INSTITUTO DE ENERGIA ATÔMICA

vinculado à SECRETARIA DA CULTURA, CIÊNCIA E TECNOLOGIA
Autarquia associada à UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

GÁS DE ELETRONS INTERAGENTES NUM METAL, SUJEITO A UM CAMPO MAGNÉTICO FORTE.

FRANCISCO CASTILHO ALCARAZ

Dissertação apresentada para a obtenção do título de "Mestre em Ciência e Tecnologia Nuclear".

Orientador: Prof.Dr.Shigueo Watanabe

SÃO PAULO - 1977

Ã Meire

Aos meus pais

Ao meu irmão José Antonio

AGRADECIMENTOS

Agradecemos de modo especial:

Ao Prof.Dr. Shigueo Watanabe pela iniciação científica e pelo contínuo apoio demonstrado durante o desenvolvimento deste trabalho.

Ao Prof.Dr. David Yutaka Kojima pelas valiosas discussões e colaborações em todas as etapas deste trabalho.

Agradecemos ainda:

Ao Prof.Dr. Rômulo Ribeiro Pieroni, Superintendente do Instituto de Energia Atômica, pela oportunidade de pesquisa.

Ao Prof.Dr. Spero Penha Morato, ao Prof.Dr. Reginaldo Muccilo e aos amigos e colegas pelo incentivo dado durante a execução do presente trabalho.

À Sra. Marilene Breves Zuffo pelo apoio prestado na datilografia.

RESUMO

Utilizando-se a técnica dos propagadores no grande "ensemble" desenvolvida por Montroll e Ward desenvolvemos as propriedades magnéticas de um gás de elétrons interagentes submetido a um campo magnético forte.

O propagador livre construido adequadamente mostra que o paramagnetismo de spin não possui termos fortemente dependentes da temperatura, ao contrário do resultado de Isihara[19].

Ao considerarmos a densidade de elétrons constante, as oscilações dHVA da susceptibilidade, considerando os efeitos das interações de troca de 1a. ordem, exibem somente uma fase, em acordo com resultados experimentais, enquanto que Ichimura[18] e Isihara[19] obtiveram duas fases que diferem de $\pi/2$.

Os efeitos das interações de troca de 1a. ordem nas oscilações dHVA da susceptibilidade magnética e velocidade do som se traduzem num fator exponencial nas amplitudes de oscilação (fator de Dingle), sendo a temperatura de Dingle linearmente dependente da velocidade de Fermi.

Os cálculos das contribuições dos diagramas em anel para a grande função de partição, nos mostram que a aproximação usada por Isihara[19] para estes cálculos não é boa e que as oscilações dHVA das contribuições dos diagramas em anel para a grande função possuem uma fase que difere de $\pi/2$ da obtida por Isihara[19].

ABSTRACT

Using the propagator's technique in the grand ensemble developed by Montroll and Ward we investigate the magnetic properties of an interacting eletron gas in a strong magnetic field.

The free propagator properly constructed shows that the spin paramagnetism does not have a term with strong temperature dependence, contrary to the result of Isihara[19].

Considering the eletron density to be constant, the dHVA oscillations in the magnetic susceptibility and sound velocity, considering the effects of 1st. exchange interactions, show only one phase in agreement with experimental results, while Ichimura[18] and Isihara[19] obtained two phases differing by $\pi/2$.

The effects of first order exchange interactions in the dHVA oscillations of the magnetic susceptibility and sound velocity give rise to an exponencial factor in the amplitudes of oscillation (Dingle factor), being the Dingle temperature linearly dependent of the Fermi velocity.

The calculations of the ring diagram contribution to the grand partition function, show that the aproximation used by Isihara for this calculations is not good and the dHVA oscillations of the contributions from the ring diagrams for the grand partition function have a phase differing by $\pi/2$ from that obtained by Isihara.

ÍNDICE

INTRODUÇÃO

Um dos assuntos mais importantes das teorias de muitos corpos tem sido a mecânica estatística do gás de elétrons[1-6]. A partir de 1930, pela observação feita por de Haas e Van Alphen[7] (dHVA) do comportamento oscilatório da susceptibilidade magnética de um cristal de bismuto submetido a um campo magnético forte, muitas experiências[8-10] e trabalhos teóricos baseadosna mecânica estatística do gás de eletrons têm sido feitos.

Foram realizados muitos trabalhos teóricos utilizando-se o modelo de eletrons livres para explicar qualitativamente o comportamento da parte constante (susceptibilidade de Landau) e da parte oscilante (oscilações dHVA) da susceptibilidade magnética do gás sujeito a um campo magnético forte.

Dingle[17] introduziu de forma semi-empírica um fator exponencial (fator de Dingle) nas amplitudes de oscilações da susceptibilidade, explicando que esse termo era ocasionado pelo alargamento dos níveis de Landau, devido às interações dos elétrons, não consideradas nos modelos não interagentes.

Ichimura[18] e Isihara[19](*) estudaram a susceptibilidade do gás interagente sujeito a um campo magnético forte, utilizando o método dos propagadores no grande "ensemble" desenvolvido por Montroll e Ward[6,18] (no apêndice A é feito um breve apanhado do método). Obtiveram para as oscilações

---

(*) Chamaremos no decorrer deste trabalho esta referência por (I).

dHVA da susceptibilidade duas fases que diferem entre si de $\pi/2$, contrariando os resultados experimentais que só exibem uma fase, o que aparentemente sugere uma inconsistência do formalismo. Isihara[19] admitiu que as oscilações dHVA com uma das fases dominam as oscilações com a outra fase, sem contudo explicar corretamente como este fato ocorre. Assim há pontos que não estão claros no que concerne às oscilações dHVA da susceptibilidade do gás interagente. Devido a este fato poucos trabalhos foram realizados tratando o gás interagente.

Nosso intuito é calcular a susceptibilidade de Landau e as oscilações DHVA de um gás de eletrons interagentes, e comparar nossos resultados com os anteriores.

Adotaremos o mesmo método usado por Ishimura e Isihara. Este método nos permite um tratamento unificado para a parte constante e oscilatória da susceptibilidade de um gás de elétrons interagentes sujeito a um campo magnético externo, onde os efeitos de spin são considerados.

Ao longo do trabalho usaremos os parâmetros adimensionais:

$$\gamma = \frac{\hbar\omega_0}{2\epsilon_F}, \quad \delta = \frac{KT}{\epsilon_F}, \quad r_s = \frac{(9\pi/4)^{1/3}}{K_F a_0}, \quad \alpha = \frac{\hbar\omega_0}{2KT}$$

onde $\frac{\hbar}{2}\omega_0 = \mu_B H$ representa a energia associada ao campo magnético H, μ_B é o magneton de Bohr e a_0 o raio de Bohr.

O método usado (veja apêndice A) consiste em construir a grande função de partição somando os termos provenientes do gás sem interação, dos efeitos das interações de troca de primeira ordem, dos diagramas em anel, etc., con -

forme abaixo

$$\ln \Xi = \ln \Xi_0 + \ln \Xi_{1x} + \ln \Xi_r + \dots$$

Podemos calcular a susceptibilidade magnética por meio de[21]:

$$\chi = \frac{1}{\beta V H} \frac{\partial \ln \Xi}{\partial H}\Big)_{Z,V,\beta}$$

sendo Z a fugacidade, $\beta = \frac{1}{kT}$ e V volume do gás. A densidade do gás pode ser calculada por[21]

$$\eta = -\frac{\delta^2}{V} \frac{\partial \ln \Xi}{\partial \delta}\Big)_{V,\beta,\alpha}$$

Se o campo magnético aplicado é forte; isto é:

$\epsilon_F \gg \hbar\omega > kT$ ou $\delta < \gamma \ll 1$ (condições dHVA)

a susceptibilidade exibirá um comportamento oscilatório, produzindo o efeito de Haas-Van Alphen.

No capítulo I construiremos o propagador livre e calcularemos a grande função de partição e a susceptibilidade magnética para o gás interagente.

No capítulo II calcularemos a contribuição para a grande função de partição proveniente dos termos de interação de troca de primeira ordem. Adicionaremos os resultados dos capítulos anteriores, no capítulo III, onde teremos a grande função de partição e susceptibilidade magnética até interações de troca de primeira ordem. Considerando a densidade de eletrons constante, mostramos a existência do fator de Dingle e mostramos a existência de uma única fase para as oscilações dHVA, de acordo com os resultados experimentais; mostrando que a hipótese de que a densidade de elétrons envolvidos no fenômeno é constante, leva a resultados consistentes. Devido ao crescente número de experiências para a determinação das oscilações quânticas da velocidade do som dentro das condições dHVA[22-25], incluimos neste capítulo nossos resultados para a velocidade do som do gás interagente sujeito a um campo magnético forte, com efeitos de troca de 1a. ordem.

No capítulo IV faremos um estudo sobre as contribuições oriundas dos diagramas de anel para a grande função de partição, e por fim concluiremos nosso trabalho no capítulo V.

CAPÍTULO I

1.1 Propagador para o sistema

Nosso modelo consiste em tratar o cristal como um gás tridimensional de eletrons interagentes, sujeito a um campo magnético uniforme H aplicado na diração z. O efeito do potencial periódico é colocado em termos de uma massa efe tiva média do cristal (m^*).

Assim a Hamiltoniana para o sistema será dada por:

$$\mathcal{H} = \sum_i \mathcal{H}_{oi} + \sum_{i>j} \phi_{ij} = \sum_i \left[\left(\frac{\vec{p}_i^{\,2}}{2m^*} - \frac{e}{c}\vec{A} \right)^2 - \frac{1}{2} g \mu_B \vec{\sigma}_i . \vec{H} \right] + \sum_{i>j} \frac{e^2}{r_{ij}} \qquad (I-1)$$

onde $\vec{\sigma}$ representa o spin, $\vec{A}$ o potencial vetor, μ_B o mag neton de Bohr e g é o fator de Landé. Usando o gauge de Cou lomb ($\vec{\nabla}.A = 0$) temos:

$$\vec{A} \equiv (-Hy, 0, 0) \qquad (I-2)$$

$$\beta \mathcal{H} = \sum_{ij} \beta \frac{\hbar^2}{2m^*} \left\{ \left(\frac{\vec{p}_i}{\hbar} - \frac{eHy}{\hbar c} \right)^2 + \sum_{i>j} \frac{e^2}{r_{ij}} \frac{2m^*}{\hbar^2} - \frac{1}{2} g \frac{m^*}{m_o} \frac{e\hbar H}{c} \sigma_z \right\} \qquad (I-3)$$

onde m_o é a massa do eletron livre. Assim definindo-se

$$\beta' = \frac{\beta \hbar^2}{2m^*}, \quad e'^2 = \frac{2m^* e^2}{\hbar^2}, \quad H' = \frac{H}{\sqrt{2m^*}} \quad \text{e} \quad g' = g \frac{m^*}{m_o} \qquad (I-4)$$

e omitindo-se as linhas nas grandezas acima, podemos trabalharno sistema em que $\hbar = 1$ e $2m^* = 1$.

Resolvendo-se a equação de Schroedinger para um eletron num campo magnético $\vec{H} = H\hat{z}$ teremos os autovalores e autofunções ($\hbar = 1$, $2m^* = 1$)

$$\epsilon_{n,\sigma} = (n+\tfrac{1}{2})\omega_0 + P_z^2 \pm \tfrac{1}{4} g\omega_0 \tag{I-5}$$

$$\psi_{n,\sigma} = \left(A_n/2\pi\right) e^{i(P_x x + P_z z)} e^{-b^2(y-y_0)/2} H_n[b(y-y_0)]\,|\sigma\rangle \tag{I-6}$$

onde $H_n(y)$ é o $n^{\underline{ésimo}}$ polinômio de Hermite, $|\sigma\rangle$ representa o estado de spin, e

$$b^2 = \frac{eH}{c} = \frac{1}{2}\omega_0 \; , \quad A_n^2 = \frac{b}{\pi^{1/2} 2^n n!} \; , \quad y_0 = \frac{P_x}{b^2} \tag{I-7}$$

Usando as autofunções e autovalores, e utilizando-se a fórmula (A-8) temos para o propagador livre(para os cálculos veja apêndice B).

$$\begin{aligned} K_0(\vec{r}_2\beta_2, \vec{r}_1\beta_1) &= \sum_{n,\sigma} e^{-(\beta_2-\beta_1)\epsilon_{n,\sigma}} \psi_{n,\sigma}(\vec{r}_2)\, \psi^*_{n,\sigma}(\vec{r}_1) = \\ &= \Pi_{spin}(s) \otimes \frac{b^2 e^{i\phi} e^{-z^2/4s} \exp\left[-\frac{b^2(x^2+y^2)}{4\tanh(sb^2)}\right]}{8\pi^{3/2} s^{1/2} \sinh(sb^2)} \end{aligned} \tag{I-8}$$

onde

$$\vec{r} = \vec{r}_2 - \vec{r}_1 \; , \; s = \beta_2 - \beta_1 \; , \; \phi = \tfrac{1}{2} b^2 (x_2 - x_1)(y_1 + y_2) \tag{I-9}$$

e

$$\Pi_{spin}(s) = e^{-\frac{1}{2} g s b^2} |\uparrow\rangle\langle\uparrow| + e^{\frac{1}{2} g s b^2} |\downarrow\rangle\langle\downarrow| \tag{I-10}$$

onde os kets $|\uparrow\rangle$ e $|\downarrow\rangle$ representam os estados em que a componente z do spin vale mais ou menos 1/2. Convêm salientar que Isihara[19] não construiu adequadamente o propagador, ocasionando resultados incorretos para termos oriundos das interações coulombianas do gás.

I.2 Sistema sem interação

Calcularemos nesta seção a grande função de partição e a susceptibilidade magnética para o gás sem interação.

Utilizando-se as fórmulas (A-11, 12, 13) e a propriedade dos propagadores (A-31) desenvolvidas no apêndice A deste trabalho, temos para a grande função de partição do gás livre:

$$\ln \Xi_0 = \mathrm{Tr}_\sigma \sum_{\ell=1}^{\infty} \frac{z^\ell (-)^{\ell+1}}{\ell} \int_V K_0(\vec{r}, \ell\beta; \vec{r}, 0)\, d\vec{r} \qquad (I\text{-}11)$$

onde Tr_σ significa o traço sobre as coordenadas de spin, e z a fugacidade.

A soma em (I-11) pode ser transformada em integral pelo uso da transformação de Mellin:

$$\sum_{n=1}^{\infty} (-)^{n+1} z^n f(n) = \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} ds\, \frac{\pi}{\sin(\pi s)}\, z^s f(s) \qquad 0<c<1 \qquad (I\text{-}12)$$

e temos

$$\ln \Xi_0 = V \frac{\pi}{2\pi i} \mathrm{Tr}_\sigma \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} \frac{ds}{s \sin(\pi s)}\, e^{s/\delta}\, K_0(\vec{r}, s\beta; \vec{r}, 0) \qquad 0<c<1 \qquad (I\text{-}13)$$

onde a integral espacial foi efetuada dando o volume do gás*

Da forma explícita do propagador (I-8) temos:

$$\mathrm{Tr}_{r_0} K_0(\vec{r}, s\beta; \vec{r}, 0) = \frac{b^2}{4\pi^2}\left(\frac{\pi}{s\beta}\right)^{1/2} \frac{\cosh\left(\frac{1}{2} g \alpha s\right)}{\sinh(\alpha s)} \qquad \text{(I-14)}$$

Assim, a grande função de partição para o gás sem interação é dada por:

$$\ln \Xi_0 = \frac{V b^2}{4\pi^{1/2}\beta^{1/2}} \frac{1}{2\pi i} \int_{C-i\infty}^{C+i\infty} \frac{ds}{s \sin(\pi s)} e^{s/\delta} \frac{\cosh\left(\frac{1}{2} g \alpha s\right)}{s^{1/2} \sinh(\alpha s)} \qquad \text{(I-15)}$$

Efetuando-se a integral acima (conforme o apêndice C), e re tendo os termos mais importantes dentro das condições dHVA, teremos:

$$\ln \Xi_0 = \frac{2V\beta P_F^5}{15\pi^2}\Big[1 + \frac{5}{8}\pi^2\delta^2 + \frac{15}{8}\left[\left(\tfrac{1}{2}g\right)^2 - \tfrac{1}{3}\right]\gamma^2 +$$

$$+ \frac{15}{4}\gamma^{3/2}\delta \sum_{\ell=1}^{\infty} (-)^{\ell+1} \frac{\cos\left(\frac{1}{2} g \ell \pi\right) \cos\left(\frac{\ell \pi}{\gamma} - \frac{\pi}{4}\right)}{\ell^{3/2} \sinh\left(\ell \pi^2/\alpha\right)}\Big] \qquad \text{(I-16)}$$

Definindo-se a susceptibilidade como $\chi = \frac{M}{H}$ onde M é a magnetização dossistema por unidade de volume, temos:[21]

$$\chi = \frac{1}{\beta H V} \left.\frac{\partial \ln \Xi}{\partial H}\right)_{z,V,\beta} \qquad \text{(I-17)}$$

Retendo-se os termos de ordem mais baixa dentro das condições dHVA temos:

$$\chi_0 = \frac{P_F}{2\pi^2}\left(\frac{e}{c}\right)^2 \left[\left(\tfrac{1}{2}g\right)^2 - \frac{1}{3} + \frac{\pi\delta}{\gamma^{3/2}} \sum_{\ell=1}^{\infty} (-)^{\ell+1} \frac{\cos\left(\frac{1}{2} g \ell \pi\right) \sin\left(\frac{\ell \pi}{\gamma} - \frac{\pi}{4}\right)}{\ell^{1/2} \sinh\left(\ell \pi^2/\alpha\right)}\right] \qquad \text{(I-18)}$$

(*) Os parametros δ, γ, α, r_s foram definidos na introdução deste trabalho.

ou em unidades regulares temos:

$$\chi_0 = \chi_0^{non} + \chi_0^{osc} \qquad (I\text{-}19)$$

onde

$$\chi_0^{non} = \frac{P_F}{4\pi^2 m^* \hbar}\left(\frac{e}{c}\right)^2\left[\left(\frac{1}{2}g\right)^2\left(\frac{m^*}{m_0}\right)^2 - \frac{1}{3}\right] = \chi_0^{sp} + \chi_0^{d} \qquad (I\text{-}20)$$

sendo

$$\chi_0^{sp} = \frac{P_F}{4\pi^2 m^* \hbar}\left(\frac{e}{c}\right)^2\left(\frac{g\,m^*}{2m_0}\right)^2 ; \quad \chi_0^{d} = \left(-\frac{1}{3}\right)\frac{P_F}{4\pi^2 m^* \hbar}\left(\frac{e}{c}\right)^2 \qquad (I\text{-}21)$$

e

$$\chi_0^{osc} = \frac{P_F^2}{2\pi^2}\left(\frac{e}{c}\right)^{1/2}\frac{\pi k T}{\hbar^{5/2} H^{3/2}}\sum_{\ell=1}^{\infty}(-)^{\ell+1}\frac{\cos\left(\frac{g\ell\pi}{2}\frac{m^*}{m_0}\right)\sin\left(\frac{\ell\pi\epsilon_F}{\mu_B^* H} - \frac{\pi}{4}\right)}{\ell^{1/2}\sinh\left(\frac{\ell\pi^2 k T}{\mu_B^* H}\right)} \qquad (I\text{-}22)$$

onde $\mu_B^* = \frac{e\hbar}{2m^* c}$ (I-23)

O termo χ_0^{sp} é a susceptibilidade paramagnética devido ao spin para o gás de eletrons livres, e foi calculado pela primeira vez por Pauli[29] e o termo χ_0^{d} é a susceptibilidade diamagnética para o gás de eletrons livres, calculado inicialmente por Landau[12].

O efeito de Haas-Van Alphen é ocasionado pelo termo oscilante χ_0^{osc} que faz com que a susceptibilidade magnética dentro das condições dHVA oscíle com o inverso do campo magnético. O termo χ_0^{osc} é bem menor que o termo constante χ_0^{non} , como se pode ver de (I-20,22).

Muitos trabalhos foram feitos para o estudo do efeito de Haas Van-Alphen tratando o gás de eletrons como um sistema sem interação coulombiana[11-17], que mostram a concordância do resultado obtido em (I-22).

Devido ao argumento de Sinh , o termo mais importante da soma em (I-22) corresponde a $\ell = 1$ e temos:

$$\chi_0^{osc} = \frac{P_F^2}{2\pi}\left(\frac{e}{c}\right)^{1/2} \frac{KT}{\hbar^{5/4} H^{3/2}} \frac{\cos\left(\frac{3 g \pi}{2}\frac{m^*}{m_0}\right) \sin\left(\frac{\pi \epsilon_F}{\mu_B^* H} - \frac{\pi}{4}\right)}{\sinh\left(\frac{\pi^2 KT}{\mu_B^* H}\right)} \tag{I-24}$$

que mostra o comportamento oscilatório da susceptibilidade com o inverso do campo, com um período dado por:

$$\Delta\left(\frac{1}{H}\right) = 2\,\frac{\mu_B^*}{\epsilon_F} = \frac{e\hbar}{m^* c\,\epsilon_F}. \tag{I-25}$$

Quando se considera um sistema com uma relação de dispersão geral (não quadrática como estamos assumindo) mostra-se que através das medidas dos períodos para determinada direção de aplicação do campo magnético, pode-se determinar as áreas extremas das órbitas dos eletrons na superfície de Fermi[14] perpendicular ao campo magnético. Contudo nossa idéia é estudar o gás isotrópico de eletrons interagentes (dispersão quadrática).

Definindo-se (em unidades $\hbar = 1$, $2m^* = 1$)

$$F^{osc} = \frac{\pi\delta}{\gamma^{3/2}} \sum_{\ell=1}^{\infty} (-)^{\ell+1} \frac{\cos\left(\frac{1}{2} g \ell \pi\right) \sin\left(\frac{\ell\pi}{\delta} - \frac{\pi}{4}\right)}{\ell^{1/2} \sinh\left(\ell\pi^2/\alpha\right)} \tag{I-26}$$

Mostramos[19] na figura 1 o comportamento de F^{asc} com o campo para várias temperaturas no caso clássico ($g=0$) e no caso quântico ($g=2$), tomando $r_s = 4.0$.

CAPÍTULO II

II.1 Termos de interação de Troca de la. ordem(lst.Exchange)

Nesta secção trataremos os termos de interação de troca de la.ordem; calculando a grande função de partição e a suceptibilidade correspondentes a esta ordem de interação.

