

## Aplicações - método diagramático $T=0$ .

Refs.: Secs. 10 e 12, Fetter and Walecke  
Secs. 5.1 e 5.5, Mahan

· método perturbativo p/ função de Green via diagramas de Feynman: em princípio, permite determinação  $G_{\alpha\beta}$  em  $\hbar$  ordem de teoria de perturbação;

entretanto, dificuldades avaliação série perturbativo

↳ necessidade introdução métodos de aproximação;

vamos considerar 2 tipos:

(i) autoenergia determinada via procedimento auto-consistente:  
aproximação de Hartree-Fock (HF) e

(ii) " " " some infinite conjunto  
partículas de diagramas (ring diagrams):  
random phase approximation (RPA).

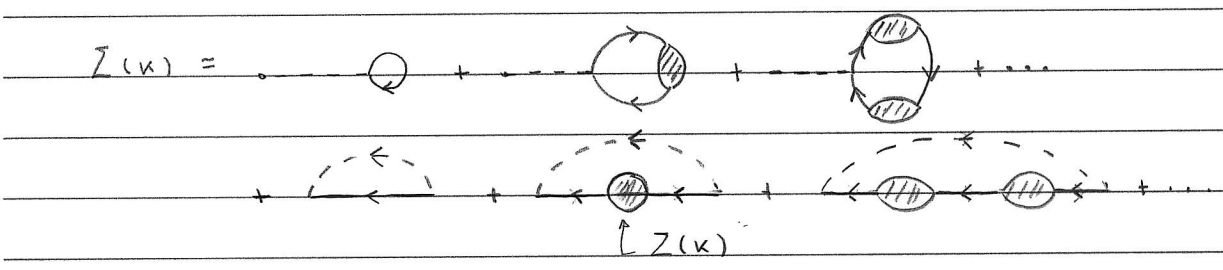


(ii) autoenergia independente  $\omega$ :  $Z^{(1)}(k) = Z^{(1)}(\vec{k})$  e

(iii) tempo de vida excitação  $\hbar/\Gamma_{\vec{k}} \rightarrow +\infty$ , pois  $Z^{(1)}(\vec{k}) \in \mathbb{R}$   
 $\hookrightarrow \Gamma_{\vec{k}} = 0$ :

: características ~ contribuições p/  $Z^{(1)}(\vec{k})$  a propagações livres: interpretação: cada partícula se movimenta em um meio de partículas não-interagentes!

$\hookrightarrow$  possível procedimento p/ incluir efeitos interação entre partículas do meio:



somando separadamente as duas séries, temos que:

$Z^{(HF)}(k) =$

(194.1)

onde: : função de Green interagente

$\hookrightarrow$  Eq. (194.1) e Eq. de Dyson (186.2);

: problema auto-consistente p/ determinação  $Z^{(HF)}(k)$ ;

de fato, verifica-se que esse problema auto-consistente = equações (usuais) da aproximação HF!



$$G^0(\vec{n}, \vec{n}'; \omega) = \sum_j \varphi_j^0(\vec{n}) \varphi_j^{0*}(\vec{n}') \left( \frac{\theta(E_i^0 - E_F)}{\omega - E_j^0/\hbar + i\eta} + \frac{\theta(E_F - E_i^0)}{\omega - E_j^0/\hbar - i\eta} \right)$$

onde  $E_F$ : energia último nível ocupado (196.1)

pt sistema não-interagente, Eq. (196.1)  $\rightarrow$  # partículas:

$$N = N^0 = (2S+1) \sum_j \theta(E_F - E_j^0) \quad (196.2)$$

notas: Eqs. (195.1) -- (196.1): problema auto-consistente pt  $G(\vec{n}, \vec{n}', \omega)$ !

• como  $Z(\vec{n}_1, \vec{n}_2)$  independe  $\omega$ , podemos considerar ansatz:

$$G(\vec{n}, \vec{n}', \omega) = \sum_j \varphi_j(\vec{n}) \varphi_j^*(\vec{n}') \left( \frac{\theta(E_j - E_F)}{\omega - E_j/\hbar + i\eta} + \frac{\theta(E_F - E_j)}{\omega - E_j/\hbar - i\eta} \right)$$

(196.3)

onde: base (partícula única)  $\varphi_j(\vec{n})$ ;

autoenergias  $E_j$  : determinados posteriormente

$\varepsilon$  energia de Fermi  $E^F$

Obs.: similaridade Eqs. (196.1) e (196.3): ideia (193.1)!

• Eqs. (195.1) e (196.3):

$$\hbar Z(\vec{n}_1, \vec{n}_2) = \delta(\vec{n}_1 - \vec{n}_2) \int d^3n'_1 V(\vec{n}_1 - \vec{n}'_1) n(\vec{n}'_1)$$

$$- V(\vec{n}_1 - \vec{n}_2) \sum_j \varphi_j(\vec{n}_1) \varphi_j^*(\vec{n}_2) \theta(E_F - E_j) \quad (196.4)$$

onde  $n(\vec{n}) = (2S+1) \sum_j |\varphi_j(\vec{n})|^2 \theta(E_F - E_j)$  : densidade de partículas

• a partir da Eq. (196.4), é possível determinar uma eq. de Schrödinger p/ estados  $\psi_j(\vec{r})$  e energias  $E_j$ :

$$\left( -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + U_{\text{ext}}(\vec{r}) \right) \psi_j(\vec{r}) + \int d^3 r' \hbar \Sigma(\vec{r}, \vec{r}') \psi_j(\vec{r}') = E_j \psi_j(\vec{r})$$

(197.1)

notas Eq. (197.1):  $\hbar \Sigma(\vec{r}, \vec{r}')$ : potencial estático não-loccal

notas Eq. (196.4):

$\hbar \Sigma(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ : termo loccal e  $\sim n(\vec{r})$ : termo dinelo

" não-loccal : " troca

↳ Eqs. (196.4) e (197.1): eqs. (auto-consistentes) usuais da aproximação HF que permitem a determinação dos estados  $\psi_j(\vec{r})$  e energias  $E_j$  via um procedimento auto-consistente (veja Sec. 1.3, Madelung, em particular, Eq. (1.23)).

