

Exemplo: Gás degenerado de elétrons

Um bom exemplo do que discutimos até aqui está no chamado gás degenerado de férmions. Especificamente, estudaremos o gás degenerado de elétrons, uma coleção de elétrons, interagindo entre eles por meio do potencial repulsivo coulombiano, mas prisioneiros, devido a ação de um potencial atrativo médio, do meio em que se encontram. Exemplos: (1) plasmas de alta temperatura, (2) os elétrons de um metal (*bulk metal*).

A Hamiltoniana do problema: $H = H_{el} + H_b + H_{el-b}$

onde

$$\left\{ \begin{array}{l} H_{el} = \sum_i \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + \frac{1}{2}e^2 \sum_i \sum_{j \neq i} \frac{e^{-\mu|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|}}{|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|} \Rightarrow \text{parte eletrônica.} \\ H_b = \frac{1}{2}e^2 \int d^3x' \int d^3x'' \rho(\mathbf{x}')\rho(\mathbf{x}'') \frac{e^{-\mu|\mathbf{x}' - \mathbf{x}''|}}{|\mathbf{x}' - \mathbf{x}''|} \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \text{repulsão entre as} \\ \text{partes do "background",} \\ \text{onde se encontram} \\ \text{os elétrons.} \end{array} \right. \\ H_{el-b} = -e^2 \sum_i \int d^3x \rho(\mathbf{x}) \frac{e^{-\mu|\mathbf{x} - \mathbf{x}_i|}}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}_i|} \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \text{interação dos elétrons com} \\ \text{o "background"}. \end{array} \right. \end{array} \right.$$

- Usamos o potencial coulombiano blindado e faremos $\mu \rightarrow 0$ no final.
- $\rho(\mathbf{x})$ é a densidade de partículas positivas do “background”.

Exemplo: Gás degenerado de elétrons

Se considerarmos um “background” homogêneo (sem estrutura), com $\rho(\mathbf{x}) = N/V$ para um sistema com volume L^3 , podemos re-escrever H_b , considerando $\mathbf{x} = \mathbf{x}' - \mathbf{x}''$, para obter:

$$\begin{aligned} H_b &= \frac{1}{2} e^2 \int d^3 x' \int d^3 x'' \rho(\mathbf{x}') \rho(\mathbf{x}'') \frac{e^{-\mu|\mathbf{x}' - \mathbf{x}''|}}{|\mathbf{x}' - \mathbf{x}''|} = \\ &= \frac{1}{2} e^2 \left(\frac{N}{V} \right)^2 \int d^3 x' \int d^3 x \frac{e^{-\mu|\mathbf{x}|}}{|\mathbf{x}|} = \frac{1}{2} e^2 \left(\frac{N}{V} \right)^2 V \frac{4\pi}{\mu^2} = \frac{1}{2} e^2 \frac{N^2}{V} \frac{4\pi}{\mu^2}. \end{aligned}$$

Ou seja, nestas condições o “background” contribui apenas com uma constante aditiva na energia. Embora o resultado pareça explodir com $\mu \rightarrow 0$, veremos que isso não é um problema. A interação dos elétrons com esse background homogêneo pode ser re-escrita por:

$$H_{el-b} = -e^2 \sum_i \int d^3 x \left(\frac{N}{V} \right) \frac{e^{-\mu|\mathbf{x} - \mathbf{x}_i|}}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}_i|} = -e^2 \frac{N^2}{V} \frac{4\pi}{\mu^2}. \text{ Juntando tudo, temos:}$$

$$H = \underbrace{-\frac{1}{2} e^2 \frac{N^2}{V} \frac{4\pi}{\mu^2}}_{\text{constante}} + \underbrace{\sum_i \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m}}_{\text{1-partícula}} + \underbrace{\frac{1}{2} e^2 \sum_i \sum_{j \neq i} \frac{e^{-\mu|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|}}{|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|}}_{\text{2-partículas}}$$

Como ficam na linguagem de 2a. quantização?