De (A-32,33) e pelo uso da transformação de Mellin (I-12) temos para a contribuição das interações de la.ordem para a grande função de partição:

$$\ln \Xi_{1x} = \frac{\beta}{2} T_{r_\sigma} \int_V d\vec{r}_1 \int_V d\vec{r}_2\, \phi(|\vec{r}_2-\vec{r}_1|)\, \mathbb{L}(\vec{r}_1\beta,\vec{r}_2 0)\, \mathbb{L}(\vec{r}_2\beta,\vec{r}_1 0) \qquad \text{(II-1)}$$

onde

$$\mathbb{L}(\vec{r}_2\beta,\vec{r}_1 0) = \frac{\pi}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} dt\, \frac{e^{t/\delta}}{\sin(\pi t)}\, K_0(\vec{r}_2, t\beta; \vec{r}_1, 0) \qquad 0<c<1 \qquad \text{(II-2)}$$

e $\phi(r) = e^2/r$ é o potencial coulombiano. Juntando-se(II-1) e (II-2) temos:

$$\ln \Xi_{1x} = \frac{\beta}{2} \frac{\pi^2}{(2\pi i)^2} \int_{c_1-i\infty}^{c_1+i\infty} ds \int_{c_2-i\infty}^{c_2+i\infty} dt\, \frac{e^{t/\delta}\, e^{s/\delta}}{\sin(\pi s)\,\sin(\pi t)}\, \times$$

$$\times \int_V d\vec{r}_1 \int_V d\vec{r}_2\, \phi(|\vec{r}_2-\vec{r}_1|)\, T_{r_\sigma} K_0(\vec{r}_2, s\beta; \vec{r}_1, 0)\, K_0(\vec{r}_1, t\beta; \vec{r}_2, 0) \qquad \text{(II-3)}$$

O traço tomado na expressão acima sobre os estados de spin é importante, pois se este não fosse tomado ocasionaria termos adicionais nos efeitos de spin, como ocorreu em (I).

Tomando-se o traço e efetuando-se as integrais espaciais em (II-3) (Veja apêndice D) temos:

$$\ln \Xi_{1x} = \frac{1}{128} V\omega_o^2 e^2 \left(\frac{1}{2\pi i}\right)^2 \int_{c_1-i\infty}^{c_1+i\infty} ds \int_{c_2-i\infty}^{c_2+i\infty} dt \frac{e^{\mu s} e^{\mu t}}{\sin(\pi s)\sin(\pi t)} \times$$
$$\times \frac{\cosh[\frac{1}{2}g\alpha(s+t)]}{s^{1/2}t^{1/2}\sinh(\alpha s)\sinh(\alpha t)} \cdot \frac{\cosh^{-1} D}{D_1 (D^2-1)^{1/2}} \qquad \text{(II-4)}$$

onde

$$D_1 = (s+t)/4\beta st \,,\; D_2 = \frac{\omega_0}{8}\left[\coth(\alpha s) + \coth(\alpha t)\right] \,,\; D = 2D_2/D_1 - 1 \qquad \text{(II-5)}$$

As contribuições principais da integral (II-4) são provenientes das regiões:

i) $s \approx 0$ e $t \approx 0$

ii) $s \approx 0$ e $\alpha t = u + i\ell\pi$ ou $t = 0$ e $s = u + i\ell\pi$

onde $u \ll 1$

As contribuições provenientes dos polos reais (excluindo a origem) e da região em que os polos em s e t são imaginários são desprezíveis frente às contribuições mencionadas acima (dentro das condições dHVA).

As contribuições do polo da origem nos dão a parte constante da contribuição para a grande função de partição das interações de troca de 1a.ordem(Veja apêndice E).

$$\ln \Xi_{1x}^{non} = \frac{V\omega_o^2 \beta e^2}{32\pi^2\alpha^2}\left\{ I_1 + \left[\tfrac{1}{3}\pi^2 + \left(\tfrac{1}{2}g\alpha\right)^2 - \tfrac{1}{3}\alpha^2\right] I_2 - \left[\tfrac{1}{3}\pi^2 - \tfrac{1}{9}\alpha^2\right] I_3 \right\} \qquad \text{(II-6)}$$

Onde (Veja apêndice F)

$$I_1 = \frac{1}{(2\pi i)^2}\int_{c_1-i\infty}^{c_1+i\infty} ds \int_{c_2-i\infty}^{c_2+i\infty} dt \, \frac{e^{s/\delta}\, e^{t/\delta}}{s^{3/2}\, t^{3/2}(s+t)} = \frac{2}{\pi}\left(\frac{1}{\delta}\right)^2 \qquad \text{(II-7)}$$

$$I_2 = \frac{1}{(2\pi i)^2}\int_{c_1-i\infty}^{c_1+i\infty} ds \int_{c_2-i\infty}^{c_2+i\infty} dt \, \frac{e^{s/\delta}\, e^{t/\delta}}{s^{3/2}\, t^{1/2}} = \frac{2}{\pi} \qquad \text{(II-8)}$$

$$I_3 = \frac{1}{(2\pi i)^2}\int_{c_1-i\infty}^{c_1+i\infty} ds \int_{c_2-i\infty}^{c_2+i\infty} dt \, \frac{e^{s/\delta}\, e^{t/\delta}}{s^{1/2}\, t^{1/2}(s+t)} = -\frac{\ln\delta}{\pi} \qquad \text{(II-9)}$$

Aqui, para o cálculo de I_3, foi assumido que I_3 é analítica como função de δ, para $\delta > 0$(*).

Assim temos:

$$\ln \Xi_{1x}^{non} = \frac{V\omega_0^2\beta e^2}{16\pi^3\alpha^2\delta^2}\left\{1+\left[\frac{1}{3}\pi^2+\left(\frac{1}{2}g\alpha\right)^2-\frac{1}{3}\alpha^2\right]\delta^2+\frac{\delta^2}{2}\ln\delta\left[\frac{\pi^2}{3}-\frac{\alpha^2}{9}\right]\right\} \qquad \text{(II-10)}$$

As contribuições mais importantes do tipo ii) dentro das condições dHVA são dadas por (Veja apêndice G):

$$\ln \Xi_{1x}^{osc} = \frac{V}{2}\frac{\pi\omega_0^2}{(4\pi)^3\alpha^2}\int d\vec{r}\,\phi(r)\sum_{\ell=-\infty}^{\infty}{}' (-)^{\ell}\, \frac{e^{\frac{i\ell y}{\delta}}\cos(g\ell\pi/2)\, e^{\frac{i\alpha z^2}{4\beta\pi\ell}}}{i\,\mathrm{Sinh}(\ell\pi^2/\alpha)\,(i\ell\pi/\alpha)^{1/2}} \times I_4 \times I_5 \qquad \text{(II-11)}$$

(*) Se porventura, em futuro trabalho for provado o contrário, a modificação a ser feita neste trabalho é somente com respeito ao termo $\ln\delta$.

onde a linha na somatória significa que $\ell=0$ é excluido e

$$I_4=\frac{1}{2\pi i}\int_{c'} ds\,\frac{e^{s/\delta}\,e^{-r^2/4\beta s}}{s^{5/2}}=\left(2\beta\frac{p_F}{r}\right)^{3/2}J_{3/2}(p_F r) \qquad (II-12)$$

$$I_5=\frac{1}{2\pi i}\oint du\,\frac{e^{u/\delta}\,e^{-\omega_0(x^2+y^2)/8u}}{u}=J_0\left[p_F(x^2+y^2)^{1/2}\right] \qquad (II-13)$$

Onde c' é o contorno (fig. c.2) que envolve um ponto de ramificação, e $J_\nu(r)$ é a função de Bessel de ordem ν. Colocando-se (II-12,13) em (II-11) temos:

$$\ln \Xi_{1x}^{osc}=\frac{V\omega_0^2 e^2}{64\pi}\left(\frac{2\beta}{\alpha\pi}\right)^{3/2} p_F\sum_{\ell=1}^{\infty}(-)^\ell\,\frac{\cos\left(\frac{\ell\pi g}{2}\right)}{\ell^{1/2}\sinh\left(\ell\pi^2/\alpha\right)}\times I \qquad (II-14)$$

sendo

$$I=\int d\vec{r}\,\frac{1}{r^{5/2}}\sin\left(\frac{\ell\pi}{\gamma}+\frac{\alpha z^2}{4\beta\pi\ell\epsilon_F}-\frac{\pi}{4}\right)J_{3/2}(r)\,J_0\left[(x^2+y^2)^{1/2}\right] \qquad (II-15)$$

onde a mudança de variáveis $\vec{r}\longrightarrow\vec{r}/p_F$ foi usada. É fácil ver que I pode ser escrito como:

$$I=\sin\left(\frac{\ell\pi}{\gamma}-\frac{\pi}{4}\right)I_c(\ell,\gamma)+\cos\left(\frac{\ell\pi}{\gamma}-\pi/4\right)I_s(\ell,\gamma) \qquad (II-16)$$

onde

$$I_c(\ell,\gamma)=\int d\vec{r}\,\frac{\cos\left(\gamma z^2/4\pi\ell\right)}{r^{5/2}}\,J_{3/2}(r)\,J_0\left[(x^2+y^2)^{1/2}\right] \qquad (II-17)$$

$$I_s(\ell,\gamma)=\int d\vec{r}\,\frac{\sin\left(\gamma z^2/4\pi\ell\right)}{r^{5/2}}\,J_{3/2}(r)\,J_0\left[(x^2+y^2)^{1/2}\right] \qquad (II-18)$$

Nas condições dHVA($\gamma\ll1$) podemos aproximar o coseno no integrando de (II-17)(Veja apêndice G) obtendo-se

$$I_c(\ell,\gamma) \approx 4\sqrt{\pi/2} \qquad \text{(II-19)}$$

A mesma aproximação não pode ser feita para $I_s(\ell,\gamma)$ pois dá um resultado divergente. No limite $\gamma=0$ temos $I_s(\ell,0)=0$ assim dentro das condições dHVA:

$$I_s(\ell,\gamma) \ll 1 \qquad \text{(II-20)}$$

Portanto, temos, para a parte oscilante das contribuições para a grande função de partição, provenientes das interações de troca de 1a.ordem:

$$\ln \Xi^{osc}_{1x} = \frac{V\omega_o^2 e^2}{16\pi}\left(\frac{2\beta}{\alpha\pi}\right)^{3/2} p_F \left(\frac{\pi}{2}\right)^{1/2} \sum_{\ell=1}^{\infty} (-)^{\ell} \frac{\cos\left(\frac{\ell\pi g}{2}\right)\sin\left(\frac{\ell\pi}{\gamma}-\frac{\pi}{4}\right)}{\ell^{1/2}\sinh\left(\ell\pi^2/\alpha\right)}$$
$$+ \frac{V\omega_o^2 e^2}{64\pi}\left(\frac{2\beta}{\alpha\pi}\right)^{3/2} p_F\, I_s(\ell,\gamma) \sum_{\ell=1}^{\infty} (-)^{\ell} \frac{\cos\left(\frac{\ell\pi g}{2}\right)\cos\left(\frac{\ell\pi}{\gamma}-\frac{\pi}{4}\right)}{\ell^{1/2}\sinh\left(\ell\pi^2/\alpha\right)} \qquad \text{(II-21)}$$

Por meio de (I-17), retendo os termos mais importantes, as contribuições para a susceptibilidade magnética provenientes das interações de troca de 1a.ordem são dadas por:

$$\chi_{1x} = \chi^{non}_{1x} + \chi^{osc}_{1x} \qquad \text{(II-22)}$$

$$\chi^{non}_{1x} = \frac{p_F}{2\pi^2}\left(\frac{e}{c}\right)^2 \frac{s}{\pi}\left[\left(\frac{1}{2}g\right)^2 - \frac{1}{3} - \frac{\ln s}{18}\right] \qquad \text{(II-23)}$$

$$\chi^{osc}_{1x} = \frac{p_F}{2\pi^2}\left(\frac{e}{c}\right)^2 \frac{s}{\pi}\left[\frac{\pi^2 s}{\gamma^{5/2}} \sum_{\ell=1}^{\infty} (-)^{\ell+1} \frac{\cos\left(\frac{\ell\pi g}{2}\right)\cos\left(\frac{\ell\pi}{\gamma}-\frac{\pi}{4}\right)\ell^{1/2}}{\sinh\left(\ell\pi^2/\alpha\right)}\right.$$
$$\left. - \frac{\pi s}{2\gamma^{3/2}} \sum_{\ell=1}^{\infty} (-)^{\ell+1}\left(1 + \frac{\sqrt{2\pi}}{2}\,\ell\,\frac{I_s}{\gamma}\right) \frac{\cos\left(\frac{\ell\pi g}{2}\right)\sin\left(\frac{\ell\pi}{\gamma}-\frac{\pi}{4}\right)}{\ell^{1/2}\sinh\left(\ell\pi^2/\alpha\right)}\right] \qquad \text{(II-24)}$$

onde

$$s \equiv \frac{e^2}{p_F} = 2\, r_s \left(\frac{4}{9\pi}\right)^{1/3} \qquad \text{(II-25)}$$

CAPÍTULO III

III.1 Gás com interação de troca até la.ordem

Nesta seção adicionaremos os resultados das duas seções precedentes. A grande função de partição, considerando termos de interação de troca até la.ordem, é dada pela soma de (I-16),(II-10) e (II-21):

$$\ln \Xi = \ln \Xi_0 + \ln \Xi_{1x} \qquad \text{(III-1)}$$

$$\ln \Xi = \ln \Xi^{non} + \ln \Xi^{osc} \qquad \text{(III-2)}$$

onde

$$\ln \Xi^{non} = \frac{2V\beta p_F^5}{15\pi^2} \Big\{ 1 + \frac{5}{8}\pi^2\delta^2 + \frac{15}{8}\Big[\Big(\frac{1}{2}g\Big)^2 - \frac{1}{3}\Big]\gamma^2 + \frac{15S}{8\pi}\Big[1 + \frac{\pi^2}{3}\delta^2\Big(1+\frac{1}{2}\ln\delta\Big) + \gamma^2\Big(\frac{g^2}{4} - \frac{1}{3} - \frac{\ln\delta}{18}\Big)\Big]\Big\} \qquad \text{(III-3)}$$

$$\ln \Xi^{osc} = \frac{2V\beta p_F^5}{15\pi^2} \Big\{ \frac{15}{4}\gamma^{3/2}\delta \sum_{\ell=1}^{\infty} (-)^{\ell+1} \frac{\cos\big(\frac{\ell\pi g}{2}\big)\cos\big(\frac{\ell\pi}{\gamma} - \frac{\pi}{4}\big)}{\ell^{3/2}\sinh(\ell\pi^2/\alpha)} \Big[1 - \frac{\sqrt{2\pi}}{4}\frac{\ell r_s}{\gamma}\frac{S}{\pi}\Big] - \frac{15}{4}\gamma^{1/2}\delta S \sum_{\ell=1}^{\infty} (-)^{\ell+1} \frac{\cos\big(\ell\pi g/2\big)\sin\big(\ell\pi/\gamma - \pi/4\big)}{\ell^{1/2}\sinh(\ell\pi^2/\alpha)} \Big\} \qquad \text{(III-4)}$$

Por meio de (I-17), retendo os termos mais importantes dentro das condições dHVA, ou somando-se os resultados (I-18), (II-23) e (II-24), temos para a susceptibilidade magnética com efeitos de troca até la. ordem:

$$\chi = \chi_0 + \chi_{1X} \tag{III-5}$$

$$\chi = \chi^{non} + \chi^{osc} \tag{III-6}$$

onde

$$\chi^{non} = \frac{P_F}{2\pi^2}\left(\frac{e}{c}\right)^2 \left\{ \left[\left(\frac{g}{2}\right)^2 - \frac{1}{3}\right]\left(1 + \frac{s}{\pi}\right) - \frac{s}{\pi}\,\frac{\ln \delta}{18} \right\} \tag{III-7}$$

$$\chi^{osc} = \frac{P_F}{2\pi^2}\left(\frac{e}{c}\right)^2 \left\{ \frac{\pi\delta}{\gamma^{3/2}} \sum_{\ell=1}^{\infty} (-)^{\ell+1} \frac{\cos\left(\frac{g\ell\pi}{2}\right)\sin\left(\frac{\ell\Omega}{\gamma} - \frac{\pi}{4}\right)}{\ell^{1/2}\sinh\left(\ell\pi^2/\alpha\right)} \left[1 - \frac{s}{2\pi}\left(1 + \frac{\sqrt{2\pi}}{2}\,\ell\frac{\delta}{\gamma}\right)\right] \right.$$

$$\left. + \left(\frac{s}{\pi}\right) \frac{\pi^2\delta}{\gamma^{5/2}} \sum_{\ell=1}^{\infty} (-)^{\ell+1} \frac{\cos\left(\frac{g\ell\pi}{2}\right)\cos\left(\frac{\ell\Omega}{\gamma} - \frac{\pi}{4}\right)\ell^{1/2}}{\sinh\left(\ell\pi^2/\alpha\right)} \right\} \tag{III-8}$$

Assim, ao tratarmos o gãs de eletrons como um sistema interagente, a susceptibilidade magnẽtica exibe um comportamento oscilatõrio com ondas tipo seno(como no gãs não interagente) e cosseno(que chamaremos daqui por diante fases seno e cosseno). As oscilações dHVA da susceptibilidade observadas experimentalmente exibem a mesma fase que a susceptibilidade oscilatõria calculada pelo modelo de eletrons livres-(I-22), isto ẽ, exibem fase seno. A equação acima nos mostra que a amplitude da fase cosseno(dentro das condições dHVA) ẽ maior que a da fase seno, contradizendo aparentemente os resultados experimentais.

Contudo, o momento de Fermi que aparece nas fõrmulas atẽ agora deduzidas, ẽ o momento de Fermi(P_F) do gãs interagente sujeito ao campo magnẽtico H e ã temperatura T, enquanto que o momento de Fermi que ẽ utilizado nos dados experimentais (onde se obtẽm a fase seno) ẽ o momento de Fermi - (P_0) do gãs de eletrons livres sem o campo magnẽtico aplicado e no zero absoluto.

O resultado (III-8) nos dá o efeito de Haas-Van Alphen, se considerarmos a energia de Fermi constante (hipótese esta usada por Blackman[11] e Dingle[16]), fazendo com que a densidade de elétrons oscile para manter esta constância, isto é, alguns dos elétrons na banda dHVA(*) são transferidos para outras bandas. No caso de elétrons livres, esta hipótese nos conduz a oscilação dHVA para a susceptibilidade do tipo seno, como observadas experimentalmente. Contudo, esta hipótese, quando aplicada ao gás interagente, nos conduz a oscilações dHVA para a susceptibilidade dos tipos seno e cosseno, em desacordo com os resultados experimentais.

Assumiremos em nosso modelo que a densidade de elétrons seja constante. A densidade de elétrons, a partir da grande função de partição é dada por:

$$\eta = -\frac{\delta^2}{V}\left.\frac{\partial \ln \Xi}{\partial \delta}\right)_{V,\beta,\alpha} \qquad \text{(III-9)}$$

Assim colocando-se (III-3) e (III-4) em (III-9) e retendo os termos mais importantes dentro das condições dHVA, temos:

$$\begin{aligned}\eta = \frac{p_F^3}{3\pi^2}\Bigg\{ & 1 + \frac{3s}{2\pi} + \frac{\pi^2 s^2}{8}\left(1 - \frac{s}{\pi}\right) + \frac{3}{8}\gamma^2\left(\frac{1}{2}g\right)^2 - \frac{\gamma^2}{8}\left(1 - \frac{s}{3\pi}\right) \\ & - \frac{3\pi^2}{2}\left(\frac{s}{\pi}\right)\frac{\delta}{\gamma^{1/2}}\sum_{\ell=1}^{\infty}(-)^{\ell+1}\frac{\cos(\ell\pi g/2)\cos\left(\frac{\ell\pi}{\gamma} - \frac{\pi}{4}\right)\ell^{1/2}}{\sinh(\ell\pi^2/\alpha)} \\ & - \frac{3\pi}{2}\gamma^{1/2}\delta\sum_{\ell=1}^{\infty}(-)^{\ell+1}\frac{\cos\left(\frac{\ell\pi g}{2}\right)\sin\left(\frac{\ell\pi}{\gamma} - \frac{\pi}{4}\right)}{\ell^{1/2}\sinh(\ell\pi^2/\alpha)}\left[1 + \frac{s}{\pi}\left(1 - \frac{\sqrt{2\pi}}{2}\,\ell\,\frac{I_s}{\gamma}\right)\right]\Bigg\}\end{aligned} \qquad \text{(III-10)}$$

(*) A banda de elétrons que está produzindo o efeito dHVA no cristal.

Mas a densidade de elétrons livres é dada por:

$$\eta = \frac{P_0^3}{3\pi^2} \qquad \text{(III-11)}$$

Onde P_0 é o módulo do momento de Fermi do gás de elétrons livres. Devido à nossa hipótese de invariância da densidade, temos que, igualando-se (III-10) e (III-11), chegamos à relação que conecta P_F com P_0.

$$P_F = P_0 \Big\{ 1 + \Big[\frac{3s}{2\pi} + \frac{\pi^2 \delta^2}{8}\left(1 - \frac{s}{\pi}\right) + \frac{3}{8}\gamma^2\left(\tfrac{1}{2}g\right)^2 - \frac{\gamma^2}{8}\left(1 - \frac{s}{3\pi}\right) - \frac{3\pi^2}{2}\left(\frac{s}{\pi}\right)\frac{\delta}{\gamma^{1/2}} \times$$
$$\times \sum_{\ell=1}^{\infty} (-)^{\ell+1} \frac{\cos\left(g\frac{\ell\pi}{2}\right)\cos\left(\frac{\ell\pi}{\gamma} - \frac{\pi}{4}\right)\ell^{1/2}}{\sinh\left(\ell\pi^2/\alpha\right)} - \frac{3\pi}{2}\gamma^{1/2}\delta \times \qquad \text{(III-12)}$$
$$\times \sum_{\ell=1}^{\infty} (-)^{\ell+1} \frac{\cos\left(g\ell\pi/2\right)\sin\left(\frac{\ell\pi}{\gamma} - \frac{\pi}{4}\right)}{\ell^{1/2}\sinh\left(\ell\pi^2/\alpha\right)}\left[1 + \frac{s}{2\pi}\left(1 - \sqrt{2\pi}\,\frac{\ell I_s}{2\gamma}\right)\right]\Big]\Big\}^{-1/3}$$

Podemos resolver (III-12) por um processo iterativo, considerando $s \ll 1$ (interações fracas, que é a hipótese básica para o tratamento perturbativo adotado neste trabalho). Conforme o apêndice H, temos após várias iterações:

$$P_F = P_0 \Big\{ 1 - \frac{s_0}{2\pi} - \frac{\pi^2 \delta_0^2}{24}\left(1 - \frac{s_0}{2\pi}\right) - \frac{\gamma_0^2}{8}\left(\tfrac{1}{2}g\right)^2\left(1 + \frac{s_0}{2\pi}\right) + \frac{\gamma_0^2}{24}\left(1 + \frac{s_0}{6\pi}\right)$$
$$+ \frac{\pi}{2}\gamma_0^{1/2}\delta_0 \sum_{\ell=1}^{\infty} (-)^{\ell+1} \frac{\cos\left(g\ell\pi/2\right)\sin\left(\frac{\ell\pi}{\gamma_0} - \frac{\pi}{4}\right)}{\ell^{1/2}\sinh\left(\ell\pi^2/\alpha\right)}\left[1 + \frac{s_0}{2\pi}\left(1 - \frac{\sqrt{2\pi}}{2} I_s^0 \frac{\ell}{\gamma_0}\right)\right]\Big\} \qquad \text{(III-13)}$$

onde o índice zero nos parâmetros significa que o momento de Fermi considerado é aquele obtido pelo modelo de eletrons livres (P_0) na ausência de campo magnético e no zero absoluto.

