

**UNIVERSIDADE FEDERAL DO AMAZONAS
INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS
DEPARTAMENTO DE FÍSICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA**

**MODELO PARA PROPRIEDADES ESTÁTICAS DE UM
GÁS DE ELÉTRONS INTERAGENTES**

ANTÔNIO GERMINIANO VILAS BOAS QUEIROZ

**Dissertação apresentada ao
Departamento de Física da
Universidade Federal do
Amazonas, como parte dos
requisitos para a obtenção
do Título de Mestre em Física**

Orientador: Prof. Dr. Jener Juscelino da Silva Brito

**MANAUS -- AM
2005
UNIVERSIDADE FEDERAL DO AMAZONAS
INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS**

PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

**MODELO PARA PROPRIEDADES ESTÁTICAS DE UM
GÁS DE ELÉTRONS INTERAGENTES**

ANTÔNIO GERMINIANO VILAS BOAS QUEIROZ

Orientador: Prof. Dr. Jener Juscelino da Silva Brito

**MANAUS - AM
2005**

MEMBROS DA BANCA EXAMINADORA DA DISSERTAÇÃO DE
MESTRADO DE Antônio Germiniano Vilas Boas Queiroz APRESENTADA
AO INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS – ICE DA UNIVERSIDADE
FEDERAL DO AMAZONAS, EM 06 DE julho DE 2005.

Banca Examinadora

Jener J. S. Brito

Prof. Dr. Jener Juscelino da Silva Brito (EST/UEA – AM) - Orientador

José Wilson Matias Pinto

Prof. Dr. José Wilson Matias Pinto (DF/UFAM – AM)

Anglada

Prof. Dr. José Anglada Rivera (UNLORIENTE CUBA)

Este trabalho foi realizado com apoio financeiro da CAPES.

Agradecimentos

Agradeço a DEUS através do seu filho amado NOSSO SENHOR JESUS CRISTO pela saúde espiritual e material a qual ele me tem proporcionado, pois através dela foi possível a conclusão deste trabalho.

Ao Prof. Dr. Jener Juscelino da Silva Brito cuja coragem, estímulo, paciência e orientação segura tornaram possível a realização deste trabalho.

À minha amiga e irmã na fé Shirley Santa Cruz Machado, pelo apoio dado durante a conclusão deste trabalho.

Ao Prof. Dr. José Wilson Matias Pinto, pelo apoio na montagem do layout deste trabalho.

Ao Prof. Dr. Anglada pela sua participação na banca examinadora.

Índice

Resumo	iii
Abstract	iv
I Introdução	1
II Formalismo matemático	3
2.1 O modelo	3
2.2 Teoria da resposta linear	9
2.3 Teorema de flutuação-dissipação para a resposta dielétrica e fator de estrutura.	12
2.4 Condições de contorno sobre as funções de correlação de pares	19
2.5 Correlações de curto alcance e limites de grandes vetores de onda dos fatores de estrutura	22
2.6 Teoremas da energia e do potencial químico, e regra de soma da compressibilidade.	23
2.7 Modelos de função dielétrica	28
2.7.1 Modelo de Thomas-Fermi	28
2.7.2 Modelo RPA	30
2.7.3 Modelo de Polo de Plasmon	33
2.7.4 Correção de campo local.	34

III Propriedades estáticas para um gás de elétrons interagentes	36
3.1 Introdução	36
3.2 Cálculo da densidade de carga de Blindagem.	41
3.3 Cálculos dos parâmetros F , Υ e Γ	42
3.4 Cálculo do Sigma (σ)	45
3.5 Modelo para o Fator de Estrutura	50
3.6 Obtenção da função de distribuição de pares	52
3.7 Resolução do sistema de equações para obtenção dos parâmetros para o fator de estrutura.	54
3.8 Cálculo da energia de interação.	59
IV Sumário	61
A O cálculo do resíduo para o fator de estrutura e a carga de blindagem	63
Referências	65

Resumo

No presente trabalho foram propostos modelos para a função dielétrica estática, a densidade de carga de blindagem, o fator de estrutura, a função distribuição de pares e a energia de interação do gás de elétrons uniforme. Os parâmetros da função dielétrica são determinados impondo-se o princípio da conservação da carga, a regra da soma da compressibilidade para grandes comprimentos de onda e a condição de Kato para a densidade de carga de blindagem para pequenas distâncias. Um modelo similar é adotado para o fator de estrutura, cujos parâmetros são obtidos da normalização da função distribuição de pares e da condição de Kimball para o comportamento desta função a pequenas distância, bem como no limite RPA do fator de estrutura para longos comprimentos de onda. A imposição destas condições de contorno leva a um conjunto de equações não lineares que permitem uma solução completamente analítica dos parâmetros. Além de satisfazerem a condição de autoconsistência, os modelos obtidos são bem comportados e levam a função de distribuição de pares positivo-definido e uma carga de blindagem convergente, que exibe oscilação de Friedel, como esperado para um gás de elétrons uniforme.

Abstract

In the present work were proposed models for the static dielectric function: the screening charge density, the structure factor, the pair distribution function and the interacting energy of the uniform electron gas. The parameters of the dielectric function are determined by imposing the charge conservation principle, the compressibility sum rule for large wavelength and the Kato's condition for the screening charge density at small distances. A similar model is adopted for the structure factor, which parameters are obtained from normalization of the pair distribution function and from the Kimball's cusp condition for the behavior of this function at small distances, as well as from the RPA limit of the structure factor at long wavelength. The imposition of these boundary condition leads to a set of non-linear equations which allows a complete analytical solution for the parameters of the theory. Besides of satisfying selfconsistence conditions, the obtained models are well behaved and leads to a positive-definite pair distribution function and a convergent screening charge density which exhibit Friedell's oscillations, as expected for an uniform electron gas.

Capítulo I

Introdução

O gás de elétrons consiste num fluido quântico de elétrons que interage segundo a lei de Coulomb num meio rígido neutralizante de carga positiva e densidade uniforme.

O estudo do gás de elétrons, iniciou-se com os trabalhos de Pauli¹ e Sommerfeld² em 1927, Bloch³ em 1929 e Wigner⁴ nos de 1934 e 1938. Nos anos 50 os trabalhos de Pines e Bohm⁵, Gell-Mann e Brueckner⁶ e Luttinger⁷ descreveram o limite de altas densidade do gás de elétrons. Neste mesmo período surgiram abordagens alternativas através de funções dielétricas proposta por Lindhard⁸, Hubbard⁹ e Nozières-Pines¹⁰. Os avanços mais significativos foram obtidos no final dos anos 60 e início dos anos 70 com a função dielétrica de Singwi¹¹ e no início dos anos 80 com o método Monte Carlo quântico desenvolvido por Ceperley¹². Nas últimas duas décadas cresceu o interesse pelo gás de elétrons, devido ao estudo sobre os elétrons de condução em metais^{13,14}, sistemas magnéticos¹⁵, metais líquidos¹⁶, cristalização de Wigner¹⁷, supercondutividade¹⁸, plasmas^{19,20,21} e simulação computacional de sistema quântico interagente^{22,23}. As propriedades do gás de elétrons encontram aplicações importantes na teoria dos muitos corpos e particularmente no cálculo da auto energia de quasi partículas.

Nestas aplicações utiliza-se geralmente modelos elaborados com a RPA (random phase approximation) e correção de campo local, no entanto as mesmas não permitem obter propriedades físicas analíticas. Os únicos modelos suficientemente simples para permitir

um cálculo analítico das propriedades do gás de elétrons são os de Thomas-Fermi²⁴ e o polo de plasmon²⁵, porém ambos produzem inconsistência física.

O modelo de Thomas-Fermi, por exemplo, produz uma divergência não física na densidade de carga de blindagem e viola a conservação da carga.

O modelo de polo de plasmon produz uma densidade de blindagem que converge e conserva a carga, porém não decai da forma correta e nem exhibe oscilação de Friedel como esperado em um gás de elétrons.

Na presente dissertação apresenta-se um modelo com os parâmetros livres para função dielétrica que remove estas inconsistências físicas e permite cálculos analíticos simples. Os parâmetros do modelo são determinados utilizando-se o princípio da conservação da carga, a regra de soma da compressibilidade e da condição de Kato²⁶.

Outra propriedade de grande interesse físico é o fator de estrutura, o qual permite calcular a energia de interação entre as partículas e a função distribuição de pares. Esta última fornece a probabilidade de se encontrar uma partícula a uma distância da outra no sistema, e portanto deve ser sempre uma função positivo-definida. Entretanto para pequenas distâncias o modelo de polo de plasmon do fator de estrutura produz uma probabilidade infinitamente negativa, violando a positividade da função distribuição de pares.

Utilizando para o fator de estrutura um modelo similar para a função dielétrica nós obtivemos expressões analíticas para a energia de interação e função de distribuição de pares. Neste caso os parâmetros foram obtidos da condição de normalização da probabilidade, de uma expressão analítica que deduzimos para o fator de estrutura RPA no limite grande comprimento de onda, e da condição de Kimball.

Capítulo II

Formalismo matemático

2.1 O modelo

O Modelo de jellium consiste num fluido quântico de elétrons interagindo coulombiamente num meio rígido neutralizante de carga positiva e densidade uniforme. O operador hamiltoniano do sistema pode ser escrito da seguinte forma

$$H = H_0 + H_{ee} + H_{bb} + H_{eb} \quad (2.1.1)$$

onde H_0 é o operador de energia cinética dos elétrons

$$H_0 = \sum_{i=1}^n \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 \quad (2.2.2)$$

H_{ee} é o operador de energia potencial de interação elétron-elétron

$$H_{ee} = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j}^N \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} \quad (2.1.3)$$

H_{bb} é a auto-energia do fundo de carga positiva de densidade uniforme $n(\mathbf{x})$

$$H_{bb} = \frac{1}{2} e^2 \int \int d^3x d^3x' \frac{n(\mathbf{x}) n(\mathbf{x}')}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} \quad (2.1.4)$$

e H_{eb} é a energia potencial de interação entre os elétrons e o fundo de cargas

$$H_{eb} = -e^2 \sum_i^N \int d^3x \frac{n(\mathbf{x})}{|\mathbf{x} - \mathbf{r}_i|}. \quad (2.1.5)$$

Visto que H_{ee} , H_{bb} e H_{eb} divergem no limite termodinâmico, convém introduzirmos o fator de convergência $\exp(-\mu r)$ onde μ é uma constante arbitrária que será eliminado no final do cálculo. de modo que

$$\begin{aligned} H_{bb} &= \frac{1}{2} e^2 \left(\frac{N}{\Omega} \right)^2 \int \int d^3x d^3x' \frac{\exp(-\mu |\mathbf{x} - \mathbf{x}'|)}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} \\ &= \frac{1}{2} e^2 \left(\frac{N}{\Omega} \right)^2 \int d^3x \left(4\pi \int_0^\infty dz z^2 \frac{\exp(-\mu z)}{z} \right) \\ &= \frac{1}{2} e^2 \frac{N^2}{\Omega} \frac{4\pi}{\mu^2} \end{aligned} \quad 2.1.6$$

assim como

$$\begin{aligned} H_{eb} &= -e^2 \sum_i^N \frac{N}{\Omega} \int d^3x \frac{\exp(-\mu |\mathbf{x} - \mathbf{r}_i|)}{|\mathbf{x} - \mathbf{r}_i|} \\ &= -e^2 \sum_i^N \frac{N}{\Omega} 4\pi \int_0^\infty dz z^2 \frac{\exp(-\mu z)}{z} \\ &= -e^2 \sum_i^N \frac{N}{\Omega} \frac{4\pi}{\mu^2} = -e^2 \frac{N^2}{\Omega} \frac{4\pi}{\mu^2} \end{aligned} \quad 2.1.7$$

de modo que

$$H = -\frac{1}{2} e^2 N^2 \Omega^{-1} 4\pi \mu^{-2} + H_0 + H_{ee}. \quad (2.1.8)$$

Expressando H_0 e H_{ee} em segunda quantização, temos que:

$$\begin{aligned} H_0 &= \int d^3x \Psi^\dagger(x) T \Psi(x) \\ H_{ee} &= \frac{1}{2} \int \int d^3x d^3x' \Psi^\dagger(x) \Psi^\dagger(x') V(x, x') \Psi^\dagger(x') \Psi^\dagger(x) \end{aligned} \quad (2.1.9b)$$

onde $T = -i\hbar(2m)^{-1}\nabla_r^2$ e $V(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = (e^2/|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)\exp[-\mu(\mathbf{r} - \mathbf{r}')]$, enquanto $\Psi^\dagger(x)$ e $\Psi(x)$ são operadores de criação e destruição de férmions nas coordenadas de espaço e spin $\mathbf{x} = (\mathbf{r}, \sigma)$, os quais obedecem as seguintes relação de anticomutação.

$$\{\Psi(x), \Psi(x)\} = \{\Psi^\dagger(x), \Psi^\dagger(x)\} = 0 \quad (2.1.10a)$$

$$\{\Psi(x), \Psi^\dagger(x')\} = \delta(x - x'). \quad (2.1.10b)$$

Expressando Ψ e $\Psi^\dagger$ em termos de um conjunto completo de funções ortonormais $\Phi_{\mathbf{k}\sigma}$ temos

$$\Psi(x) = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \Phi_{\mathbf{k}\sigma}(\mathbf{r}) C_{\mathbf{k}\sigma} \quad (2.1.11a)$$

$$\Psi^\dagger(x) = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \Phi_{\mathbf{k}\sigma}^*(\mathbf{r}) C_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \quad (2.1.11b)$$

onde $C_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger$ e $C_{\mathbf{k}\sigma}$ são operadores de criação e destruição de um elétron no estado de função de onda $\Phi_{\mathbf{k}\sigma}$.

Substituindo as expressões 2.1.11 em 2.1.9, obtemos

$$H_0 = \sum_{\substack{\mathbf{k}\mathbf{k}' \\ \sigma\sigma'}} \langle \Phi_{\mathbf{k}\sigma} | T | \Phi_{\mathbf{k}'\sigma'} \rangle C_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger C_{\mathbf{k}'\sigma'} \quad (2.1.12a)$$

$$H_{ee} = \frac{1}{2} \sum_{\substack{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2\mathbf{k}_3\mathbf{k}_4 \\ \sigma_1\sigma_2\sigma_3\sigma_4}} \langle \Phi_{\mathbf{k}_1\sigma_1} \Phi_{\mathbf{k}_2\sigma_2} | V | \Phi_{\mathbf{k}_3\sigma_3} \Phi_{\mathbf{k}_4\sigma_4} \rangle C_{\mathbf{k}_1\sigma_1}^\dagger C_{\mathbf{k}_2\sigma_2}^\dagger C_{\mathbf{k}_3\sigma_3} C_{\mathbf{k}_4\sigma_4} \quad (2.1.12b)$$

de modo que

$$\langle \Phi_{\mathbf{k}\sigma} | T | \Phi_{\mathbf{k}'\sigma'} \rangle = \int d^3r \Phi_{\mathbf{k}\sigma}^*(\mathbf{r}) T \Phi_{\mathbf{k}'\sigma'}(\mathbf{r}') \quad (2.1.13a)$$

$$\langle \Phi_{\mathbf{k}_1\sigma_1} \Phi_{\mathbf{k}_2\sigma_2} | V | \Phi_{\mathbf{k}_3\sigma_3} \Phi_{\mathbf{k}_4\sigma_4} \rangle = \int d^3r \int d^3r' \Phi_{\mathbf{k}_1\sigma_1}^*(\mathbf{r}) \Phi_{\mathbf{k}_2\sigma_2}^*(\mathbf{r}') V(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \Phi_{\mathbf{k}_3\sigma_3}(\mathbf{r}') \Phi_{\mathbf{k}_4\sigma_4}(\mathbf{r}). \quad (2.1.13b)$$

Representando o hamiltoniano do gás de elétrons em uma base de funções de ondas planas,

$$\Phi_{\mathbf{k}\sigma}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}) \chi_{\sigma}(s) \quad (2.1.14)$$

onde os valores pedidos de $\mathbf{k}$, para condições de contorno periódico são $\mathbf{k} = (2\pi/L)$.

$(n_x\hat{\mathbf{e}}_x + n_y\hat{\mathbf{e}}_y + n_z\hat{\mathbf{e}}_z)$ inteiros $\chi_{\sigma}(s)$ são os spinores de Pauli $\chi_{\uparrow}(1/2) = 1$, $\chi_{\uparrow}(-1/2) = 0$, $\chi_{\downarrow}(1/2) = 0$, $\chi_{\downarrow}(-1/2) = 1$.

Calculando-se os elementos da matriz, temos que

$$\begin{aligned} \langle \Phi_{\mathbf{k}\sigma} | T | \Phi_{\mathbf{k}'\sigma'} \rangle &= \sum_s \int_{\Omega} d^3r \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \exp(-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}) \chi_{\sigma}^*(s) \left(-\frac{i\hbar^2}{2m} \nabla^2 \right) \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \exp(i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}) \chi_{\sigma'}(s) \\ &= \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} d^3r \exp i(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \cdot \mathbf{r} \sum_s \chi_{\sigma}^*(s) \chi_{\sigma'}(s) \\ &= \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \delta_{\sigma\sigma'} \end{aligned} \quad 2.1.15$$

de modo que

$$H_0 = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} C_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} C_{\mathbf{k}\sigma}. \quad (2.1.16)$$

Expressando o potencial de interação elétron-elétron numa série de Fourier $V(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \Omega^{-1} \sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}} \exp[i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{r} - \mathbf{r}')] com $V_{\mathbf{q}} = \int_{\Omega} d^3r V(\mathbf{r}) \exp(-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r})$, podemos escrever$

$$H_{ee} = \frac{1}{2\Omega} \sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}} \sum_{\substack{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 \mathbf{k}_3 \mathbf{k}_4 \\ \sigma_1 \sigma_2 \sigma_3 \sigma_4}} \langle \Phi_{\mathbf{k}_1 \sigma_1} \Phi_{\mathbf{k}_2 \sigma_2} | \exp[i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{r} - \mathbf{r}')] | \Phi_{\mathbf{k}_3 \sigma_3} \Phi_{\mathbf{k}_4 \sigma_4} \rangle C_{\mathbf{k}_1 \sigma_1}^{\dagger} \cdot C_{\mathbf{k}_2 \sigma_2}^{\dagger} C_{\mathbf{k}_3 \sigma_3} C_{\mathbf{k}_4 \sigma_4} \quad 2.1.17$$

onde de 2-1-14

$$\begin{aligned}
\langle \Phi_{\mathbf{k}_1\sigma_1} \Phi_{\mathbf{k}_2\sigma_2} | \exp [i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')] | \Phi_{\mathbf{k}_3\sigma_3} \Phi_{\mathbf{k}_4\sigma_4} \rangle &= \sum_{ss'} \int_{\Omega} \int_{\Omega} d^3r d^3r' \frac{e^{-i\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{r}}}{\sqrt{\Omega}} \chi_{\sigma_1}^* (s) \frac{e^{-i\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{r}'}}{\sqrt{\Omega}} \chi_{\sigma_2}^* (s') \\
&\quad \times e^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} \frac{e^{i\mathbf{k}_3 \cdot \mathbf{r}'}}{\sqrt{\Omega}} \chi_{\sigma_3} (s') \frac{e^{i\mathbf{k}_4 \cdot \mathbf{r}}}{\sqrt{\Omega}} \chi_{\sigma_4} (s) \\
&= \frac{1}{\Omega^2} \int_{\Omega} \int_{\Omega} d^3r d^3r' \sum_s \chi_{\sigma_1}^* (s) \chi_{\sigma_3} (s) e^{i\mathbf{r} \cdot (\mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_1)} \\
&\quad \times e^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} e^{i\mathbf{r}' \cdot (\mathbf{k}_4 - \mathbf{k}_2)} \sum_s \chi_{\sigma_2}^* (s') \chi_{\sigma_4} (s') \\
&= \delta_{\sigma_1\sigma_3} \delta_{\sigma_2\sigma_4} \frac{1}{\Omega} \int d^3r e^{i(\mathbf{k}_3 + \mathbf{q} - \mathbf{k}_1) \cdot \mathbf{r}} \frac{1}{\Omega} \int d^3r' e^{i(\mathbf{k}_4 + \mathbf{q} - \mathbf{k}_2) \cdot \mathbf{r}'} \\
&= \delta_{\sigma_1\sigma_3} \delta_{\sigma_2\sigma_4} \delta_{\mathbf{k}_3 + \mathbf{q}, \mathbf{k}_1} \delta_{\mathbf{k}_4 - \mathbf{q}, \mathbf{k}_2}.
\end{aligned} \tag{2.1.18}$$