Exemplo: Gás degenerado de elétrons

Vamos escrevê-los, usando a base de momento linear para uma partícula com spin 1/2, isto é $i = \{\mathbf{k}, \lambda\}$, onde $\lambda = \pm$ indica o spin do elétron para cima ou para baixo. Na estratégia de normalização da caixa $\langle \mathbf{k}' \lambda' | \mathbf{p} | \mathbf{k} \lambda \rangle = \hbar \mathbf{k} \delta_{\mathbf{k}' \mathbf{k}} \delta_{\lambda \lambda'}$ e com isso podemos escrever:

$$\sum_i \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} \Rightarrow \mathcal{K} = \sum_{\mathbf{k} \lambda} \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} a_{\mathbf{k} \lambda}^\dagger a_{\mathbf{k} \lambda}$$

Analogamente, usando o que foi desenvolvido para operadores aditivos de duas partículas, temos

$$\mathcal{V} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}_1 \lambda_1} \sum_{\mathbf{k}_2 \lambda_2} \sum_{\mathbf{k}_3 \lambda_3} \sum_{\mathbf{k}_4 \lambda_4} \langle \mathbf{k}_1 \lambda_1 \mathbf{k}_2 \lambda_2 | V | \mathbf{k}_3 \lambda_3 \mathbf{k}_4 \lambda_4 \rangle a_{\mathbf{k}_1 \lambda_1}^\dagger a_{\mathbf{k}_2 \lambda_2}^\dagger a_{\mathbf{k}_4 \lambda_4} a_{\mathbf{k}_3 \lambda_3}$$

onde $\langle \mathbf{k}_1 \lambda_1 \mathbf{k}_2 \lambda_2 | V | \mathbf{k}_3 \lambda_3 \mathbf{k}_4 \lambda_4 \rangle$ é igual à

$$\begin{aligned} & \int d^3 x' \int d^3 x'' V(\mathbf{x}', \mathbf{x}'') \langle \mathbf{k}_1 \lambda_1 | \mathbf{x}' \rangle \langle \mathbf{x}' | \mathbf{k}_3 \lambda_3 \rangle \langle \mathbf{k}_2 \lambda_2 | \mathbf{x}'' \rangle \langle \mathbf{x}'' | \mathbf{k}_4 \lambda_4 \rangle = \\ & = \frac{e^2}{V^2} \int d^3 x' \int d^3 x'' \frac{e^{-\mu |\mathbf{x}' - \mathbf{x}''|}}{|\mathbf{x}' - \mathbf{x}''|} e^{-i \mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{x}'} \chi_{\lambda_1}^\dagger e^{i \mathbf{k}_3 \cdot \mathbf{x}'} \chi_{\lambda_3} e^{-i \mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{x}''} \chi_{\lambda_2}^\dagger e^{i \mathbf{k}_4 \cdot \mathbf{x}''} \chi_{\lambda_4} \\ & = \frac{e^2}{V^2} \int d^3 y \int d^3 x \frac{e^{-\mu y}}{y} e^{-i \mathbf{k}_1 \cdot (\mathbf{y} + \mathbf{x})} \delta_{\lambda_1 \lambda_3} e^{i \mathbf{k}_3 \cdot (\mathbf{y} + \mathbf{x})} e^{-i \mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{x}} e^{i \mathbf{k}_4 \cdot \mathbf{x}} \delta_{\lambda_2 \lambda_4} \end{aligned}$$

onde, substituímos $\begin{cases} \mathbf{x}'' = \mathbf{x} \rightarrow d^3 x'' = d^3 x \\ \mathbf{y} = \mathbf{x}' - \mathbf{x}'' \rightarrow d^3 x' = d^3 y \end{cases}$

Exemplo: Gás degenerado de elétrons

E assim, $\langle \mathbf{k}_1 \lambda_1 \mathbf{k}_2 \lambda_2 | V | \mathbf{k}_3 \lambda_3 \mathbf{k}_4 \lambda_4 \rangle$ fica

$$\begin{aligned}
 &= \frac{e^2}{V^2} \delta_{\lambda_1 \lambda_3} \delta_{\lambda_2 \lambda_4} \int d^3x e^{-i(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_4) \cdot \mathbf{x}} \int d^3y \frac{e^{-\mu y}}{y} e^{-i(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_3) \cdot \mathbf{y}} = \\
 &= \frac{e^2}{V} \delta_{\lambda_1 \lambda_3} \delta_{\lambda_2 \lambda_4} \delta_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_4} \int d^3y \frac{e^{-\mu y}}{y} e^{-i(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_3) \cdot \mathbf{y}}
 \end{aligned}$$