• Eqs. (131.2), (196.4) e (197.1)  $\rightarrow$  determinação energia do estado fundamental; verifica-se que (veja Eqs. (10.18) e (10.19), Fetter):

$$E_0 = (2S+1) \sum_j E_j \theta(E_F - E_j)$$

$$- \frac{1}{2} (2S+1) \sum_{ij} \theta(E_F - E_j) \theta(E_F - E_i) \int d^3 r_1 d^3 r_2 +$$

$$+ v(n_1 - n_2) \left( |\psi_j(\vec{r}_1)|^2 |\psi_i(\vec{r}_2)|^2 \right) : \text{ termo dinelo}$$

$$- \psi_j^*(\vec{r}_1) \psi_i^*(\vec{r}_2) \psi_i(\vec{r}_1) \psi_j(\vec{r}_2) : \text{ termo de troca}$$

(197.1)

• p/ sistema homogêneo, i.e.,  $U_{\text{ext}}(\vec{r}) = 0$ , verifica-se que

$$\psi_j(\vec{r}) \rightarrow \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} : \text{ solução Eq. (197.1)}$$

$$\hookrightarrow \text{Eq. (196.4)}: \quad \hbar \bar{\Sigma}(\vec{n}_1, \vec{n}_2) = \delta(\vec{n}_1 - \vec{n}_2) \int d^3 n' v(\vec{n}'_1 - \vec{n}'_2) n(\vec{n}'_1)$$

$$v(\vec{k}=0) = n : \text{cte}$$

$$- v(\vec{n}_1 - \vec{n}_2) \frac{1}{v} \sum_{\vec{q}} e^{i\vec{q} \cdot (\vec{n}_1 - \vec{n}_2)} \Theta(E_F - E_q)$$

$$\hookrightarrow \hbar \bar{\Sigma}(\vec{k}) = \int d^3 n e^{-i\vec{k} \cdot \vec{n}} \hbar \bar{\Sigma}(\vec{n})$$

$$= \int d^3 n e^{-i\vec{k} \cdot \vec{n}} \delta(\vec{n}) v(\vec{k}=0) \cdot n$$

$$= \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} \underbrace{\int d^3 n e^{-i(\vec{k}-\vec{q}) \cdot \vec{n}} v(\vec{n}) \Theta(E_F - E_q)}_{v(\vec{k}-\vec{q})} : \text{Eq. (188.1)}$$

$$\hookrightarrow \text{Eq. (197.1)}:$$

$$E_0 = (2S+1) v \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \left( E_{\vec{k}}^0 - \frac{1}{2} \hbar \bar{\Sigma}(\vec{k}) \right) \Theta(K_F - k)$$

$$E_{\vec{k}}^0 + \frac{1}{2} \hbar \bar{\Sigma}(\vec{k})$$

$$= (2S+1) v \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} E_{\vec{k}}^0 \Theta(K_F - k) \quad : \text{comparar Eq. (48.1)}$$

$$+ \frac{1}{2} v v(\vec{q}=0) n (2S+1) \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \Theta(K_F - k)$$

$$\frac{1}{v} (2S+1) \int \frac{d^3 k}{k^2} \Theta(K_F - k) = \frac{n}{v}$$

$$\frac{1}{2} v v(\vec{q}=0) n^2$$

$$: \text{comparar Eq. (52.2)}$$

$$- \frac{1}{2} v (2S+1) \int \frac{d^3 k d^3 q}{(2\pi)^6} v(\vec{k}-\vec{q}) \Theta(K_F - k) \Theta(K_F - q) : \text{veja pg. 55.1}$$

$$\hookrightarrow \frac{4\pi e^2}{|\vec{k}-\vec{q}|^2} : \text{p/ interaç\u00e3o Coulomb}$$

· Random phase approximation (RPA) - I,

ideia: considerar o gás de elétrons degenerado (pg. 49) no limite de altas densidades (parâmetro  $r_s \ll 1$ , veja pg. 52) e determinar a energia de conexão (54.2);  
 procedimento inicial: baseado na relação entre energia estado fundamental e polarização própria  $\pi(q)$  / função dielétrica  $\epsilon(q)$ ;  
 segundo procedimento ( $T \neq 0$ ): baseado análise diagramas ordem superior p/ autoenergia.

inicial I: expressão alternativa p/ a energia do estado fundamental em termos da função de Green;

Lembrar Eq. (132.3) p/ sistema homogêneo:

$$E = \frac{\pm i}{2} \sum_{\alpha} \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \int \frac{d^3k d\omega}{(2\pi)^4} \underbrace{\left( \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \hbar\omega \right)}_{(I)} e^{i\omega\eta} G_{\alpha\alpha}(\vec{k}, \omega)$$

verifica-se que é possível escrever a Eq. (132.3) de modo que (I) assume a forma (veja Eqs. (7.28) - (7.32), Fetter):

$$(I) = \hbar\omega - \hbar^2 k^2 / 2m;$$

nesse caso, é necessário introduzir:

$$H(\lambda) = H_0 + \lambda V ; \quad 0 \leq \lambda \leq 1;$$

(199.1)

$$H(\lambda) |\psi_0(\lambda)\rangle = E(\lambda) |\psi_0(\lambda)\rangle ; \quad \langle \psi_0(\lambda) | \psi_0(\lambda) \rangle = 1;$$

↳  $\lambda = 0$  :  $|\psi_0(0)\rangle \equiv |\Phi_0\rangle$  : estado fund. não-interagente;

$\lambda = 1$  :  $|\psi_0(1)\rangle \equiv |\Psi_0\rangle$  : " " interagente;





noten:

$$\langle \psi_0(\lambda) | H(\lambda) | \psi_0(\lambda) \rangle = E(\lambda) \langle \psi_0(\lambda) | \psi_0(\lambda) \rangle = E(\lambda)$$

$$\hookrightarrow \frac{dE(\lambda)}{d\lambda} = \left( \frac{d \langle \psi_0(\lambda) |}{d\lambda} \right) H(\lambda) | \psi_0(\lambda) \rangle + \langle \psi_0(\lambda) | H(\lambda) | \left( \frac{d | \psi_0(\lambda) \rangle}{d\lambda} \right)$$

$$E(\lambda) | \psi_0(\lambda) \rangle$$

$$E(\lambda) \langle \psi_0(\lambda) |$$

$$+ \langle \psi_0(\lambda) | \frac{dH(\lambda)}{d\lambda} | \psi_0(\lambda) \rangle$$

$$\langle \psi_0(\lambda) | V | \psi_0(\lambda) \rangle$$

$$\hookrightarrow \frac{dE(\lambda)}{d\lambda} = E(\lambda) \frac{d \langle \psi_0(\lambda) | \psi_0(\lambda) \rangle}{d\lambda} + \langle \psi_0(\lambda) | V | \psi_0(\lambda) \rangle + \frac{\lambda}{\lambda}$$

$$= 0$$

$$\hookrightarrow E(\lambda=1) - E(\lambda=0) = E - E_0 = \int_0^1 \frac{d\lambda}{\lambda} \langle \psi_0(\lambda) | \lambda V | \psi_0(\lambda) \rangle \quad (199.2)$$

$$\text{onde } E = E(\lambda=1) = \langle \psi_0(1) | H(1) | \psi_0(1) \rangle = \langle \psi_0 | H | \psi_0 \rangle$$

$$E_0 = E(\lambda=0) = \langle \psi_0(0) | H(0) | \psi_0(0) \rangle = \langle \Phi_0 | H_0 | \Phi_0 \rangle$$

verifica-se que:

$$E = E_0 \pm i \frac{V}{2} \sum_{\alpha} \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \int_0^{\pm} d\lambda \int \frac{d^3k d\omega}{(2\pi)^4} e^{i\omega\eta} \left( \hbar\omega - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \right) G_{\alpha}^{\lambda}(\vec{k}, \omega)$$

onde:

(200.1)

$$E = \langle \psi_0(\lambda) | H(\lambda) | \psi_0(\lambda) \rangle = \langle \psi_0 | H_0 + V | \psi_0 \rangle ;$$

$$E_0 = \langle \psi_0(0) | H(0) | \psi_0(0) \rangle = \langle \Phi_0 | H_0 | \Phi_0 \rangle$$

e  $G_{\alpha}^{\lambda}(\vec{k}, \omega)$ : função de Green p/ hamiltoniano sistema

$$H = H_0 + \lambda V : \text{lembrar que } \psi_{\alpha}(x) = \psi_{H_{\alpha}}(x) : \text{Eq. (124.3)!}$$

inicial  $\mathbb{I}$ : função de conexão densidade-densidade;

$$\text{Lembrar op. densidade (43.2): } \hat{\rho}(\vec{r}) = \sum_{\alpha} \psi_{\alpha}^{\dagger}(\vec{r}) \psi_{\alpha}(\vec{r})$$

$$\cdot \text{Definição: } \tilde{\rho}(\vec{r}) = \hat{\rho}(\vec{r}) - \langle \psi_0 | \hat{\rho}(\vec{r}) | \psi_0 \rangle$$

$$= \hat{\rho}(\vec{r}) - \langle \hat{\rho}(\vec{r}) \rangle \quad (200.2)$$

↳ Eqs. (124.2) e (200.2):

$$\tilde{\rho}_H(\vec{r}, t) = \tilde{\rho}_H(x) = e^{iHt/\hbar} \tilde{\rho}(\vec{r}) e^{-iHt/\hbar} \quad (200.3)$$

Definição: função de conexão densidade-densidade:

$$iD(x, x') = \frac{\langle \psi_0 | T(\tilde{\rho}_H(x) \tilde{\rho}_H(x')) | \psi_0 \rangle}{\langle \psi_0 | \psi_0 \rangle} \quad (200.4)$$

Eq. (200.4): exemplo função de Green de 2 partículas,  
veja, e.g., Sec. 15, Landau.

propriedade (verificar):  $\mathcal{D}(x, x') = \mathcal{D}(x', x)$  (201.1)

Vamos considerar Eq. (200.4) p/ o sistema não-interagente:

$$\text{nesse caso: } \psi_H(x) = e^{iH_0 t/\hbar} \psi_{I\alpha}(\vec{a}) e^{-iH_0 t/\hbar} \psi_{I\alpha}(x) = \psi_{\alpha}(x)$$

: veja Eqs. (124.2)

$$\underline{\tilde{\rho}}_H(x) = e^{iH_0 t/\hbar} \rho(\vec{a}) e^{-iH_0 t/\hbar} \tilde{\rho}_I(x) \quad \underline{=} \quad (153.1)$$

$$\hookrightarrow i\mathcal{D}^0(x, x') = \langle \Phi_0 | T(\tilde{\rho}_I(x) \tilde{\rho}_I(x')) | \Phi_0 \rangle ; \langle \Phi_0 | \Phi_0 \rangle = 1$$

(201.2)

como (verificar):

$$\langle \tilde{\rho}_I(x) \tilde{\rho}_I(x') \rangle = \langle \hat{\rho}_I(x) \hat{\rho}_I(x') \rangle - \langle \hat{\rho}_I(x) \rangle \langle \hat{\rho}_I(x') \rangle, \text{ temos que:}$$

$$i\mathcal{D}^0(x, x') = \sum_{\alpha\beta} \langle \Phi_0 | T(\psi_{\alpha}^{\dagger}(x) \psi_{\alpha}(x) \psi_{\beta}^{\dagger}(x') \psi_{\beta}(x')) | \Phi_0 \rangle$$

$$- \sum_{\alpha\beta} \underbrace{\langle \Phi_0 | \psi_{\alpha}^{\dagger}(x) \psi_{\alpha}(x) | \Phi_0 \rangle \langle \Phi_0 | \psi_{\beta}^{\dagger}(x') \psi_{\beta}(x') | \Phi_0 \rangle}_{\langle \hat{\rho}(\vec{a}) \rangle \langle \hat{\rho}(\vec{a}') \rangle}$$

utilizando o teorema de Wick (164.2) p/ o 1º termo:

$$i\mathcal{D}^0(x, x') = \sum_{\alpha\beta} \langle \Phi_0 | T(\psi_{\alpha}(x) \psi_{\alpha}^{\dagger}(x')) | \Phi_0 \rangle \langle \Phi_0 | T(\psi_{\beta}(x') \psi_{\beta}^{\dagger}(x)) | \Phi_0 \rangle$$

$$- \langle \Phi_0 | T(\psi_{\alpha}(x) \psi_{\beta}^{\dagger}(x')) | \Phi_0 \rangle \langle \Phi_0 | T(\psi_{\beta}(x') \psi_{\alpha}^{\dagger}(x)) | \Phi_0 \rangle$$

$$- \langle \hat{\rho}(\vec{a}) \rangle \langle \hat{\rho}(\vec{a}') \rangle$$

$$\begin{aligned} \hookrightarrow iD^\circ(x, x') &= \sum_{\alpha} iG_{\alpha\alpha}^\circ(x, x') \sum_{\beta} iG_{\beta\beta}^\circ(x', x') \\ &= (-1) \langle \hat{p}(\vec{n}) \rangle = (-1) \langle \hat{p}(\vec{n}') \rangle : \text{Eq. (171.2)} \end{aligned}$$

