

## 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:

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

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

até aqui, só escrevemos a Hamiltoniana

*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

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

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

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

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  $\lambda_3$  e  $\lambda_4$ , 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: 
$$\left\{ \begin{array}{l} (1) \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 = \mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_4 \\ (2) \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_3 = \mathbf{q} \\ (3) \mathbf{k}_3 = \mathbf{k} \\ (4) \mathbf{k}_4 = \mathbf{p} \end{array} \right.$$

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

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  $\mu$  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

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

até aqui, só escrevemos a Hamiltoniana

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  $\mathbf{k}, \lambda$ ) 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

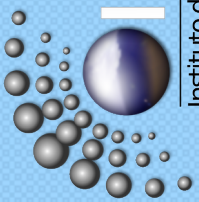
$$N = \sum_{\mathbf{k}, \lambda} \Theta(k - k_F) \rightarrow \frac{V}{(2\pi)^3} \sum_{\lambda} \int d^3k \Theta(k - k_F) \text{ com } \Theta(x) = \begin{cases} 1 & \text{para } x \leq 0 \\ 0 & \text{para } x > 0 \end{cases}$$

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

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

trocaremos a soma pela integral para obter:

$$E^{(0)} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{V}{(2\pi)^3} \sum_{\lambda} \int d^3k k^2 \Theta(k - k_F) = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{V}{(2\pi)^3} \cdot 2.4\pi \frac{k_F^5}{5} = \frac{a_0 e^2}{2\pi^2} V \frac{k_F^5}{5}$$

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

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

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

$\frac{e^2}{2a_0}$  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  $\lambda_2$ , 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

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

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

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

onde usamos que

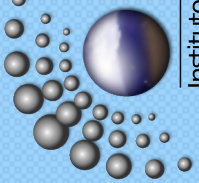
$$\begin{cases} \left( a_{\mathbf{k},\lambda_1}^\dagger a_{\mathbf{k}\lambda_1} \right) | F \rangle = \Theta(k - k_F) | F \rangle \\ \left( a_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\lambda_1}^\dagger a_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\lambda_1} \right) | F \rangle = \Theta(|\mathbf{k} + \mathbf{q}| - k_F) | F \rangle \end{cases}$$

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

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

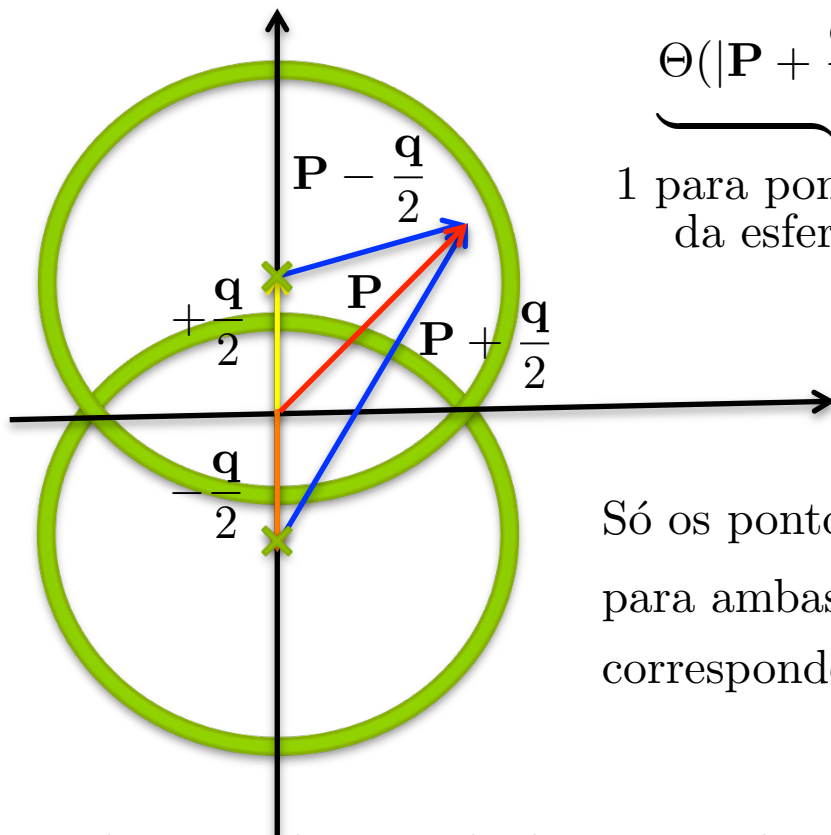
$$E^{(1)} = -\frac{e^2}{2V} 2 \frac{V^2}{(2\pi)^6} \int d^3q \frac{4\pi}{q^2} \int d^3P \Theta\left(|\mathbf{P} + \frac{\mathbf{q}}{2}| - k_F\right) \Theta\left(|\mathbf{P} - \frac{\mathbf{q}}{2}| - k_F\right)$$

A integral em  $d^3P$  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  $k_F$ .



