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

**O MÉTODO DO CAMPO AUTOCONSISTENTE NO
ESTUDO DE PROBLEMAS DE MUITOS CORPOS**

VERA BEATRIZ FREITAS DE CAMPOS

Departamento de Física

Universidade Federal de São Carlos

(Tese Apresentada ao Instituto de Física e
Química de São Carlos, USP, para a obten-
ção do título de "Doutor em Física").

Orientador:

Prof. Dr. Roberto Leal Lobo e Silva Filho

SÃO CARLOS
1976

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

O MÉTODO DO CAMPO AUTOCONSISTENTE NO ESTUDO DE PROBLEMAS DE MUITOS CORPOS

VERA BEATRIZ FREITAS DE CAMPOS

Departamento de Física
Universidade Federal de São Carlos

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

Orientador:

Prof. Dr. Roberto Leal Lobo e Silva Filho

SÃO CARLOS — 1976

Agradeço,

ao prof. Dr. Roberto Leal Lobo e Silva Filho pelo constante apoio, boa vontade e orientação na realização deste trabalho,

ao prof. Dr. Oscar Hipólito pelas proveitosas discussões e colaboração,

aos colegas e funcionários do Departamento de Física e da Divisão de Computação da UFSCAR, e do Departamento de Física e Ciência dos Materiais do IFQSC, USP, que contribuíram direta ou indiretamente para o desenvolvimento deste trabalho,

ã Maria Laura pelo excelente trabalho de datilografia.

Finalmente, agradeço a hospitalidade do IFQSC e o patrocínio da UFSCAR, indispensáveis à realização desta tese.

* * *

APRESENTAÇÃO

Este trabalho constitui-se do cálculo de propriedades de sistemas de muitos corpos, em especial líquidos quânticos ($T = 0^{\circ}\text{K}$), utilizando o método do campo autoconsistente (SCFA). Vamos aplicar a SCFA a sistema quânticos compostos por partículas neutras ou carregadas (eletrons), estudando a susceptibilidade generalizada do sistema. Assim, obtêm-se autoconsistentemente propriedades como o fator de estrutura, função de correlação dos pares, espectro de energia das excitações, velocidade do som, etc.

No Capítulo 1 discutimos os conceitos teóricos que serão utilizados, enquanto que o Capítulo 2 é dedicado a uma descrição da SCFA. Singwi e seus colaboradores desenvolveram essa aproximação para estudar o gás de eletrons tridimensional, na região de densidades metálicas, tentando melhorar os resultados até então obtidos por outras aproximações. A hipótese fundamental feita nessa teoria é utilizar a função de correlação dos pares de partículas para expressar a função de distribuição de duas partículas em termos do produto das funções de distribuição de cada partícula. Então procura-se uma solução autoconsistente para o fator de estrutura e função de correlação dos pares. Este fato implica na obtenção de um potencial efetivo autoconsistente, que representa a interação entre as partículas do gás.

O Capítulo 3 é dedicado ao estudo de um sistema tridimensional de bósons, comparando-se os resultados obtidos supondo que as partículas possam ser consideradas como esferas totalmente rígidas e introduzindo uma parte atrativa no potencial, a fim de torná-lo mais semelhante ao potencial real de

sistemas tipo ${}^4\text{He}$. Usando nas expressões obtidas teoricamente os parâmetros correspondentes ao líquido de ${}^4\text{He}$, podemos comparar os resultados com os resultados experimentais obtidos a baixas temperaturas. Verifica-se que a introdução de uma parte atrativa no potencial ocasiona uma melhora nos resultados, principalmente para a velocidade do som e massa efetiva do roton. Os espectros de energia teórico e experimental apresentam o mesmo comportamento, com as posições do máximo e do mínimo coincidentes. Entretanto, a altura do primeiro máximo e do mínimo experimentais correspondem a cerca de 50 a 60% do valor teórico com cada potencial. No caso de potencial com parte atrativa, se supusermos que a massa efetiva do átomo de Hélio no sistema é cerca de 1.8 vezes maior que a massa do átomo livre, os espectros de energia teórico e experimental vão praticamente coincidir. Então, a velocidade do som tem o valor $s = 218\text{m/s}$, bastante mais próximo do valor extrapolado dos resultados experimentais. Podemos também calcular a massa efetiva do átomo de Hélio que corresponderia ao valor experimental para a velocidade do som, obtendo-se $m_{\text{ef}} \approx 2m_{\text{He}}$. Neste caso, os valores do máximo e do mínimo do espectro de energia teórico ficam cerca de 8% maiores que os experimentais.

No Capítulo 4 a aproximação SCFA é aplicada a um sistema de fermions neutros, composto de partículas impenetráveis. O problema unidimensional foi resolvido completamente. Os resultados para este sistema mostraram uma característica bastante interessante, que é associada ao seu comportamento em função da densidade. Verificou-se que existem duas regiões de densidades com comportamentos bem distintos, tanto para o fator de estrutura e função de correlação dos pares, como para o espectro de energia das excitações elementares e velocidade do som. O espectro de energia apresenta descontí-

nuidades quando os modos coletivos encostam no espectro de partícula única. Para todas as densidades a primeira descontinuidade ocorre quando $q = \pi/\ell$, que corresponde à inversão do sinal do potencial efetivo autoconsistente. Esse fato é evidente quando se examina a relação de dispersão de um sistema de fermions e verifica-se que a troca de sinal no potencial efetivo deve necessariamente corresponder a uma troca de sinal na diferença de energias entre a excitação coletiva e partícula única. Na região de "altas" densidades ($\rho\ell \geq 0.23$) o espectro de energia vai apresentar um comportamento tipo "roton", com o mínimo de energia acentuando-se quando a densidade cresce. Para densidades mais altas vai aparecer um segundo mínimo, com $q > \pi/\ell$, que, eventualmente, vai corresponder a um zero de energia quando $\rho\ell \sim 0.66$. Esse fato evidencia que o sistema alcançou um estado cristalino, o que é também indicado pelo comportamento fortemente oscilatório da função de correlação dos pares nesta região. O comportamento de um sistema unidimensional de fermions considerados como barras rígidas, e o de um sistema de bosons com mesma interação é bastante semelhante, especialmente para baixas densidades, quando os resultados concordam com os resultados exatos de um sistema sem interação.

No Capítulo 5, é feito o estudo de um sistema quasi-unidimensional, onde a condução é feita de maneira unidimensional. Usando a aproximação SCFA, calculamos o fator de estrutura autoconsistente para valores de $x_s = x_o/a_o$ entre 0.01 e 12. Com esse resultado obtivemos a função de correlação dos pares em cada caso, comparando-a com o resultado obtido com RPA - que corresponde à aproximação de ordem zero em SCFA. Para $x_s = 0.01$ os resultados obtidos em ambas as aproximações coincidem, indicando que esse valor corresponde a uma região de densidades bastante altas. Entretanto, para densida

des menores, os valores RPA para a função de correlação são inferiores àqueles obtidos com SCFA. Para $x_s > 11$, a função de correlação obtida em RPA é negativa, para pequenas separações de partículas. Entretanto, a aproximação SCFA apresenta valores sempre positivos até $x_s = 12$, que é o valor limite para o tipo de cálculo desenvolvido. Porém, como estes resultados ainda são bastante positivos, $g(0) \sim 0.2$, é razoável supor que a aproximação SCFA vai manter $g(0)$ positivo para densidades ainda mais baixas. O cálculo das energias dos modos coletivos indica que para $x_s \gtrsim 7$ vai aparecer um mínimo em uma posição $q \neq 0$, o que não acontece em RPA. Para $x_s \gtrsim 7$, a compressibilidade alcança valores negativos, o que parece indicar uma possível instabilidade dos sistemas cuja densidade corresponde a estes valores.

ÍNDICE

APRESENTAÇÃO	I
CAPÍTULO 1 INTRODUÇÃO	1
1.1 Excitações elementares	2
1.1.1 Excitações de quasi-partículas	4
1.1.2 Excitações coletivas	5
1.2 Resposta linear e susceptibilidade	6
1.3 Fator de estrutura e função de correlação dos pares	10
1.4 Regra de soma para a compressibilidade	16
Bibliografia	19
CAPÍTULO 2 MÉTODO AUTOCONSISTENTE NA TEORIA DO GÁS DE ELÉTRONS	20
2.1 Introdução	20
2.2 Método do campo autoconsistente (SCFA)	22
2.2.1 Aproximação semi-clássica	22
2.2.2 Caso quântico	28
2.3 Resultados para três dimensões	33
2.4 Modificações na SCFA	34
Bibliografia	37

CAPÍTULO 3	APLICAÇÃO DE SCFA A UM SISTEMA DE BOSONS	38
3.1	<i>Método autoconsistente</i>	38
3.2	<i>Gás de bosons tipo esfera dura</i>	43
3.2.1	<i>Espectro de energia</i>	46
3.2.2	<i>Fator de estrutura e função de correlação dos pares</i>	46
3.2.3	<i>Velocidade do som</i>	47
3.2.4	<i>Massa efetiva</i>	48
3.2.5	<i>Comparação com ^4He</i>	49
3.3	<i>Gás de bosons: esfera dura e potencial atrativo</i>	51
3.3.1	<i>Fator de estrutura e função de correlação</i>	57
3.3.2	<i>Espectro de energia e velocidade do som</i>	57
3.3.3	<i>Massa efetiva</i>	58
3.3.4	<i>Comparação com ^4He</i>	59
	<i>Bibliografia</i>	61
 CAPÍTULO 4	 APLICAÇÃO DE SCFA A UM SISTEMA DE FERMIONS	 63
4.1	<i>Método autoconsistente</i>	63
4.2	<i>Gás de Fermi tridimensional</i>	67
4.3	<i>Gás de Fermi unidimensional</i>	70
4.4	<i>Resultados</i>	74
4.4.1	<i>Cálculo do parâmetro A</i>	75
4.4.2	<i>Espectros de energia</i>	76
4.4.3	<i>Velocidade do som</i>	79
4.4.4	<i>Fator de estrutura e função de correlação</i>	80
4.5	<i>Comparação com outros sistemas unidimensionais</i>	80
	<i>Bibliografia</i>	83

CAPÍTULO 5	GÁS DE ELÉTRONS UNIDIMENSIONAL	84
5.1	Método autoconsistente	85
5.2	Limite para grandes comprimentos de onda	90
5.2.1	Relação de dispersão de plasmon	90
5.2.2	Compressibilidade	91
5.3	Resultados	92
5.3.1	Fator de estrutura e função de correlação dos pares	93
5.3.2	Espectro de energia e compressibilidade	94
	Bibliografia	96

APÊNDICE A	CÁLCULO DA SUSCEPTIBILIDADE DE UM SISTEMA DE PARTÍCULAS LIVRES	
A.1	Sistema de fêrmions	97
A.1.1	Gás de fêrmions em uma dimensão	100
A.1.2	Gás de fêrmions tridimensional	101
A.2	Sistema de bosons	103

FIGURAS		105
---------	--	-----

CAPÍTULO I

Introdução

O objetivo da teoria de muitos corpos é estudar as propriedades de sistemas macroscópicos, baseando-se no conhecimento das forças entre as partículas, isto é, estudando a maneira pela qual a interação entre as partículas em um sistema denso altera seu comportamento. Uma descrição precisa e completa destes sistemas exige a inclusão do potencial entre as partículas, na equação de Schrödinger. Em princípio, o conjunto de funções de onda de um sistema de muitos corpos contém toda a informação necessária; entretanto, a solução exata e direta da equação de Schrödinger, correspondente ao problema, nesse caso, é, em geral, impraticável. É necessário então desenvolver-se hipóteses simplificatórias, com o objetivo de poder resolver o problema. O tipo de aproximação utilizada depende do processo específico a ser estudado e das propriedades nas quais estamos interessados. Assim é criado um modelo que será adequado para um certo tipo de interação e para um conjunto de densidades do sistema. Então é importante termos conhecimento do trabalho experimental que vem sendo desenvolvido no sistema que nos interessa, e de seus resultados, que terão papel importante no desenvolvimento das hipóteses nas quais baseamos o modelo.

Em estado sólido sabemos quais são as partículas envolvidas e, com boa aproximação, quais as forças que agem entre elas. A dificuldade é que temos cerca de 10^{23} partículas por cm^3 e, portanto, precisamos resolver um problema de muitos corpos. A procura e a utilização de modelos aproximados para estudar sistemas reais de um ponto de vista determinado, tão precisamente

quanto possível, é um desafio e uma atração da física do estado sólido.

O trabalho por nós desenvolvido constitui-se na aplicação de uma técnica de aproximação ao estudo de sistemas compostos por bosons e fermions, à temperatura de 0^0K . Vamos então estudar líquidos quânticos, isto é, sistemas homogêneos compostos por partículas que interagem fortemente entre si, em temperaturas suficientemente baixas, de modo que os efeitos quânticos representem papel importante. Os sistemas de ^3He e ^4He líquidos são os melhores exemplos reais de sistemas quânticos, como mostram os trabalhos experimentais a baixas temperaturas. Os aspectos do comportamento dos eletrons de condução em metais que não são grandemente afetados pela natureza periódica do potencial iônico, também podem ser estudados considerando-se o gás de eletrons como um líquido quântico.

1.1 - EXCITAÇÕES ELEMENTARES

O objetivo de um trabalho teórico dedicado ao estudo de propriedades de um sistema em geral, não é apenas tentar estimar o estado fundamental do sistema, mas também calcular as energias dos estados excitados que estão ligados com o estado fundamental. Os trabalhos experimentais estão associados à resposta do sistema a um estímulo externo. Tais experiências em geral modificam o estado do sistema para um estado de maior energia. Então, como grande parte das propriedades do sistema surge dessa mudança de estado de energia, vamos nos interessar principalmente por esses estados excitados. O processo de levar o sistema a um estado de energia mais alta será estudado como um processo onde se supõe que alguma coisa é criada quando nada havia an-

tes - cria-se uma *excitação elementar* no sistema.

Para podermos considerar o sistema como um conjunto de excitações elementares que interagem fracamente entre si, elas devem ter uma energia bem definida. Isto acontece⁽¹⁾ quando a excitação pode ser considerada como tendo vida longa. Porém, o sistema que estamos considerando é composto por partículas fortemente interagentes, e então precisamos examinar se é razoável imaginar que as excitações elementares no sistema tenham longa vida. Seu decaimento pode ocorrer por espalhamento com outras excitações elementares ou com partículas do estado fundamental. O primeiro tipo de decaimento é praticamente desprezível em sistemas a baixas temperaturas, quando temos um número relativamente pequeno de excitações elementares. A segunda possibilidade de decaimento apresenta também baixa probabilidade porque, para os sistemas de interesse, existem limitações no espaço de fase disponível para o decaimento de uma excitação de baixo momentum ou grande comprimento de onda. Então, para que as excitações elementares tenham um tempo de vida longo, é necessário considerarmos sistemas a baixas temperaturas e limitarmos o estudo a fenômenos que envolvem frequências suficientemente baixas e comprimentos de onda comparativamente grandes. Quando isso não acontece podemos ainda descrever um certo fenômeno físico em termos das excitações envolvidas, mas se torna essencial levar em conta o fato de que as excitações possuem um tempo de vida finito.

As excitações elementares de relativamente baixa energia, em um sistema de muitas partículas, podem ser divididas em duas categorias principais:⁽²⁾ *excitações de quasi-partícula*, que são excitações de partícula única modificadas, e *excitações coletivas*, que surgem das correlações entre o movimento

das partículas, devido à interação entre elas.

1.1.1 - Excitações de quasi-partículas

Para entender o conceito de quasi-partícula^(a), vamos examinar a seguinte situação: supondo um gás de partículas livres (sem interação), podemos aumentar a energia de uma das partículas sem afetar em nada as demais. Se o sistema estava originalmente no seu estado fundamental, este processo pode ser descrito como criando uma excitação elementar. Se agora aumentarmos a energia de outra partícula, as energias das excitações se somariam para originar a energia do sistema duplamente excitado acima do seu estado fundamental. Estamos assim criando excitações de partícula livre. Se supomos que as partículas do sistema considerado interagem entre si, esperamos que estas excitações de partícula vão decair, já que agora a partícula excitada sofre espalhamento com as partículas não excitadas e sua energia e momentum seriam gradualmente perdidos. Entretanto, se as partículas obedecem ao princípio de exclusão de Pauli, e, se a energia das excitações for pequena, haverá muito poucos estados vazios para os quais a partícula possa ser espalhada. Espera-se então que a excitação tenha um tempo de vida suficientemente longo para que a descrição em termos de partículas seja adequada. As energias das excitações diferem daquelas de partículas livres, devido à existência de interações. Ao mover-se, a partícula excitada perturba as partículas próximas, afastando umas e arrastando outras. Então, a quasi-partícula pode ser pensada como uma partícula acompanhada por uma "nuvem" formada pela distorção na sua vizinhança, ocasionada pela existência de interação entre as partículas. Isto é, a partícula se apresenta como que "vestida" por uma nuvem de auto-

energia.

1.1.2 - Excitações coletivas

As excitações coletivas relevantes neste trabalho, ou modos coletivos, são semelhantes a ondas de som, por corresponderem a oscilações da densidade das partículas, isto é, ao movimento coerente do sistema como um todo. Entretanto, diferem de ondas de som quanto ao mecanismo responsável pelas oscilações. Em uma onda de som as colisões entre as partículas agem como uma força restauradora para trazer a densidade de volta ao seu valor médio. Nos modos de excitação coletiva, o campo de força médio criado por um grande número de outras partículas age como força restauradora. As colisões entre as partículas tendem a modificar esse campo médio, e, conseqüentemente, atenuar as excitações. Para que estes modos coletivos possam existir como excitações elementares bem definidas do sistema de muitos corpos, eles devem possuir um tempo de vida suficientemente longo, antes de decaírem em pares de quasi-partículas. Esse decaimento é em geral energeticamente possível, mas pode ter pequena probabilidade devido a efeitos de coerência entre os elementos de matriz importantes. Exemplos de excitações coletivas em sistemas de muitas partículas são os fonons, plasmons, excitons, polarons, magnons, rotons, polaritons.

Em um sistema de muitos corpos um aspecto importante é a correlação entre as posições das partículas, devido às interações mútuas. Estas correlações dão origem a importantes efeitos de coerência. Por exemplo, quando o modo de excitação coletiva existe e pode ser considerado como uma excitação ele

mentar, em geral ele é o modo de excitação dominante do sistema, embora seja apenas um único modo coletivo, comparado com o contínuo de excitações de quasi-partículas. Isto acontece porque um grande número de partículas toma parte no modo coletivo, e as correlações responsáveis pelo modo coletivo originam também fatores de coerência cujo efeito é reduzir drasticamente a probabilidade de excitar pares de quasi-partículas.

1.2 - RESPOSTA LINEAR E SUSCEPTIBILIDADE ⁽⁴⁾

Qualquer experimento efetuado em um sistema físico relaciona a excitação do sistema com um estímulo externo, através da medida da resposta ao estímulo. Se a interação entre a excitação externa e o sistema é suficientemente fraca, a resposta do sistema pode ser considerada linear e é determinada completamente pelas propriedades que o sistema apresenta quando isolado. Consequentemente, experimentos de interação fraca oferecem o método ideal para estudar o comportamento de um sistema de muitas partículas.

Seja H_0 a hamiltoniana que descreve um sistema isolado. Se introduzirmos uma perturbação que vamos representar por $\lambda\phi$, a hamiltoniana do sistema passa a ser escrita como $H_0 + \lambda\phi$. O termo linear em λ , da diferença entre os valores médios de um observável, calculados com e sem a perturbação externa, é a *resposta linear* ao campo perturbador, do observável considerado.

Vamos examinar o efeito de uma perturbação externa $\phi(\vec{r}, t)$ aplicada a um sistema quântico. Esta perturbação pode ser, por exemplo, um campo de pressões ou um potencial eletromagnético, no caso de um sistema de partículas carregadas eletricamente. A existência dessa perturbação fará com que apareça uma flutuação $\rho(\vec{r}, t)$ na densidade do sistema:

$$\rho(\vec{n}, t) = \sum_{\vec{q}} \int d\omega \rho(\vec{q}, \omega) e^{i(\vec{q} \cdot \vec{n} - \omega t)} \quad (1.1)$$

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

$$\chi(\vec{q}, \omega) = \frac{\langle \rho(\vec{q}, \omega) \rangle}{\phi(\vec{q}, \omega)} \quad (1.2)$$

onde $\phi(\vec{q}, \omega)$ é a transformada de Fourier da perturbação externa e a média é feita sobre todos os estados do sistema. $\chi(\vec{q}, \omega)$ é então a susceptibilidade generalizada do sistema, que representa sua resposta a uma perturbação externa.

A hamiltoniana do sistema quântico composto por N partículas pode ser escrita da maneira usual

$$H_0 = \sum_i \frac{p_i^2}{2m} + \frac{1}{2} \sum_{\vec{q}} \varphi(\vec{q}) [\rho_{\vec{q}} \rho_{-\vec{q}} - N] \quad (1.3)$$

onde $\varphi(\vec{q})$ representa a interação entre as partículas e $\rho_{\vec{q}}$ é o operador densidade, $\rho_{\vec{q}} = \sum_i \exp(-i\vec{q} \cdot \vec{r}_i)$.

Vamos supor que a perturbação seja introduzida no sistema de maneira adiabática, e que ela possa ser considerada como uma perturbação fraca. Supomos que a interação é ligada em $t = -\infty$, e cresce lentamente até seu valor total em $t = 0$. A hamiltoniana do sistema fica então:

$$H = H_0 + H_1 \quad (1.4)$$

onde H_1 é a hamiltoniana da perturbação

$$H_1 = \lim_{\eta \rightarrow 0} \sum_{\vec{q}} \left[\rho_{\vec{q}}^{\dagger} \phi(\vec{q}, \omega) e^{-i\omega t} e^{\eta t} + \text{c.c.} \right] . \quad (1.5)$$

A introdução do infinitésimo η garante a condição adiabática.

A resposta $\chi(\vec{q}, \omega)$ à perturbação será calculada na aproximação de resposta linear, supondo que o sistema está inicialmente no seu estado fundamental. A equação de Schrödinger dependente do tempo é:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(t) = (H_0 + H_1) \Psi(t) , \quad (1.6)$$

onde $\psi(t)$ é a autofunção do sistema total.