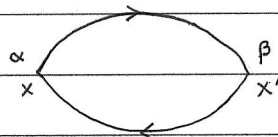
$$- \sum_{\alpha\beta} iG_{\alpha\beta}^\circ(x, x') iG_{\beta\alpha}^\circ(x', x) = \langle \hat{p}(\vec{n}) \rangle \langle \hat{p}(\vec{n}') \rangle$$

$$\hookrightarrow iD^\circ(x, x') = \sum_{\alpha\beta} G_{\alpha\beta}^\circ(x, x') G_{\beta\alpha}^\circ(x', x) \quad (202.1)$$

se  $G_{\alpha\beta}^\circ(x, x') = \delta_{\alpha\beta} G^\circ(x, x')$ , temos que:

$$iD^\circ(x, x') = (2S+1) G^\circ(x, x') G^\circ(x', x) \quad (202.2)$$

Eq. (202.1) :: diagrama:



(202.3)

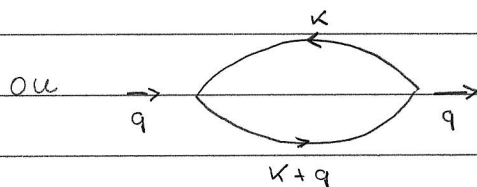
pr um sistema homogêneo:

$$G^\circ(x, x') = G^\circ(x-x') = \int \frac{d^4k}{(2\pi)^4} e^{ik \cdot (x-x')} G^\circ(k) : \text{Eq. (131.3)}$$

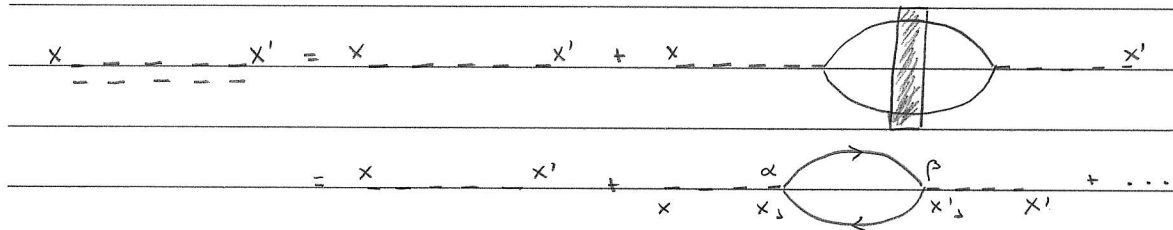
verifique-se que (exercício):

$$\begin{aligned} iD^\circ(x, x') &= \int \frac{d^4q}{(2\pi)^4} e^{iq \cdot (x-x')} \underbrace{(2S+1) \int \frac{d^4k}{(2\pi)^4} G^\circ(k+q) G^\circ(k)} \\ &= iD^\circ(q) = iD^\circ(\vec{q}, \nu) \end{aligned}$$

(202.4)



notar: similitude de Eqs. (202.3)/(202.4) e inserção de polarização (190.1);  
de fato, Eq. (190.1):



ou

$$U^R(x, x') = U(x, x') + \frac{(-i)}{\hbar} \int_{\alpha\beta} d^4x_2 d^4x'_2 U(x, x_2) G_{\alpha\beta}^0(x_2, x'_2) G_{\beta\alpha}^0(x'_2, x') + \dots$$

notar fator  $\rightarrow$

$$= U(x, x') + \int d^4x_2 d^4x'_2 U(x, x_2) \underbrace{\frac{(-i)}{\hbar} \int_{\alpha\beta} G_{\alpha\beta}^0(x_2, x'_2) G_{\beta\alpha}^0(x'_2, x')}_{\equiv \tilde{\Pi}^0(x, x')} U(x'_2, x') + \dots$$

(203.1)

comparando Eqs. (202.2) e (203.1), vemos que

$$D^0(x, x') = \hbar \tilde{\Pi}^0(x, x') = \hbar \tilde{\Pi}^0(x, x') \tag{203.2}$$

↑  
válida apenas em menor ordem!

como a relação acima pode ser estabelecido por diagramas de ordem superior, vemos que:

$$D(x, x') = \hbar \tilde{\Pi}(x, x') : \tag{203.3}$$

i relação entre a função de correlação densidade-densidade e a inserção de polarização total

• sobre a energia de correlação:

Lembran Eq. (43.3): termo interação entre pares de partículas  
via potencial independente de spin:

$$\hat{V} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} \int d^3n d^3n' \psi_{\alpha}^{\dagger}(\vec{n}) \psi_{\beta}^{\dagger}(\vec{n}') \underbrace{V(\vec{n}, \vec{n}')}_{V(\vec{n}-\vec{n}')} \psi_{\beta}(\vec{n}') \psi_{\alpha}(\vec{n})$$

$V(\vec{n}-\vec{n}')$ : hipótese

$$\hookrightarrow \langle \hat{V} \rangle = \langle \psi_0 | \hat{V} | \psi_0 \rangle =$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} \int d^3n d^3n' V(\vec{n}-\vec{n}') \langle \psi_{\alpha}^{\dagger}(\vec{n}) \psi_{\beta}^{\dagger}(\vec{n}') \psi_{\beta}(\vec{n}') \psi_{\alpha}(\vec{n}) \rangle$$

$$= \langle \psi_{\alpha}^{\dagger}(\vec{n}) ( \delta_{\alpha\beta} \delta(\vec{n}-\vec{n}') - \psi_{\alpha}(\vec{n}) \psi_{\beta}^{\dagger}(\vec{n}') ) \psi_{\beta}(\vec{n}') \rangle$$

$$= \langle \hat{p}(\vec{n}) \hat{p}(\vec{n}') \rangle - \delta(\vec{n}-\vec{n}') \langle \hat{p}(\vec{n}) \rangle$$

Eq. (200.2)

$$= \frac{1}{2} \int d^3n d^3n' V(\vec{n}-\vec{n}') \left( \langle \tilde{p}(\vec{n}) \tilde{p}(\vec{n}') \rangle + \langle \hat{p}(\vec{n}) \rangle \langle \hat{p}(\vec{n}') \rangle - \delta(\vec{n}-\vec{n}') \langle \hat{p}(\vec{n}) \rangle \right) \quad (204.1)$$

como  $\tilde{p}_H(\vec{n}, t) \tilde{p}_H(\vec{n}', t) = e^{iHt/\hbar} \tilde{p}(\vec{n}) e^{-iHt/\hbar} e^{+iHt/\hbar} \tilde{p}(\vec{n}') e^{-iHt/\hbar}$

e propriedades (201.1), temos que:

$$\langle \tilde{p}(\vec{n}) \tilde{p}(\vec{n}') \rangle = i \mathcal{D}(\vec{n}, t; \vec{n}', t);$$

pt sistema uniforme:  $\langle \hat{p}(\vec{n}) \rangle = N/V = n = \text{cte}$ : Eq. (48.2)

$$\hookrightarrow \langle \hat{V} \rangle = \frac{1}{2} \int d^3n d^3n' V(\vec{n}-\vec{n}') \left( i \mathcal{D}(\vec{n}, t; \vec{n}', t) + n^2 - \delta(\vec{n}-\vec{n}') n \right) \quad (204.2)$$

$$\doteq i \mathcal{D}^{\circ}(\vec{n}, t; \vec{n}', t)$$

$$\hookrightarrow \langle \hat{V} \rangle = \frac{1}{2} \int d^3n d^3n' V(\vec{n}-\vec{n}') (i\mathcal{D}^0(\vec{n},t; \vec{n}',t) + n^2 - \delta(\vec{n}-\vec{n}')n)$$