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

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  $\Theta$ . A integral em  $d^3 P$  corresponde ao volume de interseção.

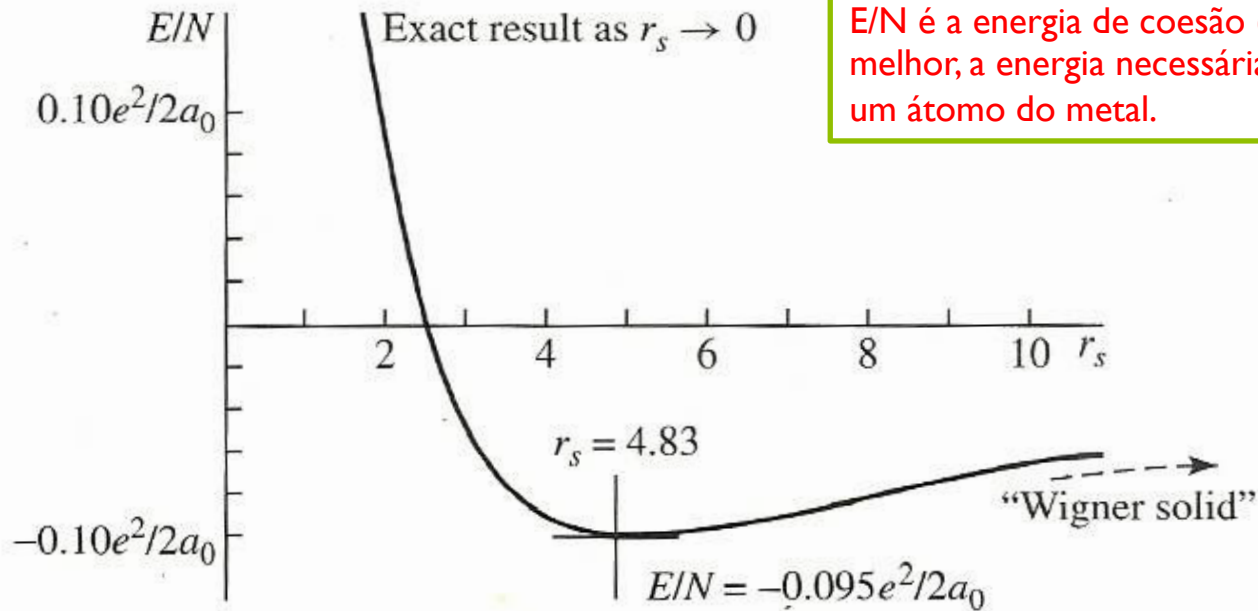
lousa

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

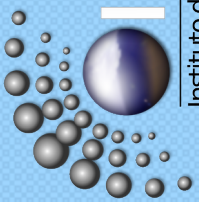
Assim, fazendo as contas temos:  $E^{(1)} = -\frac{e^2}{2a_0^2} N \frac{3}{2\pi} \left(\frac{9}{4\pi}\right)^{1/3} \frac{1}{r_s} \approx -\frac{e^2}{2a_0^2} N \frac{0,916}{r_s}$ ,  
fornecendo uma energia por partícula em primeira ordem igual a