Tomando $\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_3 = \mathbf{q}$, e a integral conhecida $\int d^3y \frac{e^{-\mu y}}{y} e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{y}} = \frac{4\pi}{q^2 + \mu^2}$,

temos, finalmente:

$$\langle \mathbf{k}_1 \lambda_1 \mathbf{k}_2 \lambda_2 | V | \mathbf{k}_3 \lambda_3 \mathbf{k}_4 \lambda_4 \rangle = \frac{e^2}{V} \delta_{\lambda_1 \lambda_3} \delta_{\lambda_2 \lambda_4} \delta_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_4} \frac{4\pi}{q^2 + \mu^2}$$

onde $\begin{cases} \delta_{\lambda_1 \lambda_3} \delta_{\lambda_2 \lambda_4} \rightarrow \text{o potencial não causa mudanças nas orientações de spin} \\ \delta_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_4} \rightarrow \text{indica que o momento linear é conservado no processo} \end{cases}$

Com isso, podemos escrever o potencial na linguagem de segunda quantização:

$$\begin{aligned}
 \mathcal{V} &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}_1 \lambda_1} \sum_{\mathbf{k}_2 \lambda_2} \sum_{\mathbf{k}_3 \lambda_3} \sum_{\mathbf{k}_4 \lambda_4} \langle \mathbf{k}_1 \lambda_1 \mathbf{k}_2 \lambda_2 | V | \mathbf{k}_3 \lambda_3 \mathbf{k}_4 \lambda_4 \rangle a_{\mathbf{k}_1 \lambda_1}^\dagger a_{\mathbf{k}_2 \lambda_2}^\dagger a_{\mathbf{k}_4 \lambda_4} a_{\mathbf{k}_3 \lambda_3} \\
 &= \frac{e^2}{2V} \sum_{\mathbf{k}_1 \lambda_1} \sum_{\mathbf{k}_2 \lambda_2} \sum_{\mathbf{k}_3 \lambda_3} \sum_{\mathbf{k}_4 \lambda_4} \delta_{\lambda_1 \lambda_3} \delta_{\lambda_2 \lambda_4} \delta_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_4} \frac{4\pi}{q^2 + \mu^2} a_{\mathbf{k}_1 \lambda_1}^\dagger a_{\mathbf{k}_2 \lambda_2}^\dagger a_{\mathbf{k}_4 \lambda_4} a_{\mathbf{k}_3 \lambda_3}
 \end{aligned}$$

Exemplo: Gás degenerado de elétrons

Somando em λ_3 e λ_4 , temos:

$$\mathcal{V} = \frac{e^2}{2V} \sum_{\mathbf{k}_1 \lambda_1} \sum_{\mathbf{k}_2 \lambda_2} \sum_{\mathbf{k}_3} \sum_{\mathbf{k}_4} \delta_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_4} \frac{4\pi}{q^2 + \mu^2} a_{\mathbf{k}_1 \lambda_1}^\dagger a_{\mathbf{k}_2 \lambda_2}^\dagger a_{\mathbf{k}_4 \lambda_2} a_{\mathbf{k}_3 \lambda_1}$$

A soma quádrupla pode virar uma soma tripla com:

$$\begin{cases} (1) \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 = \mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_4 \\ (2) \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_3 = \mathbf{q} \\ (3) \mathbf{k}_3 = \mathbf{k} \\ (4) \mathbf{k}_4 = \mathbf{p} \end{cases}$$

ou melhor $\begin{cases} (2) + (3) \rightarrow \mathbf{k}_1 = \mathbf{q} + \mathbf{k} \Rightarrow \text{este resultado juntamente com} \\ (3) \text{ e } (4) \text{ na } (1) \rightarrow \mathbf{k}_2 = \mathbf{k} + \mathbf{p} - (\mathbf{q} + \mathbf{k}) = \mathbf{p} - \mathbf{q} \\ \mathbf{k}_3 = \mathbf{k} \\ \mathbf{k}_4 = \mathbf{p} \end{cases}$