Levando a expressão 2.1.18 e 2.1.17 e renomeando-se $k_1 - q \rightarrow k$, $k_2 + q \rightarrow k'$ e substituindo $v(q)$ obtemos

$$\begin{aligned}
H_{ee} &= \frac{1}{2\Omega} \sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}} \sum_{\substack{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 \\ \sigma_1 \sigma_2}} C_{\mathbf{k}_1\sigma_1}^{\dagger} C_{\mathbf{k}_2\sigma_2}^{\dagger} C_{\mathbf{k}_2 + \mathbf{q}\sigma_2} C_{\mathbf{k}_1 - \mathbf{q}\sigma_4} \\
&= \frac{1}{2\Omega} \sum_{\mathbf{q}} \sum_{\substack{\mathbf{k} \mathbf{k}' \\ \sigma \sigma'}} \frac{4\pi e^2}{q^2 + \mu^2} C_{\mathbf{k} + \mathbf{q}\sigma}^{\dagger} C_{\mathbf{k}' - \mathbf{q}\sigma'}^{\dagger} C_{\mathbf{k}'\sigma'} C_{\mathbf{k}\sigma}.
\end{aligned} \tag{2.1.19}$$

Calculando o termo $\mathbf{q} = 0$ e usando as relações de anticomutação $\{C_{\mathbf{k}\sigma} C_{\mathbf{k}'\sigma'}\} =$

$\{C_{\mathbf{k}\sigma}, C_{\mathbf{k}'\sigma'}\} = 0$ e $\{C_{\mathbf{k}\sigma}, C_{\mathbf{k}'\sigma'}^\dagger\} = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}\delta_{\sigma\sigma'}$ obtemos

$$\begin{aligned}
h_{ee}^0 &= \frac{1}{2\Omega} \frac{4\pi e^2}{\mu^2} \sum_{\substack{\mathbf{k}\mathbf{k}' \\ \sigma\sigma'}} C_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger C_{\mathbf{k}'\sigma'}^\dagger C_{\mathbf{k}'\sigma'} C_{\mathbf{k}\sigma} \\
&= -\frac{1}{2\Omega} \frac{4\pi e^2}{\mu^2} \sum_{\substack{\mathbf{k}\mathbf{k}' \\ \sigma\sigma'}} C_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger C_{\mathbf{k}'\sigma'}^\dagger C_{\mathbf{k}\sigma} C_{\mathbf{k}'\sigma'} \\
&= -\frac{1}{2\Omega} \frac{4\pi e^2}{\mu^2} \sum_{\substack{\mathbf{k}\mathbf{k}' \\ \sigma\sigma'}} C_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \left(\delta_{\sigma\sigma'} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} - C_{\mathbf{k}\sigma} C_{\mathbf{k}'\sigma'}^\dagger \right) C_{\mathbf{k}'\sigma'} \\
&= \frac{1}{2\Omega} \frac{4\pi e^2}{\mu^2} \left[\left(\sum_{\mathbf{k}\sigma} C_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger C_{\mathbf{k}\sigma} \right) \left(\sum_{\mathbf{k}'\sigma'} C_{\mathbf{k}'\sigma'}^\dagger C_{\mathbf{k}'\sigma'} \right) - \sum_{\mathbf{k}\sigma} C_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger C_{\mathbf{k}\sigma} \right] \quad 2.1.20
\end{aligned}$$

onde $\tilde{N} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} C_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger C_{\mathbf{k}\sigma}$ é operador número de partícula do sistema, o qual é uma constante do movimento de modo que podemos identificar $\tilde{N} = N$ e escrever

$$h_{ee}^0 = \frac{1}{2\Omega} \frac{4\pi e^2}{\mu^2} N^2 - \frac{1}{2\Omega} \frac{4\pi e^2}{\mu^2} N. \quad (2.1.21)$$

Observamos que o primeiro termo da equação 2-2-21 cancela com o primeiro termo da equação 2-1-8, enquanto o segundo termo de 2-1-21 pode ser eliminado no limite $\Omega \rightarrow \infty$ desde que $\Omega \gg \mu^{-1}$. Os termos q $\neq 0$ permanecem bem definidos quando $\mu \rightarrow 0$ e são dados por

$$H = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} C_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger C_{\mathbf{k}\sigma} + \frac{1}{2\Omega} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \sum_{\substack{\mathbf{k}\mathbf{k}' \\ \sigma\sigma'}} \frac{4\pi e^2}{q^2} C_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}^\dagger C_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}\sigma'}^\dagger C_{\mathbf{k}'\sigma'} C_{\mathbf{k}\sigma}. \quad (2.1.22)$$

Definindo uma escala de distância característica r_0 através da relação $(4/3)\pi r^3 = \Omega/N$ bem como das quantidades adimensionais $\Omega_* = r_0^{-3}\Omega$, $\mathbf{k}_* = r_0\mathbf{k}$, $\mathbf{k}'_* = r_0\mathbf{k}'$, $\mathbf{q}_* = r_0\mathbf{q}$ e $r_s = r_0/a_0$ onde $a_0 = \hbar^2/me^2$ é o raio de Bohr, pode-se escrever

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{k_*}{r_0} \right)^2 = \frac{a_0 e^2}{2} \frac{k_*^2}{r_s^2 a_0^2} = \left(\frac{e^2}{a_0 r_s^2} \right) \frac{k_*^2}{2} \quad (2.1.23)$$

bem como

$$\frac{1}{2\Omega} \frac{4\pi e^2}{q^2} = \frac{1}{2\Omega_* r_0^3} \frac{4\pi e^2 r_0^2}{q_*^2} = \frac{e^2}{2\Omega_* r_S a_0} \frac{4\pi}{q_*^2} = \left(\frac{e^2}{a_0 r_S^2} \right) \frac{r_S}{2\Omega_*} \frac{4\pi}{q_*^2}. \quad (2.1.24)$$

Usando-se estas transformações em 2.1.22 obtém-se

$$H = \frac{e^2}{2a_0 r_S^2} \left(\sum_{\mathbf{k}_* \sigma} k_*^2 C_{\mathbf{k}_* \sigma}^\dagger C_{\mathbf{k}_* \sigma} + \frac{r_S}{\Omega_*} \sum_{\mathbf{q}_* \neq 0} \sum_{\substack{\mathbf{k}_* \mathbf{k}'_* \\ \sigma \sigma'}} \frac{4\pi}{q_*^2} C_{\mathbf{k}_* + \mathbf{q}_* \sigma}^\dagger C_{\mathbf{k}'_* - \mathbf{q}_* \sigma'}^\dagger C_{\mathbf{k}'_* \sigma'} C_{\mathbf{k}_* \sigma} \right) \quad (2.1.25)$$

onde $e^2/2a_0 = 1 \text{ Rydberg}$. Na equação 2.1.25 quando r_s é pequeno, estamos no limite de altas densidades onde o termo de energia de cinética é muito maior que o termo de interação elétron-elétron, deste modo esta quantidade comporta-se como uma perturbação. Para valores de r_s intermediários e grandes termos de interação elétron-elétron torna-se importante e o sistema se encontra no limite das baixas densidades.

2.2 Teoria da resposta linear

Seja H_0 o hamiltoniano de um estado de um sistema que se encontra no estado fundamental $|\varphi_0\rangle$. Considere uma perturbação externa do tipo $AF(t)$, onde A é um operador hermitiano e $f(t)$ a parte temporal da perturbação. A função de onda do sistema perturbado é governada pela equação de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial |\varphi_S(t)\rangle}{\partial t} = (H_0 + AF(t)) |\varphi_S(t)\rangle. \quad (2.2.1)$$

Usando as transformações $|\varphi\rangle = e^{iH_0 t/\hbar} |\varphi_S(t)\rangle$ e $A(t) = e^{iH_0 t/\hbar} A e^{-iH_0 t/\hbar}$ cujas inversas são $|\varphi_S(t)\rangle = e^{-iH_0 t/\hbar} |\varphi\rangle$ e $A = e^{-iH_0 t/\hbar} A(t) e^{iH_0 t/\hbar}$, podemos escrever na forma

$$i\hbar \frac{\partial |\varphi\rangle}{\partial t} = A(t) F(t) |\varphi\rangle. \quad (2.2.2)$$

Assumindo que $F(t) = 0$ em $t \rightarrow -\infty$ e que neste limite o sistema esteja no estado fundamental $|\varphi_0\rangle$ obtem-se

$$|\varphi\rangle = |\varphi_0\rangle - \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' A(t') F(t') |\varphi\rangle \quad (2.2.3)$$

Considerando que a perturbação seja pequena, podemos aproximar $|\varphi\rangle$ em primeira ordem de A por

$$|\varphi\rangle = |\varphi_0\rangle - \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' A(t') F(t') |\varphi_0\rangle. \quad (2.2.4)$$

Supondo que o valor esperado do operador B seja a resposta do sistema e que o mesmo esteja no estado perturbado $|\varphi\rangle$, temos

$$\langle B \rangle = \langle \varphi | B | \varphi \rangle \quad (2.2.5)$$

Substituindo 2.2.4 em 2.2.5 e aproximando-se até primeira ordem de A , obtemos

$$\langle B \rangle = \langle \varphi_0 | B | \varphi_0 \rangle + \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t \langle \varphi_0 | A(t') B(t) - B(t) A(t') | \varphi_0 \rangle F(t') dt' \quad (2.2.6)$$

ou

$$\langle B \rangle - B_0 = \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t \langle \varphi_0 | [A(t'), B(t)] | \varphi_0 \rangle F(t') dt' \quad (2.2.7)$$

onde $B_0 = \langle \varphi_0 | B | \varphi_0 \rangle$. Supondo que a perturbação seja do tipo $F(t') = \delta(t')$, temos

$$\langle B \rangle - B_0 = \varphi_{BA}(t) = \frac{i}{\hbar} \Theta(t) \langle \varphi_0 | [A, B(t)] | \varphi_0 \rangle \quad (2.2.8)$$

onde $\Theta(t) = 1$ para $t \geq 0$ e $\Theta(t) = 0$ se $t < 0$. Usando que $F(t') = \int_{-\infty}^{+\infty} dt'' F(t'') \delta(t'' - t')$ obtemos

$$\begin{aligned}\langle B \rangle - B_0 &= \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' \langle \varphi_0 | [A(t'), B(t)] | \varphi_0 \rangle \int_{-\infty}^{\infty} dt'' F(t'') \delta(t'' - t') \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dt'' F(t'') \int_{-\infty}^t dt' \frac{i}{\hbar} \langle \varphi_0 | [A(t'), B(t)] | \varphi_0 \rangle \delta(t'' - t') \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dt'' F(t'') \frac{i}{\hbar} \Theta(t - t'') \langle \varphi_0 | [A(t''), B(t)] | \varphi_0 \rangle\end{aligned}\quad 2.2.9$$

Fazendo a troca $t'' \rightarrow t'$ e utilizando a definição de $\varphi_{BA}(t)$ obtida em 2.2.8 obtemos

$$\langle B \rangle - B_0 = \int_{-\infty}^{\infty} dt' F(t') \varphi_{BA}(t - t'). \quad (2.2.10)$$

Para uma perturbação cíclica amortecida do tipo $F(t) = e^{(-i\omega + \eta)t}$, onde η é introduzido para garantir a convergência das integrais temos

$$\langle B \rangle - B_0 = \int_{-\infty}^{\infty} dt' e^{(-i\omega + \eta)t'} \frac{i}{\hbar} \Theta(t - t') \langle \varphi_0 | [A(t'), B(t)] | \varphi_0 \rangle \quad (2.2.11)$$

Fazendo $t - t' = t''$, obtemos

$$\begin{aligned}\langle B \rangle - B_0 &= - \int_{\infty}^{-\infty} dt'' e^{(-i\omega + \eta)(t - t'')} \frac{i}{\hbar} \Theta(t'') \langle \varphi_0 | [A(t - t''), B(t)] | \varphi_0 \rangle \\ &= e^{(-i\omega + \eta)t} \int_{-\infty}^{\infty} dt'' e^{(i\omega - \eta)t''} \frac{i}{\hbar} \Theta(t'') \langle \varphi_0 | [A, B(t'')] | \varphi_0 \rangle\end{aligned}\quad 2.2.12$$

onde acima usamos que o valor esperado do comutador de A e B depende da diferença do tempo da resposta do operador B e o tempo da perturbação de A , onde $[A(t - t''), B(t)] = [A, B(t'')]$. Efetuando novamente a troca $t'' \rightarrow t'$ e usando que $\varphi_{BA}(t') = 0$ para $t' < 0$ obtem-se

$$\langle B \rangle - B_0 = \chi_{BA}(\omega) e^{(-i\omega + \eta)t} \quad (2.2.13a)$$

onde

$$\chi_{BA}(\omega) = \int_0^\infty dt' e^{(i\omega - \eta)t'} \varphi_{BA}(t') \quad (2.2.13b)$$

a qual pode ser interpretada como uma susceptibilidade generalizada contendo a amplitude e a fase da resposta do sistema à perturbação externa. Podemos exprimir φ_{BA} e χ_{BA} através de um conjunto completo de autofunções $|\varphi_n\rangle$ do hamiltoniano não perturbado H_0 , expandindo

$$\begin{aligned} \varphi_{BA}(t') &= i \frac{\Theta(t')}{\hbar} \sum_n [\langle \varphi_0 | A | \varphi_n \rangle \langle \varphi_n | B(t') | \varphi_0 \rangle - \langle \varphi_0 | B(t') | \varphi_n \rangle \langle \varphi_n | A | \varphi_0 \rangle] \\ &= i \frac{\Theta(t')}{\hbar} \sum_n [\langle \varphi_0 | A | \varphi_n \rangle \langle \varphi_n | e^{iH_0 t'/\hbar} B e^{-iH_0 t'/\hbar} | \varphi_0 \rangle \\ &\quad - \langle \varphi_0 | e^{iH_0 t'/\hbar} B e^{-iH_0 t'/\hbar} | \varphi_n \rangle \langle \varphi_n | A | \varphi_0 \rangle] \\ &= i \frac{\Theta(t')}{\hbar} \sum_n (A_{0n} B_{n0} e^{i\omega_{n0} t'} - B_{0n} A_{n0} e^{-i\omega_{n0} t'}) \quad 4 \end{aligned} \quad (2.2.14)$$

onde $\omega_{n0} = (E_n - E_0)/\hbar$, $A_{n0} = \langle \varphi_n | A | \varphi_0 \rangle$ e $B_{n0} = \langle \varphi_n | B | \varphi_0 \rangle$. Substituindo 2.2.14 em 2.2.13b e integrando sobre t' conseguimos a expressão geral para a susceptibilidade generalizada

$$\chi_{BA}(\omega) = \sum_n \left[\frac{B_{0n} A_{n0}}{\omega - \omega_{n0} + i\eta} - \frac{A_{0n} B_{n0}}{\omega + \omega_{n0} + i\eta} \right]. \quad (2.2.15)$$

Assumindo que a intensidade da perturbação seja pequena podemos aplicar o princípio da superposição linear para obter o caso geral por integração de Fourier sobre χ_{AB} .

2.3 Teorema de flutuação-dissipação para a resposta dielétrica e fator de estrutura.

Identificando o termo $AF(t)$ definido a seção anterior como a energia de interação entre o campo externo e o sistema, bem como a diferença $\langle B \rangle - B_0$ como a densidade de

carga induzida, onde $\langle B \rangle$ é o valor esperado da densidade de carga. Teremos

$$\rho^{ext}(\mathbf{r}, t) = ea_q \cos(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) \exp(-i\omega + \eta)t \quad (2.3.1)$$

onde e a carga do eletrônica e a_q é a amplitude da densidade de carga. Levando 2-3-1, na equação de Poisson

$$\nabla^2 V^{ext}(\mathbf{r}, t) = -4\pi\rho^{ext}(\mathbf{r}, t) \quad (2.3.2)$$

obtemos a seguinte expressão para o potencial elétrico

$$V^{ext}(\mathbf{r}, t) = a_q \frac{4\pi e}{q^2} \cos(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) \exp(-i\omega + \eta)t. \quad (2.3.3)$$

Observando que o operador de densidade de carga do sistema de elétrons é dado por

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^N \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \quad (2.3.4)$$

de modo que

$$\rho(\mathbf{r}) = \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{q}} \rho_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} \quad (2.3.5a)$$

com

$$\rho_{\mathbf{q}} = \int d^3r \rho(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} = \sum_{i=1}^N \int d^3r \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} = \sum_{i=1}^N e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_i}. \quad (2.3.5b)$$

temos que a densidade de carga induzida fica:

$$\begin{aligned} \rho^{ind}(\mathbf{r}) &= e \langle \rho(\mathbf{r}) \rangle = e \left\langle \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{q}} \rho_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} \right\rangle = e \left\langle \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{q}} \left(\sum_{i=1}^N e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_i} \right) e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} \right\rangle \\ &= e \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{q}} \left\langle \sum_{i=1}^N e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_i} \right\rangle e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} = e \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{q}} \langle \rho_{\mathbf{q}} \rangle e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} \end{aligned} \quad 2.3.6$$

A fim de que a carga induzida oscile de acordo com o potencial externo definido em 2-3-3, as quantidades a serem preservados no último somatório são $\langle \rho_{\mathbf{q}} \rangle = \langle \rho_{-\mathbf{q}} \rangle$, de modo que

$$\rho^{ind}(\mathbf{r}) = \frac{e}{\Omega} \langle \rho_{\mathbf{q}} \rangle (e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} + e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}) = \frac{2e}{\Omega} \langle \rho_{\mathbf{q}} \rangle \cos(\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}). \quad (2.3.7)$$

Lembrando que o campo externo é oscilante e que portanto a densidade de carga induzida é dependente do tempo, convém escrever $\rho^{ind}(r) = \rho^{ind}(r, t)$ e definir a resposta dielétrica

$$\chi(\mathbf{q}, \omega) = \frac{\rho^{ind}(\mathbf{q}, \omega)}{V^{ext}(\mathbf{q}, \omega)} \quad (2.3.8)$$

onde $\rho^{ind}(\mathbf{q}, \omega)$ e $V^{ext}(\mathbf{q}, \omega)$ são transformadas de Fourier de $\rho^{ind}(\mathbf{r}, t)$ e $V^{ext}(\mathbf{r}, t)$ obtidas em 2.3.3 e 2.3.7 de modo que

$$\chi(\mathbf{q}, \omega) = \frac{2e}{\Omega} \frac{q^2 \langle \rho_{\mathbf{q}} \rangle \cos(\mathbf{q}\cdot\mathbf{r})}{a_q 4\pi e \cos(\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}) \exp(-i\omega t)} = \frac{q^2 \langle \rho_{\mathbf{q}} \rangle}{2\pi a_q \Omega \exp(-i\omega t)}. \quad (2.3.9)$$