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



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

*Um acordo muito razoável para um modelo tão simplificado!*



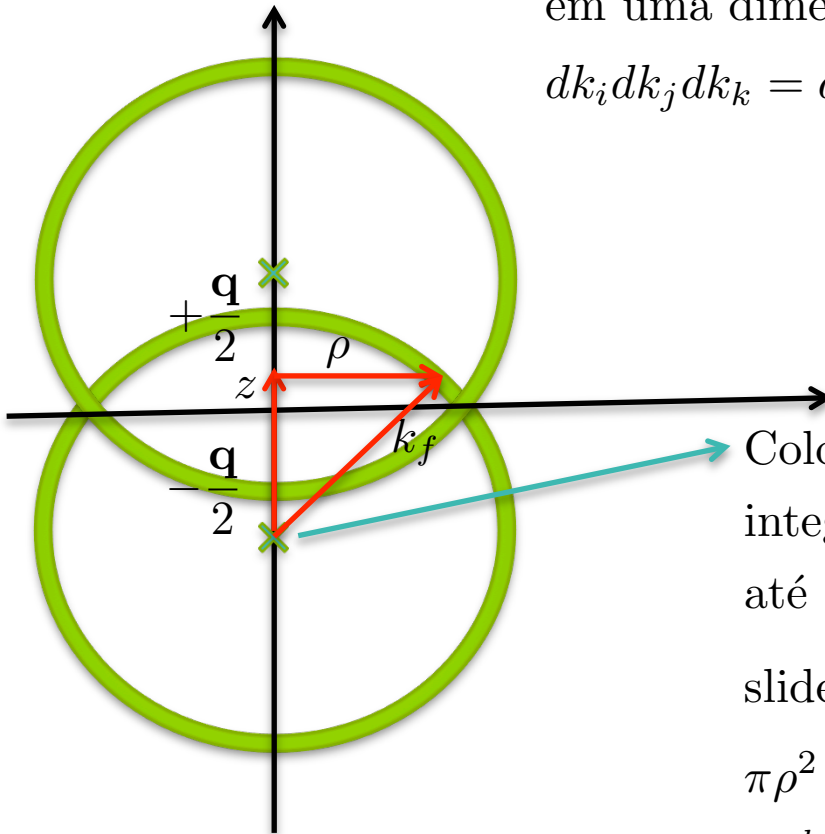
Element	Cohesive Energy	
	Per Mole	Per Atom
<a href="#">Actinium</a>	410 kJ/mol	4.25 eV/atom
<a href="#">Aluminum</a>	327 kJ/mol	3.39 eV/atom
<a href="#">Americium</a>	264 kJ/mol	2.73 eV/atom
<a href="#">Antimony</a>	265 kJ/mol	2.75 eV/atom
<a href="#">Argon</a>	7.74 kJ/mol	0.080 eV/atom
<a href="#">Arsenic</a>	285.3 kJ/mol	2.96 eV/atom
<a href="#">Barium</a>	183 kJ/mol	1.90 eV/atom
<a href="#">Beryllium</a>	320 kJ/mol	3.32 eV/atom
<a href="#">Bismuth</a>	210 kJ/mol	2.18 eV/atom
<a href="#">Boron</a>	561 kJ/mol	5.81 eV/atom
<a href="#">Bromine</a>	118 kJ/mol	1.22 eV/atom
<a href="#">Cadmium</a>	112 kJ/mol	1.16 eV/atom
<a href="#">Calcium</a>	178 kJ/mol	1.84 eV/atom
<a href="#">Carbon</a>	711 kJ/mol	7.37 eV/atom
<a href="#">Cerium</a>	417 kJ/mol	4.32 eV/atom
<a href="#">Cesium</a>	77.6 kJ/mol	0.804 eV/atom
<a href="#">Chlorine</a>	135 kJ/mol	1.40 eV/atom
<a href="#">Chromium</a>	395 kJ/mol	4.10 eV/atom
<a href="#">Cobalt</a>	424 kJ/mol	4.39 eV/atom
<a href="#">Copper</a>	336 kJ/mol	3.49 eV/atom
<a href="#">Curium</a>	385 kJ/mol	3.99 eV/atom
<a href="#">Dysprosium</a>	294 kJ/mol	3.04 eV/atom
<a href="#">Erbium</a>	317 kJ/mol	3.29 eV/atom
<a href="#">Europium</a>	179 kJ/mol	1.86 eV/atom
<a href="#">Fluorine</a>	81.0 kJ/mol	0.84 eV/atom
<a href="#">Gadolinium</a>	400 kJ/mol	4.14 eV/atom
<a href="#">Gallium</a>	271 kJ/mol	2.81 eV/atom
<a href="#">Germanium</a>	372 kJ/mol	3.85 eV/atom
<a href="#">Gold</a>	368 kJ/mol	3.81 eV/atom
<a href="#">Hafnium</a>	621 kJ/mol	6.44 eV/atom
<a href="#">Holmium</a>	302 kJ/mol	3.14 eV/atom
<a href="#">Indium</a>	243 kJ/mol	2.52 eV/atom
<a href="#">Iodine</a>	107 kJ/mol	1.11 eV/atom
<a href="#">Iridium</a>	670 kJ/mol	6.94 eV/atom
<a href="#">Iron</a>	413 kJ/mol	4.28 eV/atom
<a href="#">Krypton</a>	11.2 kJ/mol	0.116 eV/atom
<a href="#">Lanthanum</a>	431 kJ/mol	4.47 eV/atom
<a href="#">Lead</a>	196 kJ/mol	2.03 eV/atom
<a href="#">Lithium</a>	158 kJ/mol	1.63 eV/atom
<a href="#">Lutetium</a>	428 kJ/mol	4.43 eV/atom
<a href="#">Magnesium</a>	145 kJ/mol	1.51 eV/atom
<a href="#">Manganese</a>	282 kJ/mol	2.92 eV/atom
<a href="#">Mercury</a>	65 kJ/mol	0.67 eV/atom
<a href="#">Molybdenum</a>	658 kJ/mol	6.82 eV/atom
<a href="#">Neodymium</a>	328 kJ/mol	3.40 eV/atom
<a href="#">Neon</a>	1.92 kJ/mol	0.020 eV/atom
<a href="#">Neptunium</a>	456 kJ/mol	4.73 eV/atom
<a href="#">Nickel</a>	428 kJ/mol	4.44 eV/atom