Realize a soma em \mathbf{k}_2 , e troque as variáveis para obter:

$$\mathcal{V} = \frac{e^2}{2V} \sum_{\mathbf{k} \mathbf{p} \mathbf{q}} \sum_{\lambda_1 \lambda_2} \frac{4\pi}{q^2 + \mu^2} a_{\mathbf{k} + \mathbf{q}, \lambda_1}^\dagger a_{\mathbf{p} - \mathbf{q}, \lambda_2}^\dagger a_{\mathbf{p} \lambda_2} a_{\mathbf{k} \lambda_1}$$

Antes de prosseguir, é importante analisar a contribuição de $\mathbf{q} = 0$, pois ela causa uma divergência no denominador quando $\mu \rightarrow 0$.

Exemplo: Gás degenerado de elétrons

A contribuição de $\mathbf{q} = 0$ é dada por: $\mathcal{V}|_{\mathbf{q}=0} = \frac{e^2}{2V} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{p}} \sum_{\lambda_1 \lambda_2} \frac{4\pi}{\mu^2} a_{\mathbf{k},\lambda_1}^\dagger a_{\mathbf{p},\lambda_2}^\dagger a_{\mathbf{p}\lambda_2} a_{\mathbf{k}\lambda_1}$

Usando a tabela de anti-comutação de operadores de criação e aniquilação de férmions da aula passada, podemos escrever:

$$a_{\mathbf{k},\lambda_1}^\dagger a_{\mathbf{p},\lambda_2}^\dagger a_{\mathbf{p}\lambda_2} a_{\mathbf{k}\lambda_1} = -a_{\mathbf{k},\lambda_1}^\dagger a_{\mathbf{p},\lambda_2}^\dagger a_{\mathbf{k}\lambda_1} a_{\mathbf{p}\lambda_2} = a_{\mathbf{k},\lambda_1}^\dagger (a_{\mathbf{k}\lambda_1} a_{\mathbf{p},\lambda_2}^\dagger - \delta_{\mathbf{k}\mathbf{p}} \delta_{\lambda_1 \lambda_2}) a_{\mathbf{p}\lambda_2}$$

$$\therefore \mathcal{V}|_{\mathbf{q}=0} = \frac{e^2}{2V} \frac{4\pi}{\mu^2} \sum_{\mathbf{k}\lambda_1} \sum_{\mathbf{p}\lambda_2} a_{\mathbf{k},\lambda_1}^\dagger (a_{\mathbf{k}\lambda_1} a_{\mathbf{p},\lambda_2}^\dagger - \delta_{\mathbf{k}\mathbf{p}} \delta_{\lambda_1 \lambda_2}) a_{\mathbf{p}\lambda_2} = \frac{e^2}{2V} \frac{4\pi}{\mu^2} (N^2 - N)$$

O primeiro termo, $\frac{e^2}{2V} \frac{4\pi}{\mu^2} N^2$ cancela exatamente com o primeiro termo da

Hamiltoniana H (slide 2). O segundo termo $-\frac{e^2}{2V} \frac{4\pi}{\mu^2} N$ pode ser interpretado

como a energia de N partículas, com cada uma contribuindo com $-\frac{e^2}{2V} \frac{4\pi}{\mu^2}$.

Como V vai para infinito com L^3 e μ vai à zero, mas mantendo $\mu L \gg 1$ (condição do potencial coulombiano blindado), temos: $V\mu^2 \rightarrow \infty$ e \therefore

$\frac{e^2}{2V} \frac{4\pi}{\mu^2} N \rightarrow 0$ com isso podemos escrever \mathcal{H} da seguinte forma:

Exemplo: Gás degenerado de elétrons

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1 \text{ com } \begin{cases} \mathcal{H}_0 = \sum_{\mathbf{k}\lambda} \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} a_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger a_{\mathbf{k}\lambda} \\ \mathcal{H}_1 = \frac{e^2}{2V} \sum'_{\mathbf{k}\mathbf{p}\mathbf{q}} \sum_{\lambda_1 \lambda_2} \frac{4\pi}{q^2 + \mu^2} a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \lambda_1}^\dagger a_{\mathbf{p}-\mathbf{q}, \lambda_2}^\dagger a_{\mathbf{p}\lambda_2} a_{\mathbf{k}\lambda_1} \end{cases}$$

onde a \sum' significa somar sobre todos os valores de \mathbf{q} , excluindo $\mathbf{q} = 0$.