Sejam ψ_n e E_n respectivamente os autoestados e autovalores de H_0 . Podemos então expandir $\psi(t)$ em termos das ψ_n , que são funções de onda de sistema de muitos corpos e não sabemos calcular exatamente,

$$\Psi(t) = \sum_n a_n(t) \psi_n e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} , \quad (1.7)$$

onde $a_n(t)$ são os coeficientes da expansão que, como o sistema está inicialmente no estado fundamental, devem obedecer às condições de contorno

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

Os coeficientes da expansão podem ser calculados usando teoria de perturbação e as Eqs. (1.3) a (1.7). Conservando apenas os termos lineares na perturbação, temos:

$$a_n(t) = \frac{\phi(\vec{q}, \omega) (\rho_{\vec{q}}^+)_{n0} e^{-i(\omega - \omega_{n0} + i\eta)t}}{\hbar (\omega - \omega_{n0} + i\eta)} - \frac{\phi^*(\vec{q}, \omega) (\rho_{\vec{q}}^-)_{n0} e^{i(\omega + \omega_{n0} - i\eta)t}}{\hbar (\omega + \omega_{n0} - i\eta)},$$

onde $(\rho_{\vec{q}}^\pm)_{n0}$ são os elementos de matriz exatos entre as autofunções de H_0 e ω_{n0} são as correspondentes frequências de excitação $\hbar\omega_{n0} = E_n - E_0$.

O valor esperado de $\rho_{\vec{q}}^+$ nos autoestados da hamiltoniana completa, conservando apenas termos lineares nos coeficientes $a_n(t)$, pode ser escrito como:

$$\langle \rho_{\vec{q}}^+(t) \rangle = \sum_n \left[(\rho_{\vec{q}}^+)_{n0} a_n(t) e^{-i\omega_{n0}t} + (\rho_{\vec{q}}^-)_{n0} a_n^+(t) e^{i\omega_{n0}t} \right]. \quad (1.9)$$

Este resultado pode ser simplificado consideravelmente se usarmos o fato que se $(\rho_{\vec{q}}^+)_{n0} \neq 0$, então $(\rho_{\vec{q}}^\pm)_{n0} = 0$; isto é, o mesmo par de estados não pode ser acoplado simultaneamente por $\rho_{\vec{q}}^+$ e $\rho_{\vec{q}}^\pm$. Substituindo os valores de coeficientes $a_n(t)$ na Eq.(1.9), ficamos com

$$\begin{aligned} \langle \rho_{\vec{q}}^+(t) \rangle &= \frac{1}{\hbar} \phi(\vec{q}, \omega) e^{-i(\omega + i\eta)t} \\ &\times \sum_n \left[\frac{|(\rho_{\vec{q}}^+)_{n0}|^2}{\omega - \omega_{n0} + i\eta} - \frac{|(\rho_{\vec{q}}^-)_{n0}|^2}{\omega + \omega_{n0} + i\eta} \right]. \end{aligned} \quad (1.10)$$

Supondo que o sistema é invariante frente à reflexão temporal e usando

$$\langle \rho_{\vec{q}}^+(t) \rangle = \langle \rho_{\vec{q}}^-(t) \rangle e^{-i\omega t},$$

chega-se à expressão para a susceptibilidade generalizada do sistema:

$$\chi(\vec{q}, \omega) = \frac{1}{\hbar} \sum_n |(\rho_{\vec{q}}^+)_{n0}|^2 \left\{ \frac{1}{\omega - \omega_{n0} + i\eta} - \frac{1}{\omega + \omega_{n0} + i\eta} \right\}. \quad (1.11)$$

Como $\eta \rightarrow 0$, podemos escrever:

$$\text{Re } \chi(\vec{q}, \omega) = \frac{1}{\hbar} \mathcal{P} \sum_n |(\rho_{\vec{q}}^+)_{n0}|^2 \left(\frac{2\omega_{n0}}{\omega^2 - \omega_{n0}^2} \right) \quad (1.12a)$$

e

$$\text{Im } \chi(\vec{q}, \omega) = -\frac{\pi}{\hbar} \sum_n |(\rho_{\vec{q}}^+)_{n0}|^2 [\delta(\omega - \omega_{n0}) - \delta(\omega + \omega_{n0})], \quad (1.12b)$$

onde o símbolo $\mathcal{P}$ indica que devemos tomar a parte principal da expressão. No apêndice A é obtida em detalhe a expressão para a susceptibilidade de sistemas quânticos sem interação.

1.3 - FATOR DE ESTRUTURA E FUNÇÃO DE CORRELAÇÃO DOS PARES

Um exemplo típico de experimento para estudar propriedades de líquidos quânticos neutros é o espalhamento inelástico de um feixe de partículas (neutrons) pelo líquido. Vamos supor que o potencial de interação entre o sistema e a excitação externa depende apenas da posição relativa das partículas do sistema e do feixe incidente:

$$H_{int} = \sum_i \phi(\vec{r}_i - \vec{r}) \quad (1.13)$$

Escrevendo em termos dos componentes de Fourier, temos

$$H_{int} = \sum_i \sum_{\vec{q}} \phi_{\vec{q}} e^{i\vec{q} \cdot (\vec{\pi}_i - \vec{R})} = \sum_{\vec{q}} \phi_{\vec{q}} \rho_{\vec{q}}^{\dagger} e^{-i\vec{q} \cdot \vec{R}}, \quad (1.14)$$

onde $\phi_{\vec{q}}$ e $\rho_{\vec{q}}$ são respectivamente as transformadas de Fourier da excitação externa e da densidade de partículas $\rho(\vec{r}) = \sum_i \delta(\vec{r} - \vec{\pi}_i)$.

Usando teoria de perturbação, podemos calcular a probabilidade $P(\vec{q}, \omega)$ por unidade de tempo de que a partícula transfira momentum $\hbar\vec{q}$ e energia $\hbar\omega$ ao sistema⁽⁵⁾. O resultado é

$$P(\vec{q}, \omega) = 2\pi |\phi_{\vec{q}}|^2 \bar{S}(\vec{q}, \omega),$$

onde definimos

$$\bar{S}(\vec{q}, \omega) = \frac{1}{\hbar} \sum_n \left| (\rho_{\vec{q}}^{\dagger})_{n0} \right|^2 \delta(\omega - \omega_{n0}). \quad (1.15)$$

O fator de estrutura dinâmico $\bar{S}(\vec{q}, \omega)$ engloba todas as propriedades do sistema de muitas partículas que são relevantes ao espalhamento do feixe de neutrons, e é a máxima informação que se pode obter sobre o comportamento do sistema em tal experimento. Como para $T = 0^\circ\text{K}$ as frequências ω_{n0} são todas positivas, $\bar{S}(\vec{q}, \omega) = 0$ para $\omega < 0$ e $\bar{S}(\vec{q}, \omega)$ é sempre real.

Podemos relacionar o fator de estrutura dinâmico com a parte imaginária da susceptibilidade generalizada do sistema para $\vec{q} \neq 0$, usando a Eq. (1.12b)

$$\text{Im } \chi(\vec{q}, \omega) = -\pi [\bar{S}(\vec{q}, \omega) - \bar{S}(\vec{q}, -\omega)], \quad (1.16)$$

e a susceptibilidade completa pode ser obtida de $\bar{S}(\vec{q}, \omega)$, usando

$$\chi(\vec{q}, \omega) = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \bar{S}(\vec{q}, \omega') \left\{ \frac{1}{\omega - \omega' + i\eta} - \frac{1}{\omega + \omega' + i\eta} \right\}. \quad (1.17)$$

Supondo que não se possa analisar a energia das partículas (neutrons) emergentes, o que se mede é a seção de choque diferencial em função de ângulo θ de espalhamento. Se supomos ainda que o momentum e a energia transferidos sejam essencialmente independentes, podemos obter para a probabilidade correspondente

$$P(\theta) = \alpha_n |\phi_{\vec{q}}|^2 N \bar{S}(\vec{q}),$$

onde α_n depende das partículas do feixe incidente e o fator de estrutura estático é definido por:

$$\bar{S}(\vec{q}) = \frac{\hbar}{N} \int_0^{\infty} d\omega \bar{S}(\vec{q}, \omega). \quad (1.18)$$

A relação entre o fator de estrutura $\bar{S}(\vec{q})$ e a susceptibilidade $\chi(\vec{q}, \omega)$, quando $\vec{q} \neq 0$, é

$$\bar{S}(\vec{q}) = -\frac{\hbar}{\pi N} \int_0^{\infty} d\omega \operatorname{Im} \chi(\vec{q}, \omega). \quad (1.19)$$

Por outro lado, usando as Eqs.(1.15) e (1.18) vamos obter, para o fator de estrutura $\bar{S}(\vec{q})$

$$\bar{S}(\vec{q}) = \frac{1}{N} \sum_n \left| (\rho_{\vec{q}}^+)_{n0} \right|^2 = \frac{1}{N} \langle 0 | \rho_{\vec{q}} \rho_{\vec{q}}^+ | 0 \rangle. \quad (1.20)$$

Podemos então separar na expressão do fator de estrutura a contribuição de transferência de momentum nula. Como $\rho_0 = N$, vamos ficar com

$$\bar{S}(\vec{q}) = \frac{1}{N} \left\{ \langle 0 | \rho_{\vec{q}} \rho_{\vec{q}}^+ | 0 \rangle \right\}_{\vec{q} \neq 0} + N \delta_{\vec{q}0}. \quad (1.21)$$

Nesta definição para o fator de estrutura, que é a utilizada por Pines⁽⁶⁾, temos $\bar{S}(0) = N$. Podemos então definir um "novo" fator de estrutura

$$S(\vec{q}) = \bar{S}(\vec{q}) - N \delta_{\vec{q}0} = \frac{1}{N} \langle 0 | \rho_{\vec{q}} \rho_{\vec{q}}^+ | 0 \rangle - N \delta_{\vec{q}0} \quad (1.22)$$

que é nulo para $\vec{q} = 0$.

Com essa nova definição, e o correspondente $S(\vec{q}, \omega)$, as relações entre a susceptibilidade generalizada e o fator de estrutura valem para todo $\vec{q}$. Neste trabalho, vamos usar a definição (1.22).

O fator de estrutura permite também obter-se informação detalhada com relação a correlações espaciais em um sistema de muitas partículas. Vamos considerar a evolução temporal de uma flutuação de densidade $\rho_{\vec{q}}^+$. Se H é a hamiltoniana total do sistema, temos, na representação de Heisenberg⁽⁷⁾:

$$\rho_{\vec{q}}^+(t) | 0 \rangle = e^{\frac{i}{\hbar} H t} \rho_{\vec{q}}^+ e^{-\frac{i}{\hbar} H t} | 0 \rangle.$$

A correlação dinâmica entre uma flutuação de densidade em $t = 0$ e outra no tempo t é expressa pela função de correlação da densidade,

$$p(\vec{r}, t) = \sum_{\vec{q}} p(\vec{q}, t) e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}},$$

com

$$p(\vec{q}, t) = \frac{1}{N} \langle 0 | \rho_{\vec{q}}(t) \rho_{\vec{q}}^{\dagger}(0) | 0 \rangle. \quad (1.23)$$

Usando a Eq.(1.20) e introduzindo o conjunto completo de autoestados de H , obtém-se

$$\begin{aligned} p(\vec{q}, t) &= \frac{1}{N} \sum_n \langle 0 | e^{\frac{i}{\hbar} H t} \rho_{\vec{q}} e^{-\frac{i}{\hbar} H t} | n \rangle \langle n | \rho_{\vec{q}}^{\dagger} | 0 \rangle = \\ &= \frac{1}{N} \sum_n \left| (\rho_{\vec{q}}^{\dagger})_{n0} \right|^2 e^{-i\omega_{n0} t}, \end{aligned} \quad (1.24)$$

e assim

$$p(\vec{r}, t) = \frac{1}{N} \sum_n \sum_{\vec{q}} \left| (\rho_{\vec{q}}^{\dagger})_{n0} \right|^2 e^{i(\vec{q} \cdot \vec{r} - \omega_{n0} t)} \quad (1.25)$$

A função de correlação estática da densidade pode ser escrita como

$$p(\vec{\pi}) = p(\vec{\pi}, 0) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} \langle 0 | \rho_{\vec{q}} \rho_{\vec{q}}^+ | 0 \rangle e^{i\vec{q} \cdot \vec{\pi}}$$

ou

$$p(\vec{\pi}) = \sum_{\vec{q}} S(\vec{q}) e^{i\vec{q} \cdot \vec{\pi}} + N, \quad (1.26)$$

onde usamos a Eq.(1.22).

Por outro lado, a função de correlação estática da densidade está relacionada com a função de correlação dos pares $g(\vec{r})$. Supondo um sistema de partículas pontuais

$$\begin{aligned} p(\vec{\pi}) &= \frac{1}{N} \int \langle 0 | \rho(\vec{\pi} + \vec{\pi}') \rho(\vec{\pi}') | 0 \rangle d\vec{\pi}' = \\ &= \frac{1}{N} \left\langle 0 \left| \sum_{i,j} \delta(\vec{\pi} + \vec{\pi}' - \vec{\pi}_i) \delta(\vec{\pi}' - \vec{\pi}_j) \right| 0 \right\rangle d\vec{\pi}' \end{aligned} \quad (1.27)$$

Para um sistema com invariança translacional, como as coordenadas das partículas i e j comutam, já que são observadas simultaneamente, temos

$$\begin{aligned} p(\vec{\pi}) &= \frac{1}{N} \left\langle 0 \left| \sum_{i,j} \delta(\vec{\pi} + \vec{\pi}_j - \vec{\pi}_i) \right| 0 \right\rangle = \\ &= \delta(\vec{\pi}) + (N-1) g(\vec{\pi}), \end{aligned} \quad (1.28)$$

onde a função de correlação dos pares é expressa por

$$g(\vec{\pi}) = \frac{1}{N(N-1)} \langle 0 | \sum_{i \neq j} \delta(\vec{\pi} + \vec{\pi}_j - \vec{\pi}_i) | 0 \rangle . \quad (1.29)$$

Na Eq.(1.28), a primeira parcela do lado direito representa as correlações de cada partícula com si mesma, enquanto que a segunda parcela representa as correlações entre pares de partículas. Então, a função $g(\vec{r})$ expressa a probabilidade de que se uma partícula é observada em uma certa posição $\vec{r}_0$, outra partícula será encontrada em $\vec{r}_0 + \vec{r}$. Usando as Eqs.(1.26) e (1.28), podemos mostrar que, para um sistema onde o número de partículas é muito grande, o fator de estrutura e a função de correlação dos pares $g(\vec{r})$ estão relacionados através da integral de Fourier, isto é

$$\frac{1}{N} [S(\vec{q}) - 1] = \text{T. F.} [g(\vec{\pi}) - 1] . \quad (1.30)$$

1.4 - REGRA DE SOMA PARA A COMPRESSIBILIDADE

No limite de grandes comprimentos de onda, a susceptibilidade estática $\chi(\vec{q}, 0)$ representa a resposta da densidade ρ do sistema a um campo de força estático, que varia lentamente no espaço. Então, deve estar relacionada com a compressibilidade K do sistema. A relação entre elas é facilmente estabelecida ^(8,9), considerando a descrição macroscópica da resposta do sistema ao potencial escalar $\phi(\vec{r})$. A força sentida por uma partícula devido ao potencial estático é:

$$\vec{F}(\vec{\pi}) = -i \vec{q} \phi(\vec{q}) e^{i\vec{q} \cdot \vec{\pi}} + c.c. \quad (1.31)$$

Se supomos que essa força longitudinal varia lentamente no espaço, podemos definir a força média por unidade de volume do sistema como $\rho \vec{F}(\vec{r}) \approx N \vec{F}(\vec{r})$, considerando apenas termos lineares no potencial. O efeito deste campo de forças é deformar o sistema, criando uma flutuação de densidade $\delta\rho(\vec{r})$, que, por sua vez, origina uma distribuição adicional de pressões

$$\delta P(\vec{\pi}) = \frac{1}{N\kappa} \delta\rho(\vec{\pi}), \quad (1.32)$$

onde κ é a compressibilidade macroscópica.

A distribuição $\delta P(\vec{r})$ deve ser tal que a força externa seja contrabalancada pelo termo grad δP . Ou seja, a distribuição de pressões vai contrabalançar o efeito do potencial externo

$$\delta P(\vec{\pi}) = -N \phi(\vec{\pi}) = -N \phi(\vec{q}) e^{i\vec{q} \cdot \vec{\pi}} + c.c. \quad (1.33)$$

e

$$\delta\rho(\vec{\pi}) = -\kappa N^2 \phi(\vec{q}) e^{i\vec{q} \cdot \vec{\pi}} + c.c., \quad (1.34)$$

ou ainda

$$\delta\rho(\vec{q}) = -\kappa N^2 \phi(\vec{q}). \quad (1.35)$$

Porém, $\delta\rho(\vec{q})$ é a flutuação de densidade induzida pelo potencial externo $\phi(\vec{q})$, para $\vec{q} \rightarrow 0$. Então, lembrando a definição de susceptibilidade generalizada, Eq.(1.2), podemos escrever

$$\lim_{\vec{q} \rightarrow 0} \chi(\vec{q}, 0) = -K N^2 = - \frac{N}{m s^2} \quad (1.36)$$

onde usamos a relação usual entre a compressibilidade e a velocidade do som ⁽¹⁰⁾.

BIBLIOGRAFIA

CAPÍTULO 1

1. D. Pines "Elementary excitations in solids" (W.A. Benjamin, Inc., New York, 1964) capítulo 1.
2. D. Pines "The many-body problem" (W.A. Benjamin, Inc., New York, 1962) capítulo 1.
3. P.L. Taylor "A quantum approach to the solid state" (Prentice-Hall, Englewood Cliffs, NJ, 1970) capítulo 1.
4. P. Nozières & D. Pines Il Nuovo Cimento (X)9, 470 (1958) Referência (3), pág. 123.
5. D. Pines & P. Nozières "The theory of quantum liquids" (W.A. Benjamin, Inc., New York, 1966) pág. 85.
6. Veja, por exemplo, refs. (1), (2) e (5).
7. Veja referência (1), pág. 130
8. D. Pines em "Lectures on the many-body problem", vol. 2, E.P.Caianello, Ed. (Academic Press, New York, 1964) p. 15.
9. E. Feenberg "Theory of quantum fluids" (Academic Press, New York, 1969)
10. Veja, por exemplo, C. Kittel "Quantum theory of solids" (J. Wiley, New York, 1963).

CAPÍTULO 2

Método autoconsistente na teoria do gás de elétrons

2.1 - INTRODUÇÃO

Correlações no gás de elétrons podem ser expressas em termos da cons tante dielétrica. A constante dielétrica $\epsilon(\vec{q}, \omega)$, dependente da frequência e vetor de onda, descreve a resposta de um sistema a um campo elétrico aplicado e é uma importante grandeza no estudo de muitas propriedades físicas do sistema. O gás de elétrons é estudado em um fundo positivo uniforme neutralizante. As propriedades metálicas que dependem fortemente das interações ele tron-elétron também podem ser estudadas por meio da constante dielétrica. Pa ra estender esse modelo a metais, é necessário supor que a constante dielétri ca não é alterada pela natureza discreta dos ions.

A constante dielétrica tem sido calculada em várias aproximações. A aproximação RPA (Random Phase Approximation)⁽¹⁾ consiste em desprezar em uma soma de exponenciais com diferentes fases, os termos de fases aleatórias, quando comparados com N , o número total de partículas. Resulta então no trata tamento da parte de longo alcance do potencial Coulombiano como um campo ex terno polarizante.

O método RPA dá boa descrição para os modos de excitação de plasmons, e fenômenos de blindagem a grande comprimento de onda. Porém sua validade é limitada à região de altas densidades ($r_s \ll 1$, onde $r_s = r_0/a_0$, r_0 é a distância média entre as partículas e a_0 é o raio de Bohr). Na região de densidades metálicas, $1.5 < r_s < 6$, RPA prevê uma função distribuição dos pares que é

bastante negativa para pequenas separações entre as partículas. Isto acontece porque nesta aproximação não são distinguidos os efeitos de correlação de spins paralelos e antiparalelos. A aproximação RPA não inclui efeitos de intercâmbio que influem na parte de spin paralelo, isto é, para grandes transferências de momentum, este termo vai cancelar metade da interação direta: fisicamente se espera que eletrons de spin paralelos não sintam a parte de curto alcance da interação, já que o princípio de Pauli faz com que eles se mantenham afastados. Apenas os eletrons de spin antiparalelos interagem pela parte de grande transferência de momentum da interação coulombiana. Assim, a aproximação RPA falha quando $\vec{q} > \vec{q}_F$, vetor de onda de Fermi, em densidades metálicas. No limite de altas densidades, as contribuições importantes para a energia de correlação surgem das baixas transferências de momentum e esta aproximação apresenta resultados satisfatórios.

Hubbard⁽²⁾ e Nozières & Pines⁽³⁾ propuseram modificação na RPA, baseada essencialmente na mesma idéia física: para grandes transferências de momentum (baixas densidades) a principal contribuição à energia de correlação surge das interações de eletrons de spin antiparalelos.

Hubbard levou em conta os termos de intercâmbio através de uma soma quase infinita de gráficos na energia de correlação, enquanto que Nozières & Pines calcularam a energia de correlação por meio de uma interpolação entre as contribuições de grandes e pequenas transferências de momentum. A correção de Hubbard originou uma nova expressão para a constante dielétrica, que melhorou bastante a energia de correlação do gás de eletrons em densidades metálicas. Entretanto, a função distribuição dos pares $g(\vec{r})$ permanece bastante negativa para pequenos valores de $\vec{r}$, em toda essa região de densidades.

Esse fato indica falha, nesta aproximação, em levar em conta as interações de curto alcance: a constante dielétrica de Hubbard inclui correções de campo local apenas para levar em conta o "exchange hole" na aproximação de Hartree-Fock. Entretanto, na região onde os valores da densidade são tais que $1.5 < r_s < 6$, as interações elétron-elétron tem papel importante, e então de vem também ser consideradas as correções de campo local associadas com o "Coulomb hole".

2.2 - MÉTODO DO CAMPO AUTOCONSISTENTE

Singwi et al^(4,5) desenvolveram um método autoconsistente (SCFA) para o cálculo da constante dielétrica e do fator de estrutura para metais alcalinos ($1 < r_s < 6$), que leva em conta as correlações de curto alcance devidas ao potencial de Coulomb e "exchange". Este método permite expressar a função dielétrica como um funcional da transformada de Fourier da função correlação dos pares no gás de eletrons.