$\langle \Phi_0 | \hat{V} | \Phi_0 \rangle$  : comparison c/ Eq. (204.2)

$$+ \frac{1}{2} \int d^3n d^3n' V(\vec{n}-\vec{n}') (i\mathcal{D}(\vec{n},t; \vec{n}',t) - i\mathcal{D}^0(\vec{n},t; \vec{n}',t)) \quad (205.1)$$

Rembrar Eq. (199.2):

$$E - \langle \Phi_0 | H_0 | \Phi_0 \rangle = E - E_0 = \int_0^1 \frac{d\lambda}{\lambda} \langle \psi_0(\lambda) | \lambda \hat{V} | \psi_0(\lambda) \rangle$$

Eq. (205.1):  $\langle \hat{V} \rangle = \langle \psi_0 | \hat{V} | \psi_0 \rangle \rightarrow \langle \psi_0(\lambda) | \lambda \hat{V} | \psi_0(\lambda) \rangle =$

$$= \langle \Phi_0 | \lambda \hat{V} | \Phi_0 \rangle + \frac{1}{2} \int_0^1 \frac{d\lambda}{\lambda} \int d^3n d^3n' \lambda V(\vec{n}-\vec{n}') (i\mathcal{D}^\lambda(\vec{n},t; \vec{n}',t) - i\mathcal{D}^0(\vec{n},t; \vec{n}',t))$$

↑ comparison c/ Eq. (200.1)

$$\hookrightarrow E = E_0 + \int_0^1 \frac{d\lambda}{\lambda} \langle \Phi_0 | \lambda \hat{V} | \Phi_0 \rangle$$

$E_0 + \langle \Phi_0 | \hat{V} | \Phi_0 \rangle = \langle \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_0 \rangle$  : Eq. (51.3) : Hartree-Fock

$$+ \frac{1}{2} \int_0^1 \frac{d\lambda}{\lambda} \int d^3n d^3n' \lambda V(\vec{n}-\vec{n}') (i\mathcal{D}^\lambda(\vec{n},t; \vec{n}',t) - i\mathcal{D}^0(\vec{n},t; \vec{n}',t))$$

$E_c$  : energie de correlaçõ : Eq. (54.2)

· p/ sistema homogêneo :  $\mathcal{D}(\vec{n},t; \vec{n}',t) = \mathcal{D}(\vec{n}-\vec{n}',t)$

$\hookrightarrow$  é interessante escrever  $E_c$  em termos  $\mathcal{D}(q) = \mathcal{D}(\vec{q},\omega)$  :

: veja Eq. (202.4) ; verifique-se que (exercício):

$$E_c = \frac{1}{2} v \int_0^1 \frac{d\lambda}{\lambda} \int \frac{d^4q}{(2\pi)^4} \lambda V(\vec{q}) (i\mathcal{D}^\lambda(\vec{q},\omega) - i\mathcal{D}^0(\vec{q},\omega)) \quad (205.2)$$

onde:  $V$ : volume do sistema

$V(\vec{q})$ : transf. Fourier potencial  $V(\vec{r}-\vec{r}')$

Obs.: propriedade (201.1)  $\rightarrow$  não é necessário adicionar fator  $e^{\pm i\vec{v}\cdot\vec{q}}$  integrando Eq. (205.2)

como:  $V(\vec{q}) i D^0(\vec{q}, \nu) = i \hbar U(q) \tilde{\pi}^0(q)$ ; veja Eqs. (162.3) e (203.2)

$$\stackrel{\equiv}{=} V(\vec{q}) i D^\lambda(\vec{q}, \nu) = i \hbar U(q) \tilde{\pi}^\lambda(q) = i \hbar U^R(q) \tilde{\pi}^\lambda(q)$$

comparam Eqs. (190.1) e (191.1)

$\uparrow$  inserção

polarização

total própria

$$\hookrightarrow E_c = \frac{1}{2} i \hbar V \int_0^1 \frac{d\lambda}{\lambda} \int \frac{d^4 q}{(2\pi)^4} (\lambda U^R(q) \tilde{\pi}^\lambda(q) - \lambda U(q) \tilde{\pi}^0(q)) \quad (206.1)$$

$$\text{Lembrar Eq. (193.2): } U^R(q) \tilde{\pi}(q) = \frac{U(q) \tilde{\pi}(q)}{1 - U(q) \tilde{\pi}(q)} = \frac{1 - \epsilon(q)}{\epsilon(q)}$$

$$\hookrightarrow \lambda U^R(q) \tilde{\pi}^\lambda(q) = \frac{1}{\epsilon^\lambda(q)} - 1$$

$$\hookrightarrow E_c = \frac{1}{2} i \hbar V \int_0^1 \frac{d\lambda}{\lambda} \int \frac{d^4 q}{(2\pi)^4} \left( \frac{1}{\epsilon^\lambda(q)} - 1 - \lambda U(q) \tilde{\pi}^0(q) \right) : \quad (206.2)$$

: energia de correlação em termos da função dielétrica

• próxima etapa: determinar  $E_c$  p/ gás de elétrons degenerado; nesse caso termos  $\propto V(\vec{q}=0)$ : ausentes

$\hookrightarrow$  diagramas "tadpole" (eg., Figs. (171.1) (D); (176.1) (B)) ausentes de série perturbativa!