Lembre que o que fizemos até agora foi construir a Hamiltoniana do problema com a hipótese que o background (onde se encontram os elétrons) de cargas positivas é homogêneo. Resolver o problema é uma outra estória. Aqui vamos usar teoria de perturbação de primeira ordem com \mathcal{H}_1 como perturbação de \mathcal{H}_0 . Em condições especiais, isso pode resultar em uma boa aproximação da situação real.

Primeiro, vamos introduzir variáveis que reflitam a escala do problema em questão. Imagine que cada “sítio” positivo tenha um volume de $\frac{4\pi}{3} r_0^3$. Se assim fosse, o volume do sistema seria $V = N \frac{4\pi}{3} r_0^3$ e \therefore a densidade mencionada

seria $N/V = \left(\frac{4\pi}{3} r_0^3 \right)^{-1}$. A escala natural de r_0 seria o raio de Böhr $a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2}$,

sugerindo a definição de um parâmetro adimensional $r_s = r_0/a_0$.

Exemplo: Gás degenerado de elétrons

Pelo lado da energia, como seria o estado fundamental desse sistema de férmions? Como dois férmions não ocupam o mesmo estado de uma partícula, é preciso preencher os níveis (caracterizados por \mathbf{k}, λ) até um certo valor máximo k_F com energia, conhecida por energia de Fermi. Ou seja lote, aos pares ($\lambda = \pm$) todos os $\mathbf{k}'s$ com $k \leq k_F$. Ou seja

$$N = \sum_{\mathbf{k}, \lambda} \Theta(k - k_F) \rightarrow \frac{V}{(2\pi)^3} \sum_{\lambda} \int d^3k \Theta(k - k_F) \text{ com } \Theta(x) = \begin{cases} 1 & \text{para } x \leq 0 \\ 0 & \text{para } x > 0 \end{cases}$$

$$\text{Isso fornece } N = \frac{V}{(2\pi)^3} \sum_{\lambda} \frac{4\pi}{3} k_F^3 = \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{8\pi}{3} k_F^3 = \frac{V}{3\pi^2} k_F^3 \text{ e } \therefore k_F = \left(3\pi^2 \frac{N}{V} \right)^{1/3}$$

Usando N/V do slide anterior, temos $k_F = \left(\frac{9\pi}{4} \right)^{1/3} \frac{1}{r_0}$, ou seja, k_F , o k da energia de Fermi é aproximadamente o inverso da distância entre partículas.

Usaremos a mesma estratégia para calcular a energia do estado fundamental e o termo de primeira ordem, de perturbação,

$$\text{ou seja, usaremos } |F\rangle = | \underbrace{1, 1, 1 \dots 1}_N, 0, 0, \dots \rangle \text{ para calcular } \begin{cases} \langle F | \mathcal{H}_0 | F \rangle \\ \langle F | \mathcal{H}_1 | F \rangle \end{cases}$$

Exemplo: Gás degenerado de elétrons

Começamos por $E^{(0)} = \langle F | \mathcal{H}_0 | F \rangle = \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{\mathbf{k}, \lambda} k^2 \Theta(k - k_F)$, onde novamente

trocamos a soma pela integral para obter:

$$E^{(0)} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{V}{(2\pi)^3} \sum_{\lambda} \int d^3k k^2 \Theta(k - k_F) = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{V}{(2\pi)^3} \cdot 2 \cdot 4\pi \frac{k_F^5}{5} = \frac{a_0 e^2}{2\pi^2} V \frac{k_F^5}{5}$$

$$\text{de } \begin{cases} V = N \frac{4\pi}{3} r_0^3 \\ e \\ k_F = \left(\frac{9\pi}{4}\right)^{1/3} \frac{1}{r_0} \end{cases} \implies E^{(0)} = \frac{a_0 e^2}{2\pi^2} N \frac{4\pi}{3} r_0^3 \frac{\left(\left(\frac{9\pi}{4}\right)^{1/3} \frac{1}{r_0}\right)^5}{5}$$

$$\text{que simplificando fica } E^{(0)} = \frac{a_0 e^2}{2} N \frac{4}{3\pi} \left(\frac{9\pi}{4}\right)^{5/3} \frac{1}{5r_0^2} = \frac{a_0 e^2}{2} \frac{3}{5} N \left(\frac{9\pi}{4}\right)^{2/3} \frac{1}{r_0^2}$$

$$\text{para finalmente obter, com } r_0 = r_s a_0, \text{ a expressão } E^{(0)} = \frac{e^2}{2a_0} \frac{3}{5} N \left(\frac{9\pi}{4}\right)^{2/3} \frac{1}{r_s^2}$$