<a href="#">Niobium</a>	730 kJ/mol	7.57 eV/atom
<a href="#">Nitrogen</a>	474 kJ/mol	4.92 eV/atom
<a href="#">Osmium</a>	788 kJ/mol	8.17 eV/atom
<a href="#">Oxygen</a>	251 kJ/mol	2.60 eV/atom
<a href="#">Palladium</a>	376 kJ/mol	3.89 eV/atom
<a href="#">Phosphorus</a>	331 kJ/mol	3.43 eV/atom
<a href="#">Platinum</a>	564 kJ/mol	5.84 eV/atom
<a href="#">Plutonium</a>	347 kJ/mol	3.60 eV/atom
<a href="#">Polonium</a>	144 kJ/mol	1.50 eV/atom
<a href="#">Potassium</a>	90.1 kJ/mol	0.934 eV/atom
<a href="#">Praseodymium</a>	357 kJ/mol	3.70 eV/atom
<a href="#">Radium</a>	160 kJ/mol	1.66 eV/atom
<a href="#">Radon</a>	19.5 kJ/mol	0.202 eV/atom
<a href="#">Rhenium</a>	775 kJ/mol	8.03 eV/atom
<a href="#">Rhodium</a>	554 kJ/mol	5.75 eV/atom
<a href="#">Rubidium</a>	82.2 kJ/mol	0.852 eV/atom
<a href="#">Ruthenium</a>	650 kJ/mol	6.74 eV/atom
<a href="#">Samarium</a>	206 kJ/mol	2.14 eV/atom
<a href="#">Scandium</a>	376 kJ/mol	3.90 eV/atom
<a href="#">Selenium</a>	237 kJ/mol	2.46 eV/atom
<a href="#">Silicon</a>	446 kJ/mol	4.63 eV/atom
<a href="#">Silver</a>	284 kJ/mol	2.95 eV/atom
<a href="#">Sodium</a>	107 kJ/mol	1.113 eV/atom
<a href="#">Strontium</a>	166 kJ/mol	1.72 eV/atom
<a href="#">Sulfur</a>	275 kJ/mol	2.85 eV/atom
<a href="#">Tantalum</a>	782 kJ/mol	8.10 eV/atom
<a href="#">Technetium</a>	661 kJ/mol	6.85 eV/atom
<a href="#">Tellurium</a>	211 kJ/mol	2.19 eV/atom
<a href="#">Terbium</a>	391 kJ/mol	4.05 eV/atom
<a href="#">Thallium</a>	182 kJ/mol	1.88 eV/atom
<a href="#">Thorium</a>	598 kJ/mol	6.20 eV/atom
<a href="#">Thulium</a>	233 kJ/mol	2.42 eV/atom
<a href="#">Tin</a>	303 kJ/mol	3.14 eV/atom
<a href="#">Titanium</a>	468 kJ/mol	4.85 eV/atom
<a href="#">Tungsten</a>	859 kJ/mol	8.90 eV/atom
<a href="#">Uranium</a>	536 kJ/mol	5.55 eV/atom
<a href="#">Vanadium</a>	512 kJ/mol	5.31 eV/atom
<a href="#">Xenon</a>	15.9 kJ/mol	0.16 eV/atom
<a href="#">Ytterbium</a>	154 kJ/mol	1.60 eV/atom
<a href="#">Yttrium</a>	422 kJ/mol	4.37 eV/atom
<a href="#">Zinc</a>	130 kJ/mol	1.35 eV/atom
<a href="#">Zirconium</a>	603 kJ/mol	6.25 eV/atom



[slide 8](#)

Na normalização da caixa temos  $k_i = 2\pi n_i/L$ . Assim, em uma dimensão  $dk_i = 2\pi dn_i/L \rightarrow$  em 3 dimensões  $dk_i dk_j dk_k = d^3 k = (2\pi)^3 / L^3 \underbrace{dn_i dn_j dn_k}$

contagem de 1 em 1



[slide 12](#)

Coloque o  $z = 0$  aqui e observe que a integração em  $z$  começa em  $q/2$  e vai até  $k_f$ . Note que o disco que sai do slide tem raio  $\rho = \sqrt{k_f^2 - z^2}$  e área  $\pi \rho^2 = \pi(k_f^2 - z^2)$ . Note que a integral  $\int_{q/2}^{k_f} \pi(k_f^2 - z^2) dz$  é a metade do volume desejado.