• sobre o termo  $\lambda U^R(q) \pi^\lambda(q)$ :

Eq. (191.2) pode ser escrita como:

$$U^R(q) \pi(q) = U(q) \pi(q) (1 - U(q) \pi(q))^{-1}$$

$$= U(q) \pi(q) (1 + U(q) \pi(q) + (U(q) \pi(q))^2 + \dots)$$

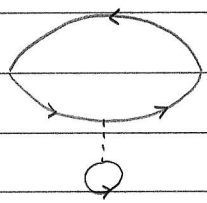
Se  $\pi(q) = \pi^0(q) + \pi^{(1)}(q) + \pi^{(2)}(q) + \dots$

↑ polarização própria em 1ª ordem

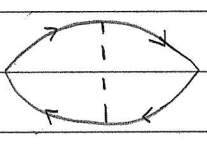
$$\hookrightarrow U^R(q) \pi(q) = U(q) \pi^0(q) + U(q) \pi^{(1)}(q) + U(q) \pi^0(q) U(q) \pi^0(q)$$

$$+ U(q) \pi^{(1)}(q) U(q) \pi^{(1)}(q) + \dots \tag{207.1}$$

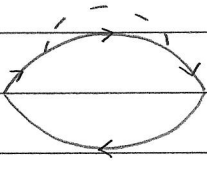
a polarização própria em 1ª ordem é dada por:



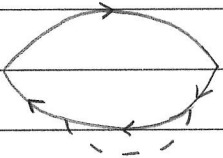
(1)



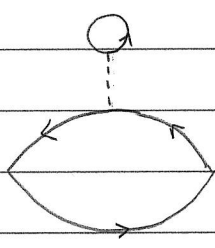
(2)



(3)



(4)



(5)

(207.2)

↳ em particular, temos as seguintes contribuições em 2ª ordem p/  $E_c$ , veja Eq. (206.1):

$$E_{c,n}^{(2)} = \frac{1}{2} i \hbar V \int_0^1 \frac{d\lambda}{\lambda} \int \frac{d^4 q}{(2\pi)^4} (\lambda U(q) \pi^0(q))^2$$

(207.3)

$$E_c^{(2,a)} = \frac{1}{2} i \hbar V \int_0^1 \frac{d\lambda}{\lambda} \int \frac{d^4 q}{(2\pi)^4} (\lambda U(q) \pi^{(1,a)}(q))^2 ; a = 2, 3, 4$$

Verifica-se que:

-  $E_c^{(2,1)} = E_c^{(2,5)} = 0$ , pois diagramas (207.2) (1) e (5)  $\sim V(\vec{q}=0)$ ;

-  $E_c^{(2,2)}$ ,  $E_c^{(2,3)}$  e  $E_c^{(2,4)} < +\infty$ : veja Prob. 4.13, Fetter;

-  $E_{c,n}^{(2)}$ : apresenta divergência logarítmica p/  $q \rightarrow 0$ ,  
veja Prob. 1.5, Fetter;

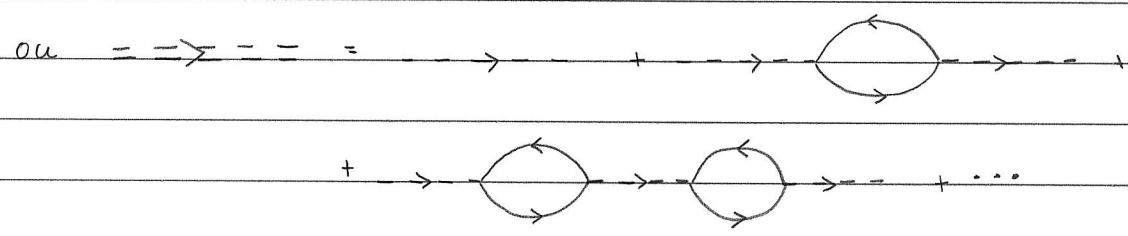
de fato, essa divergência está presente em termos de ordem superior, pois a série (207.1) apresenta termos da forma  $(U(q)\pi^0(q))^n$ ;

entretanto, é possível obter um resultado finito para as contribuições  $E_{c,n}^{(n)}$ , se considerarmos o seguinte potencial efetivo:

$$U_{ef}(q) = U(q) + U(q)\pi^0(q)U(q) + U(q)(\pi^0(q)U(q))^2 + \dots$$

$$= U(q) \left( 1 + \pi^0(q)U(q) + (\pi^0(q)U(q))^2 + \dots \right)$$

$$= \frac{U(q)}{1 - \pi^0(q)U(q)} \tag{208.1}$$



↳ a contribuição dos termos  $E_{c,n}^{(n)}$  p/  $E_c$  é dada por:  $n$ : ring diagrams

$$E_{c,n} = \frac{1}{2} i \hbar v \int_0^1 \frac{d\lambda}{\lambda} \int \frac{d^4q}{(2\pi)^4} \left( \lambda U_{ef}(q)\pi^0(q) - \lambda U(q)\pi^0(q) \right)$$

$$E_{c,n} = \frac{1}{2} i \hbar v \int_0^1 \frac{d\lambda}{\lambda} \int \frac{d^4 q}{(2\pi)^4} \sum_{n \geq 2} (\lambda U(q) \tilde{\pi}^0(q))^n$$

$$(\lambda U(q) \tilde{\pi}^0(q))^2 \sum_{n \geq 0} (\lambda U(q) \tilde{\pi}^0(q))^n$$

$$\frac{(\lambda U(q) \tilde{\pi}^0(q))^2}{1 - \lambda U(q) \tilde{\pi}^0(q)}$$

$$\lambda U(q) \tilde{\pi}^0(q) \frac{\lambda U(q) \tilde{\pi}^0(q)}{1 - \lambda U(q) \tilde{\pi}^0(q)}$$

$$\lambda U(q) \tilde{\pi}^0(q) \frac{\lambda U(q) \tilde{\pi}^0(q)}{1 - \lambda U(q) \tilde{\pi}^0(q)}$$

$$\equiv \hat{U}_{\text{ef}}(q)$$

$$\hookrightarrow E_{c,n} = \frac{1}{2} i \hbar v \int_0^1 \frac{d\lambda}{\lambda} \int \frac{d^4 q}{(2\pi)^4} \lambda U(q) \tilde{\pi}^0(q) \hat{U}_{\text{ef}}(q) \tilde{\pi}^0(q) \quad (209.1)$$

Obs.:

· potencial efetivo  $U_{\text{ef}}(q)$  / série (208.1): RPA;

· Eq. (209.1): contribuição RPA p/ energia de correlação  $E_c$ ;

· similaridade entre Eqs. (191.2) e (208.1)

$$\hookrightarrow \epsilon_{\text{RPA}}(q) = 1 - \tilde{\pi}^0(q) U(q): \text{função dielétrica na RPA} \quad (209.2)$$

· procedimento alternativo (via eqs. de movimento) p/ determinação

Eq. (209.2): veja Eqs. (5.135) -- (5.152), Mohn.

notas Eq. (208.1): soma (convergente) série de termos divergentes

$\hookrightarrow$  contribuição finita p/  $E_c$ !