$\frac{e^2}{2a_0}$ é a energia de ligação do elétron (13,6 eV) no átomo de hidrogênio.

Assim, a energia por partícula do sistema não perturbado é dada por:

$$\frac{E^{(0)}}{N} = \frac{e^2}{2a_0} \frac{3}{5} \left(\frac{9\pi}{4}\right)^{2/3} \frac{1}{r_s^2} \approx \frac{e^2}{2a_0} \frac{2,21}{r_s^2}$$

Exemplo: Gás degenerado de elétrons

O termo de correção de primeira ordem é dado por

$$E^{(1)} = \langle F | \mathcal{H}_1 | F \rangle = \frac{e^2}{2V} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{p}\mathbf{q}}' \sum_{\lambda_1 \lambda_2} \frac{4\pi}{q^2} \langle F | a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \lambda_1}^\dagger a_{\mathbf{p}-\mathbf{q}, \lambda_2}^\dagger a_{\mathbf{p}\lambda_2} a_{\mathbf{k}\lambda_1} | F \rangle$$

Para calcular isso, observe que:

- como F representa o estado fundamental $k \leq k_F$, caso contrário $a_{\mathbf{k}\lambda_1} | F \rangle = 0$
- o que for destruído entre os orbitais ocupados pelos “ a 's” precisa ser re-construído pelos operadores a^\dagger 's, caso contrário

$$\langle F | a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \lambda_1}^\dagger a_{\mathbf{p}-\mathbf{q}, \lambda_2}^\dagger a_{\mathbf{p}\lambda_2} a_{\mathbf{k}\lambda_1} | F \rangle = 0$$

- como $\mathbf{q} \neq 0$ (lembre do significado da \sum'), necessariamente $\begin{cases} \mathbf{p} - \mathbf{q} \neq \mathbf{p} \\ e \\ \mathbf{k} + \mathbf{q} \neq \mathbf{k}. \end{cases}$

- assim só nos resta fazer $\begin{cases} \mathbf{k} + \mathbf{q} = \mathbf{p} \text{ e } \lambda_2 = \lambda_1 \\ e \\ \mathbf{p} - \mathbf{q} = \mathbf{k} \text{ e } \lambda_2 = \lambda_1. \end{cases}$

- permitindo eliminar as somas em \mathbf{p} e em λ_2 , fazendo $\mathbf{p} = \mathbf{k} + \mathbf{q}$ e $\lambda_2 = \lambda_1$.

Exemplo: Gás degenerado de elétrons

Assim, a correção de primeira ordem é dado fica

$$E^{(1)} = \langle F | \mathcal{H}_1 | F \rangle = \frac{e^2}{2V} \sum'_{\mathbf{k}\mathbf{q}} \sum_{\lambda_1} \frac{4\pi}{q^2} \langle F | a_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\lambda_1}^\dagger \underbrace{a_{\mathbf{k},\lambda_1}^\dagger a_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\lambda_1}}_{\text{anti-comutam (distintos)}} a_{\mathbf{k}\lambda_1} | F \rangle =$$

anti-comutam (distintos)

$$= -\frac{e^2}{2V} \sum'_{\mathbf{k}\mathbf{q}} \sum_{\lambda_1} \frac{4\pi}{q^2} \langle F | \left(a_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\lambda_1}^\dagger a_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\lambda_1} \right) \left(a_{\mathbf{k},\lambda_1}^\dagger a_{\mathbf{k}\lambda_1} \right) | F \rangle =$$