2.2.1 - Aproximação Semi-clássica

No caso semi-clássico, a hipótese básica consiste em substituir a função distribuição clássica para duas partículas, $f^{(2)}(\vec{r}, \vec{p}; \vec{r}', \vec{p}' | t)$ por um produto de funções distribuições de uma partícula, introduzindo-se nesse desacoplamento a função de correlação estática de equilíbrio dos pares, $g^0(\vec{r} - \vec{r}')$, que expressa a probabilidade combinada de termos de uma partícula em $\vec{r}$ e outra em $\vec{r}'$.

Escreve-se então

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

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

Com a hipótese feita por Singwi et al, que leva em conta as correlações de curto alcance, pode-se obter um conjunto fechado de equações de forma autoconsistente.

A transformada de Fourier da função correlação estática de equilíbrio dos pares, $g^0(\vec{r})$, é relacionada com o fator de estrutura $S(\vec{q})$ da seguinte forma:

$$\text{T.F.} [g^0(\vec{r}) - 1] = \frac{1}{\rho} [S(\vec{q}) - 1], \quad (2.2)$$

ou

$$g(\vec{r}) = 1 + \frac{1}{\rho} \int \frac{d\vec{q}}{(2\pi)^3} e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} [S(\vec{q}) - 1], \quad (2.3)$$

onde ρ é a densidade numérica de partículas.

Por sua vez o fator de estrutura está relacionado com a susceptibilidade do fluido $\chi(\vec{q}, \omega)$ através da expressão exata⁽⁶⁾:

$$S(\vec{q}) = -\frac{\hbar}{\pi\rho} \int_0^\infty d\omega \text{Im} \chi(\vec{q}, \omega). \quad (2.4)$$

Para o gás de elétrons a constante dielétrica $\epsilon(\vec{q}, \omega)$ é dada por

$$\frac{1}{\epsilon(\vec{q}, \omega)} = 1 + \phi(\vec{q}) \chi(\vec{q}, \omega), \quad (2.5)$$

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

Então

$$S(\vec{q}) = - \frac{\hbar}{\pi \rho \phi(\vec{q})} \int_0^\infty d\omega \operatorname{Im} [\epsilon(\vec{q}, \omega)]^{-1}. \quad (2.6)$$

Precisamos agora apenas de uma expressão para $\chi(\vec{q}, \omega)$ (ou para a constante dielétrica) em função do fator de estrutura $S(\vec{q})$, para completarmos o esquema de equações autoconsistentes.

A hamiltoniana clássica de N elétrons interagindo entre si, e sob a ação de um campo externo é:

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^N \mathcal{H}_i$$

com

$$\mathcal{H}_i = \frac{p_i^2}{2m} + \phi_{\text{ext}}(\vec{r}_i, t) + \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} \phi(\vec{r}_i - \vec{r}_j),$$

onde $\phi_{\text{ext}}(\vec{r}_i, t)$ é a energia potencial da partícula i na presença do campo externo, e $\phi(\vec{r}_i - \vec{r}_j)$ é a interação dos pares de partículas. No caso de gás de elétrons, $\phi(\vec{r}_i - \vec{r}_j)$ é a interação coulombiana. Entretanto, o desenvolvimento pode ser feito para uma interação genérica.

A equação de Liouville não relativística, para o caso de N partículas, pode ser escrita como

$$\frac{\partial f^{(N)}}{\partial t} + \left[\sum_{i=1}^N Q(\vec{\pi}_i, \vec{p}_i) \right] f^{(N)} = 0, \quad (2.7)$$

onde o operador $Q(\vec{r}_i, \vec{p}_i)$ é expresso por

$$Q(\vec{\pi}_i, \vec{p}_i) = \vec{v}_i \cdot \nabla_{\vec{\pi}_i} - \nabla_{\vec{\pi}_i} \phi_{\text{ext}}(\vec{\pi}_i, t) \cdot \nabla_{\vec{p}_i} + \frac{1}{2} \sum_{i+j} \nabla_{\vec{\pi}_i} \phi(\vec{\pi}_i - \vec{\pi}_j) \cdot \nabla_{\vec{p}_i},$$

e

$$f^{(N)} \equiv f^{(N)}(\vec{\pi}_1, \vec{p}_1; \vec{\pi}_2, \vec{p}_2; \dots \vec{\pi}_N, \vec{p}_N | t)$$

é a função distribuição combinada de N partículas.

Integrando a equação de Liouville nas coordenadas e momenta de $N-1$ partículas, chega-se à equação de movimento para a função distribuição clássica de uma partícula, na presença de um campo externo:

$$\begin{aligned} \frac{\partial f^{(1)}}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla_{\vec{\pi}} f^{(1)} - \nabla_{\vec{\pi}} \phi_{\text{ext}}(\vec{\pi}, t) \cdot \nabla_{\vec{p}} f^{(1)} - \\ - \int d\vec{\pi}' d\vec{p}' \nabla_{\vec{\pi}} \phi(\vec{\pi} - \vec{\pi}') \cdot \nabla_{\vec{p}} f^{(2)} = 0 \end{aligned} \quad (2.8)$$

onde $f^{(1)} \equiv f^{(1)}(\vec{r}, \vec{p} | t)$ e $f^{(2)} \equiv f^{(2)}(\vec{r}, \vec{p}; \vec{r}', \vec{p}' | t)$.

Assim, a equação de movimento da função distribuição de uma partícula envolve a função distribuição de duas partículas. Por sua vez, a equação de

movimento para $f^{(2)}(\vec{r}, \vec{p}; \vec{r}', \vec{p}' | t)$ depende de $f^{(3)}(\vec{r}, \vec{p}; \vec{r}', \vec{p}' | t)$, e assim sucessivamente. Para resolver a Eq.(2.8) é preciso então quebrar essa sequência infinita de equações. Singwi et al propõem que isto seja feito através do desacoplamento expresso na Eq.(2.1), levando em conta, assim, de maneira aproximada, as correlações de curto alcance entre as partículas, através da função de correlação $g(\vec{r}-\vec{r}')$.

A função distribuição $f^{(1)}(\vec{r}, \vec{p} | t)$ pode ser escrita como a soma de um termo de equilíbrio $f_0(\vec{p})$ e um termo de correção $f_1(\vec{r}, \vec{p} | t)$, que exprime o afastamento do equilíbrio devido ao potencial externo (fraco):

$$f^{(1)}(\vec{r}, \vec{p} | t) = f_0(\vec{p}) + f_1(\vec{r}, \vec{p} | t). \quad (2.9)$$

Usando as Eqs.(2.1) e (2.9), e conservando apenas os termos de primeira ordem no potencial externo, a Eq.(2.8) pode ser escrita como

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla_{\vec{r}} \right] f_1(\vec{r}, \vec{p} | t) - \nabla_{\vec{r}} \phi_{ef}(\vec{r}, t) \cdot \nabla_{\vec{p}} f_0(\vec{p}) = 0, \quad (2.10)$$

com

$$\phi_{ef}(\vec{r}, t) \equiv \phi_{ext}(\vec{r}, t) + \int d\vec{r}' n(\vec{r}', t) \Psi(\vec{r} - \vec{r}'), \quad (2.11)$$

onde

$$\nabla_{\vec{r}} \Psi(\vec{r} - \vec{r}') = g(\vec{r} - \vec{r}') \nabla_{\vec{r}} \phi(\vec{r} - \vec{r}'), \quad (2.12)$$

e $n(\vec{r}, t) = \int d\vec{p} f_1(\vec{r}, \vec{p} | t)$ = densidade de partículas em $(\vec{r}, t)$.

O campo efetivo que a partícula sente pode ser escrito como:

$$\vec{E}_{ef}(\vec{r}, t) = -\nabla_{\vec{r}} \phi_{ef}(\vec{r}, t) = -\nabla_{\vec{r}} \phi_{ext}(\vec{r}, t) - \int d\vec{r}' \nabla_{\vec{r}} \phi(\vec{r}-\vec{r}') n(\vec{r}', t) - \int d\vec{r}' [g(\vec{r}-\vec{r}') - 1] \nabla_{\vec{r}} \phi(\vec{r}-\vec{r}') n(\vec{r}', t) . \quad (2.13)$$

Desta forma aparecem separados no campo efetivo os termos RPA e a correção devida à SCFA. Em RPA o campo efetivo é dado pelo campo macroscópico usual, ou seja, o campo externo e o termo de interação entre as partículas, correspondendo às duas primeiras parcelas da soma, sem levar em conta as correlações. Em SCFA, além do campo externo, ao calcular o campo efetivo levamos em conta parte da correlação entre as partículas, o que significa considerar a última parcela, além dos termos RPA.

Como a equação de movimento obtida, Eq.(2.10) é linear, sua solução pode ser encontrada considerando-se apenas uma componente de Fourier para o potencial externo:

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

Calculando da maneira usual a densidade de carga induzida⁽⁷⁾, chega-se à expressão para a susceptibilidade:

$$\chi(\vec{q}, \omega^*) = \frac{\chi^0(\vec{q}, \omega^*)}{1 - \psi(\vec{q}) \chi^0(\vec{q}, \omega^*)} , \quad (2.14)$$

onde $\chi^0(\vec{q}, \omega^*)$ é a susceptibilidade do mesmo gás sem interação e $\omega^* = \omega + i\eta$, a frequência complexa.

Para um gás de elétrons, onde o potencial de interação é coulombiano, isto é, $\phi(\vec{q}) = 4\pi e^2/q^2$, podemos obter para o potencial efetivo $\psi(\vec{q})$, a partir da Eq.(2.12)

$$\Psi(\vec{q}) = \phi(\vec{q}) [1 - G(\vec{q})], \quad (2.15)$$

com

$$G(\vec{q}) = -\frac{1}{P} \int \frac{d\vec{q}'}{(2\pi)^3} \frac{\vec{q} \cdot \vec{q}'}{(q')^2} [S(\vec{q} - \vec{q}') - 1]. \quad (2.16)$$

A expressão para a constante dielétrica fica então

$$\epsilon(\vec{q}, \omega) = 1 - \phi(\vec{q}) \frac{\chi^o(\vec{q}, \omega^*)}{1 + \phi(\vec{q}) G(\vec{q}) \chi^o(\vec{q}, \omega^*)}. \quad (2.17)$$

Chegamos assim, no caso de um gás de elétrons, a um conjunto fechado composto pelas Eqs.(2.6), (2.16) e (2.17). Estas equações deverão ser resolvidas de maneira autoconsistente, permitindo obter-se o fator de estrutura $S(\vec{q})$ para o sistema considerado. A função correlação dos pares $g(\vec{r})$ será obtida usando-se na Eq.(2.3) o fator de estrutura autoconsistente.

2.2.2 - Caso Quântico

As equações a serem resolvidas no caso quântico são obtidas dos resultados clássicos, fazendo-se a substituição do fator de estrutura e da suscetibilidade do gás sem interação clássicos, por seus análogos quânticos. Esta hipótese é feita da mesma forma autoconsistente, isto é, o sistema respon

de ao potencial blindado através da susceptibilidade de partícula livre. Nesse caso, ao levar em conta as correlações de curto alcance, estamos considerando uma diminuição da densidade eletrônica ao redor de cada partícula, associada à repulsão coulombiana (Coulomb hole) e à repulsão de "exchange" (exchange hole), o que não é levado em conta em RPA. Novamente, se desprezarmos as correções de campo local, obtemos as expressões de RPA, enquanto que, se usarmos a expressão do fator de estrutura de Hartree-Fock para calcular o potencial efetivo de interação, chega-se à constante dielétrica de Hubbard.

A hamiltoniana de um sistema de N partículas de massa m é expressa por

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

que pode ser escrita⁽⁸⁾ como

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m} + \frac{1}{2} \sum_{\vec{q} \neq 0} \phi(\vec{q}) [\rho_{\vec{q}}^\dagger \rho_{\vec{q}} - N], \quad (2.18)$$

onde a matriz densidade $\rho_{\vec{q}}$ é dada por:

$$\rho_{\vec{q}} = \sum_{i=1}^N e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}_i}. \quad (2.19)$$

Na parcela correspondente à energia potencial na Eq.(2.18), o fator N deve ser subtraído porque corresponde ao termo $i = j$ no potencial de interação no espaço real, $\phi(\vec{r}_i - \vec{r}_j)$. A soma não inclui o termo $\vec{q} = 0$, que é cancelado pelo fundo positivo.

A equação de movimento da matriz densidade⁽⁹⁾, expressa no caso geral

por

$$\ddot{\rho}_{\vec{q}} = \frac{1}{(i\hbar)^2} \left[[\rho_{\vec{q}}, H], H \right],$$

que pode ser escrita como

$$\ddot{\rho}_{\vec{q}} = - \sum_{i=1}^N \left(\frac{\vec{q} \cdot \vec{p}_i}{m} + \frac{\hbar q^2}{2m} \right)^2 e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}_i} - \sum_{\vec{q}'} \phi(\vec{q}') \frac{\vec{q} \cdot \vec{q}'}{m} \rho_{\vec{q}-\vec{q}'} \rho_{\vec{q}'} \quad (2.20)$$

onde o primeiro somatório representa a contribuição da energia cinética e o segundo surge das interações entre as partículas.

No segundo somatório, o termo com $\vec{q}' = \vec{q}$ corresponde ao termo de interação que aparece em RPA:

$$- \frac{q^2}{m} \phi(\vec{q}) \rho_0 \rho_{\vec{q}} = -\omega_p^2 \rho_{\vec{q}},$$

onde ω_p é a frequência generalizada de plasma, expressa por $\omega_p^2 = Nq^2\phi(q)/m$. Para um sistema coulombiano, obtém-se para a frequência de plasma a expressão usual $\omega_p^2 = 4\pi Ne^2/m$.

A soma, abrangendo os termos $\vec{q}' \neq \vec{q}$, que não é considerada em RPA, corresponde a uma correção pequena, porque apresenta produtos de flutuações de densidade $\rho_{\vec{q}}$, cada uma delas expressa por soma de fases aleatórias, quando $\vec{q}' \neq 0$.

A Eq.(2.20) pode ser escrita como:

$$\ddot{\rho}_{\vec{q}} + \omega_p^2 \rho_{\vec{q}} = - \sum_{i=1}^N \left(\frac{\vec{q} \cdot \vec{p}_i}{m} + \frac{\hbar q^2}{2m} \right)^2 \exp(-i\vec{q} \cdot \vec{r}_i) - \sum_{\vec{q}' \neq \vec{q}} \frac{\vec{q} \cdot \vec{q}'}{m} \phi(\vec{q}') \rho_{\vec{q}-\vec{q}'} \rho_{\vec{q}'} \quad (2.21)$$

Novamente separamos o termo RPA e a correção SCFA, respectivamente o primeiro e o segundo somatórios do lado direito. Se o lado direito da equação for nulo, a matriz densidade ρ_q^+ vai oscilar com a frequência de plasma ω_p .

Usando a expressão (2.19), podemos obter:

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

onde substituímos o último somatório sobre o índice j por sua média estática nas N partículas.

Dessa forma, a equação de movimento para ρ_q^+ fica

$$\ddot{\rho}_{\vec{q}} = - \sum_{i=1}^N \left(\frac{\vec{q} \cdot \vec{p}_i}{m} + \frac{\hbar q^2}{2m} \right)^2 \exp(i\vec{q} \cdot \vec{\pi}_i) - \Psi(\vec{q}) \frac{q^2}{m} N \rho_{\vec{q}}, \quad (2.22)$$

onde

$$\Psi(\vec{q}) = \phi(\vec{q}) + \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}'} \phi(\vec{q}') \frac{\vec{q} \cdot \vec{q}'}{q^2} [S(\vec{q}-\vec{q}') - 1], \quad (2.23)$$

e $\phi(\vec{q})$ é a transformada de Fourier do potencial de interação entre as partículas.

No caso de potencial de interação Coulombiana, obtêm-se, para o potencial efetivo,

$$\Psi(\vec{q}) = \phi(\vec{q}) [1 - G(\vec{q})], \quad (2.24)$$

com

$$G(\vec{q}) = -\frac{1}{\rho} \sum_{\vec{q}'} \frac{\vec{q} \cdot \vec{q}'}{(\vec{q}')^2} [S(\vec{q} - \vec{q}') - 1] \quad (2.25)$$

A Eq.(2.22) é análoga à equação obtida na aproximação RPA, com $\psi(\vec{q})$ no lugar do potencial de interação $\phi(\vec{q})$. Como no caso clássico, o resultado RPA para o gás de elétrons é obtido fazendo $G(\vec{q}) = 0$.

Então, o mesmo procedimento utilizado em RPA pode ser estendido para obter a expressão SCFA da susceptibilidade $\chi(\vec{q}, \omega^*)$ do gás, ou para a constante dielétrica em gás de elétrons, bastando apenas substituir $\phi(\vec{q})$ por $\psi(\vec{q})$ nos resultados.

Obtém-se assim, para a susceptibilidade, a mesma equação do caso clássico

$$\chi(\vec{q}, \omega^*) = \frac{\chi^0(\vec{q}, \omega^*)}{1 - \chi(\vec{q}) \chi^0(\vec{q}, \omega^*)} \quad (2.14)$$

sendo a susceptibilidade do gás livre dada por sua expressão quântica

$$\chi^0(\vec{q}, \omega^*) = \frac{1}{\hbar} \sum_{\vec{p}, \sigma} \frac{n_{\vec{p}+\vec{q}, \sigma} - n_{\vec{p}, \sigma}}{\omega^* - \omega_{\vec{p} \vec{q}}} \quad (2.26)$$

onde

$$\hbar \omega_{\vec{p} \vec{q}} = \varepsilon_{\vec{p}+\vec{q}} - \varepsilon_{\vec{p}} = \frac{\hbar^2}{2m} (\vec{p} + \vec{q})^2 - \frac{\hbar^2 \vec{p}^2}{2m} \quad .$$

Para a constante dielétrica $\varepsilon(\vec{q}, \omega^*)$, vamos obter também uma expressão

análoga ao caso clássico

$$\epsilon(\vec{q}, \omega^*) = 1 - \frac{\phi(\vec{q}) \chi^0(\vec{q}, \omega^*)}{1 + [\phi(\vec{q}) - \psi(\vec{q})] \chi^0(\vec{q}, \omega^*)}.$$

O esquema autoconsistente para a determinação das propriedades de um gás de elétrons com interação fica então fechado com as Eqs.(2.6), (2.16) e (2.17).

2.3 - RESULTADOS

Singwi e seus colaboradores desenvolveram o método SCFA para aplicá-lo no gás de elétrons tridimensional. Em seu desenvolvimento, a expressão do potencial efetivo de interação $\psi(\vec{q})$ envolve explicitamente a transformada de Fourier do potencial Coulombiano (Eq.(2.24)). Entretanto, a mesma aproximação pode ser estendida para um gás com outro tipo de interação, usando-se a Eq.(2.12) para obter uma expressão para o potencial efetivo $\psi(\vec{q})$, sem supor uma expressão explícita para $\phi(\vec{q})$. Este tratamento pode ser utilizado mesmo em alguns casos nos quais o potencial de interação entre as partículas não possui transformada de Fourier, ou apresenta singularidade, como é o caso do potencial de um sistema composto de partículas impenetráveis. Esta aplicação se constitui em parte de nosso trabalho a ser desenvolvido nos capítulos seguintes.

Os resultados da aplicação do método SCFA, como descrito anteriormente em um gás de elétrons tridimensional, na região de densidades metálicas, foram bastante satisfatórios⁽⁵⁾, especialmente com relação aos valores da função correlação $g(\vec{r})$ para pequenas separações das partículas. As teorias RPA

e Hubbard apresentam, nessa região, valores bastante negativos para $g(r)$, para pequenos valores de $\vec{r}$. A teoria SCFA apresenta $g(\vec{r})$ com valores sempre positivos ou levemente negativos, quando os valores negativos são (em módulo) cerca de 40 a 80 vezes menores do que os valores preditos por Hubbard e RPA, respectivamente.

Entretanto, para a compressibilidade do gás, a teoria SCFA, como descrita, apresenta valores negativos em densidades tais que $r_s > 5$, o que também acontece com RPA e Hubbard. Este fato poderia sugerir que o gás de elétrons sofreria uma transição para o estado sólido, como discutido por Wigner⁽¹⁰⁾. Isto, entretanto, não acontece, como foi mostrado por Van Horn⁽¹¹⁾ utilizando resultados obtidos, por Carr et al⁽¹²⁾. A não existência de metais alcalinos com $r_s > 5$ nos parece indicar que estes sistemas seriam instáveis, justificando assim os valores negativos para a compressibilidade.

2.4 - MODIFICAÇÕES NA SCFA

R. Lobo & P. Antoniewicz⁽¹³⁾ ponderaram que, no limite de pequenos comprimentos de onda ($q \rightarrow \infty$), considerar a função correlação estática dos pares em equilíbrio $g^0(\vec{r})$ é uma boa aproximação para a função de correlação efetiva o que não acontece no limite $q \rightarrow 0$. Para obter uma expressão adequada no limite de grandes comprimentos de onda, consideraram que existe uma flutuação de densidade no sistema, e então sugeriram para a função correlação efetiva a expansão até primeira ordem na flutuação de densidade

$$g(|\vec{r}-\vec{r}'|, n) = g^0(|\vec{r}-\vec{r}'|, n) + \frac{\partial g^0(|\vec{r}-\vec{r}'|, n)}{\partial n} [f^{(1)}(n) - f_0^{(1)}(n)], \quad (2.27)$$

onde $g^0(r, n)$ é a função correlação em equilíbrio, e $f^{(1)}(r)$ a função distribuição de uma partícula.