· Eqs. (207.3) e (209.1)  $\rightarrow$  aproximação p/  $E_c$  (veja Fig. 12.5, Fetter):

$$E_c = E_{c,n} + E_c^{(2.2)} + E_c^{(2.3)} + E_c^{(2.4)} + \dots$$



$$\begin{aligned} \hookrightarrow \pi^0(\vec{q}, \nu) &= \frac{2}{h} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \theta(|\vec{k} + \vec{q}| - k_F) \theta(k_F - k) * \\ &* \left( \frac{1}{\nu + \omega_k - \omega_{\vec{k} + \vec{q}} + i\eta} - \frac{1}{\nu + \omega_{\vec{k} + \vec{q}} - \omega_{\vec{k}} - i\eta} \right) \end{aligned} \quad (211.1)$$

como (1) =  $\frac{2(\omega_{\vec{k} + \vec{q}} - \omega_{\vec{k}} - i\eta)}{\nu^2 - (\omega_k - \omega_{\vec{k} + \vec{q}} + i\eta)^2}$ , temos que:

$$\pi^0(\vec{q}, \nu) \sim \frac{1}{\nu^2}, \quad \text{p/ } \nu \rightarrow +\infty \quad (211.2)$$

e somente caso  $\nu > 0$  precisa ser analisado!

Lembrar identidade (146.2); temos que:

$$\text{Re } \pi^0(\vec{q}, \nu) = \frac{2}{h} \mathcal{P} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \theta(|\vec{k} + \vec{q}| - k_F) \theta(k_F - k) \frac{2(\omega_{\vec{k} + \vec{q}} - \omega_{\vec{k}})}{\nu^2 - (\omega_k - \omega_{\vec{k} + \vec{q}})^2} \quad (211.3)$$

$$\begin{aligned} \text{e} \\ \text{Im } \pi^0(\vec{q}, \nu) &= -\frac{1}{h} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \theta(|\vec{k} + \vec{q}| - k_F) \theta(k_F - k) * \\ &* \left( \delta(\nu + \omega_k - \omega_{\vec{k} + \vec{q}}) + \delta(\nu + \omega_{\vec{k} + \vec{q}} - \omega_k) \right) \end{aligned} \quad (211.4)$$

verifica-se que (p/ detalhes, veja Eqs. (12.32) -- (12.45), Fetter):

$$\begin{aligned} \operatorname{Re} \tilde{\pi}^0(\vec{q}, \nu) = & \frac{2m\kappa_F}{\hbar^2} \cdot \frac{1}{4\pi^2} \left( -1 + \right. \\ & + \frac{m^2}{2\hbar^4 \kappa_F^3} \left( 4E_F \hbar \omega_q - (\hbar \omega_q - \hbar \nu)^2 \right) \ln \left| \frac{\omega_q - q\tilde{v}_F - \nu}{\omega_q + q\tilde{v}_F - \nu} \right| \\ & \left. - \frac{m^2}{2\hbar^4 \kappa_F^3} \left( 4E_F \hbar \omega_q - (\hbar \omega_q + \hbar \nu)^2 \right) \ln \left| \frac{\omega_q + q\tilde{v}_F + \nu}{\omega_q - q\tilde{v}_F - \nu} \right| \right) \quad (212.1) \end{aligned}$$

$$\stackrel{e}{=} \operatorname{Im} \tilde{\pi}^0(\vec{q}, \nu) = -\frac{m\kappa_F^2}{4\pi \hbar^2 q} \left( 1 - \left( \frac{m}{\hbar^2 \kappa_F q} \right)^2 (\hbar \nu - \hbar \omega_q)^2 \right),$$

se  $q > 2\kappa_F \stackrel{e}{=} \omega_q - q\tilde{v}_F < \nu < q\tilde{v}_F + \omega_q$

p/  $q < 2\kappa_F$ , temos que:

$$\operatorname{Im} \tilde{\pi}^0(\vec{q}, \nu) = \begin{cases} -2\nu \frac{m^2}{4\pi \hbar^3 q}, & 0 < \nu < q\tilde{v}_F - \omega_q \\ -\frac{m\kappa_F^2}{4\pi \hbar^2 q} \left( 1 - \left( \frac{m}{\hbar^2 \kappa_F q} \right)^2 (\hbar \nu - \hbar \omega_q)^2 \right), & \\ 0, & \omega_q + q\tilde{v}_F < \nu \end{cases} \quad (212.2)$$

se  $q\tilde{v}_F - \omega_q < \nu < q\tilde{v}_F + \omega_q$

é interessante introduzirmos as variáveis:

$$q' = \frac{1}{\kappa_F} q ; \quad q' \rightarrow q \quad (212.3)$$

$$e \nu' = \hbar \nu \cdot \frac{m}{\hbar^2 \kappa_F^2} ; \quad \nu' \rightarrow \nu$$

↳ Eqs. (212.1) e (212.2) assumem a forma:

$$\text{Re } \pi^0(q, \nu) = \frac{2mK_F}{\hbar^2} \cdot \frac{1}{4\pi^2} \left( -1 + \right.$$

$$\left. \frac{1}{2q} \left( 1 - \left( \frac{\nu}{q} - \frac{1}{2}q \right)^2 \right) \ln \left| \frac{1 + (\nu/q - q/2)}{1 - (\nu/q - q/2)} \right| \right.$$

$$\left. - \frac{1}{2q} \left( 1 - \left( \frac{\nu}{q} + \frac{1}{2}q \right)^2 \right) \ln \left| \frac{1 + (\nu/q + q/2)}{1 - (\nu/q + q/2)} \right| \right) \quad (213.1)$$

ε

$$\text{Im } \pi^0(q, \nu) = -\frac{mK_F}{\hbar^2} \cdot \frac{1}{4\pi q} \left( 1 - \left( \frac{\nu}{q} - \frac{1}{2}q \right)^2 \right), \quad \text{se } q > 2$$

$$\varepsilon = \frac{1}{2}q^2 - q < \nu < q + \frac{1}{2}q^2 \quad (1)$$

pr q < 2, temos que:

$$\text{Im } \pi^0(q, \nu) = \begin{cases} -2\nu \cdot \frac{mK_F}{\hbar^2} \cdot \frac{1}{4\pi q}, & 0 < \nu < q - \frac{1}{2}q^2 \quad (2) \\ -\frac{mK_F}{\hbar^2} \cdot \frac{1}{4\pi q} \cdot \left( 1 - \left( \frac{\nu}{q} - \frac{1}{2}q \right)^2 \right), & \text{se } q - \frac{1}{2}q^2 < \nu < q + \frac{1}{2}q^2 \quad (3) \\ 0, & \frac{1}{2}q^2 + q < \nu \end{cases} \quad (213.2)$$

notas: Eqs. (212.1)/(212.2) ou (213.1)/(213.2)