$$= -\frac{e^2}{2V} 2 \frac{V^2}{(2\pi)^6} \int d^3 k \int d^3 q \frac{4\pi}{q^2} \Theta(|\mathbf{k} + \mathbf{q}| - k_F) \Theta(k - k_F)$$

onde usamos que

$$\begin{cases} \left(a_{\mathbf{k},\lambda_1}^\dagger a_{\mathbf{k}\lambda_1} \right) | F \rangle = \Theta(k - k_F) | F \rangle \\ \left(a_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\lambda_1}^\dagger a_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\lambda_1} \right) | F \rangle = \Theta(|\mathbf{k} + \mathbf{q}| - k_F) | F \rangle \end{cases}$$

e que $\sum'_{\mathbf{k}\mathbf{q}} \sum_{\lambda_1} \rightarrow 2 \times \frac{V^2}{(2\pi)^6} \int d^3 k \int d^3 q$. Uma nova mudança de

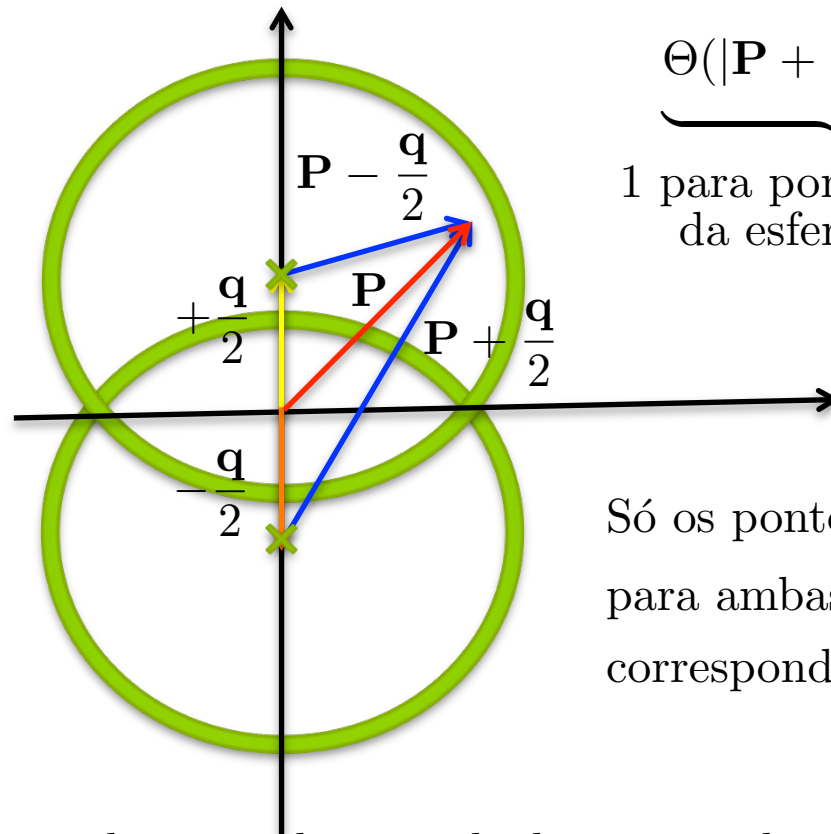
variável $\mathbf{k} = \mathbf{P} - \mathbf{q}/2 \Rightarrow d^3 k = d^3 P$ e inversão das integrais, nos leva à

$$E^{(1)} = -\frac{e^2}{2V} 2 \frac{V^2}{(2\pi)^6} \int d^3 q \frac{4\pi}{q^2} \int d^3 P \Theta\left(|\mathbf{P} + \frac{\mathbf{q}}{2}| - k_F\right) \Theta\left(|\mathbf{P} - \frac{\mathbf{q}}{2}| - k_F\right)$$

A integral em $d^3 P$ é o volume de interseção de duas esferas de raio k_F com distância q entre seus centros.