A derivada da função correlação em relação à densidade pode ser relacionada com a sua derivada em relação ao argumento r , na presença de modos coletivos, usando-se o fato de que a densidade depende do inverso do cubo da distância entre as partículas, obtendo-se

$$\frac{\partial}{\partial n} g^0(r, n) = - \frac{r}{3n} \frac{\partial}{\partial r} g^0(r, n) . \quad (2.28)$$

Usando as expressões (2.27) e (2.28) na expressão de $\psi(\vec{q})$ obtida da Eq.(2.12), e integrando por partes, o potencial efetivo autoconsistente pode ser escrito como:

$$\Psi(\vec{q}) = - \frac{4\pi}{3q^3} \int_0^\infty dr \left[\sin(qr) - qr \cos(qr) \right] g^0(r) \left[\frac{d\phi}{dr} - \frac{1}{2} r \frac{d^2\phi}{dr^2} \right] ,$$

que é a expressão adequada, no caso clássico, para o limite de grandes comprimentos de onda. No limite de grande vetor de onda, a expressão obtida por Singwi et al, utilizando para a função correlação a expressão de equilíbrio, é correta⁽¹⁴⁾.

Em um trabalho mais recente, Vashishta & Singwi⁽¹⁵⁾ sugerem uma modificação semelhante na SCFA, com o objetivo de forçá-la a obedecer quase exatamente a regra de soma da compressibilidade. Tal modificação consiste essencialmente em considerar a variação da função correlação dos pares em um campo externo fraco, através de sua expansão linear em termos do afastamento de equilíbrio. Considerando para $g(\vec{r}, \vec{r}', t)$ uma forma simétrica, tem-se

$$g(\vec{n}, \vec{n}', t) = g^0(|\vec{n} - \vec{n}'|) + \frac{1}{2} [\delta n(\vec{n}, t) + \delta n(\vec{n}', t)] \frac{\partial}{\partial n} g^0(|\vec{n} - \vec{n}'|),$$

onde δn é a resposta estática de densidade, sendo $n + \delta n(\vec{r}, t)$ a densidade local em $\vec{r}$.

Esta escolha para $g(\vec{r}, \vec{r}', t)$ faz com que os resultados para a compressibilidade, obtidos a partir da regra de soma e da definição termodinâmica, coincidam.

Entretanto, no caso quântico, a correção de campo local é mais complicada, e introduz-se um parâmetro $\underline{a}$, a ser ajustado a posteriori. Para um gás de elétrons obtém-se

$$G(\vec{q}, a) = \left(1 + a n \frac{\partial}{\partial n}\right) \left\{ -\frac{1}{n} \int \frac{d\vec{q}'}{(2\pi)^3} \frac{\vec{q} \cdot \vec{q}'}{q'^2} [S(\vec{q} - \vec{q}') - 1] \right\},$$

e o campo autoconsistente fica

$$\Psi(\vec{q}, a) = \phi(\vec{q}) [1 - G(\vec{q}, a)],$$

dependendo de um parâmetro ajustável, $\underline{a}$, que, como foi dito, será obtido ajustando-se o cálculo da compressibilidade.

BIBLIOGRAFIA

CAPÍTULO 2

1. D.Bohm & D.Pines. Phys.Rev. 92, 609 (1953). Phys.Rev. 92, 626(1953).
P.Nozieres & D.Pines. Nuovo Cimento 9, 470 (1958).
2. J.Hubbard. Proc.Roy.Soc. A 243, 336 (1957).
3. P.Nozières & D.Pines Phys.Rev. 111, 442 (1958).
4. K.S.Singwi, M.P.Tosi, A.Sjölander Nuovo Cimento 54, B160 (1968).
5. K.S.Singwi, M.P.Tosi, R.H.Land & A.Sjölander Phys.Rev. 176, 589 (1968).
6. D.Pines & P.Nozières "The theory of quantum liquids" (W.A.Benjamin Inc., New York, 1966) Cap. 2.
7. D.Pines "Elementary excitations in solids" (W.A.Benjamin Inc., New York, 1964) Cap. 3.
8. R.Brout & P.Carruthers "Lectures on the many-electron problem" (Interscience Publ., New York, 1963).
9. Por favor, veja Ref.7., pag. 98.
10. E.P.Wigner Trans.Far.Soc. 34, 678 (1938).
11. H.M.Van Horn Phys.Rev. 157, 342 (1967).
12. W.J.Carr, Jr., R.A.Coldwell-Horsfall & A.E.Fein Phys.Rev. 124, 747 (1961).
13. R.Lobo & P.Antoniewicz Solid State Comm. 8, 461 (1970).
14. K.S.Singwi, K.Sköld, M.P.Tosi Phys.Rev.Lett. 21, 881 (1968).
15. P.Vashishta & K.S.Singwi Phys.Rev. B6, 875 (1972). e Phys.Rev. B6, 4883 (1972).

CAPÍTULO 3

Aplicação de SCFA a um sistema de bosons

O interesse no estudo das propriedades de um gás de bosons é em parte devido ao fato de que ^4He , a baixas temperaturas, pode ser estudado como um líquido quântico formado por um sistema de partículas interagentes que obedecem à estatística de Bose. O potencial de interação entre as partículas deve corresponder ao potencial interatômico em Hélio. Têm sido propostas várias expressões para representar a interação He-He, como é mostrado na Figura 1. Uma característica importante do potencial de interação é a grande repulsão para pequenas separações de partículas, seguida de uma pequena atração em uma região correspondendo a maiores separações.

Como uma primeira aproximação vamos considerar ^4He como um sistema de bosons com potencial repulsivo tipo esfera dura^(1,2). Após, procurando uma melhor aproximação, vamos introduzir uma parte atrativa no potencial. Em ambos os casos, procuraremos obter o fator de estrutura $S(\vec{q})$, a função correlação dos pares $g(\vec{r})$, o espectro de excitações elementares $E(\vec{q})$ e outras propriedades do gás, como velocidade do som, massa efetiva, etc.

3.1 - MÉTODO AUTOCONSISTENTE (SCFA)

O estudo de propriedades de ^4He será feito utilizando-se uma adaptação do método SCFA desenvolvido para gás de eletrons, descrito no capítulo anterior.

Para um sistema de partículas eletricamente neutras, é conveniente estudar-se a susceptibilidade do gás ou sua resposta ao campo externo aplicado.

Assim, o conjunto de equações autoconsistentes a serem resolvidas deve envolver o fator de estrutura $S(\vec{q})$, a função correlação $g(\vec{r})$, a susceptibilidade do gás considerado, $\chi(\vec{q}, \omega^*)$ e o potencial efetivo $\psi(\vec{q})$ que, em líquidos quânticos, supõe-se ser independente da frequência.

O fator de estrutura pode ser obtido a partir da susceptibilidade total do gás

$$S(\vec{q}) = -\frac{\hbar}{\pi \rho} \int_0^\infty d\omega \operatorname{Im} \chi(\vec{q}, \omega^*) , \quad (3.1)$$

e a função de correlação estática, de equilíbrio, dos pares é obtida da transformada de Fourier de $S(\vec{q})$:

$$g^0(\vec{r}) = 1 + \frac{1}{\rho} \int d\vec{q} e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} [S(\vec{q}) - 1] , \quad \text{ou}$$

$$g^0(r) = 1 + \frac{2}{3\pi} \frac{n_0^3}{n} \int_0^\infty dq q \sin(qr) [S(q) - 1] , \quad (3.2)$$

onde ρ é a densidade numérica das partículas do gás e r_0 , o raio da esfera equivalente ao volume médio ocupado por cada partícula, $\rho = 3/(4\pi r_0^3)$. Por outro lado, na aproximação SCFA, a susceptibilidade do gás com interação é expressa como

$$\chi(\vec{q}, \omega^*) = \frac{\chi^0(\vec{q}, \omega^*)}{1 - \psi(\vec{q}) \chi^0(\vec{q}, \omega^*)} , \quad (3.3)$$

onde $\omega^* = \omega + i\eta$ é a frequência complexa, $\psi(\vec{q})$ é a interação efetiva autocon-

sistente, a ser determinada, e $\chi^0(\vec{q}, \omega^*)$ é a susceptibilidade do mesmo gás sem interação.

Para um gás de Bose, em temperatura $T=0^\circ\text{K}$, obtém-se para a susceptibilidade do gás livre (vide apêndice A)

$$\chi^0(\vec{q}, \omega^*) = \frac{2\rho \epsilon(\vec{q})}{(\hbar\omega^*)^2 - [\epsilon(\vec{q})]^2}, \quad (3.4)$$

onde $\epsilon(\vec{q}) = \hbar^2 q^2 / 2m$ é a energia de partícula única.

A susceptibilidade do gás com interação, usando as Eqs. (3.3) e (3.4), pode ser escrita como:

$$\chi(\vec{q}, \omega^*) = \frac{2\rho \epsilon(\vec{q})}{(\hbar\omega^*)^2 - [\epsilon(\vec{q})]^2 - 2\rho \epsilon(\vec{q}) \psi(\vec{q})}. \quad (3.5)$$

Desta expressão vemos que a susceptibilidade completa apresenta polos que nos vão permitir obter o espectro de energia da excitação.

A frequência $\omega_0(\vec{q})$, correspondente ao polo da susceptibilidade completa, em função do potencial efetivo $\psi(\vec{q})$, é obtida da solução da equação:

$$[\hbar\omega_0(\vec{q})]^2 - [\epsilon(\vec{q})]^2 - 2\rho \epsilon(\vec{q}) \psi(\vec{q}) = 0 \quad (3.6)$$

e então a energia da excitação é dada por:

$$E(\vec{q}) = \hbar\omega_0(\vec{q}) = \epsilon(\vec{q}) \sqrt{1 + \frac{2\rho}{\epsilon(\vec{q})} \psi(\vec{q})}. \quad (3.7)$$

A susceptibilidade do gás de bosons com interação fica:

$$\chi(\vec{q}, \omega^*) = \frac{2\rho \epsilon(\vec{q})}{(\hbar\omega^*)^2 - [\hbar\omega_0(\vec{q})]^2} \quad (3.8)$$

Assim, a parte imaginária de $\chi(\vec{q}, \omega^*)$ pode ser escrita como

$$\text{Im } \chi(\vec{q}, \omega^*) = \frac{-4\rho \epsilon(\vec{q}) \hbar^2 \omega \eta}{4(\hbar\omega)^2 (\hbar\eta)^2 + \left\{ (\hbar\omega)^2 - (\hbar\eta)^2 - [E(\vec{q})]^2 \right\}^2} \quad (3.9)$$

Usando as Eqs. (3.1) e (3.9), quando $\eta \rightarrow 0$, chega-se à expressão de Feynman para a energia de excitação de um sistema de bosons⁽¹⁾:

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

o que permite escrever, para o fator de estrutura:

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

Conhecendo-se a expressão para a interação efetiva $\psi(\vec{q})$, as Eqs. (3.7) e (3.11) permitem obter o espectro de excitações e o fator de estrutura para o sistema de bosons considerado.

O cálculo do potencial efetivo $\psi(\vec{q})$, é efetuado na aproximação SCFA, onde se obteve a relação

$$\nabla_{\vec{n}} \psi(\vec{n}-\vec{n}') = g(\vec{n}-\vec{n}') \nabla_{\vec{n}} \phi(\vec{n}-\vec{n}') ,$$

sendo $\phi(\vec{r}-\vec{r}')$ o potencial de interação entre os pares de partículas, e

$g(\vec{r}-\vec{r}')$ a função correlação obtida a partir do fator de estrutura, pela e-

quação (3.2).

Obtêm-se então para o potencial efetivo de interação $\psi(\vec{q})$ a expressão:

$$\Psi(\vec{q}) = -\frac{4\pi}{q^3} \int_0^\infty dr \frac{d\phi(r)}{dr} g(r) [\sin(qr) - qr \cos(qr)] . \quad (3.12)$$

Para a função de correlação efetiva podemos usar a expressão proposta independentemente por R.Lobo & P.Antoniewicz⁽⁴⁾ e Vashishta & Singwi⁽⁵⁾, que fazem uma expansão em torno da função de correlação estática de equilíbrio $g^0(|\vec{r}-\vec{r}'|)$ e consideram apenas os termos lineares na perturbação:

$$g(\vec{r}-\vec{r}') = g^0(|\vec{r}-\vec{r}'|) + a \rho \frac{\partial g^0(|\vec{r}-\vec{r}'|)}{\partial \rho} , \quad (3.13)$$

onde ρ é a densidade numérica, e a um parâmetro a ser ajustado a posteriori, de forma a obedecer à regra de soma da compressibilidade.

A interação efetiva torna-se:

$$\Psi(\vec{q}) = -\frac{4\pi}{q^3} \int_0^\infty dr \frac{d\phi}{dr} [\sin(qr) - qr \cos(qr)] \left[g^0(r) + a \rho \frac{\partial g^0(r)}{\partial \rho} \right] . \quad (3.14)$$

Então, o esquema autoconsistente é constituído das Eqs. (3.2), (3.11) e (3.12). É interessante ressaltar que, na obtenção das equações autoconsistentes, a única hipótese feita sobre o potencial entre as partículas, $\phi(\vec{r})$, é que ele deve ser derivável.

3.2 - GÁS DE BOSONS TIPO ESFERA DURA

Vamos supor que o gás de bosons seja constituído de esferas impenetráveis de diâmetro r_c , com potencial de interação dado por:

$$\phi(r) = \lim_{\lambda \rightarrow \infty} \lambda \theta(r_c - r), \quad (3.15)$$

onde $\theta(r)$ é a função de Heaviside. O raio da esfera dura será deixado como parâmetro a ser ajustado a posteriori. Então, a derivada do potencial é dada pela função delta:

$$\frac{d\phi}{dr} = \lim_{\lambda \rightarrow \infty} (-\lambda) \delta(r - r_c). \quad (3.16)$$

Com essa expressão para o potencial de interação, o potencial efetivo $\psi(\vec{q})$, expresso na Eq. (3.12) pode ser escrito como:

$$\Psi(\vec{q}) = \frac{4\pi r_c^2}{q} j_1(qr_c) \left[\lim_{\lambda \rightarrow \infty} \lambda g(r_c) \right], \quad (3.17)$$

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

Como o potencial $\psi(\vec{q})$ deve permanecer finito para todos os valores do vetor de onda $\vec{q}$, a função de correlação $g(\vec{r})$ deve se anular no ponto r_c , de forma a manter finito o produto $\lambda g(r_c)$. Este resultado é consistente com o fato de que estamos considerando esferas totalmente rígidas, quando a menor distância possível entre duas partículas corresponde ao seu diâmetro.

Como o produto $\lambda g(r_c)$ deve ser finito, podemos então introduzir uma constante A, função da massa e das dimensões das partículas, tal que

$$\lambda g(r_c) \equiv \frac{A \hbar^2}{12 m r_c^2} \quad (3.18)$$

O fator $\hbar^2/12mr_c^2$ foi introduzido por conveniência futura. A constante A será determinada da condição $g(r_c) = 0$. O potencial efetivo fica então

$$\Psi(\vec{q}) = \frac{\pi \hbar^2}{3 m q} A j_1(q r_c) \quad (3.19)$$

Para o fator de estrutura, usando as Eqs. (3.11) e (3.19) e fazendo $x = q r_c$, ficamos com

$$S(x) = \left\{ 1 + A \left(\frac{r_c}{r_0} \right)^3 \frac{j_1(x)}{x^3} \right\}^{-1/2} \quad (3.20)$$

Para calcular o produto $A(r_c/r_0)^3 \equiv B$, fazemos $g(r_c) = 0$ na Eq.(3.2):

$$g(r_c) = 1 + \frac{2}{3\pi} \left(\frac{r_0}{r_c} \right)^3 \int_0^\infty dx x \sin x [S(x,B) - 1] = 0 \quad (3.21)$$

ou

$$1 + \frac{2}{3\pi} \left(\frac{r_0}{r_c} \right)^3 T(B) = 0 \quad , \quad (3.22)$$

com

$$T(B) = \int_0^{\infty} dx \, x \, \sin x \left[S(x, B) - 1 \right]. \quad (3.23)$$

Vemos assim que, para cada valor da razão $(r_o/r_c)^3$, vamos obter um valor para A através da Eq.(3.22). A Fig. 2 mostra a dependência de $T(B)$ com o produto $B = A(r_c/r_o)^3$, obtida da Eq.(3.23). Então, para cada valor de $(r_o/r_c)^3$, obtêm-se um valor de A que satisfaz à Eq.(3.22).

O parâmetro A (ou B) pode ser determinado independentemente, comparando o máximo de $S(x)$, dado pela Eq.(3.20), com o valor experimental do fator de estrutura do gás considerado ($T \approx 0^\circ K$). Obtém-se uma equação transcendental para x_o , posição do máximo de $S(x)$, que não vai depender da constante A ou da razão $(r_o/r_c)^3$, isto é, independe do gás específico considerado,

$$\tan x_o = \frac{5 x_o}{5 - x_o^2}, \quad (3.24)$$

cuja raiz não nula vale $x_o = 5.4486$.

A altura do máximo, dada pelo valor $S(x_o)$ na Eq.(3.20), vai depender apenas de x_o e do produto $B = A(r_c/r_o)^3$, que pode então ser calculado a partir da comparação com resultados experimentais:

$$S(x_o) = \left\{ 1 + A \left(\frac{n_c}{n_o} \right)^3 \frac{j_1(x_o)}{x_o^3} \right\}^{-1/2} = \left\{ 1 - 9.162 \times 10^{-4} \times A \left(\frac{n_c}{n_o} \right)^3 \right\}^{-1/2}. \quad (3.25)$$

Podemos então determinar tanto a constante A como a razão $(r_o/r_c)^3$,

conhecendo o valor experimental do máximo de $S(x)$, para o gás específico considerado, e usando a Eq.(3.22).

3.2.1 - Espectro de energia

O espectro de energia das excitações elementares em um gás de Bose com interação, é obtido da Eq.(3.7) para um dado valor de $B = A(r_c/r_o)^3$. Espectros de energia, para diversos valores de B , são mostrados na Fig. 3. Para valores de $B > 400$, que correspondem a $(r_o/r_c)^3 < \pi/2$, de acordo com a Eq.(3.22), aparece um comportamento de roton. À medida em que o valor de B cresce, o que corresponde a menores valores de $(r_o/r_c)^3$, o mínimo de energia diminui, acentuando o roton. O valor crítico de $(r_o/r_c)^3$ pode ser obtido considerando-se estrutura tipo hcp, onde

$$\left(\frac{n_o}{n_c}\right)^3 = \frac{3}{\pi 2^{5/2}} \quad >$$

o que nos dá $T(B) \approx -28$ e $B \approx 1090$.

3.2.2 - Fator de estrutura e função correlação dos pares

O fator de estrutura $S(x)$, para um dado valor de $B = A(r_c/r_o)^3$ é obtido usando-se a Eq.(3.20). A autoconsistência é garantida pela Eq.(3.21), que nos permite obter pares de valores de A e $(r_o/r_c)^3$ que satisfazem à condição $g(r_c) = 0$.

Por outro lado, a função correlação dos pares $g(r)$, é obtida a partir do fator de estrutura autoconsistente, usando-se a Eq.(3.2). Para que o potencial efetivo se mantenha finito, foi imposta a condição de que a função correlação seja nula quando $r = r_c$. Vamos considerar então para

$g(r)$ o resultado obtido a partir do valor autoconsistente de $S(x)$ apenas na região $r \geq r_c$. Para $r \leq r_c$, a hipótese de partículas impenetráveis faz com que se imponha que $g(r) = 0$ nessa região.

3.2.3 - Velocidade do som

Para um gás de partículas de massa m , com densidade numérica ρ , a regra de soma da compressibilidade pode ser escrita como

$$\lim_{\vec{q} \rightarrow 0} \chi(\vec{q}, 0) = -K \rho^2 = -\frac{\rho}{m s^2}, \quad (3.26)$$

onde K é a compressibilidade do sistema e s a velocidade do som.

Usando a expressão obtida para a susceptibilidade do sistema de bosons, Eq.(3.8), chega-se a

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

o que nos permite escrever para a velocidade do som

$$s = \lim_{q \rightarrow 0} \frac{E(q)}{\hbar q}, \quad (3.27)$$

e para o sistema de bosons com interação tipo esfera dura

$$s = \frac{\hbar}{2 m n_c} \left(\frac{A}{3}\right)^{1/2} \left(\frac{n_c}{n_0}\right)^{3/2}.$$

Supondo-se gás extremamente diluído, $(r_0/r_c)^3 \rightarrow 0$, obtém-se $A = 18$ e

para a velocidade do som

$$S = \frac{\hbar}{m n_c} \sqrt{\frac{3}{2}} \left(\frac{n_c}{n_0} \right)^{3/2},$$

que é o resultado obtido por R.Lobo & P.Antoniewicz⁽¹⁾. Esse resultado difere do resultado exato⁽⁶⁾ por um fator $1/\sqrt{2}$, que pode ser justificado porque, ao considerarmos baixas energias, o diâmetro efetivo é duas vezes maior que o diâmetro da esfera dura.

3.2.4 - Massa efetiva

Para definir m^* , a massa efetiva do roton, faz-se uma comparação entre a expansão da energia em torno do vetor de onda q_0 correspondente ao roton e a energia de uma partícula única com massa m^* :

$$E(q) \equiv E(q_0) + \frac{\hbar^2 (q - q_0)^2}{2 m^*} \cong E(q_0) + \frac{(q - q_0)^2}{2} \left. \frac{d^2 E}{dq^2} \right|_{q=q_0}. \quad (3.29)$$

Então

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2} \left. \frac{d^2 E}{dq^2} \right|_{q=q_0}. \quad (3.30)$$

A expressão de Feynman (3.10) permite escrever $E(q)$ em função do fator de estrutura $S(q)$. Usando esse resultado, e a condição de que q_0 é ponto de mínimo da energia, obtêm-se

$$\left. \frac{d^2 E}{dq^2} \right|_{q=q_0} = \frac{\hbar^2}{m S(q_0)} \left\{ 1 - \frac{q_0^2}{2 S(q_0)} \left. \frac{d^2 S}{dq^2} \right|_{q=q_0} \right\},$$

e, fazendo $x = qr_c$:

$$\frac{m}{m^*} = \frac{1}{S(x_0)} - \frac{x_0^2}{2[S(x_0)]^2} \left. \frac{d^2 S}{dx^2} \right|_{x=x_0} . \quad (3.31)$$

3.2.5 - Comparação com ^4He

Para verificar a concordância dos resultados teóricos obtidos para um sistema de bosons com interação tipo esfera dura, vamos compará-los com os resultados experimentais para o gás de ^4He , a baixas temperaturas^(7,8).