Partindo das relações 2-3-13, observamos que B equivale no presente caso a forma do operador de interação AF(t) é dada por

$$\begin{aligned} AF(t) &= U = \sum_i^N e V^{ext}(\mathbf{r}_i, t) = \sum_i^N \frac{4\pi e^2}{q^2} a_{\mathbf{q}} \cos(\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_i) \exp(-i\omega t) \\ &= \left[\frac{4\pi e^2}{q^2} \frac{a_{\mathbf{q}}}{2} \sum_i^N (e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} + e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}) \right] \exp(-i\omega t) \end{aligned} \quad 2.3.10$$

onde de 2.3.5b obtem-se

$$A = \frac{4\pi e^2}{q^2} \frac{a_{\mathbf{q}}}{2} (\rho_{\mathbf{q}} + \rho_{-\mathbf{q}}) \quad (2.3.11)$$

de modo que das Eqs.2.2.13b temos

$$\langle \rho_{\mathbf{q}} \rangle = \exp(-i\omega + \eta) \frac{4\pi e^2}{q^2} \frac{a_q}{2} \frac{i}{\hbar} \int_0^\infty dt' \Theta(t') \langle \varphi_0 | [\rho_{\mathbf{q}} + \rho_{-\mathbf{q}}, \rho_{\mathbf{q}}(t')] | \varphi_0 \rangle. \quad (2.3.12)$$

Observando que o sistema é homogêneo e fazendo uso de um conjunto completo de autofunções $|\varphi_n\rangle$ de H_0 obtemos

$$\langle \rho_{\mathbf{q}} \rangle = \exp(-i\omega + \eta) \frac{4\pi e^2}{q^2} \frac{a_q}{2\hbar} \sum_n \left[\frac{(\rho_{\mathbf{q}})_{0n} (\rho_{-\mathbf{q}})_{n0}}{\omega - \omega_{n0} + i\eta} - \frac{(\rho_{-\mathbf{q}})_{0n} (\rho_{\mathbf{q}})_{n0}}{\omega + \omega_{n0} + i\eta} \right]. \quad (2.3.13)$$

ma vez que $(\rho_{-\mathbf{q}})_{n0} = (\rho_{\mathbf{q}})_{0n}^*$ e $(\rho_{\mathbf{q}})_{n0} = (\rho_{-\mathbf{q}})_{0n}^*$ temos que

$$\langle \rho_{\mathbf{q}} \rangle = \exp(-i\omega + \eta) \frac{4\pi e^2}{q^2} \frac{a_q}{2\hbar} \sum_n \left[\frac{|(\rho_{\mathbf{q}})_{0n}|^2}{\omega - \omega_{n0} + i\eta} - \frac{|(\rho_{-\mathbf{q}})_{0n}|^2}{\omega + \omega_{n0} + i\eta} \right] \quad (2.3.14)$$

onde ainda $(\rho_{-\mathbf{q}})_{0n} = (\rho_{\mathbf{q}})_{0n}$ e portanto

$$\langle \rho_{\mathbf{q}} \rangle = \exp(-i\omega + \eta) \frac{4\pi e^2}{q^2} \frac{a_q}{2\hbar} \sum_n |(\rho_{\mathbf{q}})_{0n}|^2 \left(\frac{1}{\omega - \omega_{n0} + i\eta} - \frac{1}{\omega + \omega_{n0} + i\eta} \right). \quad (2.3.15)$$

Substituindo 2-3-15 em 2.3.9 obtem-se a resposta dielétrica

$$\chi(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{\Omega \hbar} \sum_n |(\rho_{\mathbf{q}})_{0n}|^2 \left(\frac{1}{\omega - \omega_{n0} + i\eta} - \frac{1}{\omega + \omega_{n0} + i\eta} \right). \quad (2.3.16)$$

cujos efeitos dissipativos estão contidos em sua parte imaginária, dada por

$$\text{Im } \chi(\mathbf{q}, \omega) = \frac{\pi}{\Omega \hbar} \sum_n |(\rho_{\mathbf{q}})_{0n}|^2 (\delta(\omega + \omega_{n0}) - \delta(\omega - \omega_{n0})) \quad (2.3.17)$$

onde usamos que $\delta(x - x_0) = \lim_{\eta \rightarrow 0} (1/\pi) \{ \eta / [(x - x_0) + \eta^2] \}$.

Para obter uma relação entre $\text{Im } \chi(q, \omega)$ e as suas flutuações de carga no sistema basta integrar 2-3-17 em $0 \leq \omega \leq \infty$ o que fornece

$$\begin{aligned}
\int_0^\infty d\omega \operatorname{Im}\chi(q, \omega) &= -\frac{\pi}{\Omega\hbar} \sum_n (\rho_q)_{0n} (\rho_q)_{n0}^* = -\frac{\pi}{\Omega\hbar} \sum_n (\rho_q)_{0n} (\rho_{-q})_{n0} \\
&= -\frac{\pi}{\Omega\hbar} \sum_n \langle \varphi_0 | \rho_q | \varphi_n \rangle \langle \varphi_n | \rho_{-q} | \varphi_0 \rangle \\
&= -\frac{\pi}{\Omega\hbar} \langle \varphi_0 | \rho_q \rho_{-q} | \varphi_0 \rangle
\end{aligned} \tag{2.3.18}$$

onde de 2.3.4 e 2.3.5 tem-se que

$$\begin{aligned}
\langle \varphi_0 | \rho_{\mathbf{q}} \rho_{-\mathbf{q}} | \varphi_0 \rangle &= \left\langle \varphi_0 \left| \int d^3r e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \left(\sum_{i=1}^N \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \right) \int d^3r' e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}'} \left(\sum_{j=1}^N \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}_j) \right) \right| \varphi_0 \right\rangle \\
&= \sum_{ij=1}^N \int d^3r \int d^3r' \langle \varphi_0 | \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}_j) | \varphi_0 \rangle e^{-i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} \\
&= \sum_{ij=1}^N \int d^3r \langle \varphi_0 | \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) | \varphi_0 \rangle e^{-i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}_j)} \\
&= \int d^3r e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \left[\sum_{ij=1}^N \langle \varphi_0 | \delta(\mathbf{r} - (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)) | \varphi_0 \rangle \right] \\
&= \int d^3r e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \left[N\delta(\mathbf{r}) + \sum_{i \neq j}^N \langle \varphi_0 | \delta(\mathbf{r} - (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)) | \varphi_0 \rangle \right]
\end{aligned} \tag{2.3.19}$$

onde acima realizamos a troca $r - r_j \rightarrow r''$ e em seguida renomeamos $r'' \rightarrow r$. Observando que no somatório todos os pares de partículas são equivalentes, e que para cada valor de "i" haverão N-1 valores de "j" (com $i \neq j$), podemos escrever

$$\begin{aligned}
\langle \varphi_0 | \rho_{\mathbf{q}} \rho_{-\mathbf{q}} | \varphi_0 \rangle &= \int d^3r e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} [N\delta(\mathbf{r}) + N(N-1) \langle \varphi_0 | \delta(\mathbf{r} - (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)) | \varphi_0 \rangle] \\
&= N \int d^3r e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} [\delta(\mathbf{r}) + (N-1) \langle \varphi_0 | \delta(\mathbf{r} - (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)) | \varphi_0 \rangle]
\end{aligned} \tag{2.3.20}$$

Por outro lado temos que

$$\begin{aligned}
\langle \varphi_0 | \delta(\mathbf{r} - (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)) | \varphi_0 \rangle &= \int \varphi_0^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \dots, \mathbf{r}_N) \delta(\mathbf{r} - (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)) \varphi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \dots, \mathbf{r}_N) \\
&\times d^3r_1 d^3r_2 d^3r_3 \dots d^3r_N = \int \varphi_0^*(\mathbf{r} + \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \dots, \mathbf{r}_N) \varphi_0(\mathbf{r} + \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \dots, \mathbf{r}_N) \\
&\times d^3r_2 d^3r_3 \dots d^3r_N = \frac{1}{\Omega} \int \varphi_0^*(\mathbf{r} + \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \dots, \mathbf{r}_N) \varphi_0(\mathbf{r} + \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \dots, \mathbf{r}_N) \\
&\times d^3r_2 d^3r_3 \dots d^3r_N = \frac{1}{\Omega} g(\mathbf{r})
\end{aligned} \tag{2.3.21}$$

onde vemos que para uma partícula em uma posição $g(\mathbf{r})$ fornece a probabilidade de encontrarmos uma segunda partícula a uma distância ' $\mathbf{r}$ '. desta primeira. Além disso das expressões 2.3.20 e 2.3.21 temos que

$$\langle \varphi_0 | \rho_{\mathbf{q}} \rho_{-\mathbf{q}} | \varphi_0 \rangle = N \int d^3r e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} \left[\delta(\mathbf{r}) + \frac{(N-1)}{\Omega} g(\mathbf{r}) \right]. \tag{2.3.22}$$

onde $\langle \varphi_0 | \rho_{\mathbf{q}} \rho_{-\mathbf{q}} | \varphi_0 \rangle = \sum_{i,j} \langle \varphi_0 | e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_i} e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_j} | \varphi_0 \rangle$ de modo que $\langle \varphi_0 | \rho_{\mathbf{q}} \rho_{-\mathbf{q}} | \varphi_0 \rangle_{q=0} = N^2$, e podemos escrever

$$\langle \varphi_0 | \rho_{\mathbf{q}} \rho_{-\mathbf{q}} | \varphi_0 \rangle = N^2 \delta_{\mathbf{q}=0} + NS(\mathbf{q}) \tag{2.3.23}$$

de tal forma que o fator de estrutura $S(\mathbf{q})$ se anula em $q = 0$ e é a transformada de Fourier de $g(\mathbf{r})$. Pois das expressões (2.3.22) e (2.3.23) tem-se

$$N\delta_{\mathbf{q}=0} + S(\mathbf{q}) = \int d^3r e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} \delta(\mathbf{r}) + \frac{N-1}{\Omega} \int d^3r e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} g(\mathbf{r}) \tag{2.3.24}$$

onde $\int d^3r e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} \delta(\mathbf{r}) = 1$, $N\delta_{\mathbf{q}=0} = N \left(\frac{1}{\Omega} \int d^3r e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} \right) = n \int d^3r e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}}$ e no limite termodinâmico, no qual $N \rightarrow \infty$ e $\Omega \rightarrow \infty$ com $N/\Omega = n$ constante (de modo que $(N-1)/\Omega \rightarrow n$), encontra-se

$$S(q) - 1 = n \int d^3r e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} [g(\mathbf{r}) - 1] \tag{2.3.25}$$

da qual tem-se a transformação inversa

$$g(\mathbf{r}) - 1 = \frac{1}{\Omega} \sum_q e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \frac{1}{n} [S(q) - 1]. \quad (2.3.26)$$

No limite em que os valores de q percorrem um contínuo devemos passar a integração via $\sum_q \rightarrow \Omega \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3}$ de modo que neste caso

$$g(\mathbf{r}) = 1 + \frac{1}{n} \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} [S(q) - 1]. \quad (2.3.27)$$

Observando 2.3.18 e 2.3. 23, obtemos

$$S(\mathbf{q}) = -\frac{\hbar}{\pi n} \int_0^\infty d\omega \operatorname{Im} \chi(\mathbf{q}, \omega) \quad (2.3.28)$$

o qual é uma relação fundamental da teoria da resposta linear conhecido como teorema de flutuação-dissipação, no caso particular da resposta dielétrica. Partindo da expressão 2.3.25 (observando que $S(0) = 0$) notamos que $g(\mathbf{r})$ satisfaz a condição de normalização

$$n \int d^3r e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} [g(\mathbf{r}) - 1] = -1 \quad (2.3.29)$$

que pode se interpretado como um enunciado do princípio da conservação da carga ou número de partículas do sistema

2.4 Condições de contorno sobre as funções de correlação de pares

Usando o hamiltoniano abaixo

$$\begin{aligned}
 H = & \sum_{i=1}^N -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{\mathbf{r}_i}^2 + \sum_{i>j=1}^N \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} = -\frac{\hbar^2}{2m} (\nabla_{\mathbf{r}_1}^2 + \nabla_{\mathbf{r}_2}^2) - \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=3}^N \nabla_{\mathbf{r}_i}^2 + \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \\
 & + \sum_{i=3}^N \left(\frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_1|} + \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_2|} \right) + \sum_{i>j=3}^N \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}
 \end{aligned} \tag{2.4.1}$$

a função de onda do estado fundamental de energia E seja $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \dots, \mathbf{r}_N)$, corresponde ao estado fundamental, deve satisfazer a seguinte equação de Schrödinger

$$H\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \dots, \mathbf{r}_N) = E\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \dots, \mathbf{r}_N) \tag{2.4.2}$$

onde E é a energia.

Tomando duas partículas quaisquer do sistema, podemos escrever suas posições em função das coordenadas relativas e do centro de massa. Usando as relações

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2 \tag{2.4.3a}$$

e

$$\mathbf{R} = \frac{(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)}{2}, \tag{2.4.3b}$$

de onde obtemos

$$\nabla_{\mathbf{r}_1} = \nabla_{\mathbf{r}} + \frac{1}{2} \nabla_{\mathbf{R}} \tag{2.4.4a}$$

e

$$\nabla_{\mathbf{r}_2} = \nabla_{\mathbf{r}} - \frac{1}{2} \nabla_{\mathbf{R}} \tag{2.4.4b}$$

os quais levado em (2.4.2), temos

$$\begin{aligned} \left(-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_{\mathbf{r}}^2 + \frac{e^2}{r} \right) \psi(\mathbf{r}, \mathbf{R}, \mathbf{r}_3, \dots, \mathbf{r}_N) = & \left\{ E + \frac{\hbar^2}{4m} \nabla_{\mathbf{R}}^2 + \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=3}^N \nabla_{\mathbf{r}_i}^2 - \right. \\ & \sum_{i=3}^N \left(\frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - (\mathbf{R} + \frac{\mathbf{r}}{2})|} + \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_2|} \right) \\ & \left. - \sum_{i>j=3}^N \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} \right\} \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \dots, \mathbf{r}_N) \quad 2.4.5 \end{aligned}$$

onde $\mu = m/2$ é a massa reduzida. Pondo a equação acima em coordenadas esféricas obtemos

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{\hbar^2}{\mu r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{e^2}{r} \right) \psi(\mathbf{r}, \mathbf{R}, \mathbf{r}_3, \dots, \mathbf{r}_N) = \epsilon \psi(\mathbf{r}, \mathbf{R}, \mathbf{r}_3, \dots, \mathbf{r}_N). \quad 2.4.6$$

onde ϵ é o operador do lado direito equação (2.4.5). Considerando $\psi(\mathbf{r}, \mathbf{R}, \mathbf{r}_3, \dots, \mathbf{r}_N)$ como solução para pequenos valores de 'r', temos

$$\psi(\mathbf{r}, \mathbf{R}, \mathbf{r}_3, \dots, \mathbf{r}_N) \approx \psi(0, \mathbf{R}, \mathbf{r}_3, \dots, \mathbf{r}_N) + \left(\frac{\partial \psi(\mathbf{r}, \mathbf{R}, \mathbf{r}_3, \dots, \mathbf{r}_N)}{\partial r} \right)_{r=0} r \quad (2.4.7)$$

onde ainda pondo $a = (\partial \psi(\mathbf{r}, \mathbf{R}, \mathbf{r}_3, \dots, \mathbf{r}_N) / \partial r)_{r=0}$ e $b = (\partial^2 \psi(\mathbf{r}, \mathbf{R}, \mathbf{r}_3, \dots, \mathbf{r}_N) / \partial r^2)_{r=0}$, podemos escrever

$$\psi = a + br \quad 2.4.8$$

onde a coordenada r de ψ está representando a separação entre dois elétrons.

Levando 2.4.8 em 2.4.6, obtemos o seguinte

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{\hbar^2}{\mu r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{e^2}{r} \right) (a + br) = \epsilon (a + br) \quad 2.4.9$$

$$-\frac{\hbar^2 b}{\mu r} + \frac{e^2 a}{r} + e^2 b = \epsilon a + \epsilon br \quad 2.4.10$$

a qual deve ser equacionada em $r \rightarrow 0$ de tal modo que o termo (e^2/r) seja removido

$$-\hbar^2 \frac{b}{\mu} + e^2 a = 0 \quad (2.4.11)$$

$$\frac{b}{a} = \frac{\mu e^2}{\hbar^2} = \frac{m e^2}{2\hbar^2} = \frac{1}{2a_0} \quad 2.4.12$$

e assim

$$\psi(r) = a \left(1 + \frac{br}{a} \right) = a \left(1 + \frac{r}{2a_0} \right) \quad 2.4.13$$

obserando que $g(r) \propto \psi^*(r)\psi(r)$ obtemos

$$g(r) = K \left(1 + \frac{r}{2a_0} \right)^2 \quad (2.4.14)$$

onde K é uma constante.

De modo que

$$g(0) = K \quad (2.4.15)$$

Derivando 2.4.14

$$\frac{dg(r)}{dr} = \frac{K}{a_0} \left(1 + \frac{r}{2a_0} \right) \quad (2.4.16)$$

donde então

$$\left(\frac{dg(r)}{dr} \right)_{r=0} = \frac{K}{a_0} \quad (2.4.17)$$

Pondo o valor de K dado em 2.4.15, obtemos finalmente

$$\left(\frac{dg(r)}{dr} \right)_{r=0} = \frac{g(0)}{a_0} \quad (2.4.18)$$

a qual foi originalmente obtida por Kimball.

2.5 Correlações de curto alcance e limites de grandes vetores de onda dos fatores de estrutura

Da relação 2.3.27, temos que

$$g(r) = 1 + \frac{1}{n} \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} [S(q) - 1], \quad (2.5.1)$$

onde no presente caso $S(q)$ é esferossimétrica, de tal modo que

$$g(r) = 1 + \frac{3}{2rk_F^3} \int_0^\infty dq q \sin(qr) [S(q) - 1] \quad 2.5.2$$

Desenvolvendo $\sin(qr)$ para pequenos valores do argumento e seguida tomando r igual à zero, obtemos

$$g(0) = 1 + \frac{3}{2rk_F^3} \int_0^\infty dq q^2 [S(q) - 1] \quad (2.5.3)$$

Afim de que $g(r)$ seja bem definida na origem, vemos que $1 - S(q)$ deve ir a zero pelo menos tão rapidamente quanto q^{-4} para $q \rightarrow \infty$. Também observamos que $\left(\frac{dg(r)}{dr}\right)_{r=0} \neq 0$, desde que o $\lim [1 - S(q)]_{q \rightarrow \infty} = C/q^4$ e C seja proporcional a esta derivada.

Considerando as afirmações acima, podemos escrever

$$1 - S(q) = \frac{C}{(1 + q^2)^2} + S_1(q) \quad (2.5.4)$$

onde $S_1(q)$ é uma função caindo mais rapidamente do que q^{-4} .