↳ determinação ERPA (q) : Eq. (209.2);

em particular, pr potencial Coulomb  $V(q) = 4\pi e^2/q^2$

$$\hookrightarrow \frac{mK_F}{\hbar^2} \cdot \frac{4\pi e^2}{K_F^2} \cdot \left( \frac{K_F}{q} \right)^2 = 4\pi \cdot \frac{me^2}{\hbar^2} \cdot \frac{1}{K_F} \cdot \frac{1}{q^2} = \frac{4\pi}{K_F a_0} \cdot \frac{1}{q^2} = (1)$$

$$= q'^2 \rightarrow q^2$$

1/a<sub>0</sub>: veja pg. 52

como (verificar):  $KFA_0 = \frac{1}{\alpha n_s}$ ;  $\alpha^3 = \frac{4}{9\pi}$

↑ veja pg. 52 (234.1)

$$\hookrightarrow (I) = 4\pi\alpha n_s \frac{1}{q^2}$$

é interessante determinar (209.2):

$$ERPA(q) = ERPA(\vec{q}, \nu) = 1 - \pi^0(q)U(q) \quad (234.2)$$

$$\equiv E_1(\vec{q}, \nu) + iE_2(\vec{q}, \nu)$$

pr 3 casos particulares:

(i)  $\vec{q}$  fixo e  $\nu \rightarrow 0$ :

$$E_1(\vec{q}, 0) = 1 + \frac{2\alpha n_s}{\pi q^2} \left( 1 - \frac{1}{q} \left( 1 - \frac{1}{4} q^2 \right)^2 \ln \left| \frac{1 - q/2}{1 + q/2} \right| \right)$$

$$\text{e } E_2(\vec{q}, 0) = 0 \quad (234.3)$$

(ii)  $\vec{q} \rightarrow 0$  e  $\nu$  fixo:

$$E_1(0, \nu) = 1 - \frac{4\alpha n_s}{3\pi \nu^2}$$

(234.4)

$$E_2(0, \nu) = 0$$

(iii)  $\nu = qx$  e  $q \rightarrow 0$ :

$$E_1(q, xq) = 1 + \frac{4\alpha n_s}{\pi q^2} \left( 1 - \frac{1}{2} x \ln \left| \frac{1+x}{1-x} \right| \right)$$

$$E_2(q, xq) = \frac{2\alpha n_s}{q^2} x \theta(1-x) \quad (234.5)$$



· sobre a contribuição dos "diagramas de bolhas" (ring diagrams)  
 p/ a energia de correlação;

Eq. (209.3):

$$E_{c,n} = \frac{1}{2} i \hbar v \int \frac{d^4 q}{(2\pi)^4} \int_0^1 d\lambda \frac{\lambda (U(q) \tilde{\pi}^0(q))^2}{1 - \lambda U(q) \tilde{\pi}^0(q)}$$

$$= -\frac{1}{2} i \hbar v \int \frac{d^4 q}{(2\pi)^4} \underbrace{\ln(1 - U(q) \tilde{\pi}^0(q))}_{ERPA(q)} + \underbrace{U(q) \tilde{\pi}^0(q)}_{1 - ERPA(q) : Eq. (209.2)}$$

considerando apenas  $\text{Re } E_{c,n}$  e a identidade;

$$\ln ERPA = \ln(E_1 + iE_2) = \frac{1}{2} \ln(E_1^2 + E_2^2) + i \text{tg}^{-1}\left(\frac{E_2}{E_1}\right), \text{ temos que:}$$

$$\text{Re } E_{c,n} = \frac{1}{2} \hbar v \int \frac{d^4 q}{(2\pi)^4} \left( \text{tg}^{-1}\left(\frac{E_2(q)}{E_1(q)}\right) - E_2(q) \right) \quad (215.1)$$

notas: Eqs. (209.2), (213.1), (213.2) e (215.1)  $\rightarrow$  determinação  $\text{Re } E_{c,n}$   
 (veja Eqs. (12.53) -- (12.62), Fetter p/ detalhes);

Obs.: Eq. (214.5) e expansão integrando (215.1) permite verificar  
 a divergência logarítmica associada ao termo  $E_{c,n}^{(2)}$ .

Eq. (207.3): veja Eqs. (12.57) -- (12.60), Fetter.

• sobre o potencial efetivo (208.1):

Eqs. (208.1), (214.3) e interação Coulomb  $U(q) = \frac{4\pi e^2}{q^2}$ :

$$U_{\text{ef}}(\vec{q}, \nu=0) = \frac{4\pi e^2}{q^2 + \frac{4\alpha n_s v_F^2}{\pi} g(q/v_F)}$$

(216.1)

onde  $g(x) = \frac{1}{2} - \frac{1}{2x} \left(1 - \frac{1}{4}x^2\right) \ln \left| \frac{1-x/2}{1+x/2} \right|$

Eq. (216.1): efeito interação no gás de elétrons degenerado:

(base) interação Coulomb  $U(q)$

↳ interação efetiva  $U_{\text{ef}}(q)$ ;

• notar:  $U(q) \neq U_{\text{ef}}(q)$  p/  $\left(\frac{q}{v_F}\right)^2 \ll n_s$ ;

em particular, no limite de altas densidades ( $n_s \gg 1$ ),

podemos considerar  $g(q/v_F) \approx g(0) = 1$

$$\text{↳ } U_{\text{ef}}(\vec{q}, 0) = \frac{4\pi e^2}{q^2 + q_{\text{TF}}^2}; \quad q_{\text{TF}}^2 = \frac{4\alpha n_s v_F^2}{\pi} = 0.66 n_s v_F^2;$$

: vetor de onda de

Thomas-Fermi

(216.2)

↳ transf. Fourier  $U_{\text{ef}}(\vec{q})$ :  $V_{\text{ef}}(\vec{r}) = \frac{e^2}{r} e^{-r q_{\text{TF}}}$ : potencial de Yukawa,

i.e., efeito interação no gás de elétrons degenerado:

(base) interação Coulomb  $e^2/r$

↳ interação efetiva blindada:

: comprimento característico:  $\frac{1}{q_{\text{TF}}}$  : comprimento de Thomas-Fermi.