No processo iterativo as fases seno e cosseno são expandidas, e levando em conta que $s \ll 1$, obtemos somente uma fase.

É interessante observar que o fato de considerar -

mos a densidade que produz o efeito de Haas Van Alphen constante, acarreta um caráter oscilatório para o momento de fermi e consequentemente para a energia de Fermi.

Convém salientar também, o interessante fato de P_F conter somente a fase seno; isto fará com que a parte oscilante da susceptibilidade possua somente a fase seno.

Usando-se (III-13) em (III-7) e (III-8), e retendo-se os termos mais importantes, dentro das condições dHVA, temos para a parte constante da susceptibilidade:

$$\chi^{non} = \chi_d + \chi_p = \frac{P_0}{2\pi^2}\left(\frac{e}{c}\right)^2 \left\{ \left[\left(\frac{1}{2}g\right)^2 - \frac{1}{3}\right]\left(1 + \frac{S_0}{3\pi}\right) - \frac{S_0}{\pi}\frac{\ln S_0}{18} \right\} \qquad \text{(III-14)}$$

onde as susceptibilidades paramagnéticas e diamagnéticas são dadas por:

$$\chi_p = \frac{P_0}{2\pi^2}\left(\frac{e}{c}\right)^2\left(\frac{1}{2}g\right)^2\left(1 + \frac{S_0}{2\pi}\right) \qquad \text{(III-15)}$$

$$\chi_d = \frac{P_0}{2\pi^2}\left(\frac{e}{c}\right)^2\left(-\frac{1}{3}\right)\left(1 + \frac{S_0}{2\pi} + \frac{S_0 \ln S_0}{6\pi}\right) \qquad \text{(III-16)}$$

Para a parte oscilatória da susceptibilidade teremos:

$$\chi^{osc} = \frac{P_0}{2\pi^2}\left(\frac{e}{c}\right)^2 \frac{\pi S_0}{\gamma_0^{3/2}} \sum_{\ell=1}^{\infty} (-)^{\ell+1} \frac{\cos(\ell\pi g_{\perp})\sin(\ell\gamma_0 - \pi/4)}{\ell^{1/2}\sinh(\ell\pi^2/\alpha)}\left[1 - \frac{\sqrt{2\pi}}{4}\frac{\ell I_s^0}{\gamma_0}\frac{S_0}{\pi}\right] \qquad \text{(III-17)}$$

Os resultados (III-15) e (III-16) nos dão as susceptibilidades paramagnéticas e diamagnéticas para o gás interagente dentro dos efeitos de interação de troca de primeira ordem.

O resultado (III-15) nos mostra o paramagnetismo de spin e nos mostra que o resultado calculado em (I) está incorreto devido à construção inadequada do propagador com respeito ao spin.

Definindo-se:

$$F_1 = 1 + \frac{S_0}{2\pi} \tag{III-18}$$

$$F_2 = 1 + \frac{S_0}{2\pi}\left(1 + \frac{\ln S_0}{3}\right) \tag{III-19}$$

As figuras 2 e 3 mostram o comportamento do paramagnetismo e diamagnetismo para o gás interagente (parte constante da susceptibilidade). O efeito das interações de troca de 1a.ordem no paramagnetismo não possue termos fortemente dependentes da temperatura, em oposição ao resultado obtido por (I) que é fortemente dependente da temperatura. As interações de troca de primeira ordem produzem no diamagnetismo um termo fortemente dependente da temperatura.

Na figura 4 temos o comportamento da susceptibilidade constante total e como se vê, o gás exibe um comportamento paramagnético para quaisquer r_s e temperatura, em contraste ao resultado obtido em (I), que diz que, para certos valores de r_s (região metálica) e de temperatura ($T \lesssim 100^{\circ}K$), a susceptibilidade como um todo (a parte constante) é diamagnética.

O resultado III-17 nos dá a parte oscilatória da susceptibilidade, responsável pelo efeito de Haas Van Alphen, mostrando o fato experimental da susceptibilidade exibir somente a fase seno, fato este não provado por Isihara[19] e por Ichimura[18], ocasionando aparentemente uma inconsistência no formalismo usado.

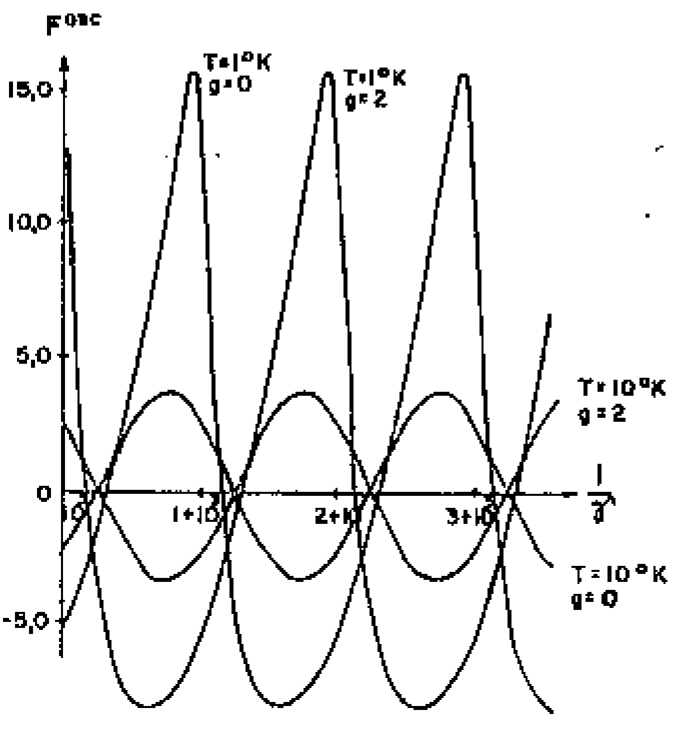


Figura 1

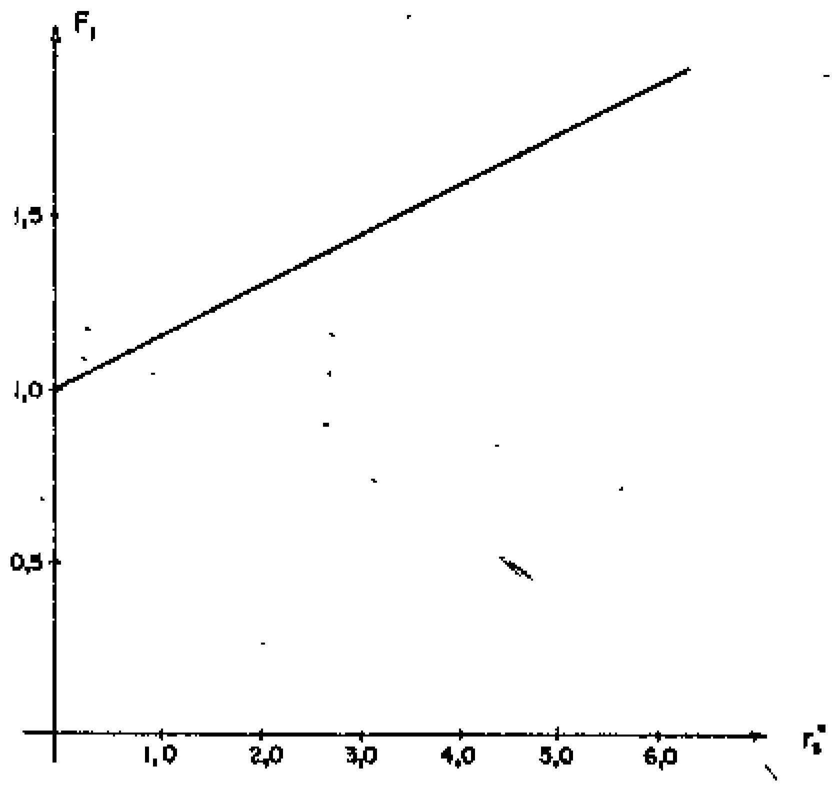


Figura 2

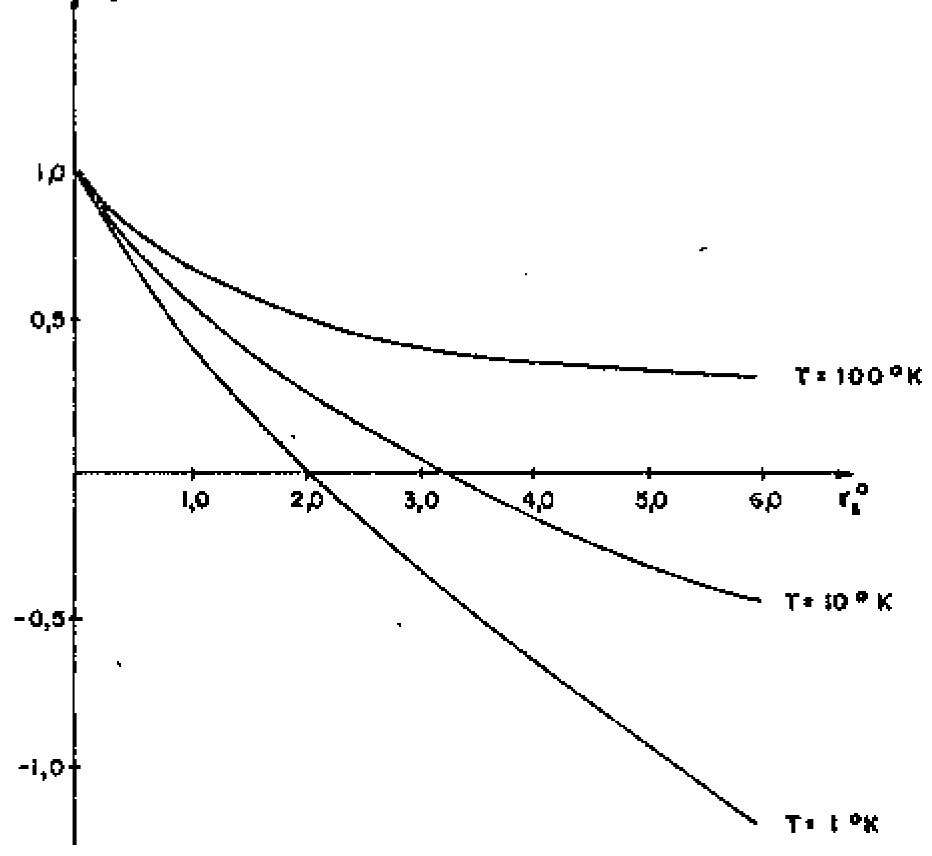


Figura 3

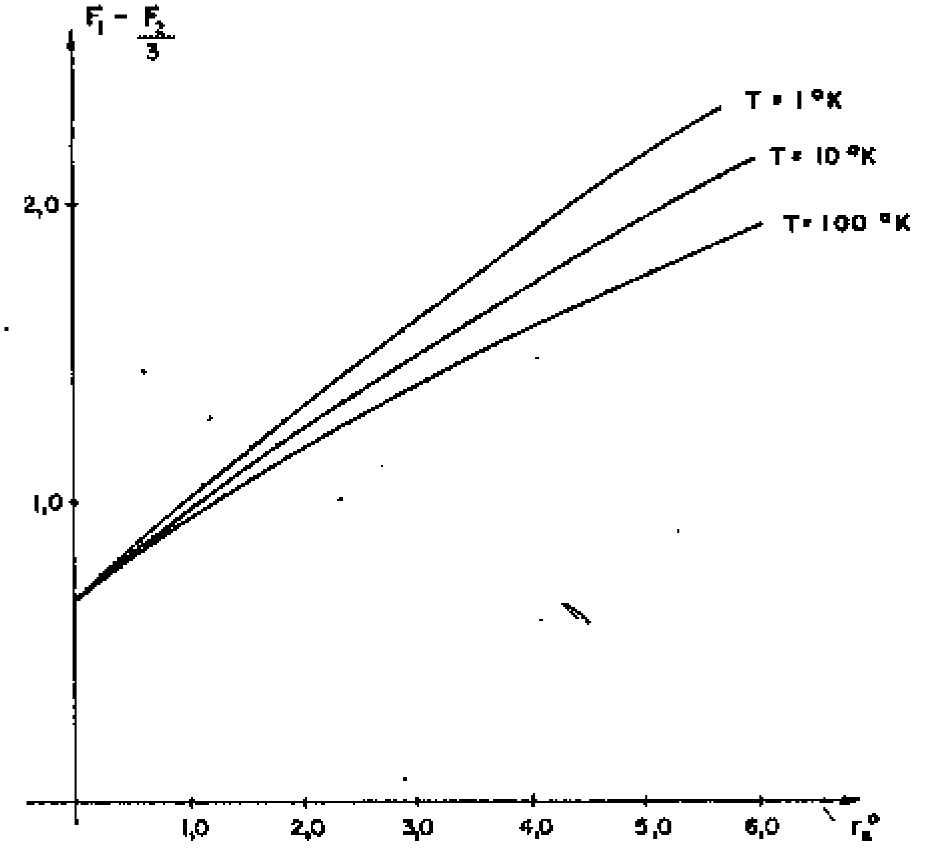


Figura 4

Em unidades regulares temos para a susceptibilidade:

$$\chi_p = \left(\frac{1}{2}g\right)^2 \left(\frac{m^*}{m_0}\right) \frac{P_0\, m_0\, \mu_B^2}{\pi^2 \hbar^3} \left[1 + \frac{1}{\pi}\left(\frac{4}{9\pi}\right)^{1/3} r_s \frac{m^*}{m_0}\right] \tag{III-20}$$

$$\chi_d = \left(-\frac{1}{3}\right) \left(\frac{m_0}{m^*}\right) \frac{P_0\, m_0\, \mu_B^2}{\pi^2 \hbar^3} \left[1 + \frac{1}{\pi}\left(\frac{4}{9\pi}\right)^{1/3} r_s \frac{m^*}{m_0}\left(1 + \frac{\ln \delta_0}{3}\right)\right] \tag{III-21}$$

$$\chi^{osc} = \frac{P_0^2 \sqrt{m_0}\, KT \mu_B^{*1/2}}{\hbar^3 \pi\, H^{3/2} \sqrt{2}} \sum_{\ell=1}^{\infty} (-)^{\ell+1} \frac{\cos\left(\frac{\ell \pi g}{2} \frac{m^*}{m_0}\right) \sin\left(\frac{\ell \pi \epsilon_F^0}{\mu_B^* H} - \frac{\pi}{4}\right)}{\ell^{1/2} \sinh\left(\frac{\ell \pi^2 KT}{\mu_B^* H}\right)} \left[1 - \frac{V_F^0\, \ell\, I_s^0}{\sqrt{2\pi}\, a_0^*\, \omega_0^*}\right] \tag{III-22}$$

onde

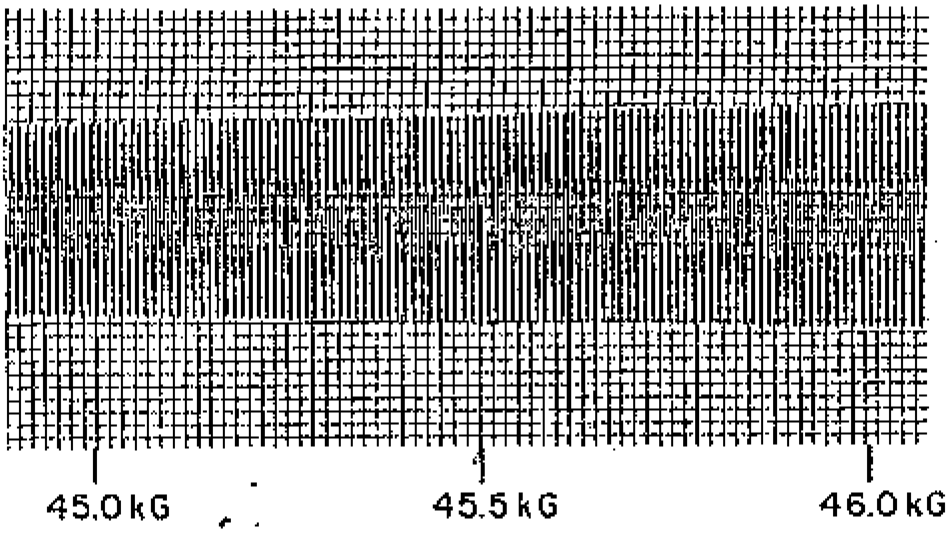
$$\mu_B^* = \frac{e\hbar}{2m^*c} \; ; \; \omega_0^* = \frac{eH}{m^*c} \; ; \; V_F^* = \frac{P_0}{m^*} \quad e \quad a_0^* = \frac{\hbar^2}{m^* e^2}$$

Dingle[17] introduziu semi-empiricamente um fator exponencial decrescente nas amplitudes de oscilação da susceptibilidade obtida pelo modelo de elétrons livres, fator este denominado fator de Dingle.

$$f_D = e^{-\frac{2\pi^2 K T_D}{\hbar \omega_0^*}} \tag{III-23}$$

onde T_D é a constante que depende do material, denominada temperatura de Dingle. Dingle explicou que este fator seria oriundo do alargamento dos níveis de Landau ocasionado pelas colisões dos elétrons em geral. Sendo, em nosso modelo, os eletrons interagentes, este fator deve aparecer do formalismo.

Reproduzimos na figura da página seguinte um típico resultado experimental[27] do efeito de Haas Van Alphen e como vemos o "range" das variações do campo magnético é bem menor que o seu valor absoluto[34], $\Delta\gamma << \gamma$, assim



Efeito de Haas Van Alphen no Ouro com H na direção[110] (T=1.2°K)

$$I_s(\ell,\gamma^o+\Delta\gamma^o) = \int \sin\left[(\gamma^o+\Delta\gamma^o)\frac{z^2}{4\pi\ell}\right] \frac{J_{3/2}(r)\,J_0\left[(x^2+y^2)^{1/2}\right]}{r^{5/2}} \simeq$$

$$\simeq \int \sin\left(\frac{\gamma_o^o z^2}{4\pi\ell}\right)\frac{J_{3/2}(r)\,J_0[(x^2+y^2)^{1/2}]}{r^{5/2}}\,d\vec{r} + \int \frac{\sin\left(\frac{\Delta\gamma^o z^2}{4\pi\ell}\right) J_{3/2}(r)\,J_0[(x^2+y^2)^{1/2}]}{r^{5/2}}\,d\vec{r} \qquad \text{(III-24)}$$

Usando o fato de $I_S(\ell,\gamma^o) \xrightarrow[\gamma\to 0]{} 0$ temos que, nas condições em que as experiências são feitas, I_s^0 é uma constante

$$I_s(\ell,\gamma^o+\Delta\gamma^o) \simeq I_s(\ell,\gamma^o) = I_s^o \qquad \text{(III-25)}$$

Nas condições experimentais somente se detecta o primeiro termo da soma[33] em (III-22). Como $I_s^o << 1$ podemos aproximar os termos nos colchetes de (III-22) pela exponencial decrescente

$$\exp\left[-\frac{2\pi K\, T_{De}}{\hbar\omega_o^*}\right] \qquad \text{(III-26)}$$

onde

$$T_{De} \simeq \frac{\hbar\, v_F^o\, I_s^o}{K\pi(2\pi)^{3/2}\alpha_o^*} \qquad \text{(III-27)}$$

assim

$$\chi^{osc} = \frac{P_o^2\sqrt{m_o}\;kT\mu_B^{1/2}}{\hbar^3\pi\; H^{3/2}\sqrt{2}}\;\frac{\cos\left(\frac{\ell\pi g}{2}\frac{m^*}{m_e}\right)\sin\left(\frac{\pi\epsilon_F^o}{\mu_B^* H}-\frac{\pi}{4}\right)}{\sinh\left(\frac{\ell\pi^2 kT}{\mu_B^* H}\right)}\; e^{-\frac{2\pi^2 k T_{De}}{\hbar\omega_o^*}} \qquad \text{(III-28)}$$

onde identificamos T_{De} como a contribuição para a temperatura de Dingle do material das interações coulombianas de troca de 1a.ordem dos elétrons da banda dHVA. Como vemos, T_{De} depende linearmente de v_F^o (velocidade de Fermi) pois quanto maior for a velocidade de Fermi, mais interagente é o gás.

Nossos resultados mostram que as interações de troca de 1a.ordem não mudam os períodos das oscilações[26]; somente há uma diminuição na amplitude ocasionada pelo fator de Dingle.

É importante observar que o fator de Dingle calculado neste trabalho (proveniente de interações elétron-elétron) é de natureza quântica. Em um cristal real, além das interações elétron-elétron, as impurezas e imperfeições existentes darão termos que contribuirão para o acréscimo da temperatura de Dingle.

III.2 - Velocidade do Som

Muitas experiências tem sido feitas para determinar as oscilações quânticas da velocidade do som em materiais nas condições dHVA[22-25]; assim é de grande importância determinar estas oscilações para o gás interagente.

Na formulação sobre oscilações na velocidade do som, Rodriguez[35] aproxima o cristal a um corpo isotrópico, calculando as velocidades longitudinais a partir do "Bulk modulus":

$$V_\ell = \sqrt{\frac{3B + 4\mu}{3\rho}} \qquad \text{(III-29)}$$

onde B é o "bulk modulus", ρ a densidade e μ o módulo de rigidez.