Levando 2.5.4 em 2.5.2, temos

$$g(r) = 1 - \frac{3\pi C}{8k_F^3} e^{-r} - \frac{3}{2rk_F^3} \int_0^\infty dq q \sin(qr) S_1(q). \quad (2.5.5)$$

Derivando 2.5.5, chegamos à expressão

$$\frac{dg(r)}{dr} = \frac{3\pi C}{8k_F^3} e^{-r} + \frac{3}{2r^2 k_F^3} \int_0^\infty dq q \sin(qr) S_1(q) - \frac{3}{2rk_F^3} \int_0^\infty dq q^2 \cos(qr) S_1(q) \quad (2.5.6)$$

Considerando que $qr \ll 1$, então podemos desenvolver $\sin(qr)$ e $\cos(qr)$ em série e em seguida fazemos $r \rightarrow 0$, nestas condições 2.5.6. pode ser escrita da seguinte forma

$$\left(\frac{dg(r)}{dr} \right)_{r=0} = \frac{3\pi C}{8k_F^3} = \frac{3\pi C}{8k_F^3} \lim_{q \rightarrow \infty} [1 - S(q)] \quad (2.5.7)$$

Continuando neste desenvolvimento, concluímos que a segunda derivada será finita na origem, desde que $S_1(q)$ caia pelo menos da ordem q^{-6} paara grandes valores de q.

2.6 Teoremas da energia e do potencial químico, e regra de soma da compressibilidade.

A energia potencial média de um gás de elétron é dada por

$$v = \frac{n}{2} \int d^3r \frac{e^2}{r} [g(\mathbf{r}) - 1] \quad (2.6.1)$$

onde $g(r)$ é a função distribuição de pares e o fator $1/2$ serve para evitar a duplicidade na contagem da interação elétron-elétron. Substituindo 2.3.27 em 2.6.1, podemos expressar a energia potencial média em termos do fator de estrutura, conforme relação abaixo

$$v = \frac{e^2}{\pi} \int_0^\infty dq [S(q) - 1] \quad (2.6.2)$$

expressando 2.6.2 em Rydbergs, obtemos

$$v = -\frac{4}{\pi r_S} \left(\frac{9\pi}{4} \right)^{1/3} \tau \quad (2.6.3)$$

onde τ é a grandeza adimensional, dada por

$$\tau = -\frac{1}{2k_F} \int_0^\infty dq [S(q) - 1]. \quad (2.6.4)$$

O conhecimento da energia potencial do gás de elétrons como função de r_S nos permite obter a energia total do estado fundamental do sistema de acordo com o teorema de Feynman. Para verificarmos isto podemos escrever o hamiltoniano do sistema na forma

$$H(\lambda) = H_0 + \lambda V \quad (2.6.5)$$

onde λ é uma quantidade adimensional, que iremos variar adiabaticamente no intervalo zero a um. Para cada valor de λ as autofunções $\psi(\lambda, r_\alpha)$ e os autovalores $\varepsilon(\lambda)$ do hamiltoniano satisfazem a equação de Shrödinger

$$H(\lambda; r_\alpha) \psi(\lambda; r_\alpha) = \varepsilon(\lambda) \psi(\lambda; r_\alpha) \quad (2.6.6)$$

onde r_α representa o conjunto de coordenadas de espaço e spin que descrevem o sistema. Calculando o valor de $\varepsilon(\lambda)$ em 2.6.6 temos que

$$\varepsilon(\lambda) = \int dr_\alpha \psi^*(\lambda; r_\alpha) H(\lambda; r_\alpha) \psi(\lambda; r_\alpha). \quad (2.6.7)$$

onde assumimos que a função $\psi(\lambda, r_\alpha)$ é normalizada.

Derivando 2.6.7 obtemos

$$\begin{aligned} \frac{\partial \varepsilon(\lambda)}{\partial \lambda} &= \int dr_\alpha \frac{\partial \psi^*(\lambda; r_\alpha)}{\partial \lambda} H(\lambda; r_\alpha) \psi(\lambda; r_\alpha) + \int dr_\alpha \psi^*(\lambda; r_\alpha) \frac{\partial H(\lambda; r_\alpha)}{\partial \lambda} \psi(\lambda; r_\alpha) \\ &\quad + \int dr_\alpha \psi^*(\lambda; r_\alpha) H(\lambda; r_\alpha) \frac{\partial \psi(\lambda; r_\alpha)}{\partial \lambda} \end{aligned} \quad 2.6.8$$

como o operador H é hermitiano, podemos escrever

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \varepsilon(\lambda)}{\partial \lambda} &= \varepsilon(\lambda) \int dr_\alpha \left[\frac{\partial \psi^*(\lambda; r_\alpha)}{\partial \lambda} \psi(\lambda; r_\alpha) + \psi^*(\lambda; r_\alpha) \frac{\partial \psi(\lambda; r_\alpha)}{\partial \lambda} \right] \\
&\quad + \int dr_\alpha \psi^*(\lambda; r_\alpha) \frac{\partial H(\lambda; r_\alpha)}{\partial \lambda} \psi(\lambda; r_\alpha) \\
&= \varepsilon(\lambda) \frac{\partial}{\partial \lambda} \int dr_\alpha \psi^*(\lambda; r_\alpha) \psi(\lambda; r_\alpha) + \int dr_\alpha \psi^*(\lambda; r_\alpha) \frac{\partial H(\lambda; r_\alpha)}{\partial \lambda} \psi(\lambda; r_\alpha) \\
&= \int dr_\alpha \psi^*(\lambda; r_\alpha) V(r_\alpha) \psi(\lambda; r_\alpha) = \frac{1}{\lambda} \int dr_\alpha \psi^*(\lambda; r_\alpha) \lambda V(r_\alpha) \psi(\lambda; r_\alpha) \\
&= \frac{v(\lambda)}{\lambda}
\end{aligned} \tag{2.6.9}$$

onde $V(\lambda)$ é a energia potencial para um dado valor de λ . Lembrando que este valor esta contido no intervalo entre zero e um, podemos escrever para $\varepsilon(\lambda)$

$$\varepsilon = \varepsilon_0 + \int_0^1 d\lambda \frac{v(\lambda)}{\lambda} \tag{2.6.10}$$

onde $\varepsilon_0 = \varepsilon(0)$ e $\varepsilon(1)$ são os autovalores para o hamiltoniano $H = H_0$ e $H(1) = H_0 + V$ respectivamente. Reescrevendo 2.6.3 em função de λ , temos

$$v(\lambda) = -\lambda \frac{4}{\pi r_S} \left(\frac{9\pi}{4} \right)^{1/3} \tau$$

de modo que

$$\varepsilon = \varepsilon_0 - \frac{4}{\pi r_S} \left(\frac{9\pi}{4} \right)^{1/3} \int_0^1 d\lambda \tau(\lambda) \tag{2.6.11}$$

e finalmente pondo $r'_S = \lambda r_S$, podemos escrever

$$\begin{aligned}
\varepsilon &= \varepsilon_0 - \frac{4}{\pi r_S^2} \left(\frac{9\pi}{4} \right)^{1/3} \int_0^{r_S} dr'_S \tau(r'_S) \\
&= \varepsilon_0 + \frac{1}{r_S^2} \int_0^{r_S} dr_{S'} r_{S'} v(r_{S'}) .
\end{aligned} \tag{2.6.12}$$

a qual é a forma adequada do teorema de Feynman para aplicação do gás de elétrons.

O conhecimento da energia do gás de elétrons para um sistema de N partículas $E_t(N)$,

nos permite obter um potencial químico μ , o qual é definido por

$$\mu = E_T(N+1) - E_T(N) \quad (2.6.13)$$

Considerando $\epsilon(n)$, a energia do estado fundamental or partícula e n a concentração do gás de elétron, então

$$E_T(N) = N\epsilon(n) \quad (2.6.14)$$

Adicionando uma partícula ao sistema sua nova concentração será

$$n_f = \frac{N+1}{\Omega} = \frac{N}{\Omega} + \frac{1}{\Omega} = n + \frac{1}{\Omega} \quad (2.6.15)$$

portanto de 2.6.14, temos que

$$\begin{aligned} E_T(N+1) &= (N+1)\epsilon(n_f) = (N+1)\epsilon\left(n + \frac{1}{\Omega}\right) \simeq (N+1)\left[\epsilon(n) + \frac{1}{\Omega}\frac{\partial\epsilon(n)}{\partial n}\right] \\ &= N\epsilon(n) + \epsilon(n) + \frac{N+1}{\Omega}\frac{\partial\epsilon(n)}{\partial n} \simeq E_T(N) + \epsilon(n) + n\frac{\partial\epsilon(n)}{\partial n} \end{aligned} \quad 2.1.16$$

de modo que 2.6.16 em 2.6.13 obtemos a expressão do teorema de Sietz

$$\mu = \epsilon(n) + n\frac{\partial\epsilon(n)}{\partial n} = \frac{\partial[n\epsilon(n)]}{\partial n} \quad (2.6.17)$$

o qual associa a energia do estado fundamental ao potencial químico.

A partindo $E_T(N)$, podemos calcular a pressão do gás de elétrons da seguinte forma

$$P = -\left(\frac{dE_T}{d\Omega}\right)_N = n\frac{d\epsilon(n)}{dn} \quad (2.6.18)$$

de onde obteremos a compressibilidade κ , dada por

$$\frac{1}{\kappa} = -\Omega\left(\frac{dP}{d\Omega}\right)_N = n\frac{dP}{dn} = n^2\frac{d^2[n\epsilon(n)]}{dn^2} = n^2\frac{d[\mu(n)]}{dn}. \quad (2.6.19)$$

Expondo o gás de eletrons a um campo elétrico de comprimento de onda q e energia potencial elétrica $W_q^{ext}(r)$, teremos que cada elétron do sistema sofre ação de uma força externa dada por

$$\mathbf{f}_q^{ext}(r) = -\nabla W_q^{ext}(r) \quad (2.6.20)$$

Supondo que os vetores de onda sejam pequenos, então a força elétrica flutuará levemente em relação a variável r , o que nos permite escrever as relações abaixo

$$\frac{\mathbf{F}_q^{ext}(r)}{\Omega} = \frac{N}{\Omega} \mathbf{f}_q^{ext}(r) = n \mathbf{f}_q^{ext}(r) = -n \nabla W_q^{ext}(r) = \nabla [-n W_q^{ext}(r)] . \quad (2.6.21)$$

por outro lado

$$\frac{\mathbf{F}_q^{ext}(r)}{\Omega} = \nabla P_q \quad (2.6.22)$$

combinando 2.6.20 e 2.6.21, obtemos

$$\nabla [-n W_q^{ext}(r)] - \nabla P_q = 0 \quad (2.6.23)$$

logo

$$P_q = -n W_q^{ext}(r) . \quad (2.6.24)$$

de 2.6.20, observamos as alterações na densidade são devidos as modificações na pressão do gás de elétrons, dado por

$$\rho(q) = \kappa n P = -\kappa n^2 W_q^{ext}(r) \quad (2.6.25)$$

onde da teoria da resposta linear temos que

$$\rho(q) = \chi^d(q, 0) W_q^{ext}(r) \quad (2.6.26)$$

e a partir 2.6.25, no limite de pequenos valores de q , obtemos

$$\lim_{q \rightarrow 0} \chi^d(q, 0) = -\kappa n^2 \quad (2.6.27)$$

conhecida como a regra de soma da compressibilidade.

2.7 Modelos de função diéletrica

2.7.1 Modelo de Thomas-Fermi

Consideramos um potencial elétrico $V(r)$ gerado por uma distribuição de carga estática de densidade $\rho(r)$, satisfazendo a equação de poisson

$$\nabla^2 V(r) = -4\pi\rho(r). \quad (2.7.1.1)$$

Assumindo que $\rho(r)$ seja a superposição de cargas externas e induzidas com densidades $\rho^{ext}(r)$ e $\rho^{ind}(r)$ respectivamente, onde podemos escrever

$$\nabla^2 V(r) = -4\pi[\rho^{ext}(r) + \rho^{ind}(r)]. \quad (2.7.1.2)$$

Definindo $\eta_0 = \frac{K_F^3}{3\pi^2}$ como concentração do gás de elétron na ausência de campo e $\eta(r) = \frac{K_F^3(r)}{3\pi^2}$ como a concentração de carga local na presença do mesmo, então temos que

$$\rho^{ind}(r) = [\eta(r) - \eta_0] \quad (2.7.1.3)$$

onde no equilíbrio a energia de fermi do sistema independente da posição, de modo que

$$E_F = \frac{\hbar^2 K_F^2(r)}{2m} + V(r) \quad (2.7.1.4)$$

e portanto

$$K_F(r) = \frac{\sqrt[2]{2mE_F}}{\hbar} \sqrt[2]{1 - \frac{V(r)}{E_F}} \quad (2.7.1.5)$$

Elevando ao cubo a expressão acima e multiplicando por $1/3\pi^2$, obtemos

$$\eta(r) = \eta_0^{\frac{3}{2}} \left[1 - \frac{V(r)}{E_F} \right]^{\frac{3}{2}} \quad (2.7.1.6)$$

de modo que a equação fica

$$\rho(r) = -e \left[\eta_0 \left(1 - \frac{V(r)}{E_F} \right)^{\frac{3}{2}} - \eta_0 \right]. \quad (2.7.1.7)$$

Assumindo que $(V(r)/E_F) \ll 1$, temos que

$$\rho^{ind}(r) = \frac{3eV(r)}{2E_F} \quad (2.7.1.8)$$

e portanto a equação 2.7.1.2 fica

$$\nabla^2 V(r) = 4\pi\rho^{ext}(r) + \frac{6\pi e^2 V(r)\eta_0}{E_F} \quad (2.7.1.9)$$

ou ainda

$$(\nabla^2 - q_{TF}^2)V(r) = 4\pi e^2 \rho^{ext}(r) \quad (2.7.1.10)$$

onde $q_{TF}^2 = 6\pi e^2 \eta_0 / E_F$ é o vetor de onda de Thomas-Fermi.

Usando a representação de Fourier $V(r) = \int d^3q V(q) e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}$ e assumindo que $\rho^{ext}(r) = Q\delta(r)$, temos que

$$V(q) = \frac{4\pi e Q}{q^2 + q_{TF}^2} \quad (2.7.1.12)$$

enquanto para a carga externa de densidade $\rho^{ext}(r) = Q\delta(r)$ a equação de poisson $\nabla^2 V(r) = 4\pi\rho^{ext}(r)$ fornece

$$V(q) = \frac{4\pi e Q}{q^2} \quad (2.7.1.13)$$

Dividindo 2.7.1.13 por 2.7.1.12, temos finalmente a expressão para função dielétrica dado por

$$\epsilon(q) = 1 + \frac{q_{TF}^2}{q^2} \quad (2.7.1.14)$$

a qual é a função dielétrica de Thomas-Fermi.

2.7.2 Modelo RPA

Nesta subseção apresentaremos a função dielétrica RPA (Random phase approximation) obtida da teoria da perturbação dependente do tempo.

A equação de Schrödinger de um gás de elétrons livres é dada por

$$i\hbar \frac{\partial \psi_k^0(r, t)}{\partial t} = H_0 |\psi_k^0(r, t)\rangle \quad (2.7.2.1)$$

onde $H_0 = \sum_i \frac{\hbar^2 \nabla_i^2}{2m}$, cuja a solução é do tipo

$$|\psi_k^0(r, t)\rangle = |\psi_k^0(r)\rangle e^{i \frac{E_k^0}{\hbar} t} \quad (2.7.2.2)$$

o qual $\psi_k^0(r)$ satisfaz a equação de autovalores

$$H_0 |\psi_k^0(r)\rangle = E_k^0 |\psi_k^0(r)\rangle. \quad (2.7.2.3)$$

Na presença de um potencial $\delta U(r, t)$, a função de onda do sistema perturbado irá satisfazer a equação

$$i\hbar \frac{\partial \psi(r, t)}{\partial t} = [H_0 + \delta U(r, t)] |\psi(r, t)\rangle \quad (2.7.2.4)$$

onde $\psi(r, t)$ pode ser expandida como uma combinação linear das funções de onda não perturbadas na forma

$$|\psi(r, t)\rangle = \sum_n C_n(t) |\varphi_k^0(r)\rangle e^{-i \frac{E_k^0}{\hbar} t} \quad (2.7.2.5)$$

de modo que a equação 2.7.2.4 fica

$$i\hbar \sum_n C'_n(t) |\varphi_k^0(r)\rangle e^{-i\frac{E_k^0}{\hbar}t} = \sum_n C_n(t) \delta U(r, t) |\varphi_k^0(r)\rangle e^{-i\frac{E_k^0}{\hbar}t}. \quad (2.7.2.6)$$

Multiplicando ambos os lados de 2.7.3.6 por $\langle \varphi_p^0(r) |$ e usando que $\langle \varphi_p^0(r) | \varphi_n^0(r) \rangle = \delta_{n,p}$, obtemos

$$C'_p = -\frac{i}{\hbar} \sum_n C_n(t) \langle \varphi_p^0(r) | \delta U(r, t) | \varphi_n^0(r) \rangle e^{i(\frac{E_p^0 - E_n^0}{\hbar})t} \quad (2.7.2.7)$$

Assumindo que $C_n(-\infty) = \delta_{n,k}$, ou seja que um tempo infinitamente no passado o sistema se encontrava num dado estado específico $|\varphi_k^0\rangle$ e considerando uma aproximação de primeira ordem, temos

$$C_p(t) = \int_{-\infty}^t dt' \langle \varphi_p^0(r) | \delta U(r, t') | \varphi_k^0(r) \rangle e^{i(\frac{E_p^0 - E_k^0}{\hbar})t'} \quad (2.3.2.8)$$

Supondo que $\delta U(r, t) = (U e^{i(\mathbf{q}\cdot\mathbf{r} - \omega t)} + U^\dagger e^{i(\mathbf{q}\cdot\mathbf{r} - \omega t)})$ e usando que para o sistema de elétrons livres não perturbado $|\varphi_k^0(r)\rangle = \frac{e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}}{\sqrt{\Omega}}$ e $|\varphi_p^0(r)\rangle = \frac{e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}}}{\sqrt{\Omega}}$, tem-se

$$C_{k+p} = U e^{i(\frac{E_{k+p} - E_k}{\hbar})t} e^{\alpha t} \left(\frac{e^{-i\omega t}}{E_k - E_{k+p} + \hbar\omega + i\alpha\hbar} \right) \quad (2.7.2.9a)$$

e

$$C_{k-p} = e^{i(\frac{E_{k-p} - E_k}{\hbar})t} e^{\alpha t} \left(\frac{e^{i\omega t}}{E_k - E_{k-p} + \hbar\omega + i\hbar\alpha} \right) \quad (2.7.2.9b)$$

de modo que

$$\psi_k(r, t) = \psi_k^0(r, t) + C_{k+p} \psi_{k+p}^0(r, t) + C_{k-p} \psi_{k-p}^0(r, t) \quad (2.7.2.10)$$

Uma vez obtida o efeito da perturbação sobre cada função de onda, podemos calcular a densidade de carga total induzida dada por

$$\rho(r, t) = e \sum_k f_k^0 \left[|\psi_k(r, t)|^2 - |\psi_k^0(r, t)|^2 \right] \quad (2.7.2.11)$$

onde f_k^0 é a distribuição de Fermi-Dirac.

