beta^2} + \pi^2 N^2(E) \right]} \quad (C.6)
 \end{aligned}$$

Desde que o integrando da última integral em E_p na eq.(C.6) é uma função analítica de E_p exceto no eixo real, a parte princi-

pal dessa integral é zero. Portanto, a eq.(C.6) fica simplesmente reduzida a

$$I_2 = \frac{1}{\beta} P \int_0^\infty dE_p N(E_p) \left[\frac{n(E_p)}{(E_p - E_{p+q}) \left[\frac{1}{\beta^2} + \Pi^2 N^2(E_p) \right]} + \frac{n(E_{p+q})}{(E_{p+q} - E_p) \left[\frac{1}{\beta^2} + \Pi^2 N^2(E_{p+q}) \right]} \right] \quad (C.7)$$

APÊNDICE D

Cálculo numérico da equação integral

$$\begin{aligned} \chi_p(r) = & \frac{1}{4\pi} \int \frac{d\Omega_p}{(2\pi)^3} \frac{\bar{V}(|\underline{r}-\underline{p}|)}{\tilde{E}_{\underline{r},\underline{p}-\underline{r}} - \tilde{E}_{\underline{p},0}} \\ & + \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\Omega_p \frac{1}{\tilde{E}_{\underline{r},\underline{p}-\underline{r}} - \tilde{E}_{\underline{p},0}} \int d\rho \rho^2 V_o(r,\rho) \chi_p^o(\rho) \end{aligned} \quad (D.1)$$

onde

$$\begin{aligned} V_o(r,\rho) &= \frac{1}{4\pi} \int d\Omega_p \bar{V}(|\underline{r}-\underline{p}|) \\ &= \frac{1}{2r\rho} \int \frac{|\underline{r}+\underline{\rho}|}{|\underline{r}-\underline{\rho}|} dk \bar{V}(k) k \end{aligned} \quad (D.2)$$

$\tilde{E}_{\underline{p}}$ é calculado na aproximação de Hartree-Fock blindada e $\bar{e}$ é dado por*(31)

$$\tilde{E}_{\underline{p}} = p^2 + \frac{4}{3}\tau \frac{p_F^4}{p^2} (A - B) \quad (D.3)$$

onde

$$A = \frac{1}{2} \left[p^2 / (p_F^2 + p_{FT}^2) \right] \quad (D.4)$$

$$B = \frac{1}{2} \left[p^2 / (p_F^2 + p^2 + p_{FT}^2) \right] \quad (D.5)$$

$$\tau = 2/\pi a_o p_F \approx 0,33 r_s \quad (D.6)$$

* Estamos usando unidades em que $\hbar^2 = 2m = 1$.

Efetuada as integrais angulares que aparecem na eq.(D.1) e tomando os momentos em unidades do momento de Fermi, obtemos

$$\begin{aligned}\tilde{\chi}_p(r) = & \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{1}{2rp} \int \frac{|r+p|}{|r-p|} dk \frac{k \tilde{V}(k)}{k^2 + \Delta(k) + r^2 + \Delta(r) - p^2 - \Delta(p)} \\ & + \frac{1}{2\pi^2} \frac{1}{2rp} \int \frac{|r+p|}{|r-p|} dk \frac{k}{k^2 + \Delta(k) + r^2 + \Delta(r) - p^2 - \Delta(p)} \\ & \times \frac{1}{2r} \int_1^\infty d\rho \int \frac{|r+\rho|}{|r-\rho|} dk k \tilde{V}(k) \rho \tilde{\chi}_p(\rho) \quad (D.7)\end{aligned}$$

onde

$$\tilde{\chi}_p(r) = p_F^3 \chi_p(r), \quad \tilde{V}(k) = p_F \bar{V}(k), \quad \text{e} \quad \Delta$$

a correção de auto-energia, é dada por

$$\Delta(p) = \frac{4}{3} \tau \frac{p_F^2}{p} (A - B) \quad (D.8)$$

A interação efetiva elétron-positron dada pela equação (3.2.12), pode ser reescrita, em unidades de p_F , como

$$\tilde{V}(k) = \frac{(2\pi)^2 \tau}{k^2} \frac{1}{\epsilon(k)} \quad (D.9)$$

com

$$\begin{aligned}\epsilon(k) = & 1 + \frac{\tau}{k^3} \left\{ \left[1 - \left(\frac{k^2 + \Delta(k)}{2k} \right)^2 \right] \ln \frac{k^2 + \Delta(k) + 2k}{k^2 + \Delta(k) - 2k} \right. \\ & \left. + \frac{k^2 + \Delta(k)}{k} \right\} \left[1 - \frac{1}{4} \left(\frac{k^2}{1 + k_{FT}^2} + \frac{k^2}{1 + k_{FT}^2} \right) \right] \quad (D.10)\end{aligned}$$