O "Bulk modulus" recebe contribuições tanto da parte iônica, que não depende do campo magnético, como da parte eletrônica, que tem uma parte dependente do campo magnético, e outra não dependente:

$$B = B_{ION} + B_e^{non} + B_e^{osc} \qquad (III-30)$$

Assim, a velocidade do som como função do campo magnético é dada por:

$$v(H) = \sqrt{\frac{3(B_{ION} + B_e^{non}) + 3B_e^{osc} + 4\mu}{3\rho}} \qquad (III-31)$$

Como a parte não oscilante do "Bulk modulus" é bem maior que a parte oscilante, a mudança fracional na velocidade do som com respeito ao campo magnético aplicado é dada por:

$$\frac{\Delta v}{v} = \frac{v(H) - v(0)}{v(0)} \simeq \frac{B_e^{osc}}{2\rho v^2(0)} \qquad (III-32)$$

A pressão do gás interagente, é dada por[20]:

$$p = \frac{KT}{V} \ln \Xi \qquad (III-33)$$

Colocando-se (III-3) e (III-4) em (III-33) teremos para a pressão, considerando efeitos de troca de 1a.ordem:

$$p = \frac{2P_F^5}{15\pi^2}\Big\{ 1 + \frac{15}{8\pi}s + \frac{5\pi^2\delta^2}{8}\left(1+\frac{s}{\pi}\right) + \frac{15}{8}\delta^2\left[\left(\tfrac{1}{2}-\gamma\right)^2 - \tfrac{1}{3}\right]\left(1+\frac{s}{\pi}\right)$$
$$+ \frac{15}{16}\frac{s}{\pi}\delta^2 \ln\delta\left[\frac{\mu^2}{3} - \frac{\alpha^2}{9}\right] - \frac{15}{4}\pi\gamma^{1/2}\delta\frac{s}{\pi}\sum_{\ell=1}^{\infty}(-)^{\ell+1}\frac{\cos\left(\frac{\ell\pi g}{2}\right)\sin\left(\ell\pi/\gamma - \pi/4\right)}{\ell^{1/2}\sinh\left(\ell\pi^2/\alpha\right)}$$
$$+ \frac{15}{4}\gamma^{1/2}\delta\sum_{\ell=1}^{\infty}(-)^{\ell+1}\frac{\cos\left(\frac{\ell\pi g}{2}\right)\cos\left(\ell\pi/\gamma - \pi/4\right)}{\ell^{3/2}\sinh\left(\ell\pi^2/\alpha\right)}\left[1 - \frac{\sqrt{2\pi}}{4}\frac{s}{\pi\gamma}I_s\,\ell\right]\Big\} \qquad (III-34)$$

Como vemos, novamente temos duas fases para as oscilações ; mas ao utilizarmos a relação (III-13) que conecta P_F com P_o temos:

$$P = \frac{2P_o^5}{15\pi^2}\left\{1 - \frac{5\delta_o}{8\pi} + \frac{5\pi^2\delta_o^2}{12}\left(1+\frac{\delta_o}{4\pi}\right) + \frac{5}{4}\gamma_o^2\left(\frac{1}{2}q\right)^2\left(1+\frac{3\delta_o}{2\pi}\right) - \frac{5\gamma_o^2}{12}\left(1+\frac{5\delta_o}{3\pi}\right) + \frac{15}{16}\left(\frac{\delta_o}{\pi}\right)\delta_o^2 \ln\delta_o \times\right.$$

$$\left. \times\left[\frac{\pi^2}{3} - \frac{\alpha^2}{4}\right] + \frac{5}{2}\pi\gamma_o^{1/2}\delta_o\sum_{\ell=1}^{\infty}(-)^{\ell+1}\frac{\cos(\ell\pi q/2)\sin(\ell\pi/\gamma_o - \pi/4)}{\ell^{1/2}\sinh(\ell\pi^2/\alpha)}\left[1 - \frac{\sqrt{2\pi}}{4}\left(\frac{\delta_o}{\pi}\right)\frac{\ell I_s^o}{\gamma_o}\right]\right\} \qquad \text{(III-35)}$$

O "Bulk modulus" é definido por[27]:

$$B = -V\frac{dP}{dV} \qquad \text{(III-36)}$$

Mas o momento de Fermi no zero absoluto do gás de elétrons livres (P_o) é função do volume do gás:

$$P_o = (3\pi^2 N)^{1/3}\, V^{-1/3} \qquad \text{(III-37)}$$

sendo N o número de elétrons do gás. Assim, retendo-se os termos mais importantes dentro das condições dHVA temos:

$$B_e = B_e^{non} + B_e^{osc} \qquad \text{(III-38)}$$

$$B_e^{non} = \frac{2P_o^5}{9\pi^2}\left(1 - \frac{\delta_o}{2\pi}\right) \qquad \text{(III-39)}$$

$$B_e^{osc} = \frac{2\delta_o P_o^5}{9\gamma_o^{1/2}}\sum_{\ell=1}^{\infty}(-)^{\ell+1}\frac{\cos\left(\frac{\ell\pi q}{2}\right)\ell^{1/2}\cos\left(\frac{\ell\pi}{\gamma_o} - \frac{\pi}{4}\right)}{\sinh(\ell\pi^2/\alpha)}\left[1 - \frac{\sqrt{2\pi}}{4}\left(\frac{\delta_o}{\pi}\right)\frac{\ell I_s^o}{\gamma_o}\right] \qquad \text{(III-40)}$$

Em unidades regulares temos:

$$B_c^{\text{nonosc}} = \frac{p_F^5}{9\pi^2 \hbar^3 m^*}\left[1 - \frac{1}{\pi}\left(\frac{4}{9\pi}\right)^{1/3} \frac{m^*}{m} r_s\right] \qquad \text{(III-41)}$$

$$B_c^{osc} = \frac{8 m^{*3/2} kT \epsilon_F^{o\,2}}{9\hbar^3 (\hbar\omega_0^*)^{1/2}} \sum_{\ell=1}^{\infty} (-)^{\ell+1} \frac{\cos\left(\frac{\ell\pi g}{2}\left(\frac{m^*}{m_0}\right)\right)\cos\left(\frac{\ell\pi\epsilon_F^o}{\mu_B^* H} - \frac{\pi}{4}\right)\ell^{1/2}}{\sinh\left(\frac{\ell\pi^2 kT}{\mu_B^* H}\right)}\left[1 - \frac{\ell I_s^o v_F^*}{\sqrt{2\pi}\, a_0^* \omega_0^*}\right] \qquad \text{(III-42)}$$

Usando (III-32) e as mesmas considerações feitas na seção anterior temos:

$$\frac{\Delta v}{v} = \frac{4 m^{*3/2} kT \epsilon_F^{o\,2}}{9 v^2(0) \rho \hbar^3 (\hbar\omega_0^*)^{1/2}} \frac{\cos\left(\frac{\ell\pi g}{2}\frac{m^*}{m_0}\right)\cos\left(\frac{\ell\pi\epsilon_F^o}{\mu_B^* H} - \frac{\pi}{4}\right)}{\sinh\left(\frac{\ell\pi^2 kT}{\mu_B^* H}\right)} e^{-\frac{2\pi^2 k T_{Dc}}{\hbar\omega_0^*}} \qquad \text{(III-43)}$$

que nos mostra que os períodos das oscilações quânticas da velocidade do som não são alterados e, assim como na susceptibilidade, as interações de troca de 1a.ordem se traduzem num decréscimo das amplitudes de oscilação, com um fator de Dingle linearmente proporcional à velocidade de Fermi do gás. O desaparecimento de uma das fases por meio do processo iterativo, tanto para a susceptibilidade magnética como para as oscilações quânticas da velocidade do som, em acordo com os resultados experimentais, indicam que o processo iterativo realizado neste trabalho é correto.

CAPÍTULO IV

IV.1 Contribuição dos diagramas em anel para a grande função de partição

Nesta secção estudaremos os termos provenientes dos diagramas em anel; devido às aproximações usadas, não conectaremos os resultados deste capítulo com os precedentes. Contudo os cálculos aqui apresentados são mais precisos que os efetuados por Isihara[19].

Na construção dos diagramas em anel, conectamos arbitrário número de torons arbitrários, por igual número de interações formando um anel. Para remover as restrições das integrais em temperatura $(\beta', \beta'', \ldots)$, precisamos obter os autovalores $(\lambda_j(\vec{q}))$ da equação de autovalores (A-49) do operador $G(q,\alpha)$ definido por (A-56). A contribuição dos diagramas em anel para a grande função de partição é dada por (Veja Apêndice A).

$$\ln \Xi_r = \frac{V}{2(2\pi)^3} \int \left\{ \sum_{j=-\infty}^{\infty} u(\vec{q})\lambda_j(\vec{q}) - \ln[1 + u(\vec{q})\lambda_j(\vec{q})] \right\} d\vec{q} \qquad \text{(IV-1)}$$

sendo $u(\vec{q})$ a transformada de fourier do potencial de Coulomb.

Conforme apresentado no apêndice (I) temos para os autovalores

$$\lambda_j(\vec{q}) = \frac{b^2}{4\pi^2}\int_{-\infty}^{\infty} dp_z \int_0^{\beta} d\alpha' \sum_{\ell=1}^{\infty}\sum_{s=0}^{\infty} (-)^{\ell+1} \frac{z^{\ell} \cosh\left(\frac{j\ell\beta b^2}{2}\right)}{\sinh(\ell\beta b^2)} \times$$

$$\times \exp\left\{-\frac{2\pi i j\alpha'}{\beta} - (s\beta+\alpha')(p_z+q_z)^2 - \left[(\ell-s)\beta-\alpha'\right]p_z^2\right\} \times A(s,\ell-s) \qquad \text{(IV-2)}$$

onde

$$A(s,\ell-s) \equiv \exp\left[-\frac{(q_x^2+q_y^2)}{b^2}\cdot\frac{\sinh\left[((\ell-s)\beta-\alpha')b^2\right]\sinh\left[(s\beta+\alpha')b^2\right]}{\sinh(\ell\beta b^2)}\right] \qquad \text{(IV-3)}$$

Para o cálculo dos autovalores, efetuaremos em duas etapas:

i) A primeira considerando (como $\alpha \gg 1$)

$$A(s,\ell-s) \simeq \exp\left[-\frac{(q_x^2+q_y^2)}{2b^2}\right] \qquad \text{(IV-4)}$$

Esta aproximação foi usada em (I). Obtemos com esta aproximação (Veja apêndice J).

$$\lambda_j(\vec{q}) = \lambda_j^{non}(\vec{q}) + \lambda_j^{osc}(\vec{q}) \qquad \text{(IV-5)}$$

onde $\vec{q}$ são coordenadas adimensionais, e

$$\lambda_j^{non}(\vec{q}) = \frac{p_F}{4\pi^2}\, e^{-q_\perp^2/2b}\, F(q_z,j) \qquad \text{(IV-6)}$$

$$\lambda_j^{osc}(\vec{q}) = \frac{1}{\pi\beta p_F}\exp\left[-\frac{q_\perp^2}{2\gamma}\right]\times\left\{\sum_{\ell=1}^{\infty}(-)^{\ell}\frac{\cos\left(\frac{\ell\pi q}{2}\right)\sin\left(\frac{\ell\pi}{\gamma}-\frac{\pi}{4}\right)}{\sinh(\ell\pi^2/\alpha)}\left[\frac{I_1+I_2}{\sqrt{2}}\right]+\right.$$

$$\left.\sum_{\ell=1}^{\infty}\frac{(-)^{\ell}\cos\left(\frac{\ell\pi q}{2}\right)\cos\left(\frac{\ell\pi}{\gamma}-\frac{\pi}{4}\right)}{\sinh(\ell\pi^2/\alpha)}\left[\frac{I_1-I_2}{\sqrt{2}}\right]\right\} \qquad \text{(IV-7)}$$

sendo $q_\perp^2 = q_x^2 + q_y^2$

$$F(q_z,j) = 1 - \left(\frac{1}{8}q_z - \frac{4}{q_z} - \frac{(2\pi j\delta)^2}{q_z^3}\right)\ln\left|\frac{(2\pi j\delta)^2+(q_z^2+2q_z)^2}{(2\pi j\delta)^2+(q_z^2-2q_z)^2}\right| \qquad \text{(IV-8)}$$

$$-\frac{(2\pi j\delta)}{2q_z}\left[\tan^{-1}\left(\frac{q_z^2+2q_z}{2\pi j\delta}\right)-\tan^{-1}\left(\frac{q_z^2-2q_z}{2\pi j\delta}\right)\right]$$

e I_1, I_2 dados por:

$$I_1(q_z) \equiv \int_{-1}^{1} \frac{q_z^2 + 2p_z q_z}{(q_z^2+2p_z q_z)^2 + (2\pi j\delta)^2} \cos\left(\frac{\ell\Omega}{\gamma} p_z^2\right) dp_z \tag{IV-9}$$

$$I_2(q_z) \equiv \int_{-1}^{1} \frac{q_z^2 + 2p_z q_z}{(q_z^2+2p_z q_z)^2 + (2\pi j\delta)^2} \sin\left(\frac{\ell\Omega}{\gamma} p_z^2\right) dp_z \tag{IV-10}$$

Em (I), Isihara considerou a integral I_2 como a mais importante, considerando I_1 praticamente nula, contudo em novo trabalho (Veja Apêndice K), dentro das condições dHVA mostramos que:

$$I_1(q_z) \simeq I_2(q_z) \simeq \left(\frac{\gamma}{2\ell}\right)^{1/2} \frac{q_z^2}{q_z^4 + (2\pi j\delta)^2} \tag{IV-11}$$

Assim a primeira etapa nos deu:

$$\lambda_j^{osc}(\vec{q}) = \frac{\gamma^{1/2}}{\pi\beta p_F} \sum_{\ell=1}^{\infty} (-)^{\ell} \frac{\cos\left(\frac{\ell\Omega q}{2}\right) \sin\left(\ell\frac{\pi}{\gamma} - \frac{\pi}{4}\right)}{\ell^{1/2} \sinh(\ell\pi^2/\alpha)} \frac{q_z^2}{q_z^4 + (2\pi j\delta)^2} e^{-\frac{q_\perp^2}{2\gamma}} \tag{IV-12}$$

O que nos mostra que as oscilações dHVA dos autovalores são principalmente do tipo seno, enquanto que as obtidas em (I) são do tipo coseno.

ii) Na segunda etapa melhoramos a aproximação feita em i) para certos valores de s e t($\equiv \ell - s$). É conveniente utilizar a fórmula para $\lambda_j(\vec{q})$ proveniente da integração de (IV-1) com respeito a P_z:

$$\lambda_j(\vec{q}) = \frac{b^2}{4\pi^{3/2}} \sum_{\ell=1}^{\infty} \frac{2^{\ell}(-)^{\ell+1} \cosh\left(\frac{q}{2} \ell\beta b^2\right)}{(\ell\beta)^{1/2} \sinh(\ell\beta b^2)} \times \sum_{\substack{s+t=\ell \\ s\geq 0,\, t\geq 1}} \int_0^{\beta} d\alpha' \, e^{-\frac{2\pi i j\alpha'}{\beta}} M(s,t) A(s,t) \tag{IV-13}$$

onde

$$M(s,t) \equiv \exp\left[-\frac{q_2^2(s\beta+\alpha')(t\beta-\alpha')}{\ell\beta}\right] \qquad \text{(IV-14)}$$

Expandindo-se $A(s,t)$ e $M(s,t)$ considerando $\alpha \gg 1$, sendo $\beta' \ll \beta$ um parâmetro a ser fixado, temos a tabela IV.1 abaixo

TABELA IV.1

	$A(0,1)$	$M(0,1)$	$A(\ell-1,1)$	$M(\ell-1,1)$	$A(0,\ell)$	$M(0,\ell)$
$0<\alpha'<\beta'$	$\exp(-q_1^2\alpha')$	$\exp[-q_2^2\alpha']$	$\exp\left[-\frac{q_1^2}{2b^2}\right]$	—	$\exp[-q_1^2\alpha']$	$\exp[-q_2^2\alpha']$
$\beta'<\alpha'<\beta-\beta'$	$\exp\left(-\frac{q_1^2}{2b^2}\right)$	—	$\exp\left[-\frac{q_1^2}{2b^2}\right]$	—	$\exp\left[-\frac{q_1^2}{2b^2}\right]$	—
$\beta-\beta'<\alpha'<\beta$	$\exp[-q_1^2(\beta-\alpha')]$	$\exp[-q_2^2(\beta-\alpha')]$	$\exp[q_1^2(\beta-\alpha')]$	$\exp[-q_2^2(\beta-\alpha')]$	$\exp\left[-\frac{q_1^2}{2b^2}\right]$	—

e

$$A(s,t) = \exp\left[-\frac{q_1^2}{2b^2}\right] \quad \text{para} \quad s \geq 1 \ \text{e} \ t \geq 2 \qquad \text{(IV-15)}$$

Como vemos, para $s \geq 1$ e $t \geq 2$ a aproximação (IV-4) é boa; contudo para os valores tabelados acima existem regiões em que esta aproximação não é boa. Corrigiremos o resultado de i) devido ao diferente comportamento exposto acima; assim, aos autovalores calculados em i) devemos adicionar:

$$\lambda_c(\vec{q},j) = \lambda_{c_1}(\vec{q},j) + \lambda_{c_2}(\vec{q},j) + \lambda_{c_3}(\vec{q},j) \qquad \text{(IV-16)}$$

ou $$\lambda_c(\vec{q},j) = \lambda_c^{non}(\vec{q},j) + \lambda_c^{osc}(\vec{q},j) \qquad \text{(IV-17)}$$

onde $\lambda_{c_i}(\vec{q})$ são as correções aos autovalores, devido ao diferente comportamento daquele assumido em (IV-4). Para manter a continuidade de $A(s,t)$ nas diferentes regiões escolhemos

$$\beta' = \frac{1}{2b^2} << \beta \tag{IV-18}$$

Conforme apêndice (L), temos para as correções dos autovalores:

$$\lambda_c^{non}(\vec{q},j) = \frac{2b^2}{3\pi^2\beta^{1/2}\alpha\,\epsilon_F\,\delta^{3/2}}\left[1 + \frac{3}{4}\delta^2\left(\frac{q^2\alpha^2}{8} - \frac{\alpha^2}{6} + \frac{\pi^2}{6}\right)\right] \times K(\vec{q},j) \tag{IV-19}$$

$$\lambda_c^{osc}(\vec{q},j) = \frac{b^2}{\pi\beta^{1/2}\alpha^{1/2}\epsilon_F} \sum_{\ell=1}^{\infty} (-)^{\ell} \frac{\cos\left(\frac{\ell\pi\delta}{2}\right)\sin\left(\frac{\ell\pi}{\gamma} - \frac{\pi}{4}\right)}{\ell^{1/2}\sinh(\ell\pi^2/\alpha)} \times K(\vec{q},j) \tag{IV-20}$$

onde; sendo $\vec{q}$ variáveis sem dimensão.

$$K(\vec{q},j) = \frac{q^2}{q^4 + (2\pi j\delta)^2} - \frac{q_z^2}{q_z^4 + (2\pi j\delta)^2}\, e^{-\frac{q_\perp^2}{2b^2}} - e^{-q^2/2\gamma}\cos\left(\frac{2\pi j\delta}{2\gamma}\right)\left[\frac{q^2}{q^4 + (2\pi j\delta)^2} - \frac{q_z^2}{q_z^4 + (2\pi j\delta)^2}\right]$$
$$+\, e^{-q^2/2\gamma}\sin\left(\frac{2\pi j\delta}{2\gamma}\right)(2\pi j\delta)\left[\frac{1}{q^4 + (2\pi j\delta)^2} - \frac{1}{q_z^4 + (2\pi j\delta)^2}\right] \tag{IV-21}$$

Temos então para os autovalores corrigidos:

$$\lambda_t(\vec{q},j) = \lambda_t^{non}(\vec{q},j) + \lambda_t^{osc}(\vec{q},j) \tag{IV-22}$$

onde

$$\lambda_t^{non}(\vec{q},j) = \lambda^{non}(\vec{q},j) + \lambda_c^{non}(\vec{q},j) \tag{IV-23}$$

$$\lambda_t^{osc}(\vec{q},j) = \lambda^{osc}(\vec{q},j) + \lambda_c^{osc}(\vec{q},j) \tag{IV-24}$$

Como se torna muito difícil o cálculo da função de partição com a expressão acima para os autovalores, faremos-uma aproximação. Como os termos seno e cosseno em $k(\vec{q},j)$ são importantes somente quando $q_z^2 << 2\gamma$, e como os autovalores serão somados em j para o cálculo da grande função de partição, assumimos que a contribuição oriunda destes termos seja bem menor que a oriunda dos termos restantes, isto é, assumimos que:

$$K(\vec{q},j) \simeq \frac{q^2}{q^4+(2\pi j\delta)^2} - \frac{q_z^2\, e^{-\frac{q_\perp^2}{2b^2}}}{q_z^4+(2\pi j\delta)^2} \qquad \text{(IV-25)}$$

e temos:

$$\lambda_t^{non}(\vec{q},j) = \frac{P_F}{4\pi^2}\left\{ e^{-q_\perp^2/2\gamma} F(q_z,j) + \frac{g}{3}\left[1+\frac{3}{4}\delta^2\left(\frac{g^2\alpha^2}{8}-\frac{\alpha^2}{6}+\frac{\pi^2}{6}\right)\right]\times \right.$$
$$\left. \times\left[\frac{q^2}{q^4+(2\pi j\delta)} - \frac{q_z^2\, e^{-q_\perp^2/2\gamma}}{q_z^4+(2\pi j\delta)^2}\right]\right\} \qquad \text{(IV-26)}$$

$$\lambda_t^{osc}(\vec{q},j) = \frac{b^2}{\pi(\beta\alpha)^{1/2}\epsilon_F}\sum_{\ell=1}^{\infty}(-)^\ell \frac{\cos(\ell\pi g/2)\,\sin\left(\frac{\ell\pi}{\delta}-\frac{\pi}{4}\right)}{\ell^{1/2}\,\sinh(\ell\pi^2/\alpha)} \cdot \frac{q^2}{q^4+(2\pi j\delta)^2} \qquad \text{(IV-27)}$$

Como se pode ver de (IV-26), na região em que $q_\perp^2 << 2\gamma$ a parte constante dos autovalores tem simetria cilíndrica no espaço dos momentos, ocasionada pelo fato da componente q_z não sentir os efeitos do campo magnético, mas sente os efeitos da degenerescência de Fermi até $q_z \simeq \epsilon_F^{1/2}$. Este comportamento coincide com o obtido em (IV-6) (coincidente com o resultado obtido em (I)). Contudo na região $q_\perp^2 >> 2\gamma$ (IV-26) nos exibe uma simetria esférica, não exibida em (IV-6) e em (I).

Isihara[19], devido a construção inadequada do propagador, no que diz respeito ao spin, obteve para as partes oscilatórias dos autovalores e das contribuições para a grande função de partição dos termos dos diagramas em anel, o fator de spin $(1 + \cos(g\ell\pi/2))$, concluindo que para $g = 2$ somente ondas com ℓ par existirão nestas oscilações. Como vemos, nosso resultado mostra que o fator de spin correto é $\cos(\frac{\ell\pi\phi}{2})$ e todas as ondas em princípio existirão.

A parte oscilatória dos autovalores tem simetria esférica no espaço de momentos, ao invés de simetria cilíndrica como obtida em (IV-12) e em (I). Assim as correções feitas na 2a. etapa alteram sensivelmente os autovalores na região $q_{\perp} > 2\gamma$.

Uma das propriedades dos autovalores, é que o termo

$$\sum_j \int d\vec{q}\; u(\vec{q})\, \lambda_j(\vec{q}) \tag{IV-27'}$$

deve dar um termo divergente, (pelo fato do potencial de Coulomb ser de grande alcance), e a contribuição das interações de troca de primeira ordem para a grande função de partição, com o sinal oposto, que é finita. É possível mostrar que os autovalores usados em (I) (assim como (IV-6) e (IV-12)) não produzem o termo divergente, enquanto que os autovalores dados por (IV-26) e (IV-27) produzem tal termo. Isto confirma que as correções provenientes da segunda etapa são bastante importantes.