Substituindo 2.7.2.10 em 2.7.2.11, obtemos

$$\begin{aligned} \rho(r, t) = & e \sum_k f_k^0 [C_{k+p}(\psi_k^0(r, t))^* \psi_{k+p}^0(r, t) + C_{k+p}^* \psi_k^0(r, t) (\psi_{k+p}^0(r, t))^* + \\ & C_{k-p}(\psi_k^0(r, t))^* \psi_{k-p}^0(r, t) + C_{k-p}^* \psi_k^0(r, t) (\psi_{k-p}^0(r, t))^*] \end{aligned} \quad (2.7.2.12)$$

Levando o conjunto de expressão 2.7.2.9 e substituindo as funções de ondas planas citadas acima em 2.7.2.12, podemos escrever

$$\begin{aligned} \rho(r, t) = & e \frac{U}{\Omega} e^{\alpha t} \{ e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} e^{-i\psi t} \sum_k \frac{f_k^0 - f_{k+q}}{E_k - E_{k+q} + \hbar\omega + i\alpha\hbar} + \\ & e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} e^{i\omega t} \sum_k \frac{f_k^0 - f_{k+q}}{E_k - E_{k+q} + \hbar\omega - i\alpha\hbar} \} \end{aligned} \quad (2.7.2.13)$$

Com o conhecimento da densidade $\rho(r, t)$, podemos encontrar a potencial elétrico através de equação de poisson

$$\nabla^2 V(r, t) = 4\pi\rho(r, t) \quad (2.7.2.14)$$

Pondo 2.7.2.13 em 2.7.2.14 e resolvendo-a em seguida, obtemos

$$V(q, \omega) = \frac{4\pi e^2 U}{q^2 \Omega} \sum_k \frac{f_k^0 - f_{k+q}}{E_k - E_{k+q} + \hbar\omega + i\alpha\hbar} \quad (2.7.2.15)$$

Lembrando que o sistema responde à ação combinada dos potenciais externo $\phi(q, \omega)$ e o induzido $V(q, \omega)$ pela redistribuição de carga, de modo que

$$\delta U(q, \omega) = V(q, \omega) + \phi(q, \omega) \quad (2.7.2.16)$$

e

$$\delta U(q, \omega) = \frac{V(q, \omega)}{\epsilon(q, \omega)} \quad (2.7.2.17)$$

onde

$$\epsilon(q, \omega) = 1 + \frac{4\pi e^2}{q^2} \frac{1}{\Omega} \sum_k \frac{f_k^0 - f_{k+q}}{E_k - E_{k+q} + \hbar\omega + i\alpha\hbar} \quad (2.7.2.18)$$

a qual é a função RPA.

Integrando a expressão 2.7.2.18 sobre todos os 'k' e em seguida escrevendo-a na forma real e imaginária, temos

$$\begin{aligned} \epsilon_1(q, \omega) = & 1 + \frac{q_{TF}^2}{q^2} \left\{ 1 + \frac{m^2}{2K_F q^3} [4E_F E_q - (E_q + \omega)^2] \right. \\ & \ln \left[\frac{E_q + qv_F + \omega}{E_q - qv_F + \omega} \right] + \frac{m^2}{2K_F q^3} [4E_F E_q - (E_q - \omega)^2] \\ & \left. \ln \left[\frac{E_q + qv_F - \omega}{E_q - qv_F - \omega} \right] \right\} \end{aligned} \quad (2.7.2.19)$$

para $q < 2K_F$

$$\epsilon_2(q, \omega) = \begin{cases} 2\omega \left(\frac{e^2 m}{q^3} \right) & 0 < \omega < qv_F - E_q \\ \left(\frac{e^2 m}{q^3} \right) \left[k_F^2 - \left(\frac{m}{q} \right)^2 (\omega - E_q)^2 \right] & qv_F - E_q < \omega < qv_F + E_q \\ 0 & qv_F + E_q < \omega \end{cases} \quad 2.7.2.20.a$$

para $q > 2K_F$

$$\epsilon_2(q, \omega) = \left(\frac{e^2 m}{q^3} \right) \left[k_F^2 - \left(\frac{m}{q} \right)^2 (\omega - E_q)^2 \right] \quad qv_F - E_q < \omega < qv_F + E_q \quad 2.7.2.20.b$$

onde $v_F = \frac{\hbar K_F}{m}$ é a velocidade de Férmi.

2.7.3 Modelo de Polo de Plasmon

Expandindo a expressão 2.7.2.20a e assumindo que as variáveis $\frac{qv_F}{\omega} \ll 1$ e $\frac{\epsilon_q}{\omega} \ll 1$, temos

$$\lim_{q \rightarrow 0} \varepsilon_1(q, \omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \left\{ 1 + \frac{1}{\omega^2} \left[\frac{3}{5} (qv_F)^2 - \varepsilon_q^2 \right] + O\left(\frac{1}{\omega^2}\right) \right\}, \quad (2.7.3.1)$$

onde $\omega_p^2 = \frac{4\pi\eta_0 e^2}{m}$ é chamada frequência de plasma para o gás de elétrons.

Igualando à expressão 2.7.3.1 a zero, obtemos:

$$\omega_q^2 = \omega_p^2 + \frac{3}{5} (qV_F)^2 + \left(\frac{\hbar q^2}{2m} \right)^2, \quad (2.7.3.2)$$

conhecida como a lei de dispersão de plasmon.

Adaptando à expressão 2.7.3.2, ao potencial de Thomas-Fermi, é introduzido no termo q^2 um fator 5/9 menor que o coeficiente RPA, então a relação acima assume a forma:

$$\omega_q^2 = \omega_p^2 + \frac{1}{3} (qV_F)^2 + \left(\frac{\hbar q^2}{2m} \right)^2. \quad (2.7.3.3)$$

Baseando nas observações acima, podemos escrever que:

$$\varepsilon(q, \omega) = \frac{\omega_q^2 - \omega^2}{\omega_q^2 - \omega_p^2 - \omega^2}, \quad (2.7.3.4)$$

onde $\varepsilon(q, \omega)$ é o modelo de polo de plasmon, o qual satisfaz as regras de soma abaixo:

$$\int_0^\infty d\omega \, \omega \, \text{Im} \left[\frac{1}{\varepsilon(q, \omega + i\delta)} \right] = -\frac{\pi}{2} \omega_p^2 \quad (2.7.3.5)$$

$$\int_0^\infty d\omega \, \omega \, \text{Im} \left[\frac{1}{\varepsilon(q, \omega + i\delta)} \right] = \frac{\pi}{2} \omega_p^2 \quad (2.7.3.6)$$

2.7.4 Correção de campo local.

Numa aproximação de campo efetivo, a densidade de carga induzida sobre um gás de elétrons por um potencial elétrico externo $V^{ext}(q, \omega)$ é dado por:

$$\delta\rho(\mathbf{q}, \omega) = \chi^0(\mathbf{q}, \omega) [V^{ext}(\mathbf{q}, \omega) + V^{eff}(\mathbf{q}, \omega) \delta\rho(\mathbf{q}, \omega)] \quad (2.7.4.1)$$

onde $\chi^0(\mathbf{q}, \omega)$ é a polarizabilidade do gás de eletrons livres de expressão

$$\chi^0(\mathbf{q}, \omega) = \sum_{\sigma=\uparrow, \downarrow} \int_{\delta \rightarrow 0} \frac{d^3 \mathbf{p}}{(2\pi)^3} \frac{n_{\mathbf{p}+\mathbf{q}, \sigma} - n_{\mathbf{p}, \sigma}}{\hbar^2 (\mathbf{q}^2 + 2\mathbf{p} \cdot \mathbf{q}) / 2m + \omega + i\delta} \quad (2.7.4.2)$$

e $V^{eff}(\mathbf{q}, \omega) \delta\rho(\mathbf{q}, \omega)$ é o potencial efetivo sentido por um eletron a partir das cargas de polarização induzidas dado por :

$$V^{eff}(\mathbf{q}, \omega) \delta\rho(\mathbf{q}, \omega) = (V(\mathbf{q}) + f_{xc}(\mathbf{q})) \delta\rho(\mathbf{q}, \omega) \quad (2.7.4.3)$$

onde $V(q) = 4\pi e^2/q^2$ é a interação coulombiana pura e $f_{xc}(q)$ é o usual fator de correlação e troca⁴², o qual está relacionado à correção de campo local $G(\mathbf{q})$ por:

$$f_{xc}(\mathbf{q}) = -V(\mathbf{q}) G(\mathbf{q}). \quad (2.7.4.4)$$

Além disso, na teoria da resposta linear nós temos que:

$$\delta\rho(\mathbf{q}, \omega) = \chi(\mathbf{q}, \omega) V^{ext}(\mathbf{q}, \omega) \quad (2.7.4.5)$$

e portanto, das Eqs.(2.7.4.1)-(2.7.4.5), obtem-se a resposta dielétrica corrigida

$$\chi(\mathbf{q}, \omega) = \frac{\chi^0(\mathbf{q}, \omega)}{1 - V(\mathbf{q}) [1 - G(\mathbf{q})] \chi^0(\mathbf{q}, \omega)}, \quad (2.7.4.6)$$

Capítulo III

Propriedades estáticas para um gás de elétrons interagentes

3.1 Introdução

Antes de mencionar o desenvolvimento dos modelos da densidade de blindagem e do fator de estrutura proposto neste capítulo, vamos mostrar algumas inconsistências físicas dos modelos já desenvolvidos: tais como “A função dielétrica de Thomas-Fermi e modelo de polo de plasmon.

Vamos primeiro mostrar a inconsistência física verificada no modelo de Thomas-Fermi, o qual apresenta uma divergência na densidade de carga de blindagem, quanto ‘ $r \rightarrow 0$ ’.

Chamando de $\delta(r)$ a função densidade de carga de blindagem, a qual está relacionada com a função $1/\epsilon(q)$, conforme fórmula abaixo:

$$\delta(r) = \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \left(1 - \frac{1}{\epsilon(q)} \right) \quad (3.1.1)$$

temos que a quantidade mencionada acima é esferossimétrica, então podemos escrever as seguintes relações:

$$d^3q = q^2 \sin(\theta) dq d\theta d\phi \quad (3.1.2)$$

$$\mathbf{q} \cdot \mathbf{r} = |\mathbf{q}| |\mathbf{r}| \cos(\theta) \quad (3.1.3)$$

Levando as expressões 3.1.2 e 3.1.3 em 3.1.1, e considerando os dominios em que as variáveis q , θ e ϕ operam, temos o seguinte:

$$\delta(r) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \int_0^\infty q^2 \sin(\theta) dq d\theta d\phi e^{i|\mathbf{q}||\mathbf{r}| \cos(\theta)} \left(1 - \frac{1}{\epsilon(q)}\right) \quad (3.1.4)$$

Resolvendo a expressão 3.1.4, com relação as variáveis θ e ϕ , obtemos:

$$\delta(r) = \frac{1}{2\pi^2 r} \int_0^\infty dq q \sin(qr) \left(1 - \frac{1}{\epsilon(q)}\right) \quad (3.1.5)$$

Reescrevendo 2.7.2.14, da seguinte forma:

$$\frac{1}{\epsilon(q, \omega)} = \frac{q^2}{q^2 + q_{TF}^2}, \quad (3.1.6)$$

e levando a mesma em 3.1.5, temos:

$$\delta(r) = \frac{1}{2\pi^2 r} \int_0^\infty dq q \sin(qr) \left(1 - \left(\frac{q^2}{q^2 + q_{TF}^2}\right)\right), \quad (3.1.7)$$

ou ainda

$$\delta(r) = \frac{1}{2\pi^2 r} \int_0^\infty dq q \sin(qr) \left(\frac{q_{TF}^2}{q^2 + q_{TF}^2}\right). \quad (3.1.8)$$

Resolvendo a integral que envolve a expressão 3.1.8, chegamos a seguinte forma para função densidade de blindagem:

$$\delta(r) = \frac{q_{TF}^2}{4\pi r} \exp(-q_{TF} r) \quad (3.1.9)$$

Observando a relação 3.1.9, conclui-se que a função densidade de blindagem diverge

na origem, o que é uma inconsistência física.

Quanto ao modelo de polo de plasmon, sua função estática apesar de produzir uma densidade de blindagem convergente, esta não produz oscilação de Friedel e nem satisfaz a regra de soma da compressibilidade, além de produzir inconsistência física no fator de estrutura, o qual será desenvolvido abaixo.

Para iniciarmos o nosso desenvolvimento, vamos reescrever expressão 2.7.4.4:

$$\varepsilon(q, \omega) = \frac{\omega_q^2 - \omega^2}{\omega_q^2 - \omega_p^2 - \omega^2}, \quad (3.1.10)$$

Fazendo:

$$\omega = \omega + i\delta, \quad (3.1.11)$$

e pondo esta expressão em 3.1.10, temos o seguinte:

$$\varepsilon(q, \omega) = \frac{\omega_q^2 - (\omega + i\delta)^2}{\omega_q^2 - \omega_p^2 - (\omega + i\delta)^2}. \quad (3.1.12)$$

Como nos interessa é o inverso da função acima, obtemos:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\varepsilon(q, \omega)} &= \frac{(\omega_q^2 - \omega_p^2 - \omega^2 + \delta^2)(\omega_q^2 - \omega^2 + \delta^2)}{(\omega_q^2 - \omega^2 + \delta^2)^2 + 4\omega^2\delta^2} + \\ &\quad \frac{4\omega^2\delta^2}{(\omega_q^2 - \omega^2 + \delta^2)^2 + 4\omega^2\delta^2} + \\ &\quad i\left\{ \frac{2\omega\delta(\omega_q^2 - \omega_p^2 - \omega^2 + \delta^2)}{(\omega_q^2 - \omega^2 + \delta^2)^2 + 4\omega^2\delta^2} - \frac{2\omega\delta(\omega_q^2 - \omega^2 + \delta^2)}{(\omega_q^2 - \omega^2 + \delta^2)^2 + 4\omega^2\delta^2} \right\}. \end{aligned} \quad (3.1.13)$$

Tomando o imaginário da função acima, temos:

$$\text{Im} \left(\frac{1}{\varepsilon(q, \omega)} \right) = \left(\frac{2\omega\delta(\omega_q^2 - \omega_p^2 - \omega^2 + \delta^2)}{(\omega_q^2 - \omega^2 + \delta^2)^2 + 4\omega^2\delta^2} - \frac{2\omega\delta(\omega_q^2 - \omega^2 + \delta^2)}{(\omega_q^2 - \omega^2 + \delta^2)^2 + 4\omega^2\delta^2} \right), \quad (3.1.14)$$

ou ainda

$$\text{Im} \left(\frac{1}{\epsilon(q, \omega)} \right) = -\frac{\omega_p^2 \delta}{2\omega_q^2 \left[(\omega^2 - \omega_q^2)^2 + \delta^2 \right]} + \frac{\omega_p^2 \delta}{2\omega_q^2 \left[(\omega^2 + \omega_q^2)^2 + \delta^2 \right]}. \quad (3.1.15)$$

Fazendo $\delta \rightarrow 0$, na expressão 3.1.15, podemos escrever que:

$$\text{Im} \left(\frac{1}{\epsilon(q, \omega)} \right) = -\frac{\pi\omega_p^2}{2\omega_q^2} \delta(\omega - \omega_q) + \frac{\pi\omega_p^2}{2\omega_q^2} \delta(\omega + \omega_q), \quad (3.1.16)$$

onde $\delta(\omega - \omega_q)$ e $\delta(\omega + \omega_q)$ são conhecidas como função delta de Dirac.

Reescrevendo a fórmula do fator de estrutura, temos:

$$S(q) = -\frac{1}{n\pi V(q)} \int_0^\infty d\omega \text{Im} \left(\frac{1}{\epsilon(q, \omega)} \right), \quad (3.1.17)$$

e substituindo nela, a expressão 3.1.16, obtemos:

$$S(q) = -\frac{1}{n\pi V(q)} \int_0^\infty d\omega \left(-\frac{\pi\omega_p^2}{2\omega_q^2} \delta(\omega - \omega_q) + \frac{\pi\omega_p^2}{2\omega_q^2} \delta(\omega + \omega_q) \right), \quad (3.1.19)$$

e lembrando que $V(q) = \frac{4\pi e^2}{q^2}$, então podemos reescrever 3.1.19, da seguinte maneira:

$$S(q) = \frac{q^2 \omega_p^2}{8n\pi e^2 \omega_q^2} \int_0^\infty \delta(\omega - \omega_q) d\omega - \frac{q^2 \omega_p^2}{8n\pi e^2 \omega_q^2} \int_0^\infty \delta(\omega + \omega_q) d\omega, \quad (3.1.20)$$

o qual temos:

$$S(q) = \frac{q^2 \omega_p^2}{8n\pi e^2 \omega_q^2}. \quad (3.1.21)$$

Substituindo 2.7.4.3 em 3.1.2.1, obtemos:

$$S(q) = \frac{q^2 \omega_p^2}{8n\pi e^2 \sqrt{\omega_p^2 + \frac{3}{5} (qV_F)^2 + \left(\frac{\hbar q^2}{2m} \right)^2}}, \quad (3.1.22)$$

ou ainda:

$$S(q) = \frac{m\omega_p^2}{4\pi n e^2} \left(1 + \frac{1}{3} \left(\frac{2mV_F}{\hbar q} \right)^2 + \left(\frac{2m\omega_p}{\hbar q^2} \right)^2 \right)^{-\frac{1}{2}}. \quad (3.1.23)$$

Desenvolvendo expressão 3.1.23 em série binomial, podemos escrever o seguinte:

$$S(q) = \left(1 - \frac{1}{6} \left(\frac{2mV_F}{\hbar q} \right)^2 - \frac{1}{2} \left(\frac{2m\omega_p}{\hbar q^2} \right)^2 + \dots \right), \quad (3.1.24)$$

pois $\omega_p = \frac{4\pi n e^2}{m}$.

Observando a expressão 3.1.24, vemos que $S(q) - 1$ cai com um valor proporcional a q^{-2} , sendo assim a função distribuição de pares divergirá na origem, o que leva a uma inconsistência física.

Pois sendo

$$g(r) = 1 + \frac{3}{2rK_F} \int_0^\infty dq \, q \sin(qr) (S(q) - 1), \quad (3.1.25)$$

então

$$g(0) = 1 + \frac{3}{2K_F} \int_0^\infty dq \, q^2 (S(q) - 1), \quad (3.1.26)$$

o qual divergirá a menos que $s(q)-1$ caia pelo menos tão rápido quanto q^{-4} .

Este modelo de função dielétrica também apresenta problema de inconsistência física quanto a regra da soma da compressibilidade.

Em vista das inconsistências física apresentadas por estes modelos analíticos, nós iremos apresentar um novo modelo para o fator de estrutura e para função densidade de blindagem, que satisfazem uma série de condições de contorno e cujos os parâmetros serão obtidos nas próximas seções.

3.2 Cálculo da densidade de carga de Blindagem.

Partindo do modelo proposto para a função $1/\epsilon(q)$ abaixo:

$$\frac{1}{\epsilon(x)} = 1 - \frac{2\pi F}{x} \left(\frac{\Upsilon}{\Upsilon^2 + (x - \Gamma)^2} - \frac{\Upsilon}{\Upsilon^2 + (x + \Gamma)^2} \right), \quad (3.2.1)$$

vamos calcular a função densidade de carga de blindagem, bem como o conjunto de parâmetros F , Υ e Γ , os quais serão obtidos através das condições de contorno.

Como duas condições de contorno estão relacionadas com a função densidade de carga de blindagem, então vamos calcular a função acima proposta.