Selecionando uma grade de pontos (r, ρ) e efetuando numericamente, pelo método de Gauss-Legendre (22), a integral em ρ , transformamos a eq.(D.7) em um sistema de equações lineares dado por

$$\sum_{i=1}^n \{ \delta(r, \rho_i) - \frac{1}{8\pi^2} \frac{1}{p r^2} \omega_i \rho_i \int \frac{|r+p|}{|r-p|} dq \frac{q}{q^2 + \Delta(q) + r^2 + \Delta(r) - p^2 - \Delta(p)} \\ \times \int \frac{|r+\rho_i|}{|r-\rho_i|} dk k \tilde{V}(k) \} \tilde{\chi}_p(\rho_i) = \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{1}{2 p r} \\ \times \int \frac{|r+p|}{|r-p|} dk \frac{k \tilde{V}(k)}{k^2 + \Delta(k) + r^2 + \Delta(r) - p^2 + \Delta(p)} \quad (D.11)$$

onde os argumentos ρ_i são zeros dos polinômios de Legendre, $P_n(\rho)$,

$$P_n(\rho) = \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{d\rho^n} (\rho^2 - 1)^n \quad (D.12)$$

e os coeficientes ω_i são

$$\omega_i = \frac{2(1 - \rho_i)^2}{n^2 [P_{n-1}(\rho_i)]^2} \quad (D.13)$$

A grade consistiu de 60 pontos selecionados em um intervalo de 1 a 41 sendo, devido ao comportamento assintótico da solução, isto é,

$$\chi_p(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} 1/r^4 \quad (D.14)$$

mais refinada para pequenos valores de r (tomamos 40 pontos no intervalo de 1 a 5).

A partir dos $\tilde{\chi}_p(r_i)$, solução do sistema de equações lineares, calculamos numericamente a integral

$$\int_1^{41} dr r^2 \tilde{\chi}_p(r) \quad (D.15)$$

A integral de $r = 41$ a $r \rightarrow \infty$ foi estimada a partir da eq. (D.14).

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 - Par de espectrômetros idênticos operados com as bobinas focalizadoras em série. Os positrons emergindo através do cristal de stilbene do contador da esquerda, mostrado ampliado em (b), são selecionados em energia e trajetória pelo espectrômetro esquerdo. Os positrons que passam pela fenda no diafragma central chocam-se com a amostra que é colocada em frente ao contador da direita, ampliado em (c). Os contadores são conectados a um circuito de coincidência cujo tempo de resolução $2\tau_0 = 2 \times 10^{-9}$ seg. Ref. (27).

Figura 2 - Curvas de resolução de coincidência para o alumínio. A curva deslocada (círculos pretos) foi obtida com a amostra em frente ao contador e a curva padrão $P(x)$ com a amostra removida, sendo os positrons detetados diretamente pelo contador. Ref. (27).

Figura 3 - Curvas de resolução de coincidência para o quartzo fundido. A curva obtida em laboratório é comparada com a curva padrão $P(x)$.

Figura 4 - Densidades e distribuições de momentos, $N(\underline{p})$ e $\rho(\underline{p})$, dos fótons da aniquilação de positrons nos metais alcalinos, Li, Na, K, Rb e Cs. Ref. (27).

Figura 5 - Densidades e distribuições de momentos, $N(\underline{p})$ e $\rho(\underline{p})$, dos fótons emitidos na aniquilação de positrons nos metais nobres, Cu, Ag e Au. Ref. (27).

Figura 6 - Densidades e distribuições de momentos, $N(\underline{p})$ e $\rho(\underline{p})$, dos fótons emitidos na aniquilação de positrons nos metais alcalinos terrosos, Be, Mg, Ca, Sr e Ba. Ref. (27).

Figura 7 - Razão de aniquilação de positrons, como função da densidade eletrônica r_s , obtida por diferentes teorias.

Figura 8 - Esquema da solução gráfica da eq.(2.1.5) para $\beta > 0$. Os dois membros da equação são traçados como função de E . As interseções indicam as energias dos estados de espalhamento para $E > 0$ e a energia do estado ligado para $E < 0$.

Figura 9 - $[g^{ab}(r) - 1] / \beta p_F$ como função de $p_F r$ para $r_s = 4$. A parte inserida que está expandida X2 horizontalmente e X40 verticalmente, mostra o comportamento oscilatório da função de correlação para grandes r .

Figura 10 - Contorno de integração para o cálculo da densidade induzida $\langle \rho(q) \rangle$ dado pela eq.(2.3.16).

Figura 11 - $[g(r) - 1] \beta p_F$ como função de $p_F r$. A curva 1 é a contribuição do estado ligado para $\beta p_F = 8\pi$, e a curva 2 é a contribuição dos estados de espalhamento.

Figura 12 - Razão de aniquilação de positrons em metais como função da densidade. Os resultados indicados como sendo de Kahana foram calculados por nós usando sua teoria.

Figura 13 - Energia, em unidades atômicas (e^2/a_0), como função de β/p_F para várias densidades metálicas. O cálculo da energia foi realizado usando o método variacional.

Figura 14 - Razão entre a densidade de elétrons em torno do positron e a densidade do positrônio livre como função de τ ($\tau \approx 0,33 r_s$).

Figura 15 - Função de correlação $g^{+-}(r)$ versus $p_F r$ para $r_s = 2, 3$ e 4. As curvas 1 foram calculadas para o positrônio e as curvas 2 foram obtidas na Ref. (26).