Devido às aproximações usadas, e como é muito difícil o cálculo exato dos autovalores, não consideraremos os termos $\frac{3}{4}\delta^2[\beta^2\alpha^2/8 - \alpha^2/6 + \frac{q^2}{6}]$ em $\lambda^{mem}_{\ell}(\vec{q},j)$. Usando-se o resultado de Kojima[37]:

$$F(q_z,j) \simeq \frac{8}{3}\,\frac{q_z^2}{q_z^4 + (2\pi j\delta)^2}\, e^{-\frac{q_\perp^2}{2\gamma}} \quad \text{para} \quad q_z \gg 1 \tag{IV-28}$$

e dividindo-se o espaço $\vec{q}$ em regiões, assumimos o seguinte comportamento para $\lambda_t^{non}(\vec{q},j)$:

$$\lambda_t^{non}(\vec{q},j) \sim \frac{P_F}{4\pi^2}\,\frac{8}{3}\,\frac{q^2}{q^4+x^2} = \lambda_{(2)}^{non} \quad \text{para } (q_z^2>1) \qquad \text{(IV-29)}$$

$$\lambda_t^{non}(\vec{q},j) \sim \frac{P_F}{4\pi^2}\,\frac{8}{3}\,\frac{q^2}{q^4+x^2} = \lambda_{(2)}^{non} \quad \text{para } (q_z^2<1 \text{ e } q_\perp^2>2\gamma) \qquad \text{(IV-30)}$$

$$\lambda_t^{non}(\vec{q},j) \sim \frac{2P_F}{4\pi^2}\left(1-\frac{x}{2q_z}\tan^{-1}\left(\frac{2q_z}{x}\right)\right) = \lambda_{(1)}^{non} \quad \text{para } (q_z^2<1 \text{ e } q_\perp^2<2\gamma) \qquad \text{(IV-31)}$$

sendo

$$x = 2\pi j\delta \qquad \text{(IV-32)}$$

Das fórmulas acima vemos que:

$$\lambda_t^{osc}/\lambda_t^{non} \sim \gamma^{1/2}\,\frac{kT}{\epsilon_F} \ll 1 \qquad \text{(IV-33)}$$

Assim, aproximando-se (IV.1), temos que a contribuição para a grande função de partição proveniente dos diagramas em anel é dada por:

$$\ln \Xi_r = \ln \Xi_r^{non} + \ln \Xi_r^{osc} \qquad \text{(IV-34)}$$

onde

$$\ln \Xi_r^{non} \simeq \frac{1}{2}P_F^3 V \sum_j \int \frac{d\vec{q}}{(2\pi)^3}\left[\lambda_t^{non}(\vec{q},j)\,u(\vec{q}) - \ln\left(1+\lambda_t^{non}(\vec{q},j)\,u(\vec{q})\right)\right] \qquad \text{(IV-35)}$$

$$\ln \Xi_r^{osc} \simeq \frac{1}{2}P_F^3 V \sum_j \int \frac{d\vec{q}}{(2\pi)^3}\,\frac{\lambda_t^{osc}(\vec{q},j)\,\lambda_t^{non}(\vec{q},j)\,u^2(q)}{1+\lambda_t^{non}(\vec{q},j)\,u(\vec{q})} \qquad \text{(IV-36)}$$

sendo $\vec{q}$ variáveis sem dimensão e $u(\vec{q}) = 4\pi e^2/q^2\epsilon_F$ é a transformada de Fourier do potencial Coulombiano nestas variáveis.

Definindo-se

$$R(u) \equiv 1 - u \tan^{-1}\frac{1}{u} \quad ; \quad u = \frac{x}{2q_2} \qquad \text{(IV-37)}$$

mudando a soma em j em (IV-35) e (IV-36)

$$\sum_j \longrightarrow \frac{1}{2\pi\delta}\int_{-\infty}^{\infty} dx \qquad \text{(IV-38)}$$

e efetuando-se a integral em (IV-36), levando em consideração os comportamentos assumidos para λ_t^{nom} nas diferentes regiões descritas por (IV-29, 30, 31), temos para a parte oscilante da contribuição dos diagramas em anel para a grande função de partição:

$$\ln \Xi_r^{osc} = \frac{16}{3\pi^4}\, p_F^3 V \gamma^{1/2} r_s^2 \left(\frac{4}{9\pi}\right)^{2/3} \left[\frac{3}{2}\mathbb{J} + \mathbb{K} + \mathbb{L}\right] \times$$
$$\times \sum_{\ell=1}^{\infty} (-)^{\ell} \frac{\cos(\ell\pi q_2)\,\sin(\ell\pi/\gamma - \pi/4)}{\ell^{1/2}\,\sinh(\ell\pi^2/\alpha)} \qquad \text{(IV-39)}$$

onde

$$\mathbb{J} = \int_{-\infty}^{\infty} du \int_0^1 dq_2 \int_0^{\sqrt{2\gamma}} \frac{dq_1\, q_1 q_2 R(u)}{\left[(q_1^2+q_2^2)^2 + 4q_2^2u^2\right](q_2^2+q_1^2)\left[1 + \frac{4}{\pi}\left(\frac{4}{9\pi}\right)^{1/3} r_s R(u)(q_1^2+q_2^2)^{-1}\right]} \qquad \text{(IV-40)}$$

$$\mathbb{K} = \frac{3\pi^2}{32}\left(\frac{9\pi}{4}\right)^{1/3} r_s^{-1} \int_1^{\infty} dq_2 \ln\left[\frac{q_2^2 + \sqrt{q_2^4 + \frac{16}{3\pi}\left(\frac{4}{9\pi}\right)^{1/3} r_s}}{2q_2^2}\right] \qquad \text{(IV-41)}$$

$$\mathbb{L} = \frac{3\pi^2}{32}\left(\frac{9\pi}{4}\right)^{1/3} r_s^{-1} \int_0^1 dq_2 \ln\left[\frac{2\gamma + q_2^2 + \sqrt{(q_2^2+2\gamma)^2 + \frac{16}{3\pi}\left(\frac{4}{9\pi}\right)^{1/3} r_s}}{2(2\gamma+q_2^2)^2}\right] \qquad \text{(IV-42)}$$

E vemos que a contribuição dos diagramas em anel, contêm somente a fase seno, isto é, o mesmo comportamento do maior termo oscilatório das interações de troca de 1a.ordem. Pode ser que, da mesma maneira que as oscilações do tipo seno das interações de troca de 1a.ordem, este termo desapareça no processo iterativo.

Podemos dividir a parte constante da contribuição - dos diagramas em anel para a grande funçaõ de partição:

$$\ln \Xi_r^{non} = \ln \Xi_{Br}^{non} + \ln \Xi_{Sr}^{non}(1) - \ln \Xi_{Sr}^{non}(2) \qquad \text{(IV-43)}$$

onde, usando-se (IV-29, 30, 31), temos:

$$\ln \Xi_{Br}^{non} = \frac{P_F^3 V}{2(2\pi)^3} \sum_j \int d\vec{q} \left[\lambda_{(2)}^{non} u(\vec{q}) - \ln\left(1 + \lambda_{(2)}^{non} u(\vec{q})\right)\right] \qquad \text{(IV-44)}$$

$$\ln \Xi_{Sr}^{non}(1) = \frac{P_F^3 V}{2(2\pi)^3} \sum_j \int_0^{\sqrt{2\gamma}} 2\pi q_\perp dq_\perp 2 \int_0^L dq_z \left[\lambda_{(1)}^{non} u(\vec{q}) - \ln\left(1 + \lambda_{(1)} u(\vec{q})\right)\right] \qquad \text{(IV-45)}$$

Em (IV-43), estendemos o comportamento esférico da parte constante dos autovalores, válido para a região que exclui momentos pequenos, para todo o espaço $\vec{q}$, e corrigimos esta extensão com os dois últimos termos de (IV-43).

Um cálculo aproximado da contribuição oriunda da região de grandes momentos (IV-44) nos mostra que este termo é da ordem de $r_s^{5/4}$. Como a contribuição principal provém da região de pequenos momentos, e devido às aproximações usadas para a obtenção dos autovalores, não consideramos este termo.

O termo $\ln \Xi_{Sr}^{non}(2)$ nos dá termos que são pequenos quando $\gamma \ll 1$, assim assumimos:

$$\ln \Xi_r^{non} \simeq \ln \Xi_{Sr}^{non}(1) \qquad \text{(IV-46)}$$

e obtemos (Veja Apêndice M)

$$\ln \Xi_r^{non} = \frac{\beta P_F^3 V}{4\pi^3} s^2 \left[C - C_1 \ln\left(\frac{2s}{\pi}\right) + C_1 \ln\left(\frac{2\gamma}{2\gamma+1}\right) \right] \qquad \text{(IV-47)}$$

onde

$C = .6589479$ e $C_1 = .3213355$

Os dois primeiros termos obtidos acima são análogos aos <u>1os</u>. termos obtidos por Isihara e Kojima[38] no cálculo das contribuições dos diagramas em anel para a grande função de partição, na ausência de campo magnético. Os coeficientes numéricos não são iguais pelo fato do campo magnético modificar a região de integração (no cálculo de (IV-47))que naquele - cálculo é esférica, por uma região cilíndrica. O terceiro termo em (IV-47) aparece pelo fato de termos dividido o comportamento da parte constante dos autovalores em regiões[38].

Nossos resultados, contudo, não serão conectados com os provenientes dos efeitos de troca de 1a.ordem, devido aos parâmetros usados nas divisões das regiões de diferentes comportamentos para os autovalores, não serem precisos.

CONCLUSÃO

Considerando efeitos das interações de troca de primeira ordem, dentro das condições dHVA, a parte constante da susceptibilidade do gás interagente nos mostra que o paramagnetismo de spin não possui termos fortemente dependentes da temperatura (fig.2), em contraposição ao resultado obtido em (I) que possui um termo dependente fortemente da temperatura; erro este ocasionado pelo tratamento inadequado da parte spinoidal do propagador livre em (I). Os efeitos das interações de troca de 1a.ordem no diamagnetismo dependem fortemente da temperatura (fig.3). Contudo a susceptibilidade constante total (parte constante da susceptibilidade) é positiva e decresce com a temperatura (fig.4), em desacordo com o resultado obtido em (I) que diz que para certas temperaturas - ($T \leq 100^oK$) e certos valores de r_s (região metálica) a parte constante da susceptibilidade é negativa.

Considerando a densidade de elétrons constante, obtívemos somente ondas do tipo seno para as oscilações dHVA - da susceptibilidade e velocidade do som para o gás interagente, em acordo com os resultados experimentais. Este resultado vem elucidar a aparente inconsistência do formalismo usado, originária do fato de Ishimura[18] e Isihara[19] terem obtido por meio da mesma técnica usada por nós, ondas do tipo seno e cosseno, sendo as ondas do tipo cosseno maiores que as do tipo seno, em desacordo com resultados experimentais.

Isihara[19] assumiu que as ondas do tipo seno devem - ser mais importantes sem contudo explicar tal fato. Devido a um processo inadequado de normalização dos resultados Isihara obteve em (I) efeitos de estrutura fina nas oscilações dHVA da susceptibilidade ("fine rippling waves"), que mos - tramos não existirem quando o processo de normalização é adequado. Acreditamos que os efeitos de estrutura fina são ocasionados pelo potencial periódico da rede cristalina, não levado em consideração em nosso modelo.

O aparecimento de ondas somente do tipo seno, indicam que no efeito de Haas Van Alphen a densidade de eletrons livres na banda de condução é constante; e a energia de Fermi oscilatória, ao contrário de pesquisadores[11,16] que assumiam a energia de Fermi constante e a densidade de eletrons na banda dHVA oscilatória.

Os efeitos das interações de troca de 1a.ordem na susceptibilidade magnética e velocidade do som se traduzem - num fator exponencial (fator de Dingle) linearmente proporcional à velocidade de Fermi, em acordo com os resultados experimentais, e com a hipótese usada por Dingle[17], de que os efeitos das interações dos eletrons dariam origem a um fator exponencial.

O fator de Dingle calculado, oriundo das interações coulombianas de troca de 1a.ordem, é de natureza quântica. Num cristal real, além das interações elétron-elétron, impurezas e imperfeições existentes contribuirão para a temperatura de Dingle.

Seria de utilidade que se realizasse experiências em que se medisse a temperatura de Dingle para várias concentrações de impurezas e de defeitos de um determinado cristal, e comparássemos o valor extrapolado destes dados para concentração nula de impurezas e de defeitos, com o fator de Dingle obtido neste trabalho.

As oscilações dHVA da susceptibilidade para o gás não interagente, nos mostra que a temperatura promove um decréscimo nas amplitudes de oscilação, devido ao termo ($\sinh(c\pi^2/x)$). Acredita-se que as interações eletron-eletron produzam efeitos análogos aos da temperatura; isto vem apoiar a aproximação feita em (III-26). Acreditamos que o efeito global do decréscimo das amplitudes das oscilações dHVA, da susceptibilidade e velocidade do som para um cristal real, seja dado grosseiramente por:

$$\exp\left[-\left(\frac{2\pi^2 kT}{\hbar\omega_0}+\frac{2\pi^2 k T_{De}}{\hbar\omega_0}+\frac{C_i}{\hbar\omega_0}+\frac{C_d}{\hbar\omega_0}\right)\right]$$

onde o primeiro e segundo termos, dentro dos parênteses, são os efeitos da temperatura e das interações elétron-elétron, e os dois últimos termos são relacionados com as concentrações de impurezas e defeitos existentes no cristal.

Nossos cálculos para as contribuições dos diagramas em anel, nos mostra que a aproximação usada em (I)(etapa i no cálculo dos autovalores neste trabalho) não é boa. As contribuições dos diagramas em anel para a grande função de partição dão oscilações dHVA do tipo seno principalmente, em contraste com as oscilações do tipo cosseno, obtidas em (I).

Embora a precisão com que calculamos às contribuições dos diagramas em anel para a grande função de partição, não nos permita que conectemos estes resultados com os oriundos das interações de troca de 1a.ordem; podemos ver que o fator de spin para as oscilações das contribuições dos diagramas em anel é dado por: $\cos(g\ell\pi/2)$. Que diz que em princípio ondas de qualquer ℓ, proveniente dos diagramas em anel, contribuirão para as oscilações dHVA. Sendo que o fator de spin obtido em (I): $1 + \cos(g\ell\pi/2)$, nos diz que para $g = 2$, somente ondas com ℓ par nos darão contribuições dos ciagramas em anel para as oscilações dHVA.

APENDICE A - Método dos Propagadores

Consideraremos neste apêndice um apanhado breve sobre a técnica dos propagadores no grande "ensemble".

Consideremos um sistema composto de N partículas que interagem por meio de um potencial Φ ; a hamiltoniana do sistema é dada por:

$$H = H_0 + \phi \quad ; \quad \phi = \sum_{i,j} \phi_{ij} \tag{A-1}$$

e as autofunções e autovalores são dados por:

$$H \psi_n(\vec{r}^N) = \epsilon_n \psi_n(\vec{r}^N) \qquad \vec{r}^N \equiv (\vec{r}_1, \vec{r}_2, \ldots, \vec{r}_N) \tag{A-2}$$

Introduzimos uma nova função de onda no espaço $\vec{r}-\beta$ (espaço de coordenadas e de temperaturas recíprocas), definindo-a como:

$$\Psi_n(\vec{r}^N, \beta) = e^{-\beta H} \cdot \psi_n(\vec{r}^N) \tag{A-3}$$

como $[H, e^{-\beta H}] = 0$; a função definida em (A-3) deve satisfazer a equação de Bloch:

$$\frac{\partial \Psi_n(\vec{r}^N, \beta)}{\partial \beta} = - H \Psi_n(\vec{r}^N, \beta) \tag{A-4}$$

A solução desta equação pode ser obtida resolvendo-se a equação integral:

$$\Psi_n(\vec{r}^N,\beta) = \int K(\vec{r}^N,\beta;\vec{r}'^N\beta')\,\Psi_n(\vec{r}'^N,\beta')\,d\vec{r}'^N \tag{A-5}$$

Notemos que o Kernel $K(\vec{r}^N,\beta;\vec{r}',\beta')$ deve ter as mesmas propriedades de simetria que $\Psi(\vec{r}^N,\beta)$ com respeito às permutações das coordenadas $\vec{r}^N$. O Kernel representa a propagação de um conjunto de coordenadas $(\vec{r}'^N,\beta')$ para $(\vec{r}^N,\beta)$ e é chamado propagador.

De (A-4) e (A-5) verificamos que o propagador é na realidade a função de Green que satisfaz a equação:

$$\frac{\partial K(2,1)}{\partial \beta_2} + H(2)\,K(2,1) = \delta(\beta_2-\beta_1)\,K(2,1) \tag{A-6}$$

sujeitas às condições subsidiárias:

$$\begin{aligned} &K(2,1) \longrightarrow \delta(\vec{r}^N-\vec{r}'^N) && \text{quando} \quad \beta_2 \longrightarrow \beta_1 \\ &K(2,1) = 0 && \text{se} \quad \beta_2 < \beta_1 \end{aligned} \tag{A-7}$$

onde por simplicidade de notação usamos 2 para $(\vec{r}^N,\beta)$ e 1 para $(\vec{r}'^N,\beta')$.

Resolvendo-se (A-6) temos para o propagador:

$$K(\vec{r}^N,\beta;\vec{r}'^N,\beta') = \sum_n \exp\left[-(\beta-\beta')\epsilon_n\right]\psi_n(\vec{r}^N)\,\psi_n^*(\vec{r}'^N) \tag{A-8}$$

Igualando-se $\beta'=0$ na equação acima, vemos que $K(\vec{r}^N\beta;\vec{r}'^N 0)$ se reduz à matriz densidade canônica. Temos então a importante relação:

$$Z_N = \int K(\vec{r}^N\beta;\vec{r}^N 0)\,d\vec{r}^N \tag{A-9}$$

Investigaremos agora o caso em que a interação ϕ é pequena comparada com H_0, de modo a podermos aplicar o método das perturbações.

A.1 - Grande Função de partição para o gás não interagente

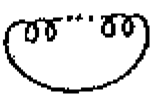
O primeiro termo de (A-9) no processo perturbativo (termo de ordem zero) corresponde à função de partição canônica para o sistema sem interação

$$Z^{\circ}_{N} = \int_{V} K_o(\vec{r}^N \beta; \vec{r}^N 0)\, d\vec{r}^N \qquad \text{(A-10)}$$

Sendo K_0 o propagador regido pela hamiltoniana sem interação ($H = H_0$), e é chamado propagador livre. A simetria das partículas está embutida na construção de $K_o(\vec{r}^N\beta;\vec{r}^N 0)$; isto é, é um determinante ou permanente dos propagadores para uma partícula; conforme as partículas sejam férmions ou bosons.

Se o determinante (ou permanente) do lado direito de (A-10) é expandido, vários produtos dos propagadores para uma partícula aparecerão, que podem ser classificados pelo número de ciclos ou troca de partículas. Por exemplo um típico "ℓ-toron" na função de partição livre, é dado por:

$$I_{\ell} \equiv \int \cdots \int K_o(\vec{r}_1\beta; \vec{r}_\ell 0)\, K_o(\vec{r}_\ell \beta, \vec{r}_{\ell-1} 0) \cdots K_o(\vec{r}_2 \beta; \vec{r}_1 0)\, d\vec{r}_1 \cdots d\vec{r}_\ell \equiv$$



(A-11)

Onde a figura acima é a representação por diagrama do "ℓ-toron".

Definindo-se

$$b_\ell^o \equiv (\mp)^{\ell+1} \frac{I_\ell}{\ell} \tag{A-12}$$

sendo os sinais(-) e (+) referentes a férmion e a bosons, e z a atividade absoluta, mostra-se (veja Isihara[6,20])

$$\Xi_o = \sum_{N=0}^{\infty} z^N Z_N = \exp\left[\sum_{\ell=1}^{\infty} z^\ell b_\ell^o\right] \tag{A-13}$$

ou em termos de representação por diagramas temos:

$$\ln \Xi_o = z\bigcirc \mp \frac{z^2}{2!}\bigcirc + \frac{z^3}{3!}\bigcirc \mp \cdots \tag{A-14}$$

A.2 - Função de Partição com Interações de troca de la.ordem (lst.Exchange)

Desenvolveremos nesta seção de maneira detalhada a obtenção da contribuição para a grande função de partição proveniente das interações de troca de la.ordem, visto a inexistência de publicações para a obtenção deste termo em detalhe.

No processo perturbativo a função de partição canônica é dada por

$$Z_N = Z_N^o + Z_N^{(1)} + \sum_{n=2}^{\infty} Z_N^{(n)} \tag{A-15}$$

onde (n) diz respeito ao número de interações envolvidas.

Vamos considerar o termo de la.ordem em (A-15) para explicar o mecanismo da obtenção das contribuições das interações de troca de la.ordem, para a grande função. Este termo é dado por:

$$Z_N^{(1)} = \frac{1}{N!^2}\int_V d\vec{r}^N \int_{V'} d\vec{r}'^N \int_0^\beta d\beta' \begin{vmatrix} K_o(\vec{r}_1\beta,\vec{r}_1'\beta') \dots K_o(\vec{r}_1\beta,\vec{r}_N'\beta') \\ \vdots \qquad\qquad \vdots \\ K_o(\vec{r}_N\beta,\vec{r}_1'\beta') \dots K_o(\vec{r}_N\beta,\vec{r}_N'\beta') \end{vmatrix}_\mp \left[\sum_{j>i}\phi(|\vec{r}_j'-\vec{r}_i'|)\right] \begin{vmatrix} K_o(\vec{r}_1'\beta',\vec{r}_1 0) \dots K_o(\vec{r}_1'\beta',\vec{r}_N 0) \\ \vdots \\ K_o(\vec{r}_N'\beta',\vec{r}_1 0) \dots K_o(\vec{r}_N'\beta',\vec{r}_N 0) \end{vmatrix}_\mp \tag{A-16}$$

Devido a indistringuibilidade das coordenadas, pela integração $d\vec{r}^N$ podemos fixar um dos $N!$ termos do 1ºdeterminante (ou permanente) e multiplicar por $N!$.

A soma $\left[\sum_{j>i}\phi(|\vec{r}_j'-\vec{r}_i'|)\right]$ contém $\binom{N}{2}$ termos, devido à integração $d\vec{r}'^N$ podemos fixar um dos termos e multiplicar por:

$$\binom{N}{2} = \frac{N!}{(N-2)!\,2!} \tag{A-17}$$

assim (A-16) pode ser escrita por:

$$Z_N^{(1)} = \frac{1}{(N!)^2} N! \frac{N!}{(N-2)!\,2!}\int_V d\vec{r}^N \int_{V'} d\vec{r}'^N \int_0^\beta d\beta' \prod_{i=1}^{N} K_o(\vec{r}_i\beta,\vec{r}_i'\beta')\,\phi(|\vec{r}_1'-\vec{r}_2'|) \begin{vmatrix} K_o(\vec{r}_1'\beta',\vec{r}_1 0) \dots K_o(\vec{r}_1'\beta',\vec{r}_N 0) \\ \vdots \\ K_o(\vec{r}_N'\beta',\vec{r}_1 0) \dots K_o(\vec{r}_N'\beta',\vec{r}_N 0) \end{vmatrix}_\mp \tag{A-18}$$

Vamos dividir as N partículas em dois grupos, um sendo um "ℓ-toron" possuindo uma interação entre duas das ℓ partículas. Devido a escolha de um dos termos do determinante (permanente) e a fixação de um dos termos do potencial de interação, as partículas 1 e 2 devem estar sempre dentro do "ℓ-toron", logo $\ell \geq 2$. O segundo grupo contendo $(N-\ell)$partículas sem interagirem. Não consideraremos torons que interagem entre si, pelo fato destes termos darem resultados divergentes que se cancelam ao considerarmos o "background" apropriado ao sistema.