De acordo com a Eq.(3.24), a posição do máximo do fator de estrutura teórico não vai depender dos parâmetros A ou $(r_0/r_c)^3$ e é dada por $x_0 = 5.4486$, que corresponde ao valor experimental $q_0 \sim 2.05 \text{ \AA}^{-1}$ quando $r_c \approx 2.6 \text{ \AA}$. Esse valor é razoável para um modelo de ^4He formado por partículas totalmente impenetráveis.

Por outro lado, a Eq.(3.25) permite obter o valor do produto $A(r_c/r_0)^3$ a partir do valor do máximo da curva experimental de $S(x)$ e de sua posição:

$$B = A \left(\frac{r_c}{r_0} \right)^3 = \frac{x_0^5}{\sin x_0 - x_0 \cos x_0} \left[\frac{1}{[S(x_0)]^2} - 1 \right] .$$

Usando o valor $S^{\text{exp}}(x_0) \approx 1.5$, obtém-se $B \approx 607.5$.

Na Fig. 4 é feita a comparação entre a curva experimental e o resultado teórico para o fator de estrutura calculado com $B = 607.5$. Por outro lado, a Eq.(3.23) permite determinar o valor de $T(B)$ neste caso, e utilizando

a Eq. (3.22), obtemos $(r_o/r_c)^3 = 1.234$, o que vai significar que $A = 749.6$.

A densidade numérica do sistema de bosons descrito corresponde, então, a

$\rho = 1.10 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$, aproximadamente duas vezes mais diluído que o ^4He usual.

Na Fig. 5 é mostrada a função correlação dos pares $g(r)$, obtida a partir do fator de estrutura autoconsistente. Para $r \leq r_c$, supomos que $g(r) = 0$, concordando com a hipótese de impenetrabilidade das partículas.

Na Tabela I estão mostrados os valores para os parâmetros do nosso cálculo, obtidos por comparação com os resultados experimentais de ^4He , a baixas temperaturas.

Tabela I

A	749.6
$(r_o/r_c)^3$	1.234
$B = A(r_c/r_o)^3$	607.5
r_c	2.6 Å
r_o	2.8 Å

O espectro de energia das excitações elementares correspondente a estes parâmetros, e o resultado experimental para ^4He , são mostrados na Fig. 6. Observa-se que a posição do máximo e do mínimo coincidem, embora os valores teóricos sejam maiores que os experimentais. Os valores correspondentes ao primeiro máximo, E_A , e ao primeiro mínimo, E_B , estão assinalados na figura.

Os resultados teóricos correspondentes à velocidade do som, massa efetiva, valores do máximo e do mínimo de energia de um gás de ^4He diluído estão mostrados na Tabela II, comparados com os correspondentes valores experimentais, obtidos para $T = 0.16^\circ\text{K}$.

Tabela II

	Experimental	Teórico
ρ	$2.18 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3} \text{ (9)}$	$1.10 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$
E_A	$13.7^\circ\text{K} \text{ (7)}$	25.9°K
E_B	$8.7^\circ\text{K} \text{ (7)}$	17.8°K
E_A/E_B	1.57	1.45
s	$237 \text{ m/s} \text{ (10)}$	434 m/s
m^*/m	0.16 (7)	0.2

3.3 - GÁS DE BOSONS: ESFERA DURA E POTENCIAL ATRATIVO

Os resultados obtidos no estudo do gás de ^4He como um sistema de esferas duras, nos encorajaram a continuar utilizando o mesmo método, porém procurando um potencial que se aproximasse mais do potencial real entre os átomos de He ⁽¹¹⁾.

Vamos, então, considerar agora o potencial de interação como sendo composto de uma parte tipo esfera-dura, impenetrável, para pequenas separações de partículas, e uma parte atrativa, favorecendo a localização de cada

partícula em uma região pouco maior do que a esfera dura. Desta forma, o potencial considerado vai aproximar-se mais da interação real He-He. O desenvolvimento será análogo ao feito com potencial esfera-dura, descrito na seção 3.2.

Vamos considerar um potencial de interação $\phi(r)$ do tipo

$$\phi(r) = \lim_{\lambda \rightarrow \infty} \lambda \Theta(r_c - r) + v(r) \Theta(r - r_c), \quad (3.32)$$

onde a primeira parcela à direita representa a esfera dura, e $v(r)$ é a parte atrativa do potencial. Por agora não é necessário supor uma forma específica para a parte atrativa, o que será feito ao compararmos com os resultados para ^4He .

A condição de continuidade do potencial está satisfeita para qualquer valor de r_c , devido à forma do potencial tipo esfera dura. Para a derivada do potencial vamos ter:

$$\frac{d\phi}{dr} = [v(r) - \lambda] \delta(r - r_c) + \Theta(r - r_c) \frac{dv}{dr}, \quad (3.33)$$

onde usamos a notação simplificada $\lambda \equiv \lim_{\lambda \rightarrow \infty} \lambda$.

O potencial efetivo $\psi(q)$, de acordo com a Eq.(3.12), fica:

$$\Psi(q) = \frac{4\pi r_c^2}{q} [\lambda g(r_c)] j_1(q r_c) - \frac{4\pi r_c^2}{q} g(r_c) v(r_c) j_1(q r_c) - F(q), \quad (3.34)$$

onde

$$F(q) = \frac{4\pi}{q} \int_{r_c}^{\infty} dr \, g(r) r^2 j_1(qr) \frac{dr}{dr} \quad (3.35)$$

e $j_1(qr)$ é a função de Bessel esférica de primeira ordem, com $\lim_{x \rightarrow \infty} j_1(x) = 0$.

O potencial efetivo $\psi(q)$ deve permanecer finito para todo q . Então, devemos ter o produto $\lambda g(r_c)$ finito, já que a segunda parcela é finita devido às características de $g(r)$ e do potencial atrativo. A presença da função de Bessel esférica e da derivada da parte atrativa do potencial na terceira parcela garante que a integral seja sempre finita. Para que o produto $\lambda g(r_c)$ seja finito, como $\lambda \rightarrow \infty$, é necessário que $g(r_c) = 0$. Novamente vamos usar em $\psi(q)$, a constante finita A , definida pela Eq.(3.18).

Fazendo $x = qr_c$, o potencial efetivo pode ser escrito como:

$$\Psi(x) = P(x) - F(x) \quad , \quad (3.36)$$

onde $P(x)$ é o potencial efetivo devido à parte de esfera dura, expresso por

$$P(x) = \frac{\pi \hbar^2 r_c}{3m} A \frac{j_1(x)}{x} \quad , \quad (3.37)$$

e $F(x)$ é a correção devida à parte atrativa:

$$F(x) = \frac{4\pi r_c^4}{x} \int_1^{\infty} dy \, g(y) y^2 j_1(xy) V(y) \quad , \quad (3.38)$$

com $y = r/r_c$ e $V(y) \equiv \frac{1}{r_c} \frac{dV(y)}{dy}$.

Temos assim separadas, no potencial efetivo, a contribuição de esfera dura, $P(x)$ e aquela devida à parte atrativa, $F(x)$, que depende da função correlação dos pares $g(y)$, para $y > 1$.

O fator de estrutura $S(x)$ é expresso pela Eq.(3.11) que, para o potencial considerado, fica

$$S(x) = \left\{ 1 + A \left(\frac{n_c}{n_0} \right)^3 \frac{j_1(x)}{x^3} - \frac{3m}{\pi \hbar^2 n_c} \left(\frac{n_c}{n_0} \right)^3 \frac{F(x)}{x^2} \right\}^{-1/2}, \quad (3.39)$$

e a função correlação dos pares $g(y)$, para $y > 1$, é obtida a partir do fator de estrutura autoconsistente, através da Eq.(3.2).

Então, as equações que vão formar o conjunto de equações a ser resolvido de maneira autoconsistente, são as Eqs. (3.2), e (3.36)-(3.39), juntamente com a condição $g(r_c) = 0$. É interessante ressaltar que não foi feita hipótese sobre a expressão do potencial atrativo $v(r)$, que vai aparecer na correção $F(q)$ apenas com sua derivada. O diâmetro da esfera dura, r_c e a densidade do gás são deixados como parâmetros a serem ajustados, repetindo-se o cálculo com vários pares de valores.

O cálculo é iniciado supondo-se apenas o potencial tipo esfera dura, isto é, $F(x) = 0$, e calcula-se $\psi_0(x, A)$ e $S_0(x, A)$, obtendo o valor do parâmetro A , que anula $g_0(r_c)$, para um certo par de valores r_0 e r_c . Os valores de A , r_0 e r_c , são usados para calcular $g_0(y)$, para $y \geq 1$, que será utilizado no cálculo da primeira correção $F_0(x)$. Com esse resultado voltamos a calcular o potencial efetivo $\psi_1(x, A)$ e o fator de estrutura, $S_1(x, A)$ correspondentes a essa primeira correção, procurando o novo valor de A que faz com que $g_1(r_c) = 0$. Obtemos então os valores correspondentes a $g_1(y)$, com $y \geq 1$, e

podemos calcular a correção seguinte, $F_2(x)$. Esse processo iterativo é repetido até que se obtenha ao final de dois ciclos sucessivos os mesmos valores para a função correlação $g(y)$, $y \geq 1$, dentro de uma precisão escolhida.

Como neste caso $F(x)$ depende diretamente de r_c , vemos que não basta escolher uma razão $(r_o/r_c)^3$, como fizemos antes. Vamos ter então três parâmetros (A, r_o e r_c) a serem ajustados. Além do critério de autoconsistência, pode-se usar a comparação com resultados experimentais em um certo sistema de bosons como critério para escolha desses parâmetros.

O cálculo autoconsistente pode ser efetuado para qualquer potencial atrativo conveniente ao sistema a ser estudado, já que não é suposta forma específica para $v(r)$. Como é nossa intenção comparar os resultados desta aproximação com um gás de ^4He , vamos escolher para $v(r)$ expressões que descrevam a forma da parte atrativa do potencial real He-He. Dentre as expressões que tem sido propostas, as mais amplamente aceitas são aquelas sugeridas por Slater-Kirkwood⁽¹²⁾ e Lennard-Jones⁽¹³⁾, mostradas na Fig. 1.

A forma proposta por Slater-Kirkwood é a seguinte:

$$v(r) = A_1 e^{-\alpha r/\sigma} - A_2 \left(\frac{\sigma}{r}\right)^6, \quad (3.40)$$

com

$$\alpha = 21.5$$

$$\sigma = 4.64 \times 10^{-8} \text{ cm}$$

$$A_1 = 5.67 \times 10^6 \text{ }^\circ\text{K}$$

$$A_2 = 1.08 \text{ }^\circ\text{K}$$

O potencial de Lennard-Jones, para ^4He é expresso por:

$$v(r) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} \right], \quad (3.41)$$

com $\varepsilon = 10.22^\circ\text{K}$

$\sigma = 2.556 \times 10^{-8} \text{ cm}$

Para encontrar o resultado autoconsistente para o fator de estrutura $S(x)$ e para a função correlação $g(r)$, com $r > r_c$, realizamos o cálculo autoconsistente com cada um dos potenciais descritos correspondendo à parte atrativa $v(r)$, escolhendo vários pares de valores r_0 e r_c . Os resultados finais obtidos para o fator de estrutura não diferiram sensivelmente, quanto à forma, para cada potencial estudado. Entretanto, o potencial tipo Slater-Kirkwood mostrou valores mais adequados para a velocidade do som, comparada com o resultado de ^4He . Por esta razão, parece mais adequado escolher-se para $v(r)$ a Eq.(3.40).

Vamos descrever a seguir, com mais detalhes, os cálculos efetuados considerando, para a parte atrativa, potencial tipo Slater-Kirkwood. Em um conjunto de cálculos usamos para r_0 o valor que corresponde à densidade experimental de ^4He , $r_0 = 2.22 \text{ \AA}$, variando os valores de r_c . Verificou-se que o problema apresenta solução para valores de r_c entre 2.24 e 2.5 $\text{\AA}$. A convergência é alcançada neste caso com cerca de 10 a 15 iterações. Algumas curvas de $S(q)$ obtidas neste cálculo estão mostradas na Fig. 7. Repetimos o cálculo, mantendo a razão $(r_0/r_c)^3$ constante, com valor igual ao obtido no caso de potencial tipo esfera dura, e usando pares de valores adequados para r_0 e r_c , com r_c variando entre 2.0 e 3.0 $\text{\AA}$. Neste caso, o problema apresenta solução para valores de r_c maiores do que 2.3 $\text{\AA}$. A Fig. 8 mostra algumas curvas de $S(q)$ obtidas neste cálculo.

3.3.1 - Fator de estrutura e função correlação

Os resultados para o fator de estrutura $S(q)$ e para a função correlação dos pares $g(r)$, para $r \geq r_c$, são obtidos do próprio cálculo autoconsistente, Eqs. (3.39) e (3.2). Neste caso, a condição imposta é que $g(r_c) = 0$, porém os valores de $g(r)$ para $r \geq r_c$ vão entrar no cálculo, na obtenção da correção $F(q)$.

3.3.2 - Espectro de energia e velocidade do som

O espectro de energia das excitações elementares em um sistema de bósons, considerando interação tipo esfera dura com parte atrativa, é obtido a partir do resultado autoconsistente para o fator de estrutura, usando-se a relação de Feynman, Eq.(3.10), ou seja:

$$E(x) = \varepsilon(x) \left\{ 1 + \frac{2\rho}{\varepsilon(x)} [P(x) - F(x)] \right\}^{1/2}, \quad (3.42)$$

onde $P(x)$ e $F(x)$ são expressos em (3.37) e (3.38).

Para a velocidade do som, de acordo com a Eq.(3.27), quando $F(x) \neq 0$, chega-se a

$$s = \frac{\hbar}{2m n_c} \left(\frac{n_c}{n_0} \right)^{3/2} \left\{ \frac{A}{3} - \frac{4m n_c^3}{\hbar^2} \Phi \right\}^{1/2}, \quad (3.43)$$

onde $\Phi = \int_1^\infty dy y^3 g(y) V(y)$ depende de $V(y)$, a derivado do potencial atrativo.

3.3.3 - Massa Efetiva

A massa efetiva do roton pode ser obtida em função do fator de estrutura autoconsistente a partir da Eq.(3.31):

$$\frac{m^*}{m} = \frac{2 [S(x_0)]^2}{2 S(x_0) - x_0^2 S''(x_0)} . \quad (3.44)$$

Usando para o fator de estrutura a expressão (3.11) com o potencial efetivo dado pela Eq.(3.36), podemos obter uma relação para x_0 , a posição do máximo de $S(x)$:

$$5 x_0 \Psi(x_0) = \frac{\pi \hbar^2 n_c}{3m} A \sin x_0 - F_1(x_0) , \quad (3.45)$$

com

$$F_1(x_0) = 4\pi n_c^4 \int_1^\infty dy y^2 g(y) V(y) \sin(x_0 y) .$$

Vemos que, nesse caso, a posição do máximo de $S(x)$ vai depender da constante A e de r_c .

Para a segunda derivada de $S(x)$, calculada no ponto x_0 , chega-se à expressão:

$$S''(x_0) = \frac{-3m n_c^2}{2\pi \hbar^2 n_c^3} \left[\frac{S(x_0)}{x_0} \right]^3 \xi(x_0) , \quad (3.46)$$

com

$$\xi(x_0) = -x_0 P(x_0) + \frac{3}{x_0^2} [F_1(x_0) - F_2(x_0)] - \frac{10}{x_0} \Psi(x_0)$$

onde

$$F_2(x_0) = 4\pi r_c^4 x_0 \int_1^\infty dy y^3 g(y) V(y) \cos(x_0 y).$$

Com o valor autoconsistente obtido para a função correlação para $r \geq r_c$, considerando um certo conjunto de valores para A , r_0 e r_c , podemos obter o valor de $S''(x_0)$ e, conseqüentemente, o valor para a massa efetiva do roton. Este cálculo é bastante trabalhoso, já que envolve várias integrais numéricas. Por outro lado, podemos obter o valor para a massa efetiva através do ajuste da expressão (3.29) para o resultado numérico para a energia da excitação $E(q)$, na região próxima do mínimo correspondente ao roton.

3.3.4 - Comparação com ^4He

As várias curvas autoconsistentes obtidas para o fator de estrutura $S(q)$, com cada um dos conjuntos de parâmetros, podem ser comparadas com o resultado experimental para ^4He , a baixas temperaturas. A curva teórica que melhor se ajusta ao resultado do fator de estrutura experimental, corresponde a um potencial atrativo tipo Slater-Kirkwood, com $A = 846.7$, $r_c = 2.58 \text{ \AA}$ e $r_0 = 2.767 \text{ \AA}$, como é mostrado na Fig. 9. Na Fig. 10 temos a função correlação $g(r)$, obtida autoconsistentemente para $r \geq r_c$. Quando $r < r_c$, supomos $g(r) = 0$, de acordo com a hipótese de potencial tipo esfera dura nesta região.

O espectro de energia obtido a partir do fator de estrutura autoconsistente, com $A = 846.7$, $r_c = 2.58 \text{ \AA}$ e $r_0 = 2.767 \text{ \AA}$, é mostrado na Fig. 11, comparado com o resultado experimental para ^4He . Também nesse caso temos para o resultado teórico uma forma semelhante à do resultado experimental, com

as posições de máximo e mínimo coincidentes. Entretanto, o gráfico teórico apresenta valores maiores que o experimental em todo o espectro de energia.

Os resultados para a velocidade do som e massa efetiva do roton, calculados considerando-se parte atrativa para o potencial são sensivelmente melhores que aqueles obtidos apenas com potencial tipo esfera dura, como pode ser verificado na Tabela III.

Tabela III

	Experimental (7)	Teórico $\phi_{HS}(r)=\lambda\theta(r_c-r)$	Teórico $\phi(r)=\phi_{HS}(r)+v(r)$
ρ	$2.18 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$	$1.10 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$	$1.13 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$
E_A	13.7 °K	25.9°K	23.6°K
E_B	8.7 °K	17.8°K	14.8°K
E_A/E_B	1.57	1.45	1.59
S	237 m/s	434 m/s	356 m/s
m^*/m	0.16	0.2	0.14

BIBLIOGRAFIA

CAPITULO 3

1. R.Lobo & P.Antoniewicz Phys.Rev.Lett. 24, 1168 (1970).
2. R.Lobo Phys.Rev. B12, 2640 (1975).
3. R.P.Feynman Phys.Rev. 94, 262 (1954).
K.Huang "Statistical Mechanics" (J.Wiley, New York, 1963) p. 381.
4. R.Lobo & P.Antoniewicz Solid State Comm. 8, 461 (1970).
5. P.Vashishta & K.S.Singwi, Phys.Rev. B6, 875 (1972). e Phys.Rev.B6,
4883 (1972).
6. K.Huang, "Statistical Mechanics" (J.Wiley, New York, 1963) p.409.
7. D.G.Henshaw & A.D.B.Woods Phys.Rev. 121, 1266 (1961)
R.A.Cowley & A.D.B.Woods Phys.Rev. Lett. 21, 787 (1968) e Can. J.Phys.,
49, 177 (1971).
- P.Martel, E.C.Svensson, A.D.B.Woods & V.F.Sears J.Low Temp.Phys. 23,
285 (1976).
- E.K.Achter & L.Meyer Phys.Rev. 188, 291 (1969).
8. A.Miller, D.Pines & P.Nozières Phys.Rev. 127, 1452 (1962).
9. J.Wilks "The properties of liquid and solid helium" (Claredon Press,Oxford,
1967) p.666
10. K.R.Atkins & C.E.Chase Proc.Phys.Soc. (London) A 64, 826 (1951).

11. J.O.Hirschfelder, C.F.Curtiss & R.B.Bird "Molecular theory of gases and liquids" (J.Wiley, New York, 1954) p. 196 e 1068.
12. J.C.Slater & J.G.Kirkwood Phys.Rev. 37, 682 (1931).
13. Por favor, veja Ref. 11, p. 196.

CAPÍTULO 4

Aplicação de SCFA a um sistema de fermions

O método autoconsistente (SCFA) de Singwi et al, desenvolvido originalmente para gás de eletrons, pode ser também estendido para sistemas de fermions em geral, por exemplo, um gás ^3He . A extensão é feita de maneira semelhante ao caso de um sistema de bosons, levando-se em conta as diferenças fundamentais entre os dois sistemas.

Pretendemos desenvolver o método SCFA para um gás de fermions s -dimensional com potencial de interação genérico e, após, aplicar o método para um potencial singular tipo "esfera dura", isto é, considerar partículas impenetráveis. Vamos verificar que a aplicação em um sistema tri-dimensional vai exigir aproximações numéricas bastante elaboradas para sua solução, o que será deixado para ser desenvolvido em trabalho futuro. Entretanto, para um sistema de fermions com menor dimensionalidade, o esquema de cálculo numérico envolvido é bastante mais razoável e sua resolução e a discussão dos resultados é objeto de parte deste trabalho. O gás de eletrons unidimensional será objeto de estudos no próximo capítulo.

4.1 - MÉTODO AUTOCONSISTENTE

Vamos considerar um sistema s -dimensional composto de fermions não carregados eletricamente e estudar a resposta $\chi(\vec{q}, \omega)$ a um campo externo aplicado. Seja $\phi(\vec{r})$ a interação entre as partículas, suposta diferenciável ao menos no sentido generalizado. De maneira análoga ao desenvolvido na Seção 3.1, vamos chegar a um conjunto de equações a ser resolvido de maneira auto-

consistente, envolvendo o fator de estrutura $S(\vec{q})$, a susceptibilidade do gás $\chi(\vec{q}, \omega)$ e o potencial efetivo autoconsistente $\psi(\vec{q})$.

A susceptibilidade do sistema com interação, na aproximação SCFA, é expressa em termos da interação efetiva $\psi(\vec{q})$ e da susceptibilidade do gás sem interação $\chi^0(\vec{q}, \omega)$:

$$\chi(\vec{q}, \omega^*) = \frac{\chi^0(\vec{q}, \omega)}{1 - \psi(\vec{q}) \chi^0(\vec{q}, \omega)} \quad , \quad (4.1)$$

onde $\omega^* = \omega + i\eta$ é a frequência complexa.