Chamando de $\delta(r)$ a função densidade de carga de blindagem, o qual está relacionada com a função $1/\epsilon(q)$, conforme fórmula abaixo:

Recrevendo a expressão 3.1.5 abaixo:

$$\delta(r) = \frac{1}{2\pi^2 r} \int_0^\infty dq q \sin(qr) \left(1 - \frac{1}{\epsilon(q)} \right), \quad (3.2.2)$$

onde faremos as seguinte mudança de variável, considerando que $x = \frac{q}{K_F}$ e $z = \frac{r}{K_F}$ e levando estas quantidades na relação 3.2.3, temos:

$$\delta(z) = \frac{K_F^3}{2\pi^2 z} \int_0^\infty dx x \sin(xz) \left(1 - \frac{1}{\epsilon(x)} \right) \quad (3.2.3)$$

Chamando de $\rho(z) = \frac{\delta(z)}{K_F^3}$, podemos escrever o seguinte:

$$\rho(z) = \frac{1}{2\pi^2 z} \int_0^\infty dx x \sin(xz) \left(1 - \frac{1}{\epsilon(x)} \right). \quad (3.2.4)$$

Levando 3.2.1 em 3.2.4, obtemos :

$$\rho(z) = \frac{1}{2\pi^2 z} \int_0^\infty dx x \sin(xz) \left\{ 1 - \left[1 - \frac{2\pi F}{x} \left(\frac{\Upsilon}{\Upsilon^2 + (x - \Gamma)^2} - \frac{\Upsilon}{\Upsilon^2 + (x + \Gamma)^2} \right) \right] \right\} \quad (3.2.5)$$

ou

$$\begin{aligned} \rho(z) = & \frac{1}{2\pi^2 z} \int_0^\infty 2\pi F \frac{\Upsilon x \sin(xz) dx}{(\Upsilon^2 + (x - \Gamma)^2)} - \\ & \frac{1}{2\pi^2 z} \int_0^\infty 2\pi F \frac{\Upsilon x \sin(xz) dx}{(\Upsilon^2 + (x + \Gamma)^2)} \end{aligned} \quad (3.2.6)$$

Lembrando que estas integrais estão resolvidas no apêndice A, então podemos escrever a expressão para a função densidade de blindagem:

$$\rho(z) = \frac{F \exp(-\Upsilon z) \sin(\Gamma z)}{z} \quad (3.2.7)$$

Obtida a expressão para a densidade de blindagem, vamos na seção desenvolver as equações para obtenção dos parâmetros, F , Υ e Γ .

3.3 Cálculos dos parâmetros F , Υ e Γ

Observando o conjunto de parâmetros acima, vemos a necessidade de obter três equações de contorno. Para desenvolvermos a primeira condição de contorno, vamos reescrever a função $1/\epsilon(q)$ da seguinte maneira:

$$\frac{1}{\epsilon(x)} = \frac{(\Upsilon^2 + \Gamma^2 - 2x\Gamma + x^2)(\Upsilon^2 + \Gamma^2 + 2x\Gamma + x^2)}{(\Upsilon^2 + \Gamma^2 - 2x\Gamma + x^2)(\Upsilon^2 + \Gamma^2 + 2x\Gamma + x^2) - 8\pi F \Upsilon \Gamma}, \quad (3.3.1)$$

onde a sua inversa é:

$$\epsilon(x) = \frac{(\Upsilon^2 + \Gamma^2 - 2x\Gamma + x^2)(\Upsilon^2 + \Gamma^2 + 2x\Gamma + x^2) - 8\pi F \Upsilon \Gamma}{(\Upsilon^2 + \Gamma^2 - 2x\Gamma + x^2)(\Upsilon^2 + \Gamma^2 + 2x\Gamma + x^2)}, \quad (3.3.2)$$

ou

$$\epsilon(x) = 1 - \frac{8\pi F \Upsilon \Gamma}{(\Upsilon^2 + \Gamma^2 - 2x\Gamma + x^2)(\Upsilon^2 + \Gamma^2 + 2x\Gamma + x^2)} \quad (3.3.3)$$

Desenvolvendo a expressão 3.3.3, em série binomial e desprezando os termos acima de ordem dois, temos:

$$\epsilon(x) = 1 + \frac{8\pi F \Upsilon \Gamma}{(\Upsilon^2 + \Gamma^2)^2 + 2x^2 (\Upsilon^2 - \Gamma^2)}. \quad (3.3.4)$$

Para obtermos a condição de contorno, será necessário continuarmos a desenvolver em série binomial a expressão 3.3.4, a qual pode ser escrita da seguinte maneira:

$$\epsilon(x) = 1 + \frac{8\pi F \Upsilon \Gamma}{2x^2 (\Upsilon^2 - \Gamma^2)} \left(1 + \frac{(\Upsilon^2 + \Gamma^2)^2}{2x^2 (\Upsilon^2 - \Gamma^2)} \right)^{-1}, \quad (3.3.5)$$

ou ainda

$$\epsilon(x) = 1 + \frac{4\pi F \Upsilon \Gamma}{x^2 (\Upsilon^2 - \Gamma^2)} - \frac{2\pi F \Upsilon \Gamma (\Upsilon^2 + \Gamma^2)^2}{x^4 (\Upsilon^2 - \Gamma^2)^2}. \quad (3.3.6)$$

Substituindo $x = \frac{q}{K_F}$, na expressão 3.3.6, temos:

$$\epsilon(q) = 1 + \frac{4\pi K_F^2 F \Upsilon \Gamma}{(\Upsilon^2 - \Gamma^2) q^2} - \frac{2\pi K_F^4 F \Upsilon \Gamma (\Upsilon^2 + \Gamma^2)^2}{(\Upsilon^2 - \Gamma^2)^2 q^4}. \quad (3.3.7)$$

Como a regra de soma da compressibilidade é:

$$\epsilon(q) = 1 + \frac{q_{TF}^2}{q^2} \frac{K}{K_F}, \quad (3.3.8)$$

onde igualaremos os termos de ordem dois das expressões 3.3.7 e 3.3.8, das quais temos a primeira condição de contorno:

$$\frac{4\pi K_F^2 F \Upsilon \Gamma}{(\Upsilon^2 - \Gamma^2)} = q_{TF}^2 \frac{K}{K_F}. \quad (3.3.9)$$

Para calcularmos a segunda condição de contorno, vamos recorrer a lei da conservação da carga, qual é a seguinte:

$$4\pi \int_0^\infty dr \, r^2 \delta(r) = 1. \quad (3.3.10)$$

Lembrando que $z = rK_F$ e $\rho(z) = \frac{\delta(z)}{K_F^3}$, então podemos reescrever a lei da conservação da carga da seguinte maneira:

$$4\pi \int_0^\infty dz z^2 \rho(z) = 1 \quad (3.3.11)$$

Levando a expressão 3.2.7 em 3.3.11, temos o seguinte:

$$4\pi \int_0^\infty dz z^2 \frac{F \exp(-\Upsilon z) \sin(\Gamma z)}{z} = 1. \quad (3.3.12)$$

Resolvendo a equação 3.3.12, temos a seguinte condição de contorno:

$$\frac{8\pi F \Upsilon \Gamma}{(\Upsilon^2 + \Gamma^2)^2} = 1. \quad (3.3.13)$$

Para obtermos a última condição de contorno, vamos recorrer a expressão de Kato, a qual está descrita abaixo:

$$\left. \frac{d\delta(r)}{dr} \right|_{r=0} = -\frac{2}{a_0} \delta(0). \quad (3.3.14)$$

Usando as relações $z = rK_F$ e $\rho(z) = \frac{\delta(z)}{K_F^3}$, podemos reescrever a condição de Kato da seguinte maneira:

$$\left. \frac{d\rho(z)}{dz} \right|_{z=0} = -\frac{2}{a_0 K_F} \rho(0), \quad (3.3.15)$$

onde $a_0 K_F = \left(\frac{9\pi}{4}\right)^{\frac{1}{3}} \frac{1}{r_s}$.

Observando a expressão 3.3.15, vemos a necessidade de calcular a derivada de $\rho(z)$, o qual será expressa abaixo:

$$\frac{d\rho(z)}{dz} = \frac{F \exp(-\Upsilon z) \sin(\Gamma z)}{z^2} + F \Upsilon \frac{\exp(-\Upsilon z) \sin(\Gamma z)}{z} - F \Gamma \frac{\exp(-\Upsilon z) \cos(\Gamma z)}{z}. \quad (3.3.16)$$

Levando as expressões 3.3.16 e 3.2.7 em 3.3.15 e fazendo a variável z igual a zero,

obteremos a seguinte condição de contorno:

$$F \Upsilon \Gamma = 2 \left(\frac{4}{9\pi} \right)^{\frac{1}{3}} r_s F \Gamma, \quad (3.3.17)$$

ou

$$\Upsilon = 2 \left(\frac{4}{9\pi} \right)^{\frac{1}{3}} r_s. \quad (3.3.18)$$

Igualando as expressões 3.3.9 e 3.3.13, podemos escrever que:

$$\Gamma = \pm \sqrt[2]{ - \left(4 \left(\frac{4}{9\pi} \right)^{\frac{2}{3}} r_s^2 + q_{TF}^4 \frac{K^2}{K_F^6} \right) \pm \sqrt[2]{ q_{TF}^4 \frac{K^2}{K_F^6} + 16 \left(\frac{4}{9\pi} \right)^{\frac{2}{3}} r_s^2 q_{TF}^4 \frac{K^2}{K_F^6} } }. \quad (3.3.19)$$

Levando as relações 3.3.18 e 3.3.19 em 3.3.9, temos:

$$F = \pm q_{TF}^4 \frac{K^2}{K_F^6} \frac{\left(8 \left(\frac{4}{9\pi} \right)^{\frac{2}{3}} r_s^2 + q_{TF}^4 \frac{K^2}{K_F^6} \pm \sqrt[2]{ q_{TF}^4 \frac{K^2}{K_F^6} + 16 \left(\frac{4}{9\pi} \right)^{\frac{2}{3}} r_s^2 q_{TF}^4 \frac{K^2}{K_F^6} } \right)}{8 \left(\frac{4}{9\pi} \right)^{\frac{1}{3}} r_s \sqrt[2]{ - \left(4 \left(\frac{4}{9\pi} \right)^{\frac{2}{3}} r_s^2 + q_{TF}^4 \frac{K^2}{K_F^6} \right) \pm \sqrt[2]{ q_{TF}^4 \frac{K^2}{K_F^6} + 16 \left(\frac{4}{9\pi} \right)^{\frac{2}{3}} r_s^2 q_{TF}^4 \frac{K^2}{K_F^6} } } } \quad (3.3.20)$$

3.4 Cálculo do Sigma (σ)

Para o cálculo da constante sigma (σ), usada na determinação dos parâmetros que compõem o fator de estrutura e a função distribuição de pares, usaremos a aproximação RPA partindo da expressão mais geral:

$$\epsilon(q, \omega) = 1 - \frac{V_q P^0(q, \omega)}{1 + V_q G(q) P^0(q, \omega)} \quad (3.4.1)$$

onde

$$\epsilon^0(q, \omega) = 1 - V_q P^0(q, \omega) \quad (3.4.2)$$

é a função dielétrica RPA e $P^0(q, \omega)$ é a polarizabilidade de Lindhardt.

Da expressão 3.4.2, vamos isolar a quantidade $P^0(q, \omega)$, como está desenvolvido abaixo:

$$P^0(q, \omega) = \frac{1 - \epsilon^0(q, \omega)}{V_q} \quad (3.4.3)$$

e substituindo em 3.4.1, obtemos o seguinte:

$$\epsilon(q, \omega) = 1 - \frac{1 - \epsilon^0(q, \omega)}{1 + G(q)(1 - \epsilon^0(q, \omega))}. \quad (3.4.4)$$

Considerando que:

$$\epsilon^0(q, \omega) = \epsilon_1^0(q, \omega) + i\epsilon_2^0(q, \omega), \quad (3.4.5)$$

e substituindo em 3.4.4, chegamos à expressão:

$$\epsilon(q, \omega) = 1 - \frac{(1 - \epsilon_1^0(q, \omega) - i\epsilon_2^0(q, \omega))}{1 + G(q)(1 - \epsilon_1^0(q, \omega) - i\epsilon_2^0(q, \omega))}, \quad (3.4.6)$$

ou

$$\epsilon(q, \omega) = 1 - \frac{(1 - \epsilon_1^0(q, \omega) - i\epsilon_2^0(q, \omega))}{(1 + G(q)(1 - \epsilon_1^0(q, \omega)) - iG(q)\epsilon_2^0(q, \omega))}. \quad (3.4.7)$$

Multiplicando a expressão 3.4.7, pelo conjugado do denominador, temos o seguinte:

$$\begin{aligned} \epsilon(q, \omega) = & 1 - \frac{(1 - \epsilon_1^0(q, \omega))(1 + G(q)(1 - \epsilon_1^0(q, \omega))) + G(q)(\epsilon_2^0(q, \omega))^2}{[(1 + G(q)(1 - \epsilon_1^0(q, \omega)))^2 + [G(q)\epsilon_2^0(q, \omega)]^2]} + \\ & \frac{i[(1 - \epsilon_1^0(q, \omega))G(q)\epsilon_2^0(q, \omega) - \epsilon_2^0(q, \omega)(1 + G(q)(1 - \epsilon_1^0(q, \omega)))]}{[(1 + G(q)(1 - \epsilon_1^0(q, \omega)))^2 + [G(q)\epsilon_2^0(q, \omega)]^2]} \end{aligned} \quad (3.4.8)$$

Supondo que:

$$\epsilon(q, \omega) = \epsilon_1(q, \omega) + i\epsilon_2(q, \omega), \quad (3.4.9)$$

e igualando as partes real e imaginária, temos o seguinte:

$$\epsilon_1(q, \omega) = 1 - \frac{(1 - \epsilon_1^0(q, \omega))(1 + G(q)(1 - \epsilon_1^0(q, \omega))) + G(q)(\epsilon_2^0(q, \omega))^2}{[(1 + G(q)(1 - \epsilon_1^0(q, \omega)))^2 + [G(q)\epsilon_2^0(q, \omega)]^2]} \quad (3.4.10)$$

$$\epsilon_2(q, \omega) = -\frac{[(1 - \epsilon_1^0(q, \omega))G(q)\epsilon_2^0(q, \omega) - \epsilon_2^0(q, \omega)(1 + G(q)(1 - \epsilon_1^0(q, \omega)))]}{[(1 + G(q)(1 - \epsilon_1^0(q, \omega)))^2 + [G(q)\epsilon_2^0(q, \omega)]^2]} \quad (3.4.11)$$

onde $\epsilon_1^0(q, \omega)$ e $\epsilon_2^0(q, \omega)$, são dados explicitamente por:

$$\begin{aligned} \epsilon_1^0(q, \omega) = & 1 + \frac{1}{2} \frac{q_{TF}^2}{q^2} \left\{ 1 + \frac{m^2}{2K_F q^3} [4E_F \epsilon_q - (\epsilon_q + \omega)^2] \ln \left| \frac{\epsilon_q + qV_F + \omega}{\epsilon_q - qV_F + \omega} \right| + \right. \\ & \left. \frac{m^2}{2K_F q^3} [4E_F \epsilon_q - (\epsilon_q - \omega)^2] \ln \left| \frac{\epsilon_q + qV_F - \omega}{\epsilon_q - qV_F - \omega} \right| \right\} \end{aligned} \quad (3.4.12)$$

com $q_{TF}^2 = \frac{6\pi e^2 \eta}{E_F}$, e

$$\epsilon_2^0(q, \omega) = \frac{e^2 m}{q^3} [\Theta(K_F - P_1)(K_F^2 - P_1^2) - \Theta(K_F - P_2)(K_F^2 - P_2^2)], \quad (3.4.13)$$

com $P_1 = \frac{m}{q} |\omega - \epsilon_q|$, $P_2 = \frac{m}{q} |\omega + \epsilon_q|$ e $\Theta(K_F - P_1)$ representa função degrau de Heaviside.

Restringindo o cálculo à aproximação RPA na qual $G(q) = 0$ e tomando o valor $q \rightarrow 0$, tem-se que $\epsilon_2^0(q, \omega) \rightarrow 0$, e $\epsilon_1^0(q, \omega)$, pode ser escrito da seguinte maneira:

$$\epsilon_1^0(q, \omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \left\{ 1 + \frac{1}{\omega^2} \left[\frac{3}{5} (qV_F)^2 - \epsilon_q^2 \right] \right\}, \quad (3.4.14)$$

com $\omega_p^2 = \frac{4\pi\eta e^2}{m}$.

Reescrevendo a fórmula do fator de estrutura abaixo:

$$S(q) = -\frac{1}{n\pi V_q} \int_0^\infty d\omega \operatorname{Im} \left(\frac{1}{\epsilon(q, \omega)} \right), \quad (3.4.15)$$

com $V_q = \frac{4\pi e^2}{q^2}$, onde temos a expressão 3.4.5, qual está reescrita da seguinte forma:

$$\frac{1}{\epsilon(q, \omega)} = \frac{\epsilon_1(q\omega) - i\epsilon_2(q, \omega)}{\epsilon_1(q\omega)^2 + \epsilon_2(q, \omega)^2}, \quad (3.4.16)$$

onde seu imaginário é:

$$\operatorname{Im} \left(\frac{1}{\epsilon(q, \omega)} \right) = -\frac{\epsilon_2(q, \omega)}{\epsilon_1(q\omega)^2 + \epsilon_2(q, \omega)^2}, \quad (3.4.17)$$

o qual é levado a expressão 3.4.15, temos:

$$S(q) = \frac{1}{n\pi V_q} \int_0^\infty d\omega \frac{\epsilon_2(q, \omega)}{\epsilon_1(q\omega)^2 + \epsilon_2(q, \omega)^2}, \quad (3.4.18)$$

assumindo $q \rightarrow 0$, então teremos o seguinte:

$$S(q) = \frac{1}{nV_q} \int_0^\infty d\omega \delta(\epsilon_1(q\omega)) = \frac{1}{nV_q} \frac{\int_0^\infty d\omega \delta(\omega - \omega_0)}{\left| \frac{\partial \epsilon_1(q\omega)}{\partial \omega} \right|_{\omega=\omega_0}} = \frac{1}{nV_q \left| \frac{\partial \epsilon_1(q\omega)}{\partial \omega} \right|_{\omega=\omega_0}}, \quad (3.4.19)$$

onde $\epsilon_1(q\omega_0) = 0$.

Fazendo $\omega = \omega_0$ em 3.4.14, obtemos:

$$\epsilon_1^0(q, \omega_0) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega_0^2} \left\{ 1 + \frac{1}{\omega_0^2} \left[\frac{3}{5} (qV_F)^2 - \epsilon_q^2 \right] \right\}, \quad (3.4.20)$$

e em seguida, igualando a relação 3.4.20 à zero, temos:

$$1 - \frac{\omega_p^2}{\omega_0^2} \left\{ 1 + \frac{1}{\omega_0^2} \left[\frac{3}{5} (qV_F)^2 - \epsilon_q^2 \right] \right\} = 0, \quad (3.4.21)$$

ou

$$\omega_0^4 - \omega_p^2 \omega_0^2 - \omega_p^2 \left[\frac{3}{5} (qV_F)^2 - \epsilon_q^2 \right] = 0, \quad (3.4.22)$$

cuja a resolução é:

$$\omega_0 = \pm \sqrt{\frac{1}{2}(\omega_p^2 \pm \sqrt{\omega_p^4 + 4\omega_p^2 \left[\frac{3}{5} (qV_F)^2 - \epsilon_q^2 \right]}),} \quad (3.4.23)$$

admitindo que as raízes são reais, como também usando aproximação binomial, podemos escrever o seguinte:

$$\omega_0 = \omega_p \left(1 + \frac{3}{10} \frac{q^2 V_F^2}{\omega_p^2} \right). \quad (3.4.24)$$

Derivando a expressão 3.4.14, obtemos:

$$\frac{d\epsilon_1^0(q, \omega)}{d\omega} = \frac{2\omega_p^2}{\omega^3} + \frac{4\omega_p^2}{\omega^5} \left[\frac{3}{5} (qV_F)^2 - \epsilon_q^2 \right], \quad (3.4.25)$$

e substituindo 3.4.24 em 3.4.25, obtemos:

$$\frac{d\epsilon_1^0(q, \omega_0)}{d\omega} = \frac{2}{\omega_p}. \quad (3.4.26)$$

Levando 3.4.26 em 3.4.19, chegamos a fórmula para o fator de estrutura:

$$S(q) = \frac{q^2 \omega_p}{2\eta 4\pi e^2}, \quad (3.4.27)$$

e lembrando que $q = xK_F$ e também podemos escrever que $\eta 4\pi e^2 = m\omega_p^2$ e levando estas quantidades em 3.4.27, temos:

$$S(x) = \frac{K_F^2}{2m\omega_p} x^2, \quad (3.4.28)$$

onde $\frac{K_F^2}{2m} = E_F = \left(\frac{9\pi}{4}\right)^{\frac{2}{3}} \frac{1}{r_s^2} R_y$ e $\omega_p = \left(\frac{12}{r_s^3}\right)^{\frac{1}{2}} R_y$.