Os "ℓ-torons" devem ser multiplicados por $\binom{N-2}{\ell-2}$, isto é, nº de maneiras possíveis de se escolher ℓ -2 partícu - las (pois duas estão fixas) dentro de (N-2) partículas.

Existem $\frac{\ell!}{\ell}$ maneiras das partículas se disporem dentro do "ℓ-toron" sendo que (ℓ -1) maneiras dão torons diferentes; como na expansão em diagramas abaixo:

(A-19)

Assim cada termo acima aparecerá (ℓ-2)! vezes.

Os diagramas acima representam partículas, havendo uma interação entre duas delas; por exemplo para ℓ=4 e s = 2 temos:

$$= \int_V d\vec{r}_1 \ldots d\vec{r}_4 \int_{V'} d\vec{r}_1' \ldots d\vec{r}_4' \int_0^\beta d\beta' \, K_0(\vec{r}_4\beta, \vec{r}_1'\beta') K_0(\vec{r}_1'\beta', \vec{r}_1 0) K_0(\vec{r}_1 0, \vec{r}_3'\beta') K_0(\vec{r}_3'\beta', \vec{r}_2 0) \times$$

$$\times \, \phi(|\vec{r}_1' - \vec{r}_2'|) K_0(\vec{r}_2 0, \vec{r}_2'\beta') K_0(\vec{r}_2'\beta', \vec{r}_3 0) K_0(\vec{r}_3 0, \vec{r}_4'\beta) K_0(\vec{r}_4'\beta', \vec{r}_4 0) \tag{A-20}$$

O segundo grupo de (N-ℓ) partículas; podemos dividi-lo em $m_{\ell'}$ "ℓ'-torons" sujeitos à condição:

$$\sum_{\ell'} m_{\ell'} \ell' = N-\ell \tag{A-21}$$

Sendo que cada diagrama deste grupo terá um peso (análogo ao peso dos termos de ordem zero; veja Isihara[6,20]):

$$(N-\ell)! \sum_{m_{\ell'}} \prod_{\ell'} \frac{(b^{0}_{\ell'})^{m_{\ell'}}}{m_{\ell'}!} \quad \text{sendo} \quad \sum m_{\ell'}\ell' = N-\ell \tag{A-22}$$

Assim temos:

$$Z_N^{(1)} = \frac{1}{N!^2} . N! . \frac{N!}{(N-2)!2!} . \frac{(N-2)!}{(N-2-(\ell-2))!(\ell-2)!} . (\ell-2)! \sum_{\ell=2}^{N} \left[(\mp)^{\ell} \sum_{\substack{s=1 \\ s+t=\ell}}^{\ell-1} \right] (N-\ell)! \sum_{m_{\ell'}} \prod_{\ell'} \frac{(b^{(0)}_{\ell'})^{m_{\ell'}}}{m_{\ell'}!} \tag{A-23}$$

Com a restrição (A-21). Assim a contribuição para a grande função de partição proveniente dos termos com uma interação é dada por:

$$\Xi^{(1)} = \sum_{N=1}^{\infty} z^N Z_N^{(1)} = \sum_{N=1}^{\infty} \sum_{\ell=2}^{N} \left[\frac{z^{\ell}}{2!} (\mp)^{\ell} \sum_{\substack{s=1 \\ s+t=\ell}}^{\ell-1} \right] \sum_{\substack{m_{\ell'} \\ \sum m_{\ell'}\ell' = N-\ell}} \prod_{\ell'} \frac{(z^{\ell'} b^{0}_{\ell'})^{m_{\ell'}}}{m_{\ell'}!} \tag{A-24}$$

Definindo-se a soma:

$$X = \frac{1}{2!} \sum_{t=1}^{\infty} (\mp)^{t} z^{t} \sum_{s=1}^{\infty} \left[(\mp)^{s+1} z^{s} \right] \tag{A-25}$$

e pelo fato da soma em N em (A-24), as restrições na soma em "s" e $\sum m_{\ell'}\ell'$ desaparecem e temos:

$$\Xi^{(1)} = X \, \Xi_0 \tag{A-26}$$

Se fizermos considerações análogas no 3º, 4º,...termos do lado direito da expansão (A-15), considerando apenas os diagramas que não há interação entre os "torons", e que cada toron contenha apenas uma interação; por exemplo, não considerando termos como na fig. A-1; mas termos como na fig. A-2 .

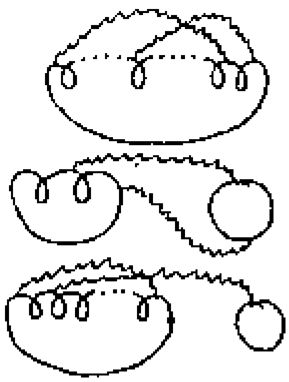


Fig. A-1

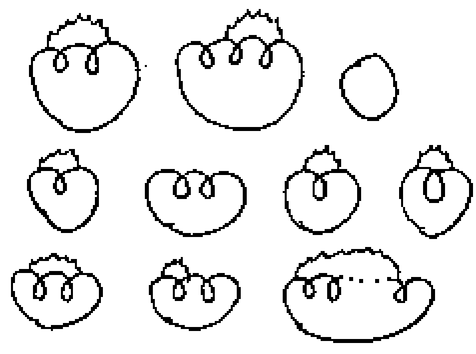


Fig. A-2

O terceiro termo de (A-15) no dá quando somado em N; a seguinte contribuição para a grande função de partição

$$\Xi^{(2)} = \frac{1}{2!} X^2 \Xi_0 \qquad \text{(A-27)}$$

O $n^{\underline{ésimo}}$ termo de (A-15) nos dará para a grande função de partição, o termo

$$\Xi^{(n)} = \frac{1}{n!} X^n \Xi_0 \qquad \text{(A-28)}$$

Usando os termos de (A-15), considerados acima; temos que a grande função de partição proveniente destes termos é dada por

$$\Xi = \Xi_0 + \sum_{n=1}^{\infty} \Xi^{(n)} = \Xi_0 \left(1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{X^n}{n!}\right) = \Xi_0 \, \Xi_{1x} \qquad \text{(A-29)}$$

Onde Ξ_{1x} é a contribuição para a grande função de partição, proveniente das interações de troca de 1a. ordem

1st exchange); é dado por:

$$\ln \Xi_{1x} = X \tag{A-30}$$

Usando-se a propriedade dos propagadores que pode ser deduzida da sua forma explícita:

$$K(\vec{r}_1, \ell\beta; \vec{r}_3, 0) = \int_V K(\vec{r}_1\beta; \vec{r}_2'0)K(\vec{r}_2'\beta; \vec{r}_3'0)\ldots K(\vec{r}_\ell'\beta; \vec{r}_3 0)d\vec{r}_2'\ldots d\vec{r}_\ell' \tag{A-31}$$

e definindo-se:

$$\mathbb{L}(\vec{r}_2\beta; \vec{r}_1 0) \equiv \sum_{t=1}^{\infty} (\mp)^{t+1} z^{t+1} K_t(\vec{r}, t\beta; \vec{r}_2 0) \tag{A-32}$$

temos para a contribuição das interações de troca de 1a. ordem, para a grande função de partição:

$$\ln \Xi_{1x} = \frac{\beta}{2} \iint d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \, \phi(|\vec{r}_2 - \vec{r}_1|) \, \mathbb{L}(\vec{r}_1\beta; \vec{r}_2 0) \, \mathbb{L}(\vec{r}_2\beta; \vec{r}_1 0) \tag{A-33}$$

A.3. Contribuição dos diagramas em anel para a grande função de partição

As contribuições para a grande função de partição provenientes de termos que na expansão (A-15) são representados por diagramas na forma de anel de torons ligados por interações (veja fig. A-3); são chamadas contribuições de diagramas em anel para a grande função de partição. As contribuições dos diversos tipos de aneis com l partículas denominaremos b_l^r.

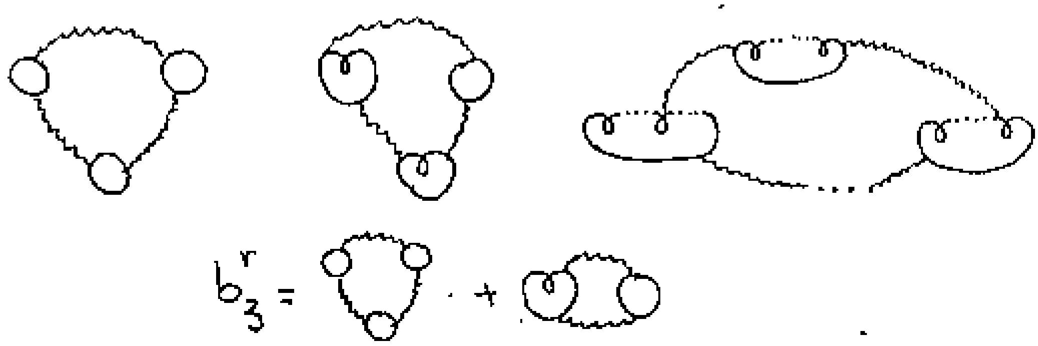


Fig. A-3

É bastante difícil explicar os fatores de peso dos diferentes anéis; para uma leitura mais extensa, embora não totalmente elucidativa recomendamos a referência 6 ou 20 ; efetuaremos aqui um breve apanhado destes termos.

Consideremos a pertubação de 2a. ōrdem correspondente ao processo ilustrado na fig. A-4 abaixo.

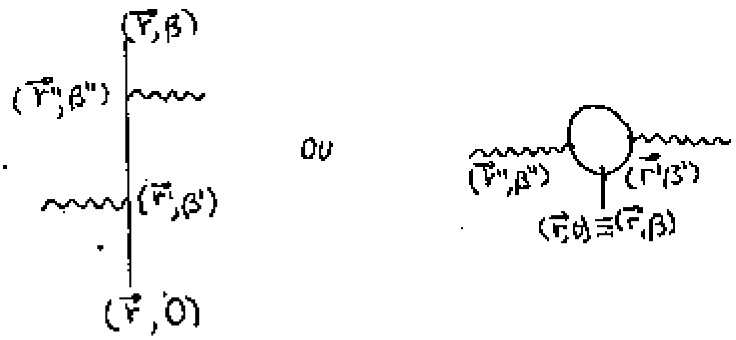


Fig. A-4

Esta figura é a representação de uma partícula, que se propaga no espaço de temperaturas recíprocas de $(\vec{r},o)$ até $(\vec{r},\beta)$ após interagir com duas outras partículas de coordenadas $(\vec{r}_1{}'', \beta')$ e $(\vec{r}_2{}', \beta'')$. A contribuição para a grande função de partição oriunda de um processo deste tipo é dada por:

$$= \int d\vec{r}\, d\vec{r}'\, d\vec{r}'' \int_0^{\beta} d\beta'' \int_0^{\beta''} d\beta'\, K_o(\vec{r}\beta, \vec{r}''\beta'')\, \phi(|\vec{r}_e'' - \vec{r}''|)\, K_o(\vec{r}''\beta''; \vec{r}'\beta') \times \tag{A-34}$$

$$\times\, \phi(|\vec{r}_2'' - \vec{r}'|)\, K_o(\vec{r}'\beta'; \vec{r}\,0)$$

Podemos usar a transformada de Fourier do potencial

$$\phi(\vec{r}) = \frac{1}{h^3}\int u(\vec{q})\, \exp(-i\hbar^{-1}\vec{q}.\vec{r})\, d\vec{r} \tag{A-35}$$

onde

$$u(\vec{q}) = \int \phi(\vec{r})\, \exp(i\hbar^{-1}\vec{q}.\vec{r})\, d\vec{r} \tag{A-36}$$

Para o caso do potencial coulombiano;

$$\phi(\vec{r}) = \frac{e^2}{r} \quad e \quad u(\vec{q}) = \hbar^2 . \frac{4\pi e^2}{q^2} \tag{A-37}$$

Os propagadores em (A-34) podem ser expressos no espaço de momentos por meio da relação:

$$K_o(\vec{r}\beta''; \vec{r}'\beta') = \frac{1}{h^3}\int K_o(\vec{p}, \beta''-\beta')\, \exp\left[-i\hbar^{-1}\vec{p}.(\vec{r}-\vec{r}')\right] d\vec{p} \tag{A-38}$$

Na equação (A-34) as coordenadas $\vec{r}'$ aparecemapenas em $\exp\left[-i\hbar^{-1}(\vec{p}-\vec{p}'-\vec{q}).\vec{r}'\right]$.

Assim a integração de (A-34) em $\vec{r}'$ nos dará a função delta de Dirac.

$$\frac{1}{h^3}\int \exp\left[-i\hbar^{-1}(\vec{p}-\vec{p}\,'-\vec{q})\cdot\vec{r}\right]d\vec{r}\,' = \delta(\vec{p}-\vec{p}\,'-\vec{q}) \tag{A-39}$$

Isto indica a conservação de momento:

$$\vec{p}\,' = \vec{p} - \vec{q} \tag{A-40}$$

Como $\vec{p}$ e $\vec{p}\,'$ são os momentos antes e após a interação, dizemos que a partícula perde momento $\vec{q}$ na interação

Ao fazermos as integrações sobre $\vec{r}\,''$ e $\vec{r}$, leis de conservação de momento similares aparecem:

$$\vec{p}\,'' = \vec{p}\,' - \vec{q}\,' \quad ; \quad \vec{p}\,'' = \vec{p} \tag{A-41}$$

Onde $\vec{q}\,'$ é o momento que representa a interação $\phi(|\vec{r}_2\,'' - \vec{r}\,'|)$; combinando-se (A-40) e (A-41) temos

$$\vec{q}\,' = -\vec{q} \tag{A-42}$$

Isto é, o momento que entra em um ponto do "1-toron" é emitido no outro ponto. Utilizando-se os resultados acima, e definindo-se o propagador no espaço dos momentos:

$$G_1(\vec{q};\beta''-\beta') \equiv \frac{2}{h^3}\int K_0(\vec{p},\beta-\beta'')\,K_0(\vec{p}-\vec{q},\beta''-\beta')\,K_0(\vec{p},\beta'-0)\,d\vec{p} \qquad \text{(A-43)}$$

temos que o processo representado por (A-34) fica:

$$\frac{1}{h^3}\int_0^{\beta} d\beta'' \int_0^{\beta''} d\beta'\; G_1(\vec{q};\beta''-\beta')\,\mathcal{U}^2(\vec{q})\,\exp\left[-i\hbar^{-1}\vec{q}\cdot(\vec{r}_\ell''-\vec{r}_2'')\right] d\vec{q} \qquad \text{(A-44)}$$

Esquecendo-se um dos $\mathcal{U}(\vec{q})$ da equação acima; introduzimos um novo propagador para uma partícula com uma interação

$$F(\vec{r}_2''-\vec{r}_\ell'';\beta''-\beta') \equiv \frac{1}{h^3}\int G_1(\vec{q};\beta''-\beta')\,\mathcal{U}(\vec{q})\,\exp\left[i\hbar^{-1}\vec{q}\cdot(\vec{r}_\ell''-\vec{r}_2'')\right] d\vec{q} \qquad \text{(A-45)}$$

Ele corresponde a um processo unitário envolvido no diagrama em anel. Nesta expressão a diferença de coordenadas $(\vec{r}_\ell''-\vec{r}_2'')$ aparece apenas na exponencial; assim a contribuição para b_ℓ^r oriunda de ℓ "1-toron" formando um anel é dada por:

$$b_\ell^r z^\ell = (\mp)^\ell \frac{(\ell-1)!}{2}\int_0^{\beta} d\beta^{(\ell)} \int_0^{\beta^{(\ell)}} \cdots \int_0^{\beta''} d\beta' \int d\vec{r}_2'\, d\vec{r}_3'' \ldots d\vec{r}_1^{(\ell)}\, F(\vec{r}_2'-\vec{r}_3'')\,\times$$

$$\times\, F(\vec{r}_3''-\vec{r}_4''')\ldots F(\vec{r}^{(\ell)}-\vec{r}_2') \qquad \text{(A-46)}$$

onde por simplicidade as coordenadas de temperatura dos propagadores foram omitidas. O fator $\frac{(\ell-1)!}{2}$ é o peso do ℓ-anel, e o fator - ou + se refere a férmions ou bosons.

Usando-se a equação (A-45) e efetuando as integrações, concluimos que todas as interações são representadas pelo mesmo $\vec{q}$ como resultado das integrações nas coordenadas espaciais. Como G_1 depende apenas de $\alpha = |\beta'' - \beta'|$ em geral, então as integrais em β podem ser efetuadas no range de 0 a β desde que introduzamos o fator $1/\ell!$. Assim (A-46) fica:

$$b_\ell^r z^\ell = (\mp)^\ell \frac{V(\ell-1)!}{2\ell!\, h^3} \int_0^\beta \cdots \int_0^\beta d\beta'' \int_0^\beta d\beta' \int u^\ell(\vec{q})\, G_1(\vec{q};|\beta'-\beta''|) \times$$

$$\times G_1(\vec{q},|\beta''-\beta'''|) \cdots G_1(\vec{q},|\beta^{(\ell)}-\beta|)\, d\vec{q} \qquad \text{(A-47)}$$

As integrais múltiplas acima podem ser efetuadas em termos dos autovalores da equação integral:

$$\lambda \psi(\beta') = \int_0^\beta G_1(\vec{q},|\beta''-\beta'|)\, \psi(\beta'')\, d\beta'' \qquad \text{(A-48)}$$

Assim, podemos expandir $G_1(\vec{q},|\beta''-\beta'|)$ em termos das autofunções normalizadas

$$G_1(\vec{q};|\beta''-\beta'|) = \sum_k \lambda_k \psi_k(\beta')\, \psi_k^*(\beta'') \qquad \text{(A-49)}$$

Mas devido ao caráter periódico dos torons, há a condição de que:

$$G_1(\vec{q},\alpha) = G_1(\vec{q};\beta-\alpha) \quad \text{onde} \quad \alpha = |\beta''-\beta'| \qquad \text{(A-50)}$$

Assim a função característica normalizada, é dada por:

$$\psi_j(\beta) = \beta^{-1/2} \exp\left(-\frac{2\pi i j \beta'}{\beta}\right) \;;\quad j = \ldots -2,-1,0,1,2,\ldots \qquad \text{(A-51)}$$

e os autovalores são:

$$\lambda_j(\vec{q}) = \int_0^\beta G_1(\vec{q},\alpha)\exp\left[-\frac{2\pi i j\alpha}{\beta}\right]d\alpha \qquad \text{(A-52)}$$

Efetuando-se as múltiplas integrações de (A-47) teremos:

$$b_\ell^r z^\ell = \frac{V}{2\ell h^3}\int \sum_j \left[-u(\vec{q})\lambda_j(\vec{q})\right]^\ell d\vec{q} \qquad \text{(A-53)}$$

A fim de achar a contribuição para a grande função de partição dos termos em anéis, devemos somar sobre ℓ; notemos aqui que estamos considerando por brevidade somente uma parte de b_ℓ^r; correspondente ao diagrama de ℓ "l-toron".

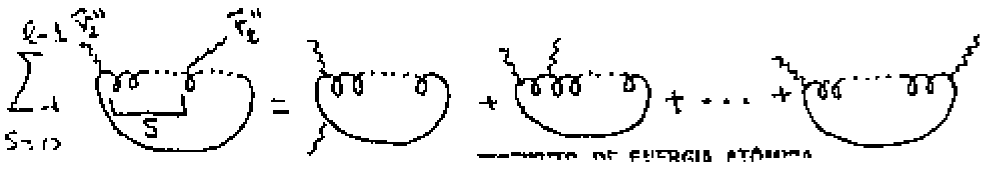
$$\ln \Xi_{1r} = \sum_{\ell=2}^{\infty} z^\ell b_\ell^r = \frac{V}{2h^3}\int \sum_j \left\{u(\vec{q})\lambda_j(\vec{q}) - \ln\left[1+u(\vec{q})\lambda_j(\vec{q})\right]\right\} d\vec{q} \qquad \text{(A-54)}$$

No caso geral, que não deduziremos aquí, isto é, onde todos os diagrama em anel são levados em conta; deveríamos partir em vez do elemento unitário dado por (A-34), por um elemento mais geral, como:

$$\sum_{s+t=\ell} (-)^\ell z^\ell \int d\vec{r}' \int d\vec{r}'' \int_0^\beta d\beta' \int_0^{\beta'} d\beta''\, K_0(\vec{r}', \beta'+t\beta; \vec{r}''\beta'')\, \phi(|\vec{r}_\ell''-\vec{r}''|)\, \times$$

$$\times\, K_0(\vec{r}'', \beta''+s\beta; \vec{r}'\beta')\, \phi(|\vec{r}_2''-\vec{r}'|) \qquad \text{(A-56)}$$

representado na forma gráfica como abaixo:



(A-55)

e chegaríamos a um $G(\vec{q},\alpha)$, mais geral que o $G_1(\vec{q},\alpha)$ considerado:

$$G(\vec{q},\alpha) = \sum_{\ell=1}^{\infty} z^{\ell} (\mp)^{\ell+1} \sum_{\substack{s+t=\ell \\ t>0 \\ s\geq 0}} \int d\vec{p}\, K_0(\vec{p};\beta'+t\beta-\beta'')\, K_0(\vec{p}+\vec{q};\beta''+s\beta-\beta') \tag{A-56}$$

Os autovalores correspondentes à equação (A-48) são:

$$\lambda_j(\vec{q}) = \int_0^{\beta} G(\vec{q},\alpha) \exp\left[-\frac{2\pi i j \alpha}{\beta}\right] d\alpha \tag{A-57}$$

e a contribuição para a grande função de partição; o que chamamos contribuição dos diagramas em anel para a grande função de partição, é dada por:

$$\ln \Xi_r = \frac{V}{2h^3} \int \sum_j \left\{ u(\vec{q})\lambda_j(\vec{q}) - \ln\left[1 + u(\vec{q})\lambda_j(\vec{q})\right] \right\} d\vec{q} \tag{A-58}$$

A.4 Função de Partição total

Dentro do que foi apresentado nas seções anteriores deste apêndice, podemos já concluir na existência de contribuição para a grande funão de partição com interações de troca de 1a. ôrdem, 2a. ôrdem, e assim por diante. Lembrando que a contribuição provinda dos diagramas em anel, envolvem todas as ôrdens de interação, temos:

$$\ln \Xi = \ln \Xi_0 + \ln \Xi_{1x} + \ln \Xi_r + \cdots \tag{A-59}$$

APÊNDICE B: Construção do propagador livre.