Por outro lado, a interação efetiva $\psi(\vec{q})$, em SCFA, é obtida conhecendo-se o potencial de interação $\phi(\vec{r})$ e a função de correlação dos pares $g(\vec{r})$:

$$\nabla_{\vec{\pi}} \psi(\vec{\pi} - \vec{\pi}') = g(\vec{\pi} - \vec{\pi}') \nabla_{\vec{\pi}} \phi(\vec{\pi} - \vec{\pi}') \quad . \quad (4.2)$$

A função correlação $g(\vec{r})$, para um sistema s-dimensional, com densidade numérica ρ , está relacionada com a transformada de Fourier do fator de estrutura $S(\vec{q})$:

$$S(\vec{q}) - 1 = \rho \text{ T.F. } [g(\vec{\pi}) - 1]$$

ou

$$g(\vec{\pi}) = 1 + \frac{1}{\rho (2\pi)^s} \int d\vec{q} \, e^{i\vec{q} \cdot \vec{\pi}} [S(\vec{q}) - 1] \quad , \quad (4.3)$$

e o fator de estrutura $S(\vec{q})$, por sua vez, pode ser obtido a partir da suscep

tibilidade do sistema:

$$S(\vec{q}) = -\frac{\hbar}{\pi \rho} \int_0^\infty d\omega \operatorname{Im} \chi(\vec{q}, \omega^*) . \quad (4.4)$$

Desse modo, para resolver as equações (4.1) a (4.4) de maneira auto-consistente, precisamos apenas conhecer o potencial de interação $\phi(\vec{r})$ entre as partículas e a susceptibilidade $\chi^0(\vec{q}, \omega)$ do gás sem interação, com mesma massa, densidade e estatística do sistema considerado.

A susceptibilidade $\chi(\vec{q}, \omega^*)$, expressa em (4.1), apresenta polos que vão corresponder à frequência das excitações elementares $\omega_0(q)$. Então, no cálculo da integral para o fator de estrutura, Eq.(4.4), é necessário levar esse fato em consideração, separando-se os termos correspondentes aos polos. Calculando a parte imaginária da susceptibilidade completa, chega-se a

$$\operatorname{Im} \chi(\vec{q}, \omega^*) = \frac{\operatorname{Im} \chi^0(\vec{q}, \omega)}{[1 - \Psi(q) \operatorname{Re} \chi^0(\vec{q}, \omega)]^2 + [\Psi(q) \operatorname{Im} \chi^0(\vec{q}, \omega)]^2} . \quad (4.5)$$

Como é mostrado no Apêndice A, para um sistema de fermions s-dimensio -
nal existem duas frequências determinadas, que vamos chamar, por agora, de ω_1 e ω_2 , tais que apenas para frequências ω com $\omega_1 < \omega < \omega_2$ vamos ter $\operatorname{Im} \chi^0(q, \omega)$ não nulo. Desse modo, como os polos de $\operatorname{Im} \chi(\vec{q}, \omega)$ correspondem a frequências $\omega_0(q)$ para os quais se deve ter

$$\operatorname{Im} \chi^0(\vec{q}, \omega_0(q)) = 0 \quad (4.6)$$

e

e

$$\Psi(\vec{q}) = \frac{1}{\text{Re } \chi^0(\vec{q}, \omega_0(q))} \quad , \quad (4.7)$$

devemos ter $\omega_0(q) < \omega_1$ ou $\omega_0(q) > \omega_2$. A expressão para o fator de estrutura fica:

$$S(\vec{q}) = -\frac{\hbar}{\pi \rho} \int_{\omega_1}^{\omega_2} d\omega \text{Im } \chi(\vec{q}, \omega) + \\ + \frac{\hbar}{\rho} \frac{1}{[\Psi(q)]^2} \left[\left| \frac{\partial \text{Re } \chi^0(q, \omega)}{\partial \omega} \right|_{\omega=\omega_0(q)} \right]^{-1} . \quad (4.8)$$

Dessa forma, separamos no fator de estrutura a contribuição de partícula única, correspondente a frequências ω tais que $\omega_1 < \omega < \omega_2$ e a contribuição dos modos coletivos, calculada a partir do polo da susceptibilidade $\chi(\vec{q}, \omega)$. A energia das excitações pode ser obtida em função do potencial efetivo $\psi(\vec{q})$, usando-se a expressão $\text{Re } \chi^0(\vec{q}, \omega_0)$ na Eq.(4.7). Precisamos calcular então o potencial efetivo $\psi(\vec{q})$. Isto é feito a partir da Eq.(4.2), para um sistema s -dimensional, e chega-se a:

$$\Psi(\vec{q}) = \Phi(\vec{q}) + \frac{1}{\rho} \int \frac{d^s q'}{(2\pi)^s} \frac{\vec{q} \cdot \vec{q}'}{q^2} \Phi(q') [S(\vec{q} - \vec{q}') - 1] . \quad (4.9)$$

Entretanto, para potenciais singulares, esta equação não é definida e então é mais conveniente obter o potencial efetivo a partir da função correlação $g(\vec{r})$, usando-se:

$$\Psi(\vec{q}) = - \frac{i\vec{q}}{q^2} \cdot \int d\vec{r} \quad g(\vec{r}) \nabla \phi(\vec{r}) \exp(-i\vec{q} \cdot \vec{r}). \quad (4.10)$$

Nesta expressão, a função $g(\vec{r})$ deve contrabalançar a singularidade do potencial, isto é, na região onde $\phi(\vec{r})$ é muito grande, $g(\vec{r})$ deve ser bem pequeno, de modo a manter $\psi(\vec{q})$ finito.

4.2 - GÁS DE FERMÍ TRIDIMENSIONAL

Vamos examinar um sistema de fermions tri-dimensional, supondo que as partículas que o compõem possam ser consideradas impenetráveis. Isso equivale a tratar as partículas como esferas rígidas, de diâmetro r_c . O potencial pode ser expresso usando-se a função de Heaviside $\theta(r)$:

$$\phi(r) = \lim_{\lambda \rightarrow \infty} \lambda \Theta(r_c - r), \quad (4.11)$$

e sua derivada vale:

$$\frac{d\phi}{dr} = \lim_{\lambda \rightarrow \infty} (-\lambda) \delta(r - r_c). \quad (4.12)$$

A Eq.(4.10) para o potencial efetivo, no caso tri-dimensional, pode ser escrita como

$$\Psi(\vec{q}) = - \frac{4\pi}{q} \int_0^\infty dr \quad r^2 \frac{d\phi(r)}{dr} j_1(qr) g(r), \quad (4.13)$$

onde $j_1(qr)$ é a função de Bessel esférica de ordem 1.

Supondo potencial tipo esfera dura, analogamente ao caso de bosons, obtém-se:

$$\Psi(\vec{q}) = \frac{4\pi r_c^2}{q} j_1(qr_c) \left[\lim_{\lambda \rightarrow \infty} \lambda g(r_c) \right]. \quad (4.14)$$

Novamente, para que $\psi(\vec{q})$ seja finito, devemos ter $g(r_c) = 0$, o que nos permitirá escrever o potencial efetivo em função de uma constante C , a ser determinada:

$$\Psi(\vec{q}) = \frac{C}{q} j_1(qr_c). \quad (4.15)$$

A susceptibilidade de um gás de fermions sem interação, com densidade numérica ρ , pode ser escrita como

$$\chi^0(\vec{q}, \omega^*) = \text{Re } \chi^0(\vec{q}, \omega) + i \text{Im } \chi^0(\vec{q}, \omega), \quad (4.16)$$

com

$$\begin{aligned} \text{Re } \chi^0(\vec{q}, \omega) = & -\frac{3\rho}{4\epsilon_F q} \left\{ 2q + \left[1 - \left(\frac{\omega + q^2}{2q} \right)^2 \right] \log \left| \frac{\omega + \omega_+(q)}{\omega + \omega_-(q)} \right| + \right. \\ & \left. + \left[1 - \left(\frac{\omega - q^2}{2q} \right)^2 \right] \log \left| \frac{\omega - \omega_+(q)}{\omega - \omega_-(q)} \right| \right\}, \end{aligned} \quad (4.17)$$

$$\begin{aligned}
\text{Im } \chi^0(\vec{q}, \omega) &= -\frac{3\pi}{8} \frac{\rho}{\epsilon_F} \frac{\omega}{q} & 0 \leq \omega < |\omega_-(q)| \\
&= -\frac{3\pi}{8} \frac{\rho}{\epsilon_F q} \left[1 - \left(\frac{\omega - q^2}{2q} \right)^2 \right] & |\omega_-(q)| \leq \omega \leq \omega_+(q) \\
&= 0 & \omega_+(q) < \omega \quad (4.18)
\end{aligned}$$

onde expressamos ω em unidades de $\epsilon_F/\hbar$. ϵ_F a energia de Fermi, e q em unidades de q_F e definimos $\omega_{\pm}(q) = q^2 \pm 2q$.

Então, usando as Eqs.(4.7) e (4.17) podemos, em princípio, obter a frequência das excitações $\omega_0(q)$ em função de $\psi(q)$ que, por sua vez, vai depender da constante C . No caso de gás de fermions tri-dimensional, não é possível obter uma expressão analítica para $\omega_0(q, C)$, e a solução numérica é bastante complicada. A função $\omega_0(q)$ é necessária no cálculo da parte coletiva do fator de estrutura. Entretanto, a constante C que aparece no potencial efetivo $\psi(q)$ só pode ser determinada após o cálculo de $S(q)$, utilizando-se a condição $g(r_c) = 0$, o que torna ainda mais elaborada a obtenção de $\omega_0(q, C)$. Também o cálculo da contribuição da partícula única no fator de estrutura, neste caso, envolve uma integral bastante complexa, que vai depender da frequência da excitação (ou do parâmetro C). Esperamos chegar à resolução desse problema em um trabalho futuro.

Para testar a aplicação de SCFA a um sistema de fermions, podemos considerar um sistema unidimensional. A principal diferença surge do fato de a expressão de $\chi^0(\vec{q}, \omega)$ para um sistema unidimensional ser muito mais simples, permitindo obter-se uma expressão analítica para a frequência do polo da sus

ceptibilidade completa.

4.3 - GÁS DE FERMÍ UNIDIMENSIONAL

Vamos considerar um sistema de fermions unidimensional, onde x_0 é a distância média entre as partículas, isto é, a densidade numérica vale $\rho = 1/x_0$. Se considerarmos as partículas com spin, a relação entre o vetor de onda de Fermi q_F e a densidade numérica, fica

$$q_F = \frac{\pi}{2} \rho = \frac{\pi}{2x_0} \quad , \quad (4.19)$$

o que nos permite escrever para a energia de Fermi:

$$\epsilon_F = \frac{\hbar^2 q_F^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2 \rho^2}{8m} \quad . \quad (4.20)$$

A hipótese de interação tipo esfera dura, em um sistema unidimensional, significa considerar-se as partículas como barras rígidas, de comprimento ℓ . Nesse caso, o potencial real entre as partículas pode ser escrito como

$$\phi(x) = \lim_{\lambda \rightarrow \infty} \lambda \left[\Theta(x+\ell) - \Theta(x-\ell) \right] \quad . \quad (4.21)$$

A expressão de $\psi(q)$, em uma dimensão, fica, de acordo com a Eq.(4.10):

$$\Psi(q) = - \frac{2}{q} \int_0^\infty dx \, \sin(qx) \, g(x) \frac{d\phi}{dx} \quad , \quad (4.22)$$

e, usando-se a expressão para o potencial $\phi(x)$, chega-se a:

$$\Psi(q) = \frac{2}{q} \sin ql \left[\lim_{\lambda \rightarrow \infty} \lambda g(\ell) \right]. \quad (4.23)$$

Como $\lambda \rightarrow \infty$, para que o potencial efetivo $\psi(q)$ permaneça finito, deve mos ter $g(\ell) = 0$, e então podemos definir

$$\lambda g(\ell) = A \pi \epsilon_F = \frac{\pi \epsilon_F}{(\rho \ell)^3} B, \quad (4.24)$$

onde A(ou B) é um parâmetro a ser determinado pela condição $g(\ell) = 0$, e ϵ_F , ρ e ℓ foram introduzidos por conveniência futura.

O potencial efetivo fica então:

$$\Psi(q) = 2 \pi \epsilon_F A \frac{\sin ql}{q}. \quad (4.25)$$

A susceptibilidade do gás de fermions unidimensional, sem interação, em unidades usuais, como é mostrado no Apêndice A, vale

$$\chi^o(q, \omega^*) = \text{Re } \chi^o(q, \omega) + i \text{Im } \chi^o(q, \omega), \quad (4.26)$$

com

$$\text{Re } \chi^o(q, \omega) = \frac{\rho \epsilon_F}{4 \epsilon_F q} \log \left| \frac{\omega^2 - \omega_-^2(q)}{\omega^2 - \omega_+^2(q)} \right| \quad (4.27)$$

$$\begin{aligned} \text{Im } \chi^0(q, \omega) &= - \frac{\pi p q_F}{4 \epsilon_F} \frac{1}{q} & \omega_-(q) \leq \omega \leq \omega_+(q) \\ &= 0 & \omega < \omega_-(q) \quad (4.28) \\ & & \text{ou } \omega > \omega_+(q) \end{aligned}$$

onde as frequências

$$\omega_{\pm}(q) \equiv \left| \frac{\hbar q^2}{2m} \pm \frac{\hbar q q_F}{m} \right| \quad (4.29)$$

correspondem aos valores extremos da banda de energias de excitação de um par fermion-buraco com vetor de onda q .

A frequência $\omega_0(q)$ correspondente ao polo da susceptibilidade completa, como já vimos, deve estar fora da região compreendida entre $\omega_-(q)$ e $\omega_+(q)$, e pode ser obtida usando as Eqs.(4.7) e (4.27). Para um gás unidimensional chega-se a:

$$\log \left| \frac{\omega_0^2 - \omega_-^2(q)}{\omega_0^2 - \omega_+^2(q)} \right| = \frac{2\pi \epsilon_F q}{q_F^2 \psi(q)} \equiv \alpha(q) \quad (4.30)$$

ou

$$\omega_0^2(q) = \frac{\omega_-^2 - \omega_+^2 e^{\alpha(q)}}{1 - e^{\alpha(q)}} = \frac{\omega_+^2 - \omega_-^2 e^{-\alpha(q)}}{1 - e^{-\alpha(q)}} \quad (4.31)$$

Supondo potencial tipo esfera dura, $\psi(q)$ é expresso pela Eq.(4.25), e ficamos com

$$\alpha(q) = \frac{q^2}{q_F^2 A \sin(qa)} \quad (4.32)$$

Nesse caso então pode-se obter uma expressão analítica para $\omega_0(q)$, que

vai depender do parâmetro $\underline{A}$, mas pode ser calculada explicitamente, em função desse parâmetro.

O espectro de energia das excitações elementares em um gás de fermions unidimensional é expresso por

$$E(q) = \hbar \omega_0(q) = \hbar \sqrt{\frac{\omega_-^2 - \omega_+^2 e^\alpha}{1 - e^\alpha}}, \quad (4.33)$$

e, usando a expressão (3.27) para a velocidade do som, obtemos

$$s = \frac{\pi \rho \hbar}{2m} \sqrt{1 + A \pi \rho \ell} = v_F \sqrt{1 + A \pi \rho \ell}. \quad (4.34)$$

Usando a frequência $\omega_0(q)$ do polo da susceptibilidade pode-se obter uma expressão para o fator de estrutura $S(q)$, em termos do parâmetro $\underline{A}$:

$$S(q, A) = S_1(q, A) + S_2(q, A), \quad (4.35)$$

onde a contribuição de partícula única vale

$$S_1(q, A) = \frac{\hbar q_F \alpha^2(q)}{4\pi \epsilon_F q} \int_{\omega_-(q)}^{\omega_+(q)} \frac{d\omega}{\left[\alpha(q) + \log \left| \frac{\omega^2 - \omega_-^2}{\omega^2 - \omega_+^2} \right| \right]^2 + \pi^2}, \quad (4.36a)$$

e a parte correspondente aos modos coletivos,

$$S_2(q, A) = \frac{\hbar q_F \alpha^2(q)}{8\epsilon_F q \omega_0} \frac{(\omega_0^2 - \omega_+^2)(\omega_0^2 - \omega_-^2)}{(\omega_-^2 - \omega_+^2)}. \quad (4.36b)$$

A função correlação dos pares, em uma dimensão, é obtida do fator de estrutura, usando

$$g(x) = 1 + \frac{1}{2q_F} \int_0^{\infty} dq \cos qx [S(q) - 1]. \quad (4.37)$$

Por sua vez, o parâmetro $\underline{A}$ será obtido autoconsistentemente da condição

$$g(l) = 1 + \frac{1}{\pi \rho l} T(A) = 0 \quad (4.38)$$

com

$$T(A) = \int_0^{\infty} d(ql) \cos (ql) [S(q, A) - 1] = -\pi \rho l. \quad (4.39)$$

4.4 - RESULTADOS

Para obter as propriedades de um gás de Fermi unidimensional devemos então resolver de maneira autoconsistente as Eqs.(4.31), (4.35) e (4.37), juntamente com a condição (4.38). Isto foi feito supondo vários valores para o produto ρl , ou seja, variando a densidade do gás.

As equações do esquema autoconsistente podem ser reescritas em unidades adimensionais, fazendo $z = q/q_F$, $y = x/l$ e $t = \hbar\omega/\epsilon_F$. Nestas unidades podemos escrever

$$\alpha(z) = \frac{z^2}{A \sin(Cz)}, \quad (4.40)$$

onde $C = q_F \ell = \frac{\pi}{2} (\rho \ell)$, e as frequências $\omega_+(q)$ e $\omega_-(q)$ ficam:

$$t_{\pm}(z) = |z^2 \pm 2z| . \quad (4.41)$$

Para o fator de estrutura temos $S(z) = S_1(z) + S_2(z)$ com

$$S_1(z, A) = \frac{\alpha^2(z)}{4z} \int_{t_-(z)}^{t_+(z)} \frac{dt}{\left[\alpha(z) + \log \left| \frac{t^2 - t_-^2}{t^2 - t_+^2} \right| \right]^2 + \pi^2} , \quad (4.42a)$$

e

$$S_2(z, A) = \frac{\alpha^2(z)}{8\epsilon_F} \frac{(t_0^2 - t_+^2)(t_0^2 - t_-^2)}{z t_0 (t_-^2 - t_+^2)} , \quad (4.42b)$$

e para a função de correlação dos pares

$$g(y) = 1 + \frac{1}{2} \int_0^\infty dz \cos(Cyz) [S(z, A) - 1] . \quad (4.43)$$

O espectro de energia das excitações elementares fica

$$E(z) = \epsilon_F \sqrt{\frac{t_-^2 - t_+^2 e^\alpha}{1 - e^\alpha}} . \quad (4.44)$$

4.4.1 - Cálculo do parâmetro A

Os valores de $T(A)$ que satisfazem à condição $g(\ell) = 0$, isto é $T(A) = -\pi \rho \ell$ estão mostrados na Fig.12, em função do produto $B = A(\rho \ell)^3$. A mesma figura representa também a dependência de $\rho \ell$ com $A(\rho \ell)^3$ e sua forma indica que nosso cálculo não deve ser válido para valores de $\rho \ell$ próximos da u-

nidade, como será discutido adiante. Na verdade, de acordo com a Fig. 12, vemos que devemos considerar apenas os valores de $\rho l \lesssim 0.7$. Para cada valor de ρl nesta região, podemos determinar o valor da constante A e calcular o fator de estrutura e o espectro de energia autoconsistentemente, através das Eqs. (4.33) e (4.35-36).

4.4.2 - Espectros de energia

A análise dos espectros de energia em função do produto ρl permite distinguir dois tipos de comportamento, para diferentes valores de ρl . Verifica-se que até um certo valor intermediário para a densidade, $\rho l \lesssim 0.22$, as curvas de energia das excitações elementares apresentam curvatura positiva, próximo à origem, enquanto que para densidades mais altas a orientação da curvatura é invertida. Este comportamento está exemplificado nas Fig. 13 e 14, onde mostramos alguns espectros de energia, com várias densidades. Podemos então distinguir regiões de alta e baixa densidade com comportamentos diferentes. Este fato é importante ao considerarmos a velocidade do som, onde as regiões apresentam-se bem distintas. Como vemos nas Figs. 13 e 14, o espectro de energia apresenta descontinuidades, quando os modos coletivos encostam no espectro de partícula única. Os valores do vetor de onda e energia logo antes da primeira descontinuidade são aproximadamente os mesmos para todas as densidades. Então, a orientação da concavidade próxima à origem determina a velocidade do som.

As descontinuidades que vão aparecer no espectro de energia de um gás de Fermi unidimensional podem ser entendidas examinando-se a equação de movimento para as flutuações de densidade ρ_q . Em segunda quantização, a hamiltono

niana efetiva de um sistema de N partículas que obedecem à estatística de Fermi-Dirac, pode ser escrita como⁽¹⁾

$$\mathcal{H} = \sum_q \epsilon_q c_q^\dagger c_q + \frac{1}{2} \sum_q \psi(q) [p_q p_q^\dagger - N], \quad (4.45)$$

onde ϵ_q é a energia de partícula única, $\psi(q)$ é o potencial efetivo, $c_q^\dagger$ e c_q são os operadores de criação e destruição para as partículas do sistema e a matriz densidade é dada por $\rho_q^\dagger = \sum_p c_{p+q}^\dagger c_p$, com $\rho_q^\dagger = \rho_{-q}$.

A relação de dispersão pode ser obtida da equação de movimento para as flutuações de densidade. Vamos calcular o comutador entre a hamiltoniana do sistema e o operador associado ao par partícula-buraco:

$$[\mathcal{H}, c_{p+k}^\dagger c_p] = \hbar \omega_{pk}^0 c_{p+k}^\dagger c_p - \frac{1}{2} \sum_q \psi(q) \left\{ p_q^\dagger, (c_{p+k}^\dagger c_{p+q} - c_{p+k-q}^\dagger c_p) \right\}_+, \quad (4.46)$$

onde $\hbar \omega_{pk}^0 = \epsilon_{p+k} - \epsilon_p$ e $\{A, B\}_+$ indica o anti-comutador.