Pondo estas quantidades mencionadas acima em 3.4.28, obtemos:

$$S(x) = \left(\frac{9\pi}{4}\right)^{\frac{2}{3}} \frac{1}{(12r_s)^{\frac{1}{2}}} x^2, \quad (3.4.29)$$

e como $S(x) = \sigma x^2$, onde podemos escrever que:

$$\sigma = \left(\frac{9\pi}{4}\right)^{\frac{2}{3}} \frac{1}{(12r_s)^{\frac{1}{2}}}. \quad (3.4.30)$$

3.5 Modelo para o Fator de Estrutura

Apresentaremos nesta seção, o seguinte modelo matemático para o fator de estrutura:

$$S(x) = 1 - \frac{2\alpha}{3\pi x} \left(\frac{\beta}{\beta^2 + (x - \gamma)^2} - \frac{\beta}{\beta^2 + (x + \gamma)^2} \right), \quad (3.5.1)$$

onde temos $x = \frac{q}{K_F}$ e o conjunto de parâmetros α, β e γ , os quais serão determinados através das condições de contorno, que envolve a função acima.

Observando a função proposta, necessitamos um conjunto de três equações para obter as variáveis α, β e γ , implicando assim três condições de contorno envolvendo a função do fator de estrutura.

Duas condições de contorno envolvendo o fator de estrutura, podem ser obtidos desenvolvendo a função em série, para pequenos valores de x , onde podemos escrever o seguinte:

$$S(x) = 1 - \frac{2\alpha\beta}{3\pi x} \left(\frac{1}{(\beta^2 + \gamma^2) \left(1 + \frac{2\gamma x}{(\beta^2 + \gamma^2)} + \frac{x^2}{(\beta^2 + \gamma^2)} \right)} - \frac{1}{(\beta^2 + \gamma^2) \left(1 - \frac{2\gamma x}{(\beta^2 + \gamma^2)} + \frac{x^2}{(\beta^2 + \gamma^2)} \right)} \right) \quad (3.5.2)$$

ou

$$S(x) = 1 - \frac{2\alpha\beta}{3\pi x (\beta^2 + \gamma^2)} \left[\left(1 + \frac{2\gamma x}{(\beta^2 + \gamma^2)} + \frac{x^2}{(\beta^2 + \gamma^2)} \right)^{-1} - \left(1 - \frac{2\gamma x}{(\beta^2 + \gamma^2)} + \frac{x^2}{(\beta^2 + \gamma^2)} \right)^{-1} \right] \quad (3.5.3)$$

ou ainda

$$S(x) = 1 - \frac{2\alpha\beta}{3\pi x (\beta^2 + \gamma^2)} \left\{ \left[1 - \left(-\frac{2\gamma x}{(\beta^2 + \gamma^2)} - \frac{x^2}{(\beta^2 + \gamma^2)} \right) \right]^{-1} - \left[1 - \left(\frac{2\gamma x}{(\beta^2 + \gamma^2)} - \frac{x^2}{(\beta^2 + \gamma^2)} \right) \right]^{-1} \right\} \quad (3.5.4)$$

Usando a seguinte expansão :

$$(1 - t)^{-1} = 1 + t + t^2 + t^3 + \dots, \quad (3.5.5)$$

em 3.5.4, obtemos o seguinte:

$$S(x) = 1 - \frac{8\alpha\beta\gamma}{3\pi (\beta^2 + \gamma^2)^2} \left\{ \left[1 + \left(-\frac{2\gamma x}{(\beta^2 + \gamma^2)} - \frac{x^2}{(\beta^2 + \gamma^2)} \right) + \left(-\frac{2\gamma x}{(\beta^2 + \gamma^2)} - \frac{x^2}{(\beta^2 + \gamma^2)} \right)^2 + \left(-\frac{2\gamma x}{(\beta^2 + \gamma^2)} - \frac{x^2}{(\beta^2 + \gamma^2)} \right)^3 + \dots \right] - \left[1 + \left(\frac{2\gamma x}{(\beta^2 + \gamma^2)} - \frac{x^2}{(\beta^2 + \gamma^2)} \right) + \left(\frac{2\gamma x}{(\beta^2 + \gamma^2)} - \frac{x^2}{(\beta^2 + \gamma^2)} \right)^2 + \left(\frac{2\gamma x}{(\beta^2 + \gamma^2)} - \frac{x^2}{(\beta^2 + \gamma^2)} \right)^3 + \dots \right] \right\}, \quad (3.5.6)$$

ou seja

$$S(x) = 1 - \frac{8\alpha\beta\gamma}{3\pi(\beta^2 + \gamma^2)^2} + \frac{16\alpha\beta\gamma(\beta^2 - \gamma^2)}{3\pi(\beta^2 + \gamma^2)^4}x^2 + \dots \quad (3.5.7)$$

Da expressão 3.5.7, temos as seguintes condições: onde a primeira refere-se à função $S(x)$, o qual é nula quando x tende a zero, o que nos permite escrever:

$$\frac{8\alpha\beta\gamma}{3\pi(\beta^2 + \gamma^2)^2} = 1, \quad (3.5.8)$$

e a segunda condição, decorre que o termo em segundo grau da expressão 3.6 é igual σ , sendo assim podemos escrever que:

$$\frac{16\alpha\beta\gamma(\beta^2 - \gamma^2)}{3\pi(\beta^2 + \gamma^2)^4} = \sigma. \quad (3.5.9)$$

A outra condição de contorno, está relacionado com a condição de Kimball, o qual será deduzido seção seguinte.

3.6 Obtenção da função de distribuição de pares

Nesta seção vamos obter a função distribuição de pares a partir do modelo proposto para o fator de estrutura. Para o desenvolvimento deste cálculo vamos recorrer a expressão 2.5.2, o qual é a seguinte:

$$g(z) = 1 + \frac{3}{2z} \int_0^\infty dx x \sin(zx) [S(x) - 1], \quad (3.6.1)$$

onde $z = rK_F$.

Levando a função do fator de estrutura em na expressão 3.6.1, temos o seguinte:

$$g(z) = 1 + \frac{3}{2z} \int_0^\infty dx x \sin(zx) \left[1 - \frac{2\alpha}{3\pi x} \left(\frac{\beta}{\beta^2 + (x - \gamma)^2} - \frac{\beta}{\beta^2 + (x + \gamma)^2} \right) - 1 \right] \quad (3.6.2)$$

ou seja

$$g(z) = 1 - \frac{\alpha\beta}{\pi z} \int_0^\infty \frac{x \sin(zx) dx}{(\beta^2 + (x - \gamma)^2)} + \frac{\alpha\beta}{\pi z} \int_0^\infty \frac{x \sin(zx) dx}{(\beta^2 + (x + \gamma)^2)}. \quad (3.6.2)$$

Como as integrais acima estão resolvidas no apêndice A, então podemos escrever que:

$$g(z) = 1 - \frac{\alpha \exp(-\beta z) \sin(\gamma z)}{z}. \quad (3.6.3)$$

Obtida a função $g(z)$, podemos desenvolver a terceira condição de contorno, usando a relação de kimball, desenvolvido no capítulo anterior, o qual será reescrita abaixo:

$$\frac{dg(z)}{dz} \Big|_{z=0} = \frac{g(z)}{K_F a_0} \Big|_{z=0}, \quad (3.6.4)$$

onde $K_F a_0 = \left(\frac{9\pi}{4}\right)^{\frac{1}{3}} \frac{1}{r_s}$.

Observando a expressão 3.6.3, vemos a necessidade de calcular a derivada de $G(z)$, o qual será expressa abaixo:

$$\frac{dg(z)}{dz} = \alpha \frac{\exp(-\beta z) \sin(\gamma z)}{z^2} + \alpha\beta \frac{\exp(-\beta z) \sin(\gamma z)}{z} - \alpha\gamma \frac{\exp(-\beta z) \cos(\gamma z)}{z}. \quad (3.6.5)$$

Levando as expressões 3.6.3 e 3.6.5 em 3.6.4 e fazendo a variável z igual zero, obteremos a terceira condição de contorno, o qual está relacionada abaixo

$$\alpha\beta\gamma = \left(\frac{4}{9\pi}\right)^{\frac{1}{3}} r_s (1 - \alpha\gamma). \quad (3.6.6)$$

Com a obtenção das três condições de contorno, podemos achar os parâmetros α, β e γ , cujos os valores serão obtidos na próxima seção.

3.7 Resolução do sistema de equações para obtenção dos parâmetros para o fator de estrutura.

Antes de obter os parâmetros, vamos reunir as três equações em um sistema abaixo:

$$\begin{cases} \frac{8\alpha\beta\gamma}{3\pi(\beta^2+\gamma^2)^2} = 1 \\ \frac{16\alpha\beta\gamma(\beta^2-\gamma^2)}{3\pi(\beta^2+\gamma^2)^4} = \sigma \\ \alpha\beta\gamma = \left(\frac{4}{9\pi}\right)^{\frac{1}{3}} r_s (1 - \alpha\gamma). \end{cases} \quad (3.7.1)$$

Chamando $\frac{8\alpha\beta\gamma}{3\pi} = t^4$, então podemos reescrever o sistema de equações 3.7.1 da seguinte maneira:

$$\begin{cases} \frac{t^4}{(\beta^2+\gamma^2)^2} = 1 \\ \frac{2t^4(\beta^2-\gamma^2)}{(\beta^2+\gamma^2)^4} = \sigma \\ \frac{3\pi t^4}{8} = \left(\frac{4}{9\pi}\right)^{\frac{1}{3}} r_s \left(1 - \frac{3\pi t^4}{8\beta}\right). \end{cases} \quad (3.7.2)$$

Resolvendo o sistema 3.7.2, podemos escrever as seguintes relações para os parâmetros α, β e γ , em função da variável “t”:

$$\beta = -\frac{3\pi t^4 \left(\frac{4}{9\pi}\right)^{\frac{1}{3}} r_s}{\left(3\pi t^4 - 8 \left(\frac{4}{9\pi}\right)^{\frac{1}{3}} r_s\right)} \quad (3.7.3)$$

$$\gamma = \sqrt[2]{\frac{9\pi^2 t^{10} - 9\pi^2 \left(\left(\frac{4}{9\pi}\right)^{\frac{1}{3}} r_s\right)^2 t^8 - 48\pi \left(\left(\frac{4}{9\pi}\right)^{\frac{1}{3}} r_s\right) t^6 + 64 \left(\left(\frac{4}{9\pi}\right)^{\frac{1}{3}} r_s\right)^2 t^2}{9\pi^2 t^8 - 48\pi \left(\left(\frac{4}{9\pi}\right)^{\frac{1}{3}} r_s\right) t^4 + 64 \left(\left(\frac{4}{9\pi}\right)^{\frac{1}{3}} r_s\right)^2}} \quad (3.7.4)$$

$$\alpha = -\frac{\left(3\pi t^4 - 8 \left(\frac{4}{9\pi}\right)^{\frac{1}{3}} r_s\right) \sqrt[2]{9\pi^2 t^8 - 48\pi \left(\left(\frac{4}{9\pi}\right)^{\frac{1}{3}} r_s\right) t^4 + 64 \left(\left(\frac{4}{9\pi}\right)^{\frac{1}{3}} r_s\right)^2}}{\left(\left(\frac{4}{9\pi}\right)^{\frac{1}{3}} r_s\right) \sqrt[2]{9\pi^2 t^{10} - 9\pi^2 \left(\left(\frac{4}{9\pi}\right)^{\frac{1}{3}} r_s\right)^2 t^8 - 48\pi \left(\left(\frac{4}{9\pi}\right)^{\frac{1}{3}} r_s\right) t^6 + 64 \left(\left(\frac{4}{9\pi}\right)^{\frac{1}{3}} r_s\right)^2 t^2}}. \quad (3.7.5)$$

Enquanto para variável “t”, obtemos a seguinte equação abaixo:

$$\frac{3\pi \left(\left(\frac{4}{9\pi}\right)^{\frac{1}{3}} r_s\right) t^4}{\left(3\pi t^4 - 8 \left(\frac{4}{9\pi}\right)^{\frac{1}{3}} r_s\right)} = \pm \sqrt[2]{\frac{2+\sigma}{4}}, \quad (3.7.6)$$

onde desenvolvendo a mesma escrita acima, podemos obter dois polinômio incompleto do quarto grau, os quais são:

$$t^4 - \left(\frac{4}{9\pi}\right)^{\frac{1}{3}} \sqrt[2]{\frac{4}{2+\sigma}} r_s t^3 - \frac{8}{3\pi} \left(\frac{4}{9\pi}\right)^{\frac{1}{3}} r_s = 0 \quad (3.7.7)$$

ou

$$t^4 + \left(\frac{4}{9\pi}\right)^{\frac{1}{3}} \sqrt[2]{\frac{4}{2+\sigma}} r_s t^3 - \frac{8}{3\pi} \left(\frac{4}{9\pi}\right)^{\frac{1}{3}} r_s = 0. \quad (3.7.8)$$

Fazendo a mudança de variável, onde $t = y - \frac{1}{4} \left(\frac{4}{9\pi}\right)^{\frac{1}{3}} \sqrt[2]{\frac{4}{2+\sigma}} r_s$, obteremos o seguinte:

$$y^4 - \frac{1}{(2+\sigma)} \sqrt[3]{\frac{2}{3\pi^2}} r_s^2 y^2 + \frac{4}{9\pi} \sqrt[3]{\frac{1}{(2+\sigma)^2}} r_s^3 y - \frac{1}{6\pi (2+\sigma)^2} \sqrt[3]{\frac{1}{18\pi}} r_s^4 - \frac{8}{3\pi} \left(\frac{4}{9\pi}\right)^{\frac{1}{3}} r_s = 0 \quad (3.7.9)$$

ou

$$y^4 - \frac{1}{(2+\sigma)} \sqrt[3]{\frac{2}{3\pi^2}} r_s^2 y^2 - \frac{4}{9\pi} \sqrt[3]{\frac{1}{(2+\sigma)^2}} r_s^3 y - \frac{1}{6\pi(2+\sigma)^2} \sqrt[3]{\frac{1}{18\pi}} r_s^4 - \frac{8}{3\pi} \left(\frac{4}{9\pi}\right)^{\frac{1}{3}} r_s = 0 \quad (3.7.10)$$

Introduzindo a variável “x”, nas equações 3.7.8e 3.7.9 e fazendo em seguida algumas manipulações, chegamos as seguintes igualdades abaixo:

$$\left(y^2 - \frac{r_s^2}{(2+\sigma)} \sqrt[3]{\frac{2}{3\pi^2}} + x\right)^2 = \left(-\frac{r_s^2}{(2+\sigma)} \sqrt[3]{\frac{2}{3\pi^2}} + 2x\right) y^2 - \frac{4}{9\pi} \sqrt[3]{\frac{1}{(2+\sigma)^2}} r_s^3 y + \frac{13}{6\pi} \frac{1}{(2+\sigma)^2} \sqrt[3]{\frac{1}{18\pi}} r_s^4 - \frac{8}{(2+\sigma)} \sqrt[3]{\frac{2}{3\pi^2}} r_s^2 x + x^2 + \frac{8}{3\pi} \left(\frac{4}{9\pi}\right)^{\frac{1}{3}} r_s^2 \quad (3.7.11)$$

ou

$$\left(y^2 - \frac{r_s^2}{(2+\sigma)} \sqrt[3]{\frac{2}{3\pi^2}} + x\right)^2 = \left(-\frac{r_s^2}{(2+\sigma)} \sqrt[3]{\frac{2}{3\pi^2}} + 2x\right) y^2 + \frac{4}{9\pi} \sqrt[3]{\frac{1}{(2+\sigma)^2}} r_s^3 y + \frac{13}{6\pi} \frac{1}{(2+\sigma)^2} \sqrt[3]{\frac{1}{18\pi}} r_s^4 - \frac{8}{(2+\sigma)} \sqrt[3]{\frac{2}{3\pi^2}} r_s^2 x + x^2 + \frac{8}{3\pi} \left(\frac{4}{9\pi}\right)^{\frac{1}{3}} r_s^2 \quad (3.7.12)$$

Tomando o $\Delta = 0$, do lado direito das equações 3.7.11 e 3.7.12, obtemos o seguinte polinômio do terceiro grau em “x” :

$$x^3 - \frac{5}{(2+\sigma)} \sqrt[3]{\frac{1}{12\pi^2}} r_s^2 x^2 + \left[\frac{8}{3\pi} \sqrt[3]{\frac{4}{9\pi}} r_s \left(1 + \frac{25r_s^3}{32(2+\sigma)^2}\right) \right] x - \frac{8}{9\pi^2} \frac{r_s^3}{(2+\sigma)} - \frac{125r_s^6}{324\pi^2 (2+\sigma)^3} = 0$$

Usando a relação $x = z + \frac{5}{3} \sqrt[3]{\frac{1}{12\pi^2}} \frac{r_s^2}{(2+\sigma)}$, chegamos a seguinte equação:

$$z^3 + \frac{8}{3\pi} \left(\frac{4}{9\pi}\right)^{\frac{1}{3}} r_s z + \frac{16}{27\pi^2} \frac{r_s^3}{(2+\sigma)} = 0. \quad (3.7.14)$$

Resolvendo a equação 3.7.13, tivemos como solução:

$$\begin{aligned}
z = & \frac{1}{12} \sqrt[3]{-\frac{512r_s^3}{\pi^2(2+\sigma)} + 12 \sqrt[2]{\frac{524288r_s^3}{81\pi^4} + \frac{16384r_s^6}{9\pi^4(2+\sigma)^2}}} + \\
& \frac{1}{12} \sqrt[3]{-\frac{512r_s^3}{\pi^2(2+\sigma)} - 12 \sqrt[2]{\frac{524288r_s^3}{81\pi^4} + \frac{16384r_s^6}{9\pi^4(2+\sigma)^2}}}
\end{aligned} \quad (3.7.15)$$

Conhecido o valor de “z”, podemos obter o seguinte:

$$\begin{aligned}
x = & \frac{1}{12} \sqrt[3]{-\frac{512r_s^3}{\pi^2(2+\sigma)} + 12 \sqrt[2]{\frac{524288r_s^3}{81\pi^4} + \frac{16384r_s^6}{9\pi^4(2+\sigma)^2}}} + \\
& \frac{1}{12} \sqrt[3]{-\frac{512r_s^3}{\pi^2(2+\sigma)} - 12 \sqrt[2]{\frac{524288r_s^3}{81\pi^4} + \frac{16384r_s^6}{9\pi^4(2+\sigma)^2}}} + \\
& \frac{5}{3} \sqrt[3]{\frac{1}{12\pi^2} \frac{r_s^2}{(2+\sigma)}}
\end{aligned} \quad (3.7.16)$$