Por definição

$$K_0(\vec{r}_2\beta_2,\vec{r}_1\beta_1)=\sum_{n,\sigma} e^{-(\beta_2-\beta_1)\epsilon_{n,\sigma}}\psi_{n,\sigma}(\vec{r}_2)\,\psi^{*}_{n,\sigma}(\vec{r}_1) \qquad (B-1)$$

Substituindo-se os autovalores e autofunções dados por (I-5) e (I-6) teremos:

$$K_0(\vec{r}_2\beta_2,\vec{r}_1\beta_1)=\frac{b}{4\pi^{3/2}}\sum_{\sigma} e^{-\frac{s}{2}g\omega_b S_z}|\sigma\rangle\langle\sigma| \otimes \int_{-\infty}^{\infty}dP_z\, e^{-sP_z^2+iP_z(z_2-z_1)}\times$$

$$\times\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{2^n n!}\int_{-\infty}^{\infty}dP_x\, e^{-s(n+\frac{1}{2})\omega_0}\, e^{-\frac{1}{2}(\xi^2+\eta^2)}\, e^{iP_x(x_2-x_1)}\, H_n(\eta)\,H_n(\xi) \qquad (B-2)$$

onde

$$s=\beta_2-\beta_1\ ;\ \xi=b\left(y_2-\frac{P_x}{b^2}\right)\ ;\ \eta=b\left(y_1-\frac{P_x}{b^2}\right)$$

e

$$S_z=\pm\frac{1}{2}\quad \text{se}\quad |\sigma\rangle=\begin{matrix}|\uparrow\rangle\\|\downarrow\rangle\end{matrix} \qquad (B-3)$$

sendo $|\uparrow\rangle$ e $|\downarrow\rangle$ os estados em que a componente z do spin vale + 1/2 ou - 1/2. Mas

$$\prod_{spin}(s)\equiv\sum_{\sigma} e^{-\frac{s}{2}g\omega_b S_z}|\sigma\rangle\langle\sigma| = e^{-\frac{s}{4}g\omega_b}|\uparrow\rangle\langle\uparrow|+e^{\frac{s}{4}g\omega_b}|\downarrow\rangle\langle\downarrow| \qquad (B-4)$$

e

$$\alpha\equiv\int_{-\infty}^{\infty}dP_z\, e^{-sP_z^2+iP_z(z_2-z_1)}=\left(\frac{\pi}{s}\right)^{1/2} e^{\frac{-z^2}{4s}}\quad \text{onde}\ z=z_2-z_1 \qquad (B-5)$$

$$\gamma \equiv \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{2^n n!} H_n(\zeta) H_n(\eta) e^{-n s \omega_0} \tag{B-6}$$

Usando-se a definição de $H_n(x)$ como[28]:

$$H_n(x) \equiv \frac{2^n}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} (x+it)^n e^{-t^2} dt \tag{B-7}$$

temos

$$\gamma = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left\{ (\zeta+it)(\eta+iu) 2 e^{-s\omega_0} \right\} \exp\left[-(t^2+u^2)\right] du \tag{B-8}$$

assim (B-2) fica:

$$K_0(\vec{r}_2\beta_2, \vec{r}_1\beta_1) = \prod_{spin} \otimes \frac{b}{4\pi^3 s^{1/2}} e^{-\frac{z^2}{4s}} e^{-\frac{s\omega_0}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} dP_x \int_{-\infty}^{\infty} du \int_{-\infty}^{\infty} dt \exp\left\{ (\zeta+it)(\eta+iu) 2 e^{-s\omega_0} \right.$$

$$\left. - \frac{1}{2}(\zeta^2+\eta^2) + iP_x(x_2-x_1) - t^2 - u^2 \right\} \tag{B-9}$$

Efetuando-se as integrais envolvidas em (B-9) temos:

$$K_0(\vec{r}_2\beta_2, \vec{r}_1\beta_1) = \prod_{spin}(s) \otimes \frac{b^2 e^{i\phi}}{8\pi^{3/2}} \frac{e^{-\frac{z^2}{4s}} e^{\frac{-b^2(x^2+y^2)}{4\tanh(sb^2)}}}{s^{1/2}\sinh(sb^2)} \tag{B-10}$$

onde

$$\vec{r} = \vec{r}_2 - \vec{r}_1 \;\; ; \;\; s = \beta_2 - \beta_1 \;\; e \;\; \phi = \frac{1}{2} b^2 (x_2 - x_1)(y_1 + y_2) \tag{B-11}$$

APÊNDICE C - Grande função de partição Livre

De (I-15) temos

$$\ln \Xi_0 = \frac{Vb^2}{4\pi^{1/2}\beta^{1/2}} \cdot \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} \frac{ds}{s \sin \pi s} \, e^{s/\delta} \, \frac{\cosh(\frac{1}{2} g\alpha s)}{s^{1/2} \sinh(\alpha s)} \qquad (C-1)$$

O contorno da integral acima é mostrado na fig.C-1 e pode ser modificado pelo contorno mostrado na fig. C-2.

A integral terá contribuições do polo da origem e dos polos imaginários, os polos reais provenientes de $\sin(\pi s)$ não serão considerados; pois dão contribuições despresíveis devido ao fator do integrando $e^{s/\delta}$.

C.1 - Contribuição do polo da origem

Expandindo-se as funções que aparecem no integrando de (C-1) èm torno da origem (S≃0), temos para a contribuição do polo da origem para a grande função do gás de elétrons livres.

$$\ln \Xi_0^{non} = \frac{Vb^2}{4\pi^{3/2}\alpha\beta^{1/2}} \left\{ \frac{1}{2\pi i} \int_{c'} ds \frac{e^{s/\delta}}{s^{3/2}} + \left[\frac{1}{2}\left(\frac{g\alpha}{2}\right)^2 + \frac{\pi^2}{6} - \frac{\alpha^2}{6}\right] \frac{1}{2\pi i} \int_{c'} \frac{e^{s/\delta}}{s^{3/2}} ds \right\} \qquad (C-2)$$

onde c' é o contorno mostrado na fig. C-2, e usando-se a formula[28]

$$\frac{1}{2\pi i} \int_{c'} ds \, \frac{e^{ts}}{s^{\nu+1}} = \begin{cases} 0 & \text{se } t<0 \\ \dfrac{t^{\nu}}{\Gamma(\nu+1)} & R_e \nu > -1 \ \text{ se } t>0 \end{cases} \qquad (C-3)$$

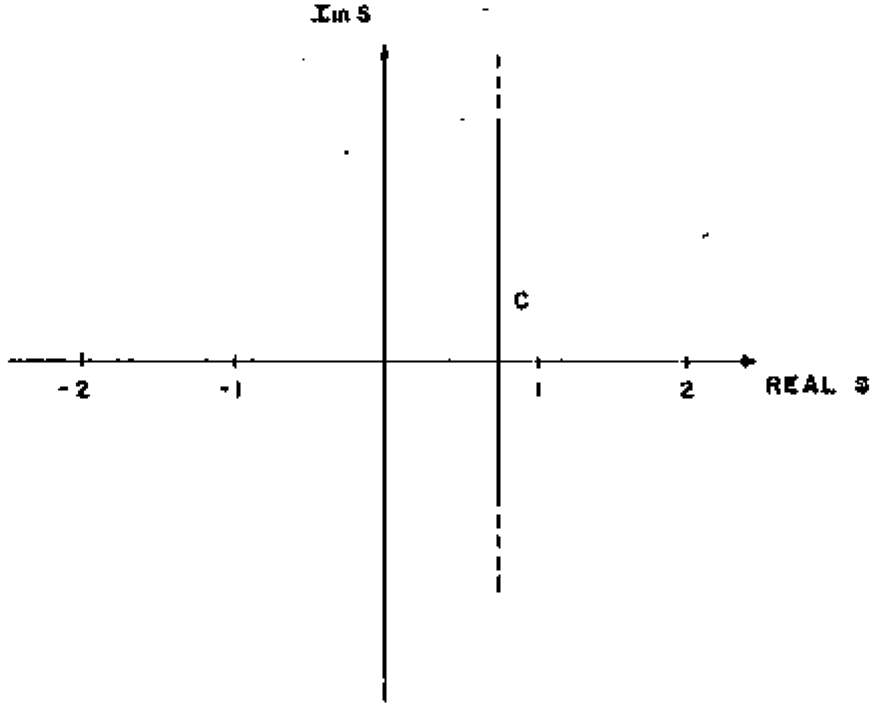


Figura C.1

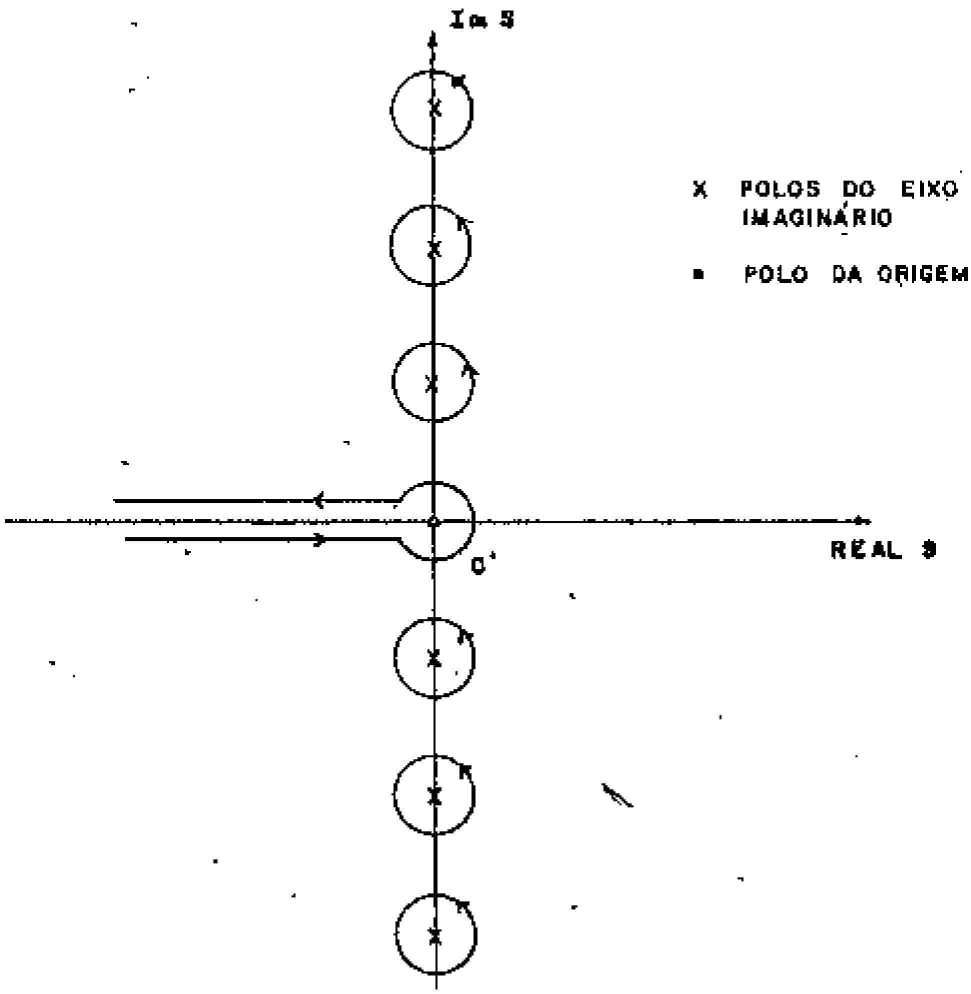


Figura C.2

Sendo $\Gamma(\nu)$ a função gama, temos para (C-2):

$$\ln \Xi_0^{non} = \frac{Vb^2}{4\pi^{3/2}\alpha\beta^{1/2}} \cdot \left(\frac{1}{\delta}\right)^{5/2} \cdot \frac{1}{\Gamma(7/2)} \left\{ 1 + \left[\frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}g\alpha\right)^2 + \frac{\pi^2}{6} - \frac{\alpha^2}{6}\right] \delta^2 \, \frac{\Gamma(7/2)}{\Gamma(3/2)} \right\} \quad \text{(C-4)}$$

C.2 - Contribuição dos polos imaginários

Expandindo-se as funções do integrando de (C-1) nas vizinhanças dos polos imaginários, isto é, $\alpha s = u + i\ell\pi$ onde $u \ll 1$, temos para a contribuição dos polos imaginários para a grande função do gás de elétrons livres:

$$\ln \Xi_0^{osc} = \sum_{\ell=-\infty}^{\infty}{}' \frac{Vb^2 (-)^{\ell}}{4\pi^{1/2}\beta^{1/2}\alpha} \cdot \frac{e^{i\ell\pi/\delta} \cos(g\ell\pi/2)}{i \sinh(\ell\pi^2/\alpha) \left(\frac{i\ell\pi}{\alpha}\right)^{3/2}} \cdot \frac{1}{2\pi i} \int_{c'} \frac{e^{u/\delta}}{u} du \quad \text{(C-5)}$$

onde a linha na somatoria significa que a origem é excluida. Usando (C-3), e rearranjando a soma (C-5) fica

$$\ln \Xi_0^{osc} = \frac{Vb^2\alpha^{1/2}}{2\pi^2\beta^{1/2}} \sum_{\ell=1}^{\infty} (-)^{\ell+1} \frac{\cos(g\ell\pi/2)\,\cos(\ell\pi/\delta - \frac{\pi}{4})}{\ell^{3/2} \sinh(\ell\pi^2/\alpha)} \quad \text{(C-6)}$$

C.3 - Contribuição total dos polos

Somando-se (C-4) e (C-6) temos para a grande função de partição do gás de elétrons livres

$$\ln \Xi_0 = \ln \Xi_0^{non} + \ln \Xi_0^{osc} \quad \text{(C-7)}$$

$$\ln \Xi_0 = \frac{2V\beta p_F^5}{15\pi^2}\left\{1 + \frac{5}{8}\pi^2\delta^2 + \frac{15}{8}\left[\left(\tfrac{1}{2}g\right)^2 - \tfrac{1}{3}\right]\gamma^2 + \right.$$

$$\left. + \frac{15}{4}\gamma^{3/2}\delta \sum_{\ell=1}^{\infty} (-)^{\ell+1} \frac{\cos(g\ell\pi/2)\,\cos(\ell\pi/\gamma - \pi/4)}{\ell^{3/2}\sinh(\ell\pi^2/\alpha)}\right\} \qquad \text{(C-8)}$$

APÊNDICE D - Integrais espaciais das contribuições das interações de troca de 1a. ordem para a grande função de partição.

Definindo-se

$$A = \int_V d\vec{r}_1 \int_V d\vec{r}_2 \, \phi(|\vec{r}_2 - \vec{r}_1|) \, Tr_\sigma \, K_0(\vec{r}_2, s\beta; \vec{r}_1, 0) \, K_0(\vec{r}_1, t\beta; \vec{r}_2, 0) \tag{D-1}$$

e colocando-se as fórmulas explícitas dos propagadores envolvidos em (D-1) temos:

$$A = \frac{b^4}{(8\pi^{3/2})^2} \int_V d\vec{r}_1 \int_V d\vec{r}_2 \, \phi(|\vec{r}_2 - \vec{r}_1|) \frac{\exp\left\{-\frac{z^2(s+t)}{4\beta st} - \frac{\omega b}{8}\left[\coth(\alpha s) + \coth(\alpha t)\right](x^2+y^2)\right\}}{(\beta t)^{1/2}(\beta s)^{1/2} \sinh(\alpha s) \sinh(\alpha t)} \times$$

$$\times \, Tr_\sigma \left\{ \left[|\uparrow\rangle\langle\uparrow| e^{-\frac{1}{2} g\beta b^2 s} + |\downarrow\rangle\langle\downarrow| e^{\frac{1}{2} g\beta b^2 s} \right] \times \left[|\uparrow\rangle\langle\uparrow| e^{-\frac{1}{2} g\beta b^2 t} + |\downarrow\rangle\langle\downarrow| e^{\frac{1}{2} g\beta b^2 t} \right] \right\} \tag{D-2}$$

O traço sobre os estados de spin nos dá:

$$Tr_\sigma \left\{ [\ ] \times [\cdot] \right\} = 2 \cosh\left[\tfrac{1}{2} g\beta b^2 (s+t)\right] \tag{D-3}$$

Mudando-se as coordenadas espaciais para coordenadas relativas, temos:

$$A = \frac{\omega b^2}{128} \frac{V e^2}{\pi^3} \frac{\cosh\left[\frac{1}{2} g\alpha(s+t)\right]}{(s\beta)^{1/2}(t\beta)^{1/2} \sinh(\alpha s) \sinh(\alpha t)} \int \frac{d\vec{r}}{r} e^{-D_1 z^2} e^{-D_2(x^2+y^2)} \tag{D-4}$$

onde

$$D_1 = (s+t)/4\beta st \tag{D-5}$$

$$D_2 = \frac{\omega_b}{B}\left[\coth(\alpha s) + \coth(\alpha t)\right] \; ; \quad D = 2\frac{D_2}{D_1} - 1 \tag{D-6}$$

Usando-se coordenadas cilíndricas e os resultados[28]:

$$\int_0^\infty dx \, \frac{e^{-\alpha x}}{[x(x+b)]^{1/2}} = e^{-b\alpha/2} K_0\left(\tfrac{1}{2}b\alpha\right) \tag{D-7}$$

$$\int_0^\infty dx \, e^{-bx} K_0(x) = \frac{\cosh^{-1} b}{(b^2-1)^{1/2}} \tag{D-8}$$

onde $K_0(x)$ é a função de Bessel com argumento complexo de ordem zero, teremos para (D-4)

$$A = \frac{2V\omega_0^2 e^2}{128\,\beta\pi^2} \, \frac{e^{s/\delta} e^{t/\delta} \cosh\left[\frac{1}{2}g\alpha(s+t)\right]}{\sin(\pi s)\sin(\pi t)\, s^{1/2} t^{1/2} \sinh(\alpha s)\sinh(\alpha t)} \cdot \frac{\cosh^{-1} D}{D_1 (D^2-1)^{1/2}} \tag{D-9}$$

APÊNDICE E - Cálculo de Ξ^{non}_{1x}

Os contornos das integrais em (II-4), mostrados na fig. C-1, podem ser mudados pelo contorno mostrado na fig.C-2 do apêndice C.

Para o cálculo das contribuições provenientes do polo da origem $\left(\Xi^{non}_{1x}\right)$ devemos expandir as funções no integrando de (II-4) para $S \approx 0$ e $t \approx 0$, em particular:

$$\frac{\cosh^{-1} D}{(D^2-1)^{1/2}} \simeq 1 - \frac{\omega_0}{9} \alpha\beta st \tag{E-1}$$

e teremos

$$\operatorname{Im} \Xi^{non}_{1x} = \frac{V\omega_0^2 e^2 \beta}{32\pi^2\alpha^2} \left(\frac{1}{2\pi i}\right)^2 \int_{C_2'} ds \int_{C_2'} dt \, \frac{e^{s/\delta} e^{t/\delta}}{(s+t)\, s^{3/2} t^{3/2}} \Big\{1 + st\Big[\left(\tfrac{1}{2} g\alpha\right)^2 - \tfrac{2}{9}\alpha^2\Big] + s^2\Big[\tfrac{1}{2}\left(\tfrac{1}{2} g\alpha\right)^2 + \tfrac{\pi^2}{6} - \tfrac{\alpha^2}{6}\Big] + t^2\Big[\tfrac{1}{2}\left(\tfrac{1}{2} g\alpha\right)^2 + \tfrac{\pi^2}{6} - \tfrac{\alpha^2}{6}\Big]\Big\} \tag{E-2}$$

Mas é facil ver que para $s,t \ll 1$:

$$\frac{st}{(s+t)\, s^{3/2} t^{3/2}} = \frac{1}{(s+t)\, s^{1/2} t^{1/2}} \; ; \; \frac{s^2}{(s+t)\, s^{3/2} t^{3/2}} = \frac{1}{s^{1/2} t^{3/2}} - \frac{1}{s^{1/2} t^{1/2} (s+t)}$$

e

$$\frac{t^2}{(s+t)\, s^{3/2} t^{3/2}} = \frac{1}{t^{1/2} s^{3/2}} - \frac{1}{s^{1/2} t^{1/2} (s+t)} \tag{E-3}$$

e obtemos

$$\operatorname{Im} \Xi^{non}_{1x} = \frac{V\omega_0^2 \beta e^2}{32\pi^2\alpha^2} \Big\{ I_1 + \Big[\frac{\pi^2}{3} + \left(\tfrac{1}{2} g\alpha\right)^2 - \frac{\alpha^2}{3}\Big] I_2 - \Big[\frac{\pi^2}{3} - \frac{\alpha^2}{9}\Big] I_3 \Big\} \tag{E-4}$$

onde

$$I_1 = \left(\frac{1}{2\pi i}\right)^2 \int_{C_1'} ds \int_{C_2'} dt \, \frac{e^{s/\delta}\, e^{t/\delta}}{s^{3/2}\, t^{3/2}\, (s+t)} \tag{E-5}$$

$$I_2 = \left(\frac{1}{2\pi i}\right)^2 \int_{C_1'} ds \int_{C_2'} dt \, \frac{e^{s/\delta}\, e^{t/\delta}}{s^{3/2}\, t^{1/2}} \tag{E-6}$$

$$I_3 = \left(\frac{1}{2\pi i}\right)^2 \int_{C_1'} ds \int_{C_2'} dt \, \frac{e^{s/\delta}\, e^{t/\delta}}{s^{1/2}\, t^{1/2}\, (s+t)} \tag{E-7}$$

APÊNDICE F - Cálculo de I_1, I_2 e I_3

F.1 - Cálculo de I_1

Expandindo-se (S + t) do denominador de (E-5) em potências de S/t teremos:

$$I_1 = \frac{1}{2\pi i}\int_{c_1'} ds\, \frac{e^{S/\delta}}{S^{5/2}}\left[\frac{1}{2\pi i}\int_{c_2'} \frac{e^{t/\delta}}{t^{3/2}}dt + \frac{1}{2\pi i}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{(-)^n}{S^n}\int_{c_2'}\frac{e^{t/\delta}}{t^{3/2-n}}dt\right] \qquad (F-1)$$

Usando-se (C-3) temos

$$\frac{1}{2\pi i}\int_{c_1'}\frac{e^{t/\delta}}{t^{3/2}}dt = \frac{(1/\delta)^{1/2}}{\Gamma(3/2)} \qquad (F-2)$$

Definindo-se

$$I_{1n} = \frac{1}{2\pi i}\int_{c'}\frac{e^{t/\delta}}{t^{3/2-n}}dt \qquad (F-3)$$

vemos que para $n \geq 1$ há contribuição dos ramos do polo, e obtêmos:

$$I_{1n} = \frac{(2n-3)!!}{\pi}(-)^{n+1}\left(\frac{\delta}{2}\right)^{n-1}\sqrt{\pi\delta} \qquad n \geq 1 \qquad (F-4)$$

Usando-se (F-2) e (F-4) obtemos para (F-1):

$$I_1 = \frac{1}{2\pi i}\int_{c'} ds\, \frac{e^{s/\delta}}{s^{5/2}} \left\{ \frac{(1/\delta)^{1/2}}{\Gamma(3/2)} - \frac{\sqrt{\delta\pi}}{\pi s} - \sum_{n=2}^{\infty} \frac{(2n-3)!!}{s^n \pi} \left(\frac{\delta}{2}\right)^{n-1} \sqrt{\delta\pi} \right\} \tag{F-5}$$

Usando-se (C-3) vārias vezes, temos:

$$I_1 = \left(\frac{1}{\delta}\right)^2 \left\{ \frac{1}{\Gamma(3/2)\Gamma(5/2)} - \frac{\sqrt{\pi}}{\pi\,\Gamma(7/2)} - \frac{8}{\pi} \sum_{n=2}^{\infty} \frac{(2n-3)!!}{(2n+3)!!} \right\} \tag{F-6}$$

mas

$$\frac{8}{\pi} \sum_{n=2}^{\infty} \frac{(2n-3)!!}{(2n+3)!!} = \frac{2}{15\pi} \tag{F-7}$$

e obtemos

$$I_1 = \frac{2}{\pi}\left(\frac{1}{\delta}\right)^2 \tag{F-8}$$

F.2 - Cālculo de I_2

De (E-6) temos

$$I_2 = \frac{1}{2\pi i}\int_{c_1'} ds\, \frac{e^{s/\delta}}{s^{3/2}} \cdot \frac{1}{2\pi i}\int_{c_2'} dt\, \frac{e^{t/\delta}}{t^{1/2}} \tag{F-9}$$

Usando-se (C-3) obtemos:

$$I_2 = \frac{2}{\pi} \tag{F-10}$$

F.3 - Cálculo de I_3

De (F-9) temos para $\delta > 0$

$$I_3\left(\frac{1}{\delta}\right) = \left(\frac{1}{2\pi i}\right)^2 \left\{ \int_{C_1'} ds \int_{C_2'} dt \frac{e^{s/\delta} e^{t/\delta}}{s^{1/2} t^{1/2} (s+t)} \right\} = \left(\frac{1}{2\pi i}\right)^2 \left\{ \int_{\epsilon}^{1/\delta} dv \int_{C_1'} ds \int_{C_2'} dt \frac{e^{(s+t)v}}{s^{1/2} t^{1/2}} + \int_{C_1'} \int_{C_2'} ds\,dt \frac{e^{(s+t)\epsilon}}{s^{1/2} t^{1/2} (s+t)} \right\} \tag{F-11}$$

Usando (C-3) e assumindo que $I_3'(1/\delta)$ seja analítica como função de δ para $\delta > 0$, obtemos

$$I_3 = -\frac{\ln \delta}{\pi} . \tag{F-12}$$

APÊNDICE G - Parte oscilatória da contribuição para a grande função de partição, oriunda da interação de troca de 1a. ordem $\left(\Xi^{osc}_{1x}\right)$.