Exemplo: Gás degenerado de elétrons

Para ver isso, observe na figura abaixo que o ponto \mathbf{P} corresponde ao ponto $\mathbf{P} - \frac{\mathbf{q}}{2}$ com respeito ao centro da esfera superior e ao ponto $\mathbf{P} + \frac{\mathbf{q}}{2}$ com respeito ao centro da esfera inferior. As esferas têm raio k_F .



$$\underbrace{\Theta\left(\left|\mathbf{P} + \frac{\mathbf{q}}{2}\right| - k_F\right)}_{1 \text{ para pontos internos da esfera inferior}} \quad \underbrace{\Theta\left(\left|\mathbf{P} - \frac{\mathbf{q}}{2}\right| - k_F\right)}_{1 \text{ para pontos internos da esfera superior}}$$

1 para pontos internos da esfera inferior

1 para pontos internos da esfera superior

Só os pontos da interseção das duas esferas dão 1 para ambas as funções Θ . A integral em d^3P corresponde ao volume de interseção.

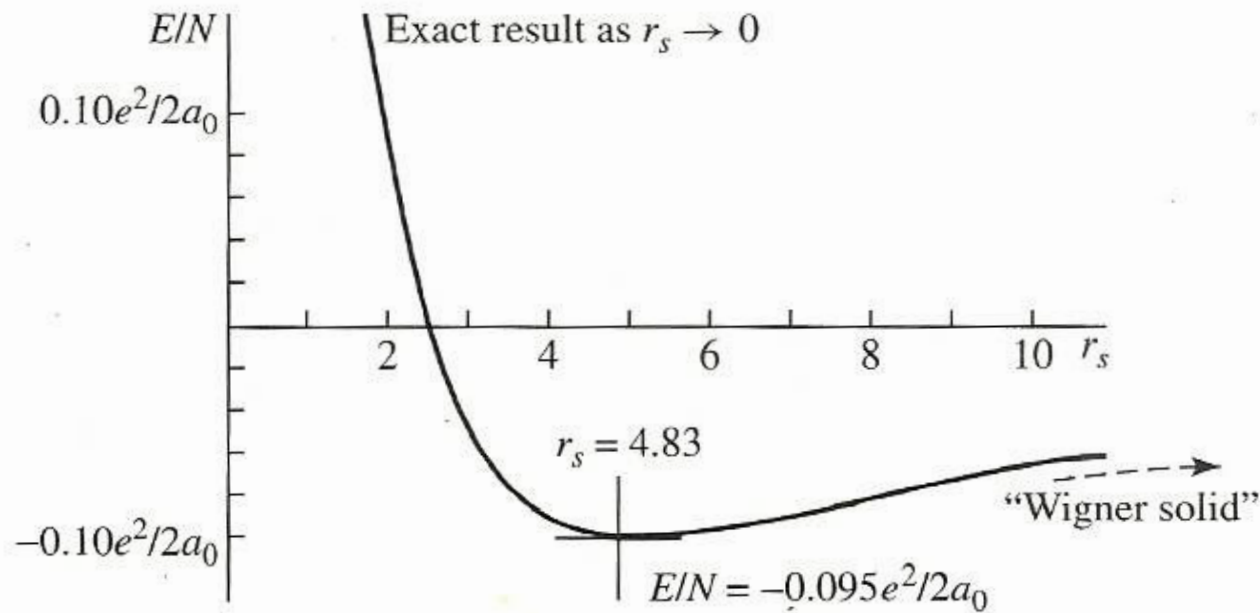
Para obter o volume, calcule em coordenadas cilíndricas: $2 \int_{q/2}^{k_F} \pi(k_F^2 - z^2) dz$

Exemplo: Gás degenerado de elétrons

Assim, fazendo as contas temos: $E^{(1)} = -\frac{e^2}{2a_0^2} N \frac{3}{2\pi} \left(\frac{9}{4\pi}\right)^{1/3} \frac{1}{r_s} \approx -\frac{e^2}{2a_0^2} N \frac{0,916}{r_s}$,

forneendo uma energia por partícula em primeira ordem igual a

$$\frac{E}{N} = \frac{E^{(0)} + E^{(1)}}{N} = \frac{e^2}{2a_0^2} \left(\frac{2,21}{r_s^2} - \frac{0,916}{r_s} \right)$$



no ponto de mínimo	{	$E/N = -0,095 \frac{e^2}{2a_0^2} = -1,29 \text{ eV}$	}	metal de
		$r_s = 4,83$		sódio
				{
				$E/N = -1,13 \text{ eV}$
				$r_s = 3,96$

Um acordo muito razoável para um modelo tão simplificado!