A Eq.(4.46) mostra que a excitação de um único par está ligada com a excitação de dois pares, e sucessivamente, o que origina uma série de equações acopladas que não pode ser resolvida de maneira exata. A aproximação de ordem mais baixa para resolver essa série de equações consiste em desprezar os termos de interação, isto é, supor $\psi(q) = 0$. Nesse caso, obtemos a aproximação de partícula livre para o par fermion-buraco, que oscila com frequência

ω_{pk}^0 . Fazendo aproximação tipo RPA, que consiste em considerar apenas termos de interação com transferência de momentum igual ao momentum $\hbar k$ do par que se quer estudar, obtém-se⁽²⁾:

$$[\mathcal{H}, c_{p+k}^+ c_p] = \hbar \omega_{pk}^0 c_{p+k}^+ c_p - \Psi(k) [\eta_{p+k}^0 - \eta_p^0] \sum_q c_{q+k}^+ c_q, \quad (4.47)$$

onde $\eta_k^0 = \bar{c}_k^+ c_k$ é o operador número de ocupação. Esta equação é linear nos operadores do par e pode ser resolvida.

Se $\omega_k^* = \omega_k + i\eta$ é a frequência de oscilação, a relação de dispersão é obtida fazendo

$$[\mathcal{H}, c_{p+k}^+ c_p] = \hbar \omega_k^* c_{p+k}^+ c_p$$

e chega-se então a

$$1 = \frac{\Psi(k)}{\hbar} \sum_p \frac{\eta_p^0 - \eta_{p+k}^0}{\omega_k - \omega_{pk}^0 + i\eta} \quad (4.48)$$

Examinando a expressão (4.48) vemos que as descontinuidades no espectro de energia vão corresponder a posições onde $\psi(q)$ troca de sinal, mantendo pequeno seu valor. Se $\psi(q) \rightarrow 0^+$, ω deve estar bem próximo à banda de partícula única, com $\omega = \omega_+(q) + \Delta$, $\Delta \gtrsim 0$. Da mesma forma, se $\psi(q) \rightarrow 0^-$, devemos ter $\omega = \omega_-(q) - \Delta'$, com $\Delta' \gtrsim 0$. Assim, quando o potencial, inicialmente positivo, vai diminuindo até trocar de sinal, a energia das excitações vai sofrer uma descontinuidade, passando do valor $\hbar\omega_+(q)$ para o valor $\hbar\omega_-(q)$.

Para densidades $\rho l > 0.23$, vamos ter um comportamento tipo roton no

espectro de energia, com o mínimo acentuando-se quando a densidade cresce, porém permanecendo na mesma posição em relação a q , como é mostrado na Fig. 14. O espectro de energia, na região de altas densidades, apresenta um segundo mínimo para $q\ell > \pi$. À medida que a densidade cresce esse mínimo decresce e para $\rho\ell \sim 0.66$ vai tocar o eixo horizontal $E(q) = 0$. Podemos então definir um vetor de onda crítico $q_c \cong 0.05 \text{ \AA}^{-1}$, com $\lambda = 2\pi/q_c = 1/\rho_c$ expressando a periodicidade da rede. Com essa densidade, correspondente a um espaçamento médio entre as partículas $x_0 \sim \frac{3}{2}\ell$, alcançamos um estado cristalino e não podemos prosseguir com o mesmo formalismo para densidades mais altas. O fato de o espectro de energia apresentar o valor $E(q_c) = 0$ para um valor $q_c \neq 0$, mostra uma instabilidade do sistema quanto aos modos coletivos, sendo que o vetor de onda correspondente pode ser associado a uma periodicidade na rede.

4.4.3 - Velocidade do som

Os valores correspondentes à velocidade do som em função da densidade obtidos na Eq. (4.34) estão mostrados na Fig. 15. Estes valores concordam com os valores obtidos calculando-se a inclinação, perto da origem, do espectro de energia.

Novamente é evidente a existência de duas regiões de densidade, com comportamento diferentes. A região de baixas densidades, com $\rho\ell \lesssim 0.22$, é uma região de interação fraca, onde se tem para a velocidade do som valores próximos à velocidade de Fermi, $s \sim v_F$. Na região de densidades mais altas, entretanto, temos $s \gg v_F$, correspondendo a um sistema com interação forte. A região de transição, onde a velocidade do som varia bastante com a densidade, corresponde exatamente aos valores de densidade onde a concavidade de

$E(q)$ perto da origem muda de sinal.

4.4.4 - Fator de estrutura e função de correlação dos pares

O fator de estrutura autoconsistente $S(q)$ está mostrado na Fig. 16, enquanto que na Fig. 17 temos a função correlação $g(x)$ obtida a partir de $S(q)$ com o auxílio da Eq. (4.37). Novamente as duas regiões de densidade apresentam comportamentos bem distintos. Para baixas densidades, tanto o fator de estrutura como a função de correlação aproximam-se assintoticamente do valor unitário. Entretanto, na região de densidades mais altas, o fator de estrutura vai apresentar um máximo tanto mais acentuado quanto mais alta a densidade e a função de correlação passa a oscilar em torno do valor unitário. Quando a densidade cresce, as oscilações de $g(x)$ tornam-se mais acentuadas e regulares, indicando a formação de uma estrutura tipo cristalina ($\rho\ell > 0.66$), como é evidenciado na Fig. 18.

4.5 - COMPARAÇÃO COM OUTROS SISTEMAS UNIDIMENSIONAIS

Os resultados obtidos para um sistema unidimensional de fermions com interação tipo esfera dura mostram que ele não se comporta muito distintamente de um sistema de bosons com o mesmo tipo de interação⁽³⁾. Por outro lado, Girardeau⁽⁴⁾ mostrou que um sistema unidimensional de bosons pontuais e impenetráveis não difere sensivelmente de um sistema de fermions sem interação.

Considerando um sistema de fermions com spin, sem interação, o fator de estrutura pode ser calculado através da relação

$$S^0(q) = - \frac{t}{\pi \rho} \int_0^\infty d\omega \operatorname{Im} \chi^0(q, \omega) ,$$

que nos permite obter:

$$\begin{aligned} S^0(q) &= \frac{q}{2q_F} & q \leq 2q_F \\ &= 1 & q > 2q_F \end{aligned} \quad (4.49)$$

e, para a função correlação dos pares, tem-se:

$$g(x) = 1 - \frac{1}{2} \left[\frac{\operatorname{Sen} q_F x}{q_F x} \right]^2 . \quad (4.50)$$

O resultado exato obtido por Girardeau, para um sistema unidimensional de bosons sem spin, considerados como partículas pontuais e impenetráveis é:

$$g(x) \approx 1 - \left[\frac{\operatorname{Sen} q_F x}{q_F x} \right]^2 . \quad (4.51)$$

O fator $1/2$ não aparece devido a considerarmos partículas sem spin.

Para a velocidade do som o resultado exato de Girardeau, obtido a partir da energia do estado fundamental é:

$$S_{\text{exato}} = \frac{v_F}{(1 - \rho \ell)^2} \quad (4.52)$$

onde $v_F = \pi \rho \hbar / m$ é a velocidade de Fermi para o sistema sem spin e l é a dimensão da partícula impenetrável.

O nosso resultado para a velocidade do som, usando SCFA para um sistema de fermions unidimensional, composto de barras rígidas de comprimento l e considerando spin $\frac{1}{2}$:

$$s_{SCFA} = v_F \sqrt{1 + A \pi \rho l},$$

onde $v_F = \pi \rho \hbar / 2m$, para partículas com spin. Como vimos, para baixas densidades a constante A cresce com ρl . Então, no limite de partículas pontuais ($l \rightarrow 0$), ambos os resultados coincidem, e temos $s \approx v_F$, que é o resultado para o sistema sem interação.

A aproximação SCFA pode ser usada para estudar um gás de bosons impenetráveis em uma dimensão⁽³⁾ de maneira análoga ao feito para o sistema tridimensional. Examinando os resultados obtidos para a velocidade do som nesse caso, vemos que os valores concordam exatamente com aqueles que obtivemos para um sistema de fermions unidimensional, com mesma massa e mesmo tipo de interação. Também para o sistema de bosons, a aproximação SCFA só pode ser utilizada na região de densidades tais que $\rho l < 0.7$. É interessante ressaltar que, para um sistema de bosons impenetráveis, em uma dimensão, podemos distinguir as duas regiões de densidades e o comportamento geral do espectro de energia é semelhante ao caso de fermions, principalmente para baixas densidades. Apenas, no caso de bosons, não vai aparecer a descontinuidade no espectro de energia, que é característica de um sistema de fermions, como foi mostrado.

BIBLIOGRAFIA

CAPÍTULO 4

1. D.Pines "The many-body problem" (W.A.Benjamin, Inc., Reading, Mass. USA, 1962), p.42.
2. D.Pines em "Lectures on the many-body problem", vol. 2, E.P. Caianello, Ed. (Academic Press, New York, 1964), p.15.
3. O.Hipólito & R.Lobo "Self-consistent field approximation method for a one-dimensional many-body system: Bosons", to be published.
4. M.Girardeau J.Math.Phys. 1, 516 (1960).

CAPÍTULO 5

Gás de eletrons unidimensional

Recentemente^(1,6) tem sido intensificado o interesse no estudo de condutores e semicondutores de um tipo particular, que exibem uma forte anisotropia, comportando-se praticamente como condutores unidimensionais. Um modelo satisfatório para esses materiais é supor que eles sejam compostos de "fios" condutores formados por cadeias de suas moléculas, ao longo dos quais os eletrons de condução se movem como em um condutor unidimensional. No modelo quasi-unidimensional supõe-se que os "fios" condutores são paralelos, suficientemente afastados de modo que se possa desprezar a interação entre eles.

As substâncias desse tipo que tem sido mais investigadas são compostos orgânicos de tetracyanoquinodimethane (TCNQ) com quinolinium (Q_n -TCNQ), N-methylphenazinium (NMP-TCNQ) e tetrathiofulvalene (TTF-TCNQ)⁽³⁾, e compostos inorgânicos como potassium-tetracyanoplatinates (KCP)⁽⁴⁾.

A teoria dos condutores lineares ou metais quasi-unidimensionais tem sido bastante desenvolvida recentemente. Entretanto a maioria dos trabalhos realizados refere-se ao cálculo das funções de onda. O estudo das excitações elementares em um gás de eletrons unidimensional foi feito usando o método de Bohm & Pines (RPA), por vários autores^(5,6). Os resultados obtidos com RPA são satisfatórios na região de altas densidades, porém falham na região de densidades metálicas. A aproximação proposta por Singwi et al (SCFA),

apresentou sensível melhora sobre os resultados de RPA para o gás de eletrons tridimensional. Nesta teoria são incluídas correções locais na inte

ração, por meio de uma interação efetiva obtida considerando apenas contri
buições de pares de partículas.

O objetivo deste capítulo é aplicar a SCFA a um gás de elétrons consi
derado como um sistema quasi-unidimensional, de maneira análoga ao desenvol
vido no caso tridimensional, e comparar estes resultados com aqueles reporta
dos na literatura.

5.1 - MÉTODO AUTOCONSISTENTE

Vamos considerar o gás de elétrons como sendo composto de cadeias con
dutoras unidimensionais e paralelas, ao longo das quais os elétrons se movem
de maneira essencialmente unidimensional. Supõe-se que seja nula a probabi
lidade de um elétron pular de uma cadeia para outra. Se $\mathcal{N}$ é o número de
fios condutores por unidade de área e se em cada um deles temos ρ partículas
por unidade de comprimento, o volume V da célula unitária é $V = (\rho \mathcal{N})^{-1}$.
A interação coulombiana entre os pares de partículas em cada fio condutor é
 $\phi(x)$, e então o potencial efetivo em SCFA, $\psi(x)$, é obtido a partir da função
de correlação dos pares $g(x)$, através da Eq.(2.12) para o caso unidimensio
nal:

$$\frac{d}{dx} \psi(x-x') = g(x-x') \frac{d}{dx} \phi(x-x'). \quad (5.1)$$

Expressando as funções no espaço real em termos de suas transformadas
de Fourier, e usando

$$\text{T. F. } [g(x) - 1] = \frac{1}{\rho} [S(q) - 1], \quad (5.2)$$

chega-se a

$$\Psi(q) = \phi(q) [1 - G(q)] , \quad (5.3)$$

onde $\phi(q) = 4\pi e^2/q^2$ e

$$G(q) = -\frac{1}{4q_F} \int_{-\infty}^{\infty} dq' \frac{q}{q'} [S(|\vec{q}-\vec{q}'|) - 1] . \quad (5.4)$$

A constante dielétrica $\epsilon(q, \omega^*)$, dependente da frequência complexa $\omega^* = \omega + i\eta$ e do vetor de onda q pode ser obtida a partir da susceptibilidade $\chi(q, \omega^*)$ do gás com interação:

$$\epsilon(q, \omega^*) = \frac{1}{1 + \phi(q) \chi(q, \omega^*)} . \quad (5.5)$$

Na aproximação SCFA, a susceptibilidade do gás com interação é obtida em função do potencial efetivo autoconsistente $\psi(q)$ e da susceptibilidade $\chi^0(q, \omega^*)$ do mesmo gás sem interação

$$\chi(q, \omega^*) = \frac{\chi^0(q, \omega^*)}{1 - \Psi(q) \chi^0(q, \omega^*)} . \quad (5.6)$$

Então, para a constante dielétrica ficamos com

$$\epsilon(q, \omega^*) = 1 + \frac{Q_0(q, \omega^*)}{1 - G(q) Q_0(q, \omega^*)} , \quad (5.7)$$

onde $Q_0(q, \omega^*) = -\phi(q) \chi^0(q, \omega^*)$ é a polarizabilidade dos elétrons livres, na direção das linhas condutoras.

Usando o resultado obtido para $\chi_1^0(q, \omega^*)$ em um sistema unidimensional de fermions, no sistema quasi-unidimensional, a susceptibilidade do gás livre fica $\chi^0(q, \omega^*) = \mathcal{N} \chi_1^0(q, \omega^*)$, onde $\mathcal{N}$ é o número de cadeias condutoras por unidade de área. Então, para a polarizabilidade do sistema quasi-unidimensional temos:

$$Q_0(q, \omega^*) = \text{Re } Q_0(q, \omega) + i \text{Im } Q_0(q, \omega), \quad (5.8)$$

com

$$\text{Re } Q_0(q, \omega) = \frac{1}{2} \frac{q_F}{q^3} q_{FT}^2 \ln \left| \frac{\omega^2 - \omega_+^2(q)}{\omega^2 - \omega_-^2(q)} \right| \quad (5.9)$$

$$\begin{aligned} \text{Im } Q_0(q, \omega) &= \frac{\pi}{2} \frac{q_F}{q^3} q_{FT}^2 & \omega_-(q) \leq \omega \leq \omega_+(q) \\ &= 0 & \omega < \omega_-(q) \\ & & \text{ou } \omega > \omega_+(q), \end{aligned} \quad (5.10)$$

onde q_F é o vetor de onda de Fermi, q_{FT} é o análogo unidimensional do vetor de onda de Fermi-Thomas, $q_{FT}^2 = m\omega_p^2/2\epsilon_F$, e ω_p é a frequência livre de plasma. Em um sistema quasi-unidimensional vale $\omega_p^2 = 4\pi e^2/mV$, V o volume da célula unitária. As frequências

$$\omega_{\pm}(q) = \left| \frac{\hbar q^2}{2m} \pm \frac{\hbar q q_F}{m} \right| \quad (5.11)$$

representam os valores extremos da banda de energias correspondente à excitação

ção de um par eletrôn-buraco com vetor de onda q .

Por sua vez, o fator de estrutura $S(q)$ está relacionado com a constante dielétrica $\epsilon(q, \omega^*)$ através da expressão:

$$S(q) = - \frac{\hbar V}{\pi \phi(q)} \int_0^{\infty} d\omega \operatorname{Im} [\epsilon(q, \omega^*)]^{-1}. \quad (5.12)$$

As equações (5.4), (5.7) e (5.12), juntamente com a expressão $Q_0(q, \omega^*)$ constituem o esquema de equações a ser resolvido de maneira autoconsistente.

A expressão RPA para a constante dielétrica é

$$\epsilon(q, \omega^*) = 1 - \phi(q) \chi^0(q, \omega^*), \quad (5.13)$$

correspondendo então a uma aproximação de ordem zero em SCFA, com $G(q) = 0$.

Usando a Eq.(5.7), podemos obter

$$\operatorname{Im} \frac{1}{\epsilon(q, \omega^*)} = \frac{\operatorname{Im} Q_0(q, \omega)}{\left\{ 1 + [1 - G(q)] \operatorname{Re} Q_0(q, \omega) \right\}^2 + \left\{ [1 - G(q)] \operatorname{Im} Q_0(q, \omega) \right\}^2}. \quad (5.14)$$

Então, ao calcular o fator de estrutura, a integral vai ser efetuada entre os limites $\omega_-(q)$ e $\omega_+(q)$, quando $\operatorname{Im} Q_0(q, \omega)$ não é nulo. Entretanto, devemos também considerar a contribuição devida às frequências $\omega_p(q)$ tais que

$$\operatorname{Im} Q_0(q, \omega_p(q)) = 0 \quad (5.15)$$

$$\operatorname{Re} Q_0(q, \omega_p(q)) = \frac{1}{G(q) - 1} . \quad (5.16)$$

Os zeros da constante dielétrica vão corresponder aos polos de $\chi(q, \omega^*)$. Aplicando os resultados do caso unidimensional para um sistema quasi-dimensional, as frequências $\omega_p(q)$ são expressas por

$$\omega_p^2(q) = \frac{\omega_-^2(q) - \omega_+^2(q) e^{\alpha(q)}}{1 - e^{\alpha(q)}} , \quad (5.17)$$

onde

$$\alpha(q) = \frac{\pi q^3}{q_F^2 q_{FT}^2 V [1 - G(q)]} . \quad (5.18)$$

O fator de estrutura $S(q)$ pode ser então obtido através da equação:

$$S(q) = - \frac{\hbar V}{\pi \phi(q)} \int_{\omega_-(q)}^{\omega_+(q)} d\omega \operatorname{Im} [\epsilon(q, \omega^*)]^{-1} + \\ + \frac{\hbar V}{\phi(q)} \left[\left| \frac{\partial \operatorname{Re} \epsilon(q, \omega^*)}{\partial \omega} \right|_{\omega=\omega_p(q)} \right]^{-1} , \quad (5.19)$$

onde aparecem separadas a contribuição de excitação de partícula única e de excitação de plasmons.

A função de correlação dos pares $g(x)$ é obtida do fator de estrutura autoconsistente, usando

$$\epsilon(x) = 1 + \frac{1}{2q_F} \int_0^\infty dq \cos qx [S(q)-1] . \quad (5.20)$$

5.2 - LIMITE DE GRANDES COMPRIMENTOS DE ONDA

No limite de grandes comprimentos de onda, a função dielétrica quasi-unidimensional na aproximação SCFA, que obtivemos na Eq.(5.7) satisfaz à condição de blindagem perfeita, como se esperaria, isto é,

$$\lim_{q \rightarrow 0} \frac{1}{\epsilon(q,0)} = 0 . \quad (5.21)$$

5.2.1 - Relação de dispersão de plasmon

Supondo frequências não nulas, a expressão da constante dielétrica, para pequenas transferências de momentum, fica:

$$\lim_{q \rightarrow 0} \epsilon(q, \omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \left[1 + \left(\frac{q}{q_{FT}} \right)^2 - \gamma \left(\frac{q}{q_F} \right)^2 \right] + \dots \quad (5.22)$$

onde $\omega_p^2 = 4\pi e^2/Vm$ é a frequência livre de plasma e

$$\gamma = \frac{1}{2q_F} \int_0^\infty dq \frac{S(q)}{q^2} . \quad (5.23)$$

Então, a relação de dispersão de plamons, para grandes comprimentos de onda, obtida dos zeros da constante dielétrica, pode ser escrita como

$$\omega_p(q) = \omega_p \left\{ 1 + \left(\frac{q}{q_{FT}} \right)^2 \left[1 - \gamma \left(\frac{q_{FT}}{q_F} \right)^2 \right] + \dots \right\}^{1/2}, \quad (5.24)$$

ou, para grandes comprimentos de onda

$$\omega_p(q) = \omega_p + \beta_{SCFA} \frac{\hbar q^2}{m} + \dots, \quad (5.25)$$

onde

$$\beta_{SCFA} = \beta_{RPA} \left[1 - \gamma \left(\frac{q_{FT}}{q_F} \right)^2 \right] \quad (5.26)$$

$$e \quad \beta_{RPA} = \epsilon_F / \hbar \omega_p.$$

5.2.2 - Compressibilidade

A razão K_f/K entre a compressibilidade de um gás livre unidimensional e do mesmo gás com interação é obtida da regra de soma⁽⁷⁾

$$\lim_{q \rightarrow 0} \epsilon(q, 0) = 1 + \left(\frac{q_{FT}}{q} \right)^2 \frac{K}{K_f}. \quad (5.27)$$

Calculando o limite $q \rightarrow 0$ para a função dielétrica na aproximação SCFA, obtém-se

$$\lim_{q \rightarrow 0} \epsilon(q, 0) = 1 + \frac{(q_{FT}/q)^2}{1 - \gamma (q_{FT}/q_F)^2} \quad (5.28)$$

onde γ foi definido na Eq.(5.23).

Para a razão das compressibilidades ficamos então com

$$\frac{K_F}{K} = 1 - \gamma \left(\frac{q_{FT}}{q_F} \right)^2 = \frac{\beta_{SCFA}}{\beta_{RPA}} \quad (5.29)$$

5.3 - RESULTADOS

O cálculo autoconsistente para a obtenção das propriedades de um gás de elétrons quasi-unidimensional com interação coulombiana foi efetuado para vários valores de $x_s = x_0/a_0$, onde a_0 é o raio de Bohr e $x_0 = 1/\rho$ a distância média entre as partículas na cadeia condutora. Para um sistema unidimensional, temos

$$\rho = \frac{1}{x_s a_0} = \frac{2q_F}{\pi} \quad ,$$

e então o vetor de onda de Thomas-Fermi pode ser expresso em função de x_s :

$$\frac{q_{FT}^2}{q_F^2} = 5.16 \times 10^{-17} \mathcal{N} x_s^3$$

Para o número de fios condutores por unidade de área usamos o valor $\mathcal{N} = 10^{14} \text{ cm}^{-2}$, que corresponde a uma distância média de 10 Å entre os fios. A densidade volumétrica N dos elétrons corresponde ao inverso do volume médio ocupado por cada elétron, isto é, $N = 1/V = \mathcal{N}\rho$. Como usamos valores de x_s entre 0.01 e 12, vamos ter densidades volumétricas N entre 1.7×10^{21} e $2 \times 10^{24} \text{ cm}^{-3}$. No nosso cálculo, ao variarmos a densidade do gás, estamos considerando variações apenas na densidade dos elétrons em cada fio condutor, mantendo constante o número de fios condutores.