Figura 16 - Função de correlação $g(r)$ versus $p_F r$ para $r_s = 2, 3$ e 4, obtidas na Ref. (25). a é o raio do positrônio.

Figura 17 - Correlação angular dos fótons emitidos na aniquilação de positrons em amônia líquida, soluções de lítio-amônia, K e Cs. São também mostradas as distribuições angulares que seriam esperadas para positrons aniquilando-se com elétrons livres em um gás de mesma concentração eletrônica das soluções lítio-amônia.

Figura 18 - Razão de aniquilação de positrons em metais alcalinos versus a densidade eletrônica.

BIBLIOGRAFIA

- 1 - ANDERSON, C.A. - Phys. Rev. 41, 405 (1932).
- 2 - ANTONIEWICZ, P.R. e KLEINMAN, L. - Phys. Rev. B, 2, 2808 (1970).
- 3 - BELL, R.E. e JORGENSEN, M.H. - Can. J. Phys. 38, 652 (1960).
- 4 - BELL, R.E. e GRAHAM, R.L. - Phys. Rev. 90, 644 (1952).
- 5 - BHATTACHARYYA, P. e SINGWI, K.S. - Phys. Rev. Let. 29, 1, 22 (1972).
- 6 - BISI, A., FIORENTINI, A. e ZAPPA, L. - Phys. Rev. 134, A328 (1964).
- 7 - BOHM, D. e PINES, D. - Phys. Rev. 92, 609 (1953).
- 8 - DE BENEDETTI, S., COWAN, C.E., KONNEKER, W.R. e PRIMAKOFF, H. - Phys. Rev. 77, 205 (1950).
- 9 - DE BENEDETTI, S. e RICHINGS, H.J. - Phys. Rev. 85, 377 (1952).
- 10 - FERRELL, R. - Rev. Mod. Phys. 28, 308 (1956).
- 11 - FREITAS, L.G. de - Tese de Doutorado, Universidade de São Paulo, EESC, São Carlos (1971).
- 12 - GREEN, R.E. e STEWART, A.T. - Phys. Rev. 98, 486 (1955).
- 13 - GÜTTINGER, W., SEKINE, K. e SWIECA, J.A. - Nuc. Phys. 62, 3, 417 (1965).
- 14 - HELD, A. e KAHANA, S. - Can. J. Phys. 42, 1908 (1964).
- 15 - KAHANA, S. - Phys. Rev. 129, 1622 (1963).
- 16 - LANG, G. e DE BENEDETTI, S. - Phys. Rev. 108, 914 (1957).
- 17 - LANG, G., DE BENEDETTI, S. e SMOLUCHOWSKI, R. - Phys. Rev. 99, 596 (1955).

- 18 - LEE-WHITING, G.E. - Phys. Rev. 97, 1557 (1955).
- 19 - LOBO, R. - A ser publicado.
- 20 - LOBO, R., SINGWI, K.S. e TOSI, M.P. - Phys. Rev. 186, 2, 470 (1969).
- 21 - PINES, D. - "The Many Body Problem", Benjamin, N.York (1961).
- 22 - SCHEID, F. - "Theory and Problem of Numerical Analysis" (Schaum's Outline Series), McGraw-Hill Book Company, New York, Cap.15 (1968).
- 23 - SHEARER, J.W. e DEUTSCH, M. - Phys. Rev. 76, 642 (1949).
- 24 - SINGWI, K.S., SJÖLANDER, A., TOSI, M.P. e LAND, R.H. - Phys. Rev. B1, 1044 (1970).
- 25 - SINGWI, K.S., TOSI, M.P., LAND, R.H. e SJÖLANDER, A. - Phys. Rev. 176, 589 (1968).
- 26 - SJÖLANDER, A. e STOTT, M. - Phys. Rev. B5, 2109 (1972).
- 27 - STEWART, A.T. - Can. J. Phys. 35, 168 (1957).
- 28 - STEWART, A.T. - Phys. Rev. 99, 594 (1955).
- 29 - VARLASHKIN, P.G. e STEWART, A.T., in Positron Annihilation (Stewart, A.T. and Roellis, L.O., Eds.), Academic Press, New York 313-316 (1967).
- 30 - VASHISHTA, P. e SINGWI, K.S. - Phys. Rev. B6, 875 (1972).
- 31 - WALLACE, P.R., in Solid State Physics 10 (Seitz, F. and Turnbull, D. Eds.), Academic Press, New York 1-69 (1960).
- 32 - WEISBERG, H. e BERKO, S. - Phys. Rev. 154, 249 (1967).
- 33 - ZIMAN, J.M. - "Elements of Advanced Quantum Theory", Cambridge University Press (1969).

Figura — I

Figura — 2

Figura — 3

Figura — 4

Energia — uma partícula movimentando-se

Figura — 5

Figura — 6

Figura — 7

Figura — 8

Figura — 10

Figura — 11

Figura — 12

Figura — 13

Figura — 14

Figura — 15

Figura — 16

Figura — 17

Figura — 18