Como equação 3.7.13 é do terceiro grau admite uma raiz real em $x=x_0$, levando esta quantidade nas expressões 3.7.11 e 3.7.12, obtemos os resultados abaixo:

$$\begin{aligned}
& \left(y^2 - \sqrt[3]{\frac{144}{\pi^2} \frac{r_s^2}{36(2+\sigma)}} + \frac{1}{12} \sqrt[3]{-\frac{512r_s^3}{\pi^2(2+\sigma)} + 12 \sqrt[2]{\frac{524288r_s^3}{81\pi^4} + \frac{16384r_s^6}{9\pi^4(2+\sigma)^2}}} + \right. \\
& \left. \frac{1}{12} \sqrt[3]{-\frac{512r_s^3}{\pi^2(2+\sigma)} - 12 \sqrt[2]{\frac{524288r_s^3}{81\pi^4} + \frac{16384r_s^6}{9\pi^4(2+\sigma)^2}}} \right)^2 = \left(\sqrt[3]{\frac{144}{\pi^2} \frac{r_s^2}{9(2+\sigma)}} + \right. \\
& \left. \frac{1}{6} \sqrt[3]{-\frac{512r_s^3}{\pi^2(2+\sigma)} + 12 \sqrt[2]{\frac{524288r_s^3}{81\pi^4} + \frac{16384r_s^6}{9\pi^4(2+\sigma)^2}}} + \sqrt[3]{-\frac{512r_s^3}{\pi^2(2+\sigma)} - 12 \sqrt[2]{\frac{524288r_s^3}{81\pi^4} + \frac{16384r_s^6}{9\pi^4(2+\sigma)^2}}} \right) \\
& \left(y - \left(\frac{2}{9\pi} \right) r_s^3 \left(\frac{1}{2+\sigma} \right)^{\frac{2}{3}} \right. \\
& \left. \left(\frac{1}{\sqrt[3]{\frac{144}{\pi^2} \frac{r_s^2}{9(2+\sigma)}} + \frac{1}{6} \sqrt[3]{-\frac{512r_s^3}{\pi^2(2+\sigma)} + 12 \sqrt[2]{\frac{524288r_s^3}{81\pi^4} + \frac{16384r_s^6}{9\pi^4(2+\sigma)^2}}} + \frac{1}{6} \sqrt[3]{-\frac{512r_s^3}{\pi^2(2+\sigma)} - 12 \sqrt[2]{\frac{524288r_s^3}{81\pi^4} + \frac{16384r_s^6}{9\pi^4(2+\sigma)^2}}}} \right)^2 \right)
\end{aligned} \quad (3.7.17)$$

ou ainda

$$\begin{aligned}
& \left(y^2 - \sqrt[3]{\frac{144}{\pi^2} \frac{r_s^2}{36(2+\sigma)}} + \frac{1}{12} \sqrt[3]{-\frac{512r_s^3}{\pi^2(2+\sigma)}} + 12 \sqrt[2]{\frac{524288r_s^3}{81\pi^4} + \frac{16384r_s^6}{9\pi^4(2+\sigma)^2}} + \right. \\
& \left. \frac{1}{12} \sqrt[3]{-\frac{512r_s^3}{\pi^2(2+\sigma)}} - 12 \sqrt[2]{\frac{524288r_s^3}{81\pi^4} + \frac{16384r_s^6}{9\pi^4(2+\sigma)^2}} \right)^2 = \left(\sqrt[3]{\frac{144}{\pi^2} \frac{r_s^2}{9(2+\sigma)}} + \right. \\
& \left. \frac{1}{6} \sqrt[3]{-\frac{512r_s^3}{\pi^2(2+\sigma)}} + 12 \sqrt[2]{\frac{524288r_s^3}{81\pi^4} + \frac{16384r_s^6}{9\pi^4(2+\sigma)^2}} + \sqrt[3]{-\frac{512r_s^3}{\pi^2(2+\sigma)}} - 12 \sqrt[2]{\frac{524288r_s^3}{81\pi^4} + \frac{16384r_s^6}{9\pi^4(2+\sigma)^2}} \right) \\
& \left(y + \left(\frac{2}{9\pi} \right) r_s^3 \left(\frac{1}{2+\sigma} \right)^{\frac{2}{3}} \right. \\
& \left. \left(\frac{1}{\sqrt[3]{\frac{144}{\pi^2} \frac{r_s^2}{9(2+\sigma)}} + \frac{1}{6} \sqrt[3]{-\frac{512r_s^3}{\pi^2(2+\sigma)}} + 12 \sqrt[2]{\frac{524288r_s^3}{81\pi^4} + \frac{16384r_s^6}{9\pi^4(2+\sigma)^2}} + \frac{1}{6} \sqrt[3]{-\frac{512r_s^3}{\pi^2(2+\sigma)}} - 12 \sqrt[2]{\frac{524288r_s^3}{81\pi^4} + \frac{16384r_s^6}{9\pi^4(2+\sigma)^2}}} \right) \right)^2.
\end{aligned} \tag{3.7.18}$$

Chamando de m , n e p as quantidades abaixo temos o seguinte:

$$\begin{aligned}
m &= -\sqrt[3]{\frac{144}{\pi^2} \frac{r_s^2}{36(2+\sigma)}} + \frac{1}{12} \sqrt[3]{-\frac{512r_s^3}{\pi^2(2+\sigma)}} + 12 \sqrt[2]{\frac{524288r_s^3}{81\pi^4} + \frac{16384r_s^6}{9\pi^4(2+\sigma)^2}} \\
& \quad - \frac{1}{12} \sqrt[3]{-\frac{512r_s^3}{\pi^2(2+\sigma)}} - 12 \sqrt[2]{\frac{524288r_s^3}{81\pi^4} + \frac{16384r_s^6}{9\pi^4(2+\sigma)^2}}
\end{aligned} \tag{3.7.19}$$

$$\begin{aligned}
n &= \sqrt[3]{\frac{144}{\pi^2} \frac{r_s^2}{9(2+\sigma)}} + \frac{1}{6} \sqrt[3]{-\frac{512r_s^3}{\pi^2(2+\sigma)}} + 12 \sqrt[2]{\frac{524288r_s^3}{81\pi^4} + \frac{16384r_s^6}{9\pi^4(2+\sigma)^2}} \\
& \quad - \sqrt[3]{-\frac{512r_s^3}{\pi^2(2+\sigma)}} - 12 \sqrt[2]{\frac{524288r_s^3}{81\pi^4} + \frac{16384r_s^6}{9\pi^4(2+\sigma)^2}}
\end{aligned} \tag{3.7.20}$$

$$p = \left(\frac{2}{9\pi} \right) r_s^3 \left(\frac{1}{2+\sigma} \right)^{\frac{2}{3}}, \tag{3.7.21}$$

podemos rescrever 3.7.19 e 3.7.20 da seguinte maneira:

$$(y^2 + m)^2 = n \left(y - \frac{p}{n} \right)^2 \tag{3.7.22}$$

ou ainda:

$$(y^2 + m)^2 = n \left(y + \frac{p}{n} \right)^2. \quad (3.7.23)$$

Partindo das expressões 3.7.22 e 3.7.23, podemos obter uma fórmula fechada para variável "t":

$$t = \frac{\pm n \mp \sqrt[2]{n^2 - 4[(\pm p) + m]}}{2} - \frac{1}{4} \left(\frac{4}{9\pi} \right)^{\frac{1}{3}} \sqrt[2]{\frac{4}{2 + \sigma}} r_s \quad (3.7.24)$$

e assim podemos achar os valores α, β e γ .

3.8 Cálculo da energia de interação.

Para cálculo da energia de interação do gás de elétrons, vamos reescrever 2.6.4:

$$\tau = -\frac{1}{2k_F} \int_0^\infty dq [S(q) - 1], \quad (3.8.1)$$

e substituindo 3.5.1 em 3.8.1, temos:

$$\tau = -\frac{1}{2k_F} \int_0^\infty dq \left[1 - \frac{2\alpha}{3\pi x} \left(\frac{\beta}{\beta^2 + (x - \gamma)^2} - \frac{\beta}{\beta^2 + (x + \gamma)^2} \right) - 1 \right], \quad (3.8.2)$$

ou ainda

$$\tau = \frac{\alpha}{3\pi} \int_0^\infty dx \frac{1}{x} \left(\frac{\beta}{\beta^2 + (x - \gamma)^2} - \frac{\beta}{\beta^2 + (x + \gamma)^2} \right). \quad (3.8.3)$$

Resolvendo 3.7.27, obtemos:

$$\tau = \frac{\alpha\gamma}{3(\gamma^2 + \beta^2)}, \quad (3.8.4)$$

e substituindo 3.7.27 em 2.6.3, temos:

$$v = -\frac{4\alpha\gamma}{3\pi r_S(\gamma^2 + \beta^2)} \left(\frac{9\pi}{4}\right)^{1/3}, \quad (3.8.5)$$

que é a energia de interação em função dos parâmetros α, β, γ e r_s .

Capítulo IV

Sumário

No capítulo dois, apresentou-se o formalismo matemático empregado na dissertação, incluindo-se o hamiltoniano do modelo, a teoria da resposta linear, o teorema de Flutuação-dissipação, as condições de contorno sobre a função de distribuição de pares, a correlação de curto alcance e o limite de grandes vetores de onda do fator de estrutura, o teorema de Hellmann-Feynmann para a energia, o modelo de Thomas-Fermi, a aproximação RPA, modelo de polo de Plasmon e correção de campo local.

No capítulo três apresentou-se a densidade de carga de blindagem na aproximação de Thomas-Fermi e o fator de estrutura na aproximação de polo de plasmon, em seguida apresentou-se um novo modelo para a função dielétrica estática com a qual obteve-se uma densidade de blindagem convergente e que conserva a carga, bem como satisfaz a regra da soma da compressibilidade e a condição de Kato. Um modelo similar para o fator de estrutura que produz uma função de distribuição de pares convergente e positivo-definida para todas as distâncias. Os parâmetros foram obtidos impondo-se a normalização da função distribuição de pares, a condição de Kimball para o comportamento desta função para curtas distâncias e o limite RPA do fator de estrutura para grandes comprimentos de onda.

Observando a exposição acima, podemos concluir que os modelos densidade de carga de blindagem e função distribuição de pares, desenvolvidos neste trabalho, são bem com-

portadas em todas as distâncias, em contraste com os modelos de Thomas-Fermi e modelo de pólo de plasmon de lundquist, os quais geram uma divergência não física na densidade de carga de blindagem e função distribuição de pares na região de curto alcance e além disso os mesmos não exibem oscilação de Friedell na região de longo alcance.

Observamos que a função distribuição de pares satisfaz a condição de Kimball, o qual é violada pelo modelo pólo de plasmon. O mesmo acontece com o modelo da densidade de blindagem o qual satisfaz respectivamente a condição de Kato, bem como a regra da soma da compressibilidade, ambos violado por por todos os modelos atualmente conhecidos.

Os modelos desenvolvidos neste trabalho não apresentam dependência com a frequência e portanto não incorpora efeitos dinâmicos, como o tempo de vida das excitações, apenas em uma forma promediada.

Dentro de uma perspectiva futura, estes modelos podem ser usados para calcular as seguintes quantidades físicas: energia de quasi-partículas, densidade de estados, largura de banda para o estudo de transição metal-isolante, aplicações em sistema de baixa dimensionalidade como o gás de elétrons 2D e 1D, susceptibilidade e fator de estrutura magnético, magnetismo itinerante e efeitos dinâmicos.

Apêndice A

O cálculo do resíduo para o fator de estrutura e a carga de blindagem

Cálculo da densidade de blindagem na equação 3.2.6 e da função distribuição de pares na equação 3.6.2 envolve a solução da integral

$$I = \int_0^{\infty} \frac{x \sin(ax) dx}{(\beta^2 + x^2)}, \quad (\text{A.1})$$

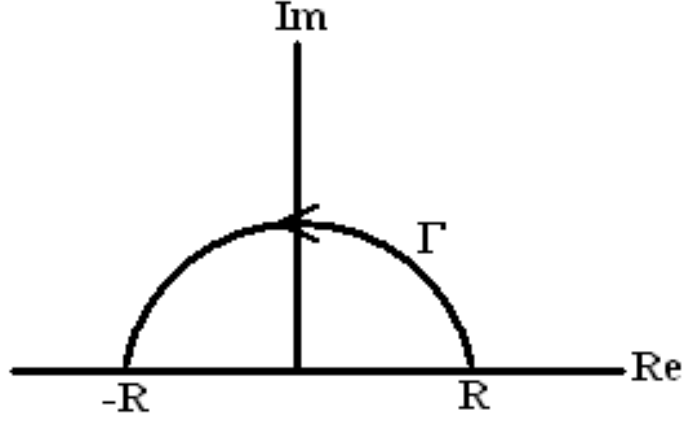
onde a expressão A.1. pode ser escrita como:

$$\int_0^{\infty} \frac{x \sin(ax) dx}{(\beta^2 + x^2)} = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{x \operatorname{Im}(\exp(iax)) dx}{(\beta^2 + x^2)}. \quad (\text{A.2})$$

Sabendo que:

$$\int_{-R}^R \frac{z \operatorname{Im}(\exp(iaz)) dz}{(\beta^2 + z^2)} + \int_{\Gamma} \frac{z \operatorname{Im}(\exp(iaz)) dz}{(\beta^2 + z^2)} = i2\pi \sum \text{resíduos} \quad (\text{A.3})$$

onde Γ é o gráfico abaixo:



Rescrevendo A2 da seguinte forma temos:

$$\int_{-R}^R \frac{z \operatorname{Im}(\exp(iaz)) dz}{(z - i\beta)(z + i\beta)}, \quad (\text{A.4})$$

onde iremos calcular os resíduos da expressão A.4, através da fórmula abaixo:

$$\operatorname{Re} s(z_0) = \lim_{z \rightarrow z_0} (z - z_0) f(z). \quad (\text{A.5})$$

Estando os polos em $z=i\beta$ e $z=-i\beta$, então temos:

$$\operatorname{Re} s(i\beta) = \lim_{z \rightarrow i\beta} (z + i\beta) \frac{z(\exp(iaz))}{(z - i\beta)(z + i\beta)} = \frac{-i\beta \exp(a\beta)}{-i2\beta} = \frac{\exp(a\beta)}{2} \quad (\text{A.6})$$

$$\operatorname{Re} s(i\beta) = \lim_{z \rightarrow i\beta} (z - i\beta) \frac{z(\exp(iaz))}{(z - i\beta)(z + i\beta)} = \frac{i\beta \exp(-a\beta)}{i2\beta} = \frac{\exp(-a\beta)}{2}. \quad (\text{A.7})$$

Levando A.6 e A.7 em A.3, temos:

$$\int_{-R}^R \frac{z \operatorname{Im}(\exp(iaz)) dz}{(\beta^2 + z^2)} + \int_{\Gamma} \frac{z \operatorname{Im}(\exp(iaz)) dz}{(\beta^2 + z^2)} = i2\pi \left(\frac{\exp(a\beta)}{2} - \frac{\exp(-a\beta)}{2} \right), \quad (\text{A.8})$$

como $R \rightarrow \infty$, então a integral sobre a curva Γ é zero, podemos escrever o seguinte:

$$\int_0^\infty \frac{x \sin(ax) dx}{(\beta^2 + x^2)} = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^\infty \frac{x \operatorname{Im}(\exp(iax)) dx}{(\beta^2 + x^2)} = \frac{1}{2} \operatorname{Im} \left(i2\pi \left(\frac{\exp(a\beta)}{2} - \frac{\exp(-a\beta)}{2} \right) \right), \quad (\text{A.9})$$

ou ainda

$$\int_0^\infty \frac{x \sin(ax) dx}{(\beta^2 + x^2)} = \pi \left(\frac{\exp(a\beta)}{2} - \frac{\exp(-a\beta)}{2} \right). \quad (\text{A.10})$$

REFERÊNCIAS

- [1] W. Pauli, Z. Phys. **41**, 81(1927).
- [2] A. Sommerfeld, Naturwissenschaften **15**, 825(1927).
- [3] F. Bloch, Z. Phys. **57**, 545(1929).
- [4] E. P. Wigner, Phys. Rev. **46**, 1002(1934); Trans. Faraday Soc. **34**, 678(1938).
- [5] D. Pines e D. Bohm, Phys. Rev. **85**, 338(1952).
- [6] M. Gell-Mann e K. A. Brueckner, Phys. Rev. **106**, 364(1957).
- [7] J. M. Luttinger, Phys. Rev. **119**, 1153(1960).
- [8] J. Lindhard, Kgl. Danske Videnskab. Selskab, Mat.-Fys. Medd. **28**, n^o 8(1954).
- [9] J. Hubbard, Proc. R. Soc. London, Ser. A **240**, 539(1957); **243**, 336(1957).
- [10] P. Nozières e D. Pines, Nuovo Cimento **9**, 470(1958).
- [11] K. S. Singwi, M. P. Tosi, R. H. Land e A. Sjölander, Phys. Rev. **176**, 589(1968).
- [12] D. M. Ceperley e B. J. Alder, Phys. Rev. Lett. **45**, 566(1980).
- [13] P. M. Platzman, E. D. Isaacs, H. Williams, P. Zschack e G. E. Ice, Phys. Rev. B **46**, 12943(1992); B. S. Itchkawitz, I. W. Lyo e E. W. Plummer, Phys. Rev. B **41**, 8075(1990).

- [14] D. Singh, D. P. Clougherty, J. M. MacLaren, R. C. Albers, C. S. Wang, Phys. Rev. B **44**, 7701(1991).
- [15] J. P. Hansen, Phys. World **9**, n^o4, 43(1996); M. Bauss e J. P. Hansen, Phys. Rep. **59**, 1(1980); Coulomb Liquids(Editado por N. H. March e M. P. Tosi, Academic Press 1984).
- [16] G. Senatore e G. Pastore, Phys. Rev. Lett. **64**, 303(1990); S. Moroni e G. Senatore, Phys. Rev. B **44**, 9864(1991).
- [17] K. Mouloupoulos e N. W. Ashcroft, Phys. Rev. Lett. **69**, 2555(1992).
- [18] G. Chabrier, N. W. Ashcroft e H. E. De Witt, Nature, **360**, 48(1992).
- [19] S. Ichimaru, Rev. Mod. Phys. **65**, 255 (1993).
- [20] C. F. Richardson e N. W. Ashcroft, Phys. Rev. B **55**, 15130(1997); Y. Takada, Phys. Rev. B **47**, 5202(1993).
- [21] G. Senatore e N. H. March, Rev. Mod. Phys. **66**, 445(1994).
- [22] C. Bowen, G. Sugiyama e B. J. Alder, Phys. Rev. B **50**, 14838(1994).
- [23] S. Morone, D. M. Ceperley e G. Senatore, Phys. Rev. Lett. **75**, 689 (1995).
- [24] G. D. Mahan, Many Particle Physics, Plenum Press, New York, (1990).
- [25] B. I. Lundqvist, Physics Koncleus Materie **6**, 205 (1967).
- [26] N. H. March, Electron Correlation in Molecules and Condensed Phases, Plenum Press, New York (1996).
- [27] J. C. Kimball, Phys. Rev. A **7**, 1648 (1973).
- [28] A. Sarkar, Acta Polonica A **106**, (2004).
- [29] E. Paijanne, Journal of Phys C.**15**, 2683 (1982).

- [30] J. E. Alvarellos, J. Phys. F **15**, 2465 (1985).
- [31] M. T. Wilson, J. Phys.: Cond. Matter **7** L371 (1995).
- [32] P. Minnhagen, J Phys. C **15**, 1535 (1975).
- [32] V. G. Kohn, J. Phys. C **15**, 2935 (1982).
- [33] H. H. Kranz, J Phys C **17**, 2121 (1984).