A aproximação SCFA, como já vimos, consiste essencialmente em substi-

tuir o potencial de interação $\phi(q)$ pelo potencial efetivo autoconsistente: $\psi(q) = \phi(q) [1-G(q)]$. Iniciamos o cálculo supondo $G(q) = 0$, obtendo então o resultado RPA para o fator de estrutura. Com esse resultado para $S(q)$, calculamos a correção $G(q)$, e repetimos o processo de maneira autoconsistente, até alcançarmos convergência com a precisão desejada. Para valores de x_s até 3, a convergência foi alcançada com cerca de 5 iterações, enquanto que para $3 < x_s < 7$, foram necessárias 12 iterações. O tipo de cálculo desenvolvido só permite calcular até valores $x_s = 12$, quando são necessárias cerca de 40 iterações para alcançar convergência.

5.3.1 - Fator de estrutura e função correlação

Os valores para o fator de estrutura $S(q)$ foram obtidos autoconsistentemente, para vários valores da densidade ρ de elétrons na cadeia condutora. Na Fig. 19 estão representados alguns resultados para $S(q)$, em função de x_s . Como se pode observar na figura, para $x_s = 0.01$ o fator de estrutura apresenta o valor correspondente ao gás unidimensional sem interação, Eq. (4.49).

A função de correlação dos pares para um gás de elétrons unidimensional é obtida a partir do fator de estrutura autoconsistente, através da Eq. (5.20). Nas Figs. 20 e 21 estão mostradas algumas curvas de $g(x)$ obtidas em SCFA, para vários valores de x_s , comparadas com os resultados de RPA. À medida ^{em} que a densidade cresce, os resultados obtidos com os dois métodos vão se aproximando e coincidem para $x_s = 0.01$, que corresponde à região de altas densidades, onde se sabe que a aproximação RPA é satisfatória. Para valores

$x_s > 11$, a aproximação RPA origina resultados negativos para a função de correlação $g(x)$ com pequenas separações das partículas. As características do cálculo desenvolvido neste trabalho não permitem obter resultados em SCFA para $x_s > 12$. Entretanto, como esses resultados ainda são bastante positivos, é razoável supor que a aproximação SCFA mantém $g(x)$ positiva para densidades bastante mais baixas em RPA.

5.3.2 - Espectro de Energia e Compressibilidade

As frequências dos modos coletivos $\omega_p(q)$ foram calculadas para diversos valores de x_s a partir dos zeros da constante dielétrica. Na Fig.22 temos algumas curvas de dispersão, para vários valores da densidade. Para valores de $x_s \gtrsim 7$, os resultados de nosso cálculo indicam o aparecimento de um mínimo na energia de excitação dos modos coletivos para $\vec{q} \neq 0$, que vai se acentuando à medida que a densidade decresce. Esse resultado significa que, devido às correlações de curto alcance presentes no sistema, seria necessário menos energia para excitar um modo coletivo, no qual os elétrons tendem a ordenar-se, do que um modo coletivo de comprimento de onda infinito ($q=0$). Esse resultado não é previsto em RPA.

Nas Fig.23 e 24, temos as curvas de dispersão em SCFA, comparadas com o resultado RPA e com a banda de excitação de partícula única, para vários valores de x_s . Pode-se notar que as curvas de dispersão obtidas com RPA não apresentam mínimo, o que acontece na aproximação SCFA, para baixas densidades. Novamente, para altas densidades, os resultados SCFA e RPA coincidem. Em ambas as aproximações, as curvas que representam as frequências das oscilações coletivas não cortam o espectro de partícula única, o que parece ser caracte

rística do sistema unidimensional.

Os valores da função γ , obtidos a partir do fator de estrutura auto-consistente, através da Eq. (5.23), para diversas densidades, estão mostrados na Fig.25. Quando $x_s \rightarrow 0$, γ cresce, porém o produto $\gamma(q_{FT}/q_F)^2 \rightarrow 0$ e então obtém-se o resultado RPA para a relação de dispersão de plasmons

($\beta_{SCFA} \rightarrow \beta_{RPA}$):

$$\omega_p^{RPA}(q) \cong \omega_p \left(1 + \frac{1}{2} \frac{q^2}{q_{FT}^2} \right)$$

Na Fig.26 está representada a dependência da razão entre as compressibilidades do gás livre e do gás com interação, em função de x_s . Na aproximação RPA a razão permanece constante e igual à unidade, porém na aproximação SCFA seu valor vai decrescendo quando a densidade decresce, alcançando valores negativos para $x_s \geq 7.0$.

BIBLIOGRAFIA

CAPITULO 5

1. H.G.Schuster, editor "One-dimensional conductors", German Physical Society Summer School Proceedings (Springer-Verlag, Berlin, 1975).
2. H.Kunz Annals of Phys. 85, 303 (1974)
V.J.Emery, A.Luther & I.Peschel Phys.Rev. B13, 1272 (1976).
H.U. Everts, H.Shulz Z.Physik B22, 285 (1975).
F.Devreux Phys.Rev. B13, 4651 (1976).
3. R.G.Kepler et al Phys.Rev.Lett. 5, 503 (1960)
W.J.Siemons et al J.Chem.Phys. 39, 3523 (1963)
R.J.Birgeneau et al Phys.Rev.Lett. 26, 718 (1971)
L.B.Cohen et al Solid State Comm. 12, 1125 (1973).
4. I.F.Schegolev Phys.Stat.Solidi A12, 9 (1972)
R.Renker et al Phys.Rev.Lett. 30, 1144 (1973) e Phys.Rev.Lett. 32, 836 (1974).
5. P.F.Williams & A.N.Bloch Phys.Rev. B10, 1097 (1974)
6. M.Apostol Z.Physik B22, 279 (1975)
A.K.Das Solid State Comm. 15, 475 (1974).
7. D.Pines em "Lectures on the many-body problem", vol.2; E.P. Caianello, Ed. (Academic Press, New York, 1964), p.15.

APENDICE A

Cálculo da susceptibilidade de um sistema de partículas livres : fermions e bosons

A.1 - SISTEMAS DE FERMIONS

Queremos calcular a susceptibilidade de um sistema de fermions sem interação, isto é, a resposta a uma excitação externa suficientemente fraca para podermos usar aproximação linear. Vamos usar unidades adimensionais, expressando os vetores de onda em unidades de q_F e as energias em unidades de ϵ_F .

Para um sistema com interação, obtivemos Eq. (1.11)

$$\chi(\vec{q}, \omega) = \frac{1}{\epsilon_F} \sum_n \left| (\rho_{\vec{q}}^+)_{n0} \right|^2 \left\{ \frac{1}{\omega - \omega_{n0} + i\eta} - \frac{1}{\omega + \omega_{n0} + i\eta} \right\}. \quad (A.1)$$

Precisamos então calcular os elementos de matriz $\langle 0 | \rho_{\vec{q}}^+ | 0 \rangle$, onde $|0\rangle$ representa o estado fundamental do sistema, com todos os estados de partícula única até a superfície de Fermi preenchidos; $\rho_{\vec{q}}^+ = \sum_{\vec{p}} c_{\vec{p}+\vec{q}}^+ c_{\vec{p}}$, $c_{\vec{q}}^+$ e $c_{\vec{q}}$ são os operadores de criação e destruição de fermions. Estes elementos de matriz não são nulos apenas quando uma partícula de momentum $\vec{p}$ foi excitada para um estado com momentum $\vec{p} + \vec{q}$, deixando um buraco em $\vec{p}$. Então, para um gás de fermions livres, a diferença de energia entre as duas configurações é

$$\hbar \omega_{n0} = \hbar \omega_{\vec{p}\vec{q}}^0 = \epsilon_{\vec{p}+\vec{q}}^0 - \epsilon_{\vec{p}}^0 = q^2 + 2\vec{q} \cdot \vec{p}. \quad (A.2)$$

Assim, a susceptibilidade do gás livre pode ser escrita como

$$\chi^0(\vec{q}, \omega) = \frac{1}{\epsilon_F} \sum_{\vec{p}, \vec{p}'} \sum_{\sigma, \sigma'} \langle 0 | c_{\vec{p}-\vec{q}, \sigma'}^\dagger c_{\vec{p}', \sigma'} c_{\vec{p}+\vec{q}, \sigma}^\dagger c_{\vec{p}, \sigma} | 0 \rangle \times$$

$$\times \left\{ \frac{1}{\omega^* - \omega_{\vec{p}\vec{q}}^0} - \frac{1}{\omega^* + \omega_{\vec{p}\vec{q}}^0} \right\} \quad , \quad (\text{A.3})$$

com $\omega^* = \omega + i\eta$

Porém, temos

$$\langle 0 | c_{\vec{p}-\vec{q}, \sigma'}^\dagger c_{\vec{p}', \sigma'} c_{\vec{p}+\vec{q}, \sigma}^\dagger c_{\vec{p}, \sigma} | 0 \rangle = \delta_{\vec{p}', \vec{p}+\vec{q}} \delta_{\sigma \sigma'} \quad , \quad (\text{A.4})$$

e assim, para a susceptibilidade, ficamos com

$$\chi^0(\vec{q}, \omega) = \frac{1}{\epsilon_F} \sum_{\vec{p}, \sigma} \langle 0 | c_{\vec{p}, \sigma}^\dagger c_{\vec{p}+\vec{q}, \sigma} c_{\vec{p}, \sigma}^\dagger c_{\vec{p}, \sigma} | 0 \rangle \left\{ \frac{1}{\omega^* - \omega_{\vec{p}\vec{q}}^0} - \frac{1}{\omega^* + \omega_{\vec{p}\vec{q}}^0} \right\}. \quad (\text{A.5})$$

Os operadores de criação e destruição de fermiões obedecem às regras de anticomutação usuais:

$$\{c_{\vec{q}}^\dagger, c_{\vec{q}'}^\dagger\}_+ = \{c_{\vec{q}}, c_{\vec{q}'}\}_+ = 0$$

$$\{c_{\vec{q}}^\dagger, c_{\vec{q}'}\}_+ = \delta_{\vec{q}\vec{q}'} \quad (\text{A.6})$$

Usando as Eqs. (A.5) e (A.6), para $\vec{q} \neq 0$, podemos escrever

$$\chi^0(\vec{q}, \omega) = \frac{1}{\epsilon_F} \sum_{\vec{p}, \sigma} \langle 0 | c_{\vec{p}, \sigma}^\dagger c_{\vec{p}, \sigma} [1 - c_{\vec{p}+\vec{q}, \sigma}^\dagger c_{\vec{p}+\vec{q}, \sigma}] | 0 \rangle \left\{ \frac{1}{\omega^* - \omega_{\vec{p}\vec{q}}^0} - \frac{1}{\omega^* + \omega_{\vec{p}\vec{q}}^0} \right\}. \quad (\text{A.7})$$

Como o número de ocupação do estado com momentum $\vec{p}$ é definido por

$$\langle 0 | c_{\vec{p}, \sigma}^\dagger c_{\vec{p}, \sigma} | 0 \rangle = n_{\vec{p}, \sigma}^0, \quad (\text{A.8})$$

a Eq. (A.7) fica

$$\chi^0(\vec{q}, \omega) = \frac{1}{\epsilon_F} \sum_{\vec{p}\sigma} n_{\vec{p}\sigma}^0 (1 - n_{\vec{p}+\vec{q}\sigma}^0) \left\{ \frac{1}{\omega - \omega_{\vec{p}\vec{q}} + i\eta} - \frac{1}{\omega + \omega_{\vec{p}\vec{q}} + i\eta} \right\}. \quad (\text{A.9})$$

Ou seja, $\chi^0(\vec{q}, \omega) \neq 0$ apenas quando $|\vec{p}| < q_F$ e $|\vec{p} + \vec{q}| > q_F$.

Podemos obter uma expressão equivalente para $\chi^0(\vec{q}, \omega)$ se, no segundo termo da equação (A.9), trocarmos o índice mudo de soma $\vec{p} \rightarrow -\vec{p}-\vec{q}$. Dessa forma, tem-se $\omega_{\vec{p}\vec{q}} \rightarrow \omega_{-\vec{p}-\vec{q}\vec{q}}$, e então, como $n_{\vec{p}} = n_{-\vec{p}}$, podemos escrever

$$\chi^0(\vec{q}, \omega) = \frac{1}{\epsilon_F} \sum_{\vec{p}\sigma} \frac{n_{\vec{p}\sigma}^0 - n_{\vec{p}+\vec{q}\sigma}^0}{\omega - \omega_{\vec{p}\vec{q}} + i\eta}. \quad (\text{A.10})$$

Ainda, se usarmos o fato de que, de acordo com a Eq. (A.8), temos

$$\begin{aligned} n_{\vec{p}}^0 &= 1 & \text{se } |\vec{p}| \leq q_F \\ &= 0 & \text{se } |\vec{p}| > q_F, \end{aligned}$$

e, fazendo uma nova mudança nos índices de soma, chega-se a

$$\chi^0(\vec{q}, \omega) = \frac{1}{\epsilon_F} \sum_{\substack{\vec{p}\sigma \\ |\vec{p}| \leq q_F}} \left[\frac{1}{\Omega_+ + i\eta} - \frac{1}{\Omega_- + i\eta} \right], \quad (\text{A.11})$$

onde $\Omega_{\pm} = \omega \pm q^2 - 2\vec{q} \cdot \vec{p}$.

Para calcular a parte real e a parte imaginária de $\chi^0(\vec{q}, \omega)$, com

$$\chi^{\circ}(\vec{q}, \omega) = \text{Re } \chi^{\circ}(\vec{q}, \omega) + i \text{Im } \chi^{\circ}(\vec{q}, \omega),$$

vamos usar a relação

$$\lim_{\eta \rightarrow 0} \frac{1}{\Omega + i\eta} = \mathcal{P} \left(\frac{1}{\Omega} \right) - i\pi \delta(\Omega), \quad (\text{A.12})$$

que vale rigorosamente dentro de uma integral.

A.1.1 - Gás de fermions em uma dimensão

Para um sistema unidimensional de fermions com spin, temos

$$\rho = \frac{N}{L} = \frac{2q_F}{\pi}.$$

Supondo uma distribuição contínua de momenta, em unidades adimensionais, vamos usar

$$\sum_{\vec{p} \in \sigma} \longrightarrow \frac{Lq_F}{2\pi} \int dp = \frac{\rho}{4} \int dp,$$

onde estamos supondo "volume" unitário. Para a parte real da susceptibilidade generalizada, usando Eq. (A.11), obtem-se

$$\text{Re } \chi^{\circ}(q, \omega) = \frac{\rho}{4\epsilon_F q} \log \left| \frac{\omega^2 - \omega_-^2(q)}{\omega^2 - \omega_+^2(q)} \right|, \quad (\text{A.13})$$

$$\text{com } \omega_{\pm}(q) = |q^2 \pm 2q|.$$

Para calcular a parte imaginária é mais conveniente usar a Eq. (A.9), e então

$$\text{Im } \chi^{\circ}(q, \omega) = -\frac{\pi\rho}{4\epsilon_F} \int dp \beta_{pq} [\delta(\omega - \omega_{pq}) - \delta(\omega + \omega_{pq})], \quad (\text{A.14})$$

onde

$$\beta_{qp} = \eta_p^\circ (1 - \eta_{p+q}^\circ) = \begin{cases} 1 & \text{se } |\vec{p}| \leq q_F \leq |\vec{p} + \vec{q}| \\ 0 & \text{se } |\vec{p}| > q_F \text{ ou } |\vec{p} + \vec{q}| < q_F . \end{cases}$$

Assim, podemos escrever para a parte imaginária da susceptibilidade

$$\text{Im } \chi^\circ(q, \omega) = - \frac{\pi p}{4\epsilon_F} \int_{-q_F}^{q_F} dp [\delta(\omega - \omega) - \delta(\omega + \omega)], \quad (\text{A.15})$$

com a condição adicional $|\vec{q} + \vec{p}| > q_F$.

Efetuada a integral, supondo $\omega > 0$, chega-se finalmente a

$$\begin{aligned} \text{Im } \chi^\circ(q, \omega) &= - \frac{\pi p}{8\epsilon_F q} & \text{se } \omega_- < \omega < \omega_+ \\ &= 0 & \text{se } \omega < \omega_- \text{ ou } \omega > \omega_+ \end{aligned} \quad (\text{A.16})$$

onde $\omega_\pm = |q|^2 \pm 2q$.

As equações (A.13) e (A.16) permitem então obter-se a expressão completa para a susceptibilidade generalizada, em um gás de fermions unidimensional.

A.1.2 - Gás de fermions tridimensional

O cálculo da susceptibilidade de um sistema de fermions em tres dimensões é realizado de maneira análoga ao caso de uma dimensão.

Supondo distribuição contínua de momenta, e usando novamente as Eqs. (A.11) e (A.12), temos, para a parte real de $\chi^\circ(\vec{q}, \omega)$:

$$\operatorname{Re} \chi^0(\vec{q}, \omega) = \frac{3\rho}{8\pi\epsilon_F} \int_{|\vec{p}| \leq q_F} d\vec{p} \left[\frac{1}{\omega - q^2 + 2\vec{q} \cdot \vec{p}} - \frac{1}{\omega + q^2 - 2\vec{q} \cdot \vec{p}} \right]. \quad (\text{A.17})$$

Efetuada a integração dentro da superfície de Fermi, chega-se a

$$\begin{aligned} \operatorname{Re} \chi^0(\vec{q}, \omega) = & - \frac{3\rho}{4\epsilon_F q} \left\{ 2q + \left[1 - \left(\frac{\omega + q}{2q} \right)^2 \right] \log \left| \frac{\omega + \omega_+(q)}{\omega + \omega_-(q)} \right| + \right. \\ & \left. + \left[1 - \left(\frac{\omega - q}{2q} \right)^2 \right] \log \left| \frac{\omega - \omega_+(q)}{\omega - \omega_-(q)} \right| \right\}, \end{aligned} \quad (\text{A.18})$$

com $\omega_{\pm}(q) = q^2 \pm 2q$.

Para a parte imaginária, usando as Eqs. (A.9) e (A.12), e supondo apenas frequências $\omega > 0$, obtêm-se

$$\operatorname{Im} \chi^0(\vec{q}, \omega) = - \frac{3\rho}{8\epsilon_F} \int d\vec{p} \, \eta_{\vec{p}}^0 (1 - \eta_{\vec{p}+\vec{q}}^0) \delta(\omega - \omega_{\vec{p}\vec{q}}). \quad (\text{A.19})$$

Para que a integral não seja nula, devemos ter $|\vec{p}| < q_F < |\vec{p} + \vec{q}|$, isto é, se θ é o ângulo entre $\vec{p}$ e $\vec{q}$, devemos ter

$$\begin{aligned} |\vec{p}| &\leq q_F \\ \text{e} \quad \cos \theta &\geq \alpha(p, q) = \frac{q_F^2 - q^2 - p^2}{2qp}. \end{aligned} \quad (\text{A.20})$$

Assim, a Eq. (A.19) fica

$$\operatorname{Im} \chi^0(\vec{q}, \omega) = \frac{3\pi\rho}{8q_F\epsilon_F} \int_0^{q_F} dp \, p^2 \int_{\alpha(q,p)}^1 dx \, \delta\left(x - \frac{\omega - q^2}{2qp}\right). \quad (\text{A.21})$$

Resolvendo a integral da equação (A.21), com a condição (A.20), chega-se a

$$\begin{aligned}
 \text{Im } \chi^0(\vec{q}, \omega) &= -\frac{3\pi\rho}{8\epsilon_F} \frac{\omega}{q} & 0 \leq \omega \leq |\omega_-(q)| \\
 &= -\frac{3\pi\rho}{8\epsilon_F q} \left[1 - \left(\frac{\omega - q^2}{2q} \right) \right] & |\omega_-(q)| \leq \omega \leq \omega_+(q) \\
 &= 0 & \omega_+(q) < \omega
 \end{aligned} \tag{A.22}$$

A susceptibilidade generalizada de um gás de fermions tridimensional, sem interação, é então expressa pelas equações (A.18) e (A.22) .

A.1 - SISTEMAS DE BOSONS

Em um sistema de bosons sem interação, todas as partículas podem se encontrar no mesmo estado de partícula única, com momentum zero, correspondendo ao estado fundamental do sistema total. Então, ao calcular os elementos de matriz do operador densidade que aparecem na Eq. (A.1), vamos acoplar estados com momentum zero ao estado com momentum $\vec{q}$, que é o momentum resultante do par partícula-buraco que criamos. Assim, neste caso vamos ter $\hbar\omega_{no} = \epsilon_{\vec{q}} = \hbar^2 q^2 / 2m$. A expressão para a susceptibilidade pode ser escrita como (em unidades adimensionais) :

$$\chi^0(\vec{q}, \omega) = \frac{1}{\epsilon_F} \sum_n \left| \langle \rho_{\vec{q}, no} \rangle \right|^2 \frac{2\epsilon_{\vec{q}}}{(\hbar\omega^*)^2 - (\epsilon_{\vec{q}})^2} \tag{A.23}$$

Porém, neste caso, temos ainda $\sum_n \langle 0 | \rho_{\vec{q}}^{\dagger} | n \rangle \langle n | \rho_{\vec{q}} | 0 \rangle = \langle 0 | \rho_{\vec{q}}^{\dagger} \rho_{\vec{q}} | 0 \rangle = \rho$

onde ρ representa o número de partículas em um volume unitário. Então, a susceptibilidade do gás de bosons sem interação, vale

$$\chi^o(\vec{q}, \omega) = \frac{2 \rho \epsilon(\vec{q})}{(\omega + i\eta)^2 - [\epsilon(\vec{q})]^2} \quad , \quad (\text{A.24})$$

que é a expressão válida para sistemas com qualquer dimensionalidade.

FIGURA 1

FIGURA 2

FIGURA 3

FIGURA 4

FIGURA 5

FIGURA 6

FIGURA 7

FIGURA 8

FIGURA 9

FIGURA 10

FIGURA 11

FIGURA 12

FIGURA 13

FIGURA 14

FIGURA 15

FIGURA 16

FIGURA 17

FIGURA 18

FIGURA 19

FIGURA 20

FIGURA 21

FIGURA 22

FIGURA 23

FIGURA 24

FIGURA 25

FIGURA 26