Para calcular as contribuições provenientes dos polos $s \simeq 0$ e $\alpha t = u + i\ell\pi$ ou $t \simeq 0$ e $\alpha s = u + i\ell\pi$ onde $u \simeq 0$ é conveniente partir da equação (II-3), utilizando os resultados (D-3) e (D-4) e expandindo as funções que aparecem no integrando de (II-3) nas regiões acima mencionadas. Devido à simetria quanto a troca de s e t no integrando de (II-3); basta considerarmos $s \simeq 0$ e $\alpha t = u + i\ell\pi$ onde $u \simeq 0$, e multiplicarmos por dois o resultado. Assim as contribuições mais importantes (dentro das condições dHVA) provenientes dos polos imaginários, para a grande função de partição são dadas por:

$$\ln \Xi^{osc}_{1x} = \frac{2}{4} V \frac{\pi}{(2\pi i)^2} \frac{\omega_0^2}{(4\pi)^3 \alpha^2} \int d\vec{r}\, \phi(\vec{r}) \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} ds \frac{e^{s/\delta}}{s^{5/2}} \sum_{\ell=-\infty}^{\infty}{}' (-)^{\ell} \oint \frac{du\, e^{(u+i\ell\pi)/\gamma}\, e^{-D_1 z^2}\, e^{-D_2(x^2+y^2)} \cos(q\ell/2)}{u\, i\, \mathrm{senh}(\ell\pi^2/\alpha)\, (i\ell\pi/\alpha)^{1/2}} \qquad (G-1)$$

Onde a linha na somatória significa que $\ell = 0$ é excluido, e D_1 e D_2 que aparecem na fórmula acima, são as expansões daqueles dados pelas equações (II-5):

$$D_1 = \frac{1}{4\beta s} - \frac{\alpha}{4\beta\ell} i \quad ; \quad D_2 = \frac{\omega_0}{8}\left(\frac{1}{\alpha s} + \frac{1}{u}\right) \qquad (G-2)$$

Rearranjando-se (G-1) temos:

$$\ln \Xi_{1x}^{osc} = \frac{\gamma\pi\omega_0^2}{2(4\pi)^3\alpha^2}\int d\vec{r}\,\phi(\vec{r})\sum_\ell{}' e^{i\ell\pi/\gamma}\frac{(-)^\ell \cos(g\ell\pi/2)\, e^{\frac{i\alpha z^2}{4\beta\pi\ell}}}{i\,\mathrm{Sinh}(\ell\pi^2/\alpha)(i\ell\pi/\alpha)^{1/2}} \times I_4 \times I_5 \qquad (G-3)$$

onde

$$I_4 = \frac{1}{2\pi i}\int_{C'} ds\,\frac{e^{s/\gamma}\, e^{-r^2/4\beta s}}{s^{5/2}} = \left(\frac{2\beta P_F}{r}\right)^{3/2} J_{3/2}(P_F r) \qquad (G-4)$$

$$I_5 = \frac{1}{2\pi i}\oint \frac{du}{u}\, e^{u/\gamma}\, e^{-\omega_0(x^2+y^2)/8u} = J_0\left[P_F(x^2+y^2)^{1/2}\right] \qquad (G-5)$$

usamos para o cálculo de I_4 e I_5 a fórmula[32]:

$$\frac{1}{2\pi i}\int_{c-i\infty}^{c+i\infty}\frac{ds}{s^{\nu+1}}\, e^{-p/s+sq} = p^{-\nu/2} q^{\nu/2} J_\nu(2p^{1/2}q^{1/2}) \qquad R_e\,\nu > -1 \qquad (G-6)$$

Sendo J_ν a função de Bessel de ordem ν .

Fazendo a mudança de variável: $\vec{r} \longrightarrow \vec{r}/P_F$ em (G-3) temos

$$\ln \Xi_{1x}^{osc} = \frac{\gamma\omega_0^2 e^2}{64\pi}\left(\frac{2\beta}{\alpha\pi}\right)^{3/2} P_F \sum_{\ell=1}^{\infty}\frac{(-)^\ell \cos(g\ell\pi/2)}{\ell^{1/2}\,\mathrm{Sinh}(\ell\pi^2/\alpha)} \times I \qquad (G-7)$$

sendo

$$I = \int \frac{d\vec{r}}{r^{5/2}}\sin\left(\frac{\ell\pi}{\gamma} + \frac{\alpha z^2}{4\beta\pi\ell\epsilon_F} - \frac{\pi}{4}\right) J_{3/2}(r)\, J_0\left[(x^2+y^2)^{1/2}\right] \qquad (G-8)$$

Podemos escrever I como:

$$I = \sin\left(\frac{\ell\pi}{\gamma} - \frac{\pi}{4}\right) I_c(\ell,\gamma) + \cos\left(\frac{\ell\pi}{\gamma} - \frac{\pi}{4}\right) I_s(\ell,\gamma) \tag{G-9}$$

onde

$$I_c(\ell,\gamma) = \int \frac{d\vec{r}}{r^{5/2}} \cos\left(\gamma z^2/4\pi\ell\right) J_{3/2}(r) J_0\left[(x^2+y^2)^{1/2}\right] \tag{G-10}$$

$$I_s(\ell,\gamma) = \int \frac{d\vec{r}}{r^{5/2}} \sin\left(\gamma z^2/4\pi\ell\right) J_{3/2}(r) J_0\left[(x^2+y^2)^{1/2}\right] \tag{G-11}$$

Dentro das condições dHVA que estamos interessados, temos que $\gamma = \frac{\omega_0}{2\epsilon_F} << 1$, assim podemos expandir o cosseno no integrando de $I_c(\ell,\gamma)$ retendo somente o primeiro termo da expansão. O mesmo não pode ser feito para $I_s(\ell,\gamma)$, posto que, o resultado torna-se divergente.

Utilizando-se coordenadas esféricas e integrando-se em φ temos:

$$I_c(\ell,\gamma) \simeq 4\pi \int_0^\infty dr \, \frac{J_{3/2}(r)}{r^{1/2}} \int_0^1 J_0(rx) \frac{x}{(1-x^2)^{1/2}} dx \tag{G-12}$$

Utilizando-se os resultados[32]

$$\int_0^1 J_0(rx) \frac{x}{(1-x^2)^{1/2}} dx = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \, \frac{J_{1/2}(r)}{r^{1/2}} \tag{G-13}$$

$$\int_0^\infty \frac{J_{3/2}(r) \, J_{1/2}(r)}{r} = \frac{1}{\pi} \tag{G-14}$$

obtemos

$$I_c(\ell,\gamma) \simeq 4\sqrt{\frac{\pi}{2}} \qquad (G\text{-}15)$$

APÊNDICE H - Interações em P_F

Para maior brevidade das fórmulas usaremos a seguinte notação:

$$f(\ell,\alpha) \equiv \frac{\cos(\ell\pi g/2)}{\sinh(\ell\pi^2/\alpha)} \quad ; \quad \frac{\sin}{\cos}\left(\frac{\ell\pi}{\gamma}-\frac{\pi}{4}\right) \equiv \frac{S}{C}\left(\frac{\ell\pi}{\gamma}\right) \tag{H-1}$$

e

$$\sum_{\ell=1}^{\infty} (-)^{\ell+1} \quad \text{será omitida.}$$

Nas condições dHVA e como $s \ll 1$ (condição implícita no método perturbativo usado), os termos dentro dos colchetes de (III-12) são pequenos; podemos então expandir (III-12) e temos:

$$\begin{aligned} P_F = P_0 \Big\{ 1 - \frac{1}{3}\Big[& \frac{3s}{2\pi} + \frac{\pi^2 s^2}{8}\left(1-\frac{s}{\pi}\right) + \frac{3}{8}\gamma^2\left(\frac{1}{2}g\right)^2 - \frac{\gamma^2}{8}\left(1-\frac{s}{3\pi}\right) - \frac{3\pi}{2}\gamma^{1/2} s \, \frac{f(\ell,\alpha)\, S\left(\frac{\ell\pi}{\gamma}\right)}{\ell^{1/2}} \Big(1 + \\ & \frac{s}{2\pi}\left(1 - \frac{\sqrt{2\pi}}{2}\, \ell \, \frac{I_s}{\gamma}\right)\Big) - \frac{3\pi^2}{2}\left(\frac{s}{\pi}\right)\frac{s}{\gamma^{1/2}} f(\ell,\alpha)\, C\left(\frac{\ell\pi}{\gamma}\right) \ell^{1/2} \Big] - \frac{1}{3}\cdot\left(-\frac{4}{3}\right)\cdot\frac{1}{2!}\Big[\frac{3s}{2\pi} + \\ & \frac{\pi^2 s^2}{8}\left(1-\frac{s}{\pi}\right) + \frac{3}{8}\gamma^2\left(\frac{1}{2}g\right)^2 - \frac{\gamma^2}{8}\left(1-\frac{s}{3\pi}\right) - \frac{3\pi}{2}\gamma^{1/2} s\, \frac{f(\ell,\alpha)\, S\left(\frac{\ell\pi}{\gamma}\right)}{\ell^{1/2}} \left(1 + \frac{s}{2\pi}\left(1 - \frac{\sqrt{2\pi}}{2}\, \ell \frac{I_s}{\gamma}\right)\right) \\ & - \frac{3\pi^2}{2}\left(\frac{s}{\pi}\right)\frac{s}{\gamma^{1/2}} f(\ell,\alpha)\, C\left(\frac{\ell\pi}{\gamma}\right) \ell^{1/2} \Big]^2 + \cdots \end{aligned} \tag{H-2}$$

Tomando-se os termos mais importantes na expressão acima temos:

$$\begin{aligned} \frac{P_F}{P_0} \simeq {} & 1 - \frac{s}{2\pi} - \frac{\pi^2 s^2}{24}\left(1-\frac{3s}{\pi}\right) - \frac{\gamma^2}{8}\left(\frac{1}{2}g\right)^2\left(1-\frac{2s}{\pi}\right) + \frac{\gamma^2}{24}\left(1-\frac{7s}{3\pi}\right) \\ & + \frac{\pi}{2}\gamma^{1/2} s\, \frac{f(\ell,\alpha)\, S\left(\frac{\ell\pi}{\gamma}\right)}{\ell^{1/2}}\left[1 - \frac{3s}{2\pi}\left(1 + \frac{\sqrt{2\pi}}{6}\,\ell\,\frac{I_s}{\gamma}\right)\right] + \frac{\pi^2}{2}\left(\frac{s}{\pi}\right)\frac{s}{\gamma^{1/2}} f(\ell,\alpha)\, C(\ell\pi/\gamma)\, \ell^{1/2} \end{aligned} \tag{H-3}$$

A primeira iteração consiste em substituir P_F por P_0 em todos os termos do lado direito de (H-3); assim a primeira iteração nos dá:

$$\frac{P_F}{P_0} = 1 - \frac{\delta_0}{2\pi} - \frac{\pi^2\delta_0^2}{24}\left(1 - \frac{3\delta_0}{\pi}\right) - \frac{\gamma_0^2}{8}\left(\tfrac{1}{2}g\right)^2\left(1 - \frac{2\delta_0}{\pi}\right) + \frac{\gamma_0^2}{24}\left(1 - \frac{7\delta_0}{3\pi}\right)$$

$$+ \frac{\pi}{2}\gamma_0^{1/2}\delta_0 \frac{f(\ell,\alpha)\, S\left(\frac{\ell\pi}{\gamma_0}\right)}{\ell^{1/2}}\left[1 - \frac{3\delta_0}{2\pi}\left(1 + \frac{\sqrt{2\pi}}{6}\,\ell\,\frac{I_5^0}{\gamma_0}\right)\right] + \frac{\pi^2}{2}\left(\frac{\delta_0}{\pi}\right)\frac{\delta_0}{\gamma_0^{1/2}} f(\ell,\alpha)\, C\left(\frac{\ell\pi}{\gamma_0}\right)\ell^{1/2} \quad \text{(H-4)}$$

Onde o índice zero nos parâmetros acima significa - que o momento de Fermi considerado é P_0.

A partir da expressão (H-4), podemos expressar os parâmetros envolvidos em (H-3) que dependam de P_F, em termos de P_0.

$$\frac{\delta}{\delta_0} = \left(\frac{P_0}{P_F}\right)^2 = 1 + \frac{\delta_0}{\pi} + \frac{\pi^2\delta_0^2}{12}\left(1 - \frac{3\delta_0}{2\pi}\right) + \frac{\gamma_0^2}{4}\left(\tfrac{1}{2}g\right)^2\left(1 - \frac{\delta_0}{2\pi}\right) - \frac{\gamma_0^2}{12}\left(1 - \frac{5\delta_0}{6\pi}\right)$$

$$- \pi\gamma_0^{1/2}\delta_0 \frac{f(\ell,\alpha)\, S\left(\frac{\ell\pi}{\gamma_0}\right)}{\ell^{1/2}}\left[1 - \frac{\delta_0}{\pi}\frac{\sqrt{2\pi}}{4}\,\ell\,\frac{I_5^0}{\gamma_0}\right] - \pi^2\left(\frac{\delta_0}{\pi}\right)\frac{\delta_0}{\gamma_0^{1/2}} f(\ell,\alpha)\, C\left(\frac{\ell\pi}{\gamma_0}\right)\ell^{1/2} + \dots \quad \text{(H-5)}$$

$$\frac{\gamma}{\gamma_0} = \frac{P_0}{P_F} = 1 + \frac{\delta_0}{2\pi} + \frac{\pi^2\delta_0^2}{24}\left(1 - \frac{2\delta_0}{\pi}\right) + \frac{\gamma_0^2}{8}\left(\tfrac{1}{2}g\right)^2\left(1 - \frac{\delta_0}{\pi}\right) - \frac{\gamma_0^2}{24}\left(1 - \frac{4\delta_0}{3\pi}\right)$$

$$- \frac{\pi}{2}\gamma_0^{1/2}\delta_0 \frac{f(\ell,\alpha)\, S\left(\frac{\ell\pi}{\gamma_0}\right)}{\ell^{1/2}}\left[1 - \frac{\delta_0}{2\pi}\left(1 + \frac{\sqrt{2\pi}}{2}\,\ell\,\frac{I_5^0}{\gamma_0}\right)\right] - \frac{\pi^2}{2}\left(\frac{\delta_0}{\pi}\right)\frac{\delta_0}{\gamma_0^{1/2}} f(\ell,\alpha)\, C\left(\frac{\ell\pi}{\gamma_0}\right)\ell^{1/2} + \dots \quad \text{(H-6)}$$

$$\begin{matrix} S \\ C \end{matrix}\left(\frac{\ell\pi}{\gamma}\right) = \begin{matrix} S \\ C \end{matrix}\left(\frac{\ell\pi}{\gamma_0}\right) \mp \begin{matrix} C \\ S \end{matrix}\left(\frac{\ell\pi}{\gamma_0}\right)\left(\frac{\ell\pi}{\gamma_0}\right)\left[\frac{\delta_0}{\pi} + \frac{\pi^2\delta_0^2}{12}\left(1 - \frac{7\delta_0}{2\pi}\right) + \frac{\gamma_0^2}{4}\left(\tfrac{1}{2}g\right)^2\left(1 - \frac{5\delta_0}{2\pi}\right)\right.$$

$$\left. - \frac{\gamma_0^2}{12}\left(1 - \frac{17\delta_0}{6\pi}\right)\right] - \begin{matrix} S \\ C \end{matrix}\left(\frac{\ell\pi}{\gamma_0}\right)\left(\frac{\ell\pi}{\gamma_0}\right)^2\left[\frac{\pi^2\delta_0^2}{12}\left(\frac{\delta_0}{\pi}\right) + \frac{\gamma_0^2}{4}\left(\left(\tfrac{1}{2}g\right)^2 - \frac{1}{3}\right)\frac{\delta_0}{\pi}\right.$$

$$\left. + \frac{\gamma_0^4}{32}\left(\left(\tfrac{1}{2}g\right)^2\left(1 - \frac{5\delta_0}{2\pi}\right) - \frac{1}{3}\left(1 - \frac{17\delta_0}{6\pi}\right)\right)^2\right] + \dots \quad \text{(H-7)}$$

$$I_s(\ell,\gamma) \simeq I_s(\ell,\gamma_0) = I_s^0 \qquad \text{(H-8)}$$

Colocando-se os parâmetros acima, obtidos da 1a. iteração em (H-3) e retendo os termos mais importantes, temos para a segunda iteração:

$$\frac{P_F}{P_0} \simeq 1 - \frac{S_0}{2\pi} - \frac{\pi^2 \delta_0^2}{24}\left(1 - \frac{S_0}{2\pi}\right) - \frac{\gamma_0^2}{8}\left(\frac{1}{2}g\right)^2\left(1 + \frac{S_0}{2\pi}\right) + \frac{\gamma_0^2}{24}\left(1 + \frac{S_0}{6\pi}\right)$$

$$+ \frac{\pi}{2}\gamma_0^{1/2}\delta_0 \; \frac{f(\ell,\alpha)\, S'\left(\frac{\ell\pi}{\gamma_0}\right)}{\ell^{1/2}} \left[1 + \frac{S_0}{2\pi}\left(1 - \frac{\sqrt{2\pi}}{2} \; \frac{\ell\, I_s^0}{\gamma_0}\right)\right] + \cdots \qquad \text{(H-9)}$$

Por meio de (H-9) podemos calcular, analogamente ao que foi feito na segunda iteração, os parâmetros em (H-3) que envolvem P_F. Substituindo-se em (H-3) e retendo os termos dentro da ordem que estamos interessados, observamos que (H-9) não muda, assim (III-12) está iterada; e P_F é dado por (H-9).

APÊNDICE I - Fórmula dos Autovalores

Seguiremos para a obtenção da fórmula dos autovalores, o procedimento apresentado no apêndice A (A-34 a A-57).

A transformada de Fourier do propagador dado por - (I-8) é dada por:

$$K_o(\vec{p},\beta_2-\beta_1)=\int K_o(\beta_2\vec{r}_2,\beta_1\vec{r}_1)e^{-i\phi}e^{i\vec{p}\cdot(\vec{r}_2-\vec{r}_1)}d(\vec{r}_2-\vec{r}_1)=$$

$$=\prod_{spin}(\beta_2-\beta_1)\otimes\frac{\exp\left[-(\beta_2-\beta_1)p_z^2-\frac{p_x^2+p_y^2}{b^2\coth[(\beta_2-\beta_1)b^2]}\right]}{\cosh[(\beta_2-\beta_1)b^2]} \qquad \text{(I-1)}$$

Onde o fator $e^{-i\phi}$ foi introduzido intencionalmente, pois que o resultado não muda com a introdução desta fase, devido ao fato dos "torons" nos diagramas em anel não possuirem fases.

Assim, de acordo com (A-56) temos $(\alpha'=|\beta_2-\beta_1|)$:

$$G(\vec{q},\alpha')=\sum_{\ell=1}^{\infty}(-)^{\ell+1}2\frac{\ell b^2}{4\pi^2}\frac{\cosh(q\ell\beta b^2/2)}{\sinh(\ell\beta b^2)}\sum_{\substack{s+t=\ell\\ s\geq 0,\,t\geq 1}}\int_{-\infty}^{\infty}dp_z\times$$

$$\times\exp\left[-(t\beta-\alpha')p_z^2-(s\beta+\alpha')(p_z+q_z)^2\right]\times$$

$$\times\exp\left[-\frac{(q_x^2+q_y^2)}{b^2}\,\frac{\sinh[(t\beta-\alpha')b^2]\sinh[(s\beta+\alpha')b^2]}{\sinh(\ell\beta b^2)}\right] \qquad \text{(I-2)}$$

Onde o traço sobre os estados de spin foi tomado. A integração em P_z não foi efetuada, pois a fórmula acima é de mais fácil manuseio.

De acordo com (A-57) temos para os autovalores de $G(\vec{q}, \alpha')$:

$$\lambda_j(\vec{q}) = \frac{b^2}{4\pi^2} \sum_{\ell=1}^{\infty} (-)^{\ell+1} z^{\ell} \frac{\operatorname{Cosh}(\frac{q \ell \beta b^2}{2})}{\operatorname{Sinh}(\ell \beta b^2)} \sum_{\substack{s+t=\ell \\ s \geq 0,\, t \geq 1}} \int_0^{\beta} d\alpha' \, e^{-2\pi i j \frac{\alpha'}{\beta}} \times$$

$$\times \int_{-\infty}^{\infty} dp_z \exp\left[-(t\beta-\alpha')p_z^2 - (s\beta+\alpha')(p_z+q_z)^2\right] \times \tag{I-3}$$

$$\times \exp\left\{-\frac{(q_x^2+q_y^2)}{b^2} \frac{\operatorname{Sinh}[(t\beta-\alpha')b^2] \operatorname{Sinh}[(s\beta+\alpha')b^2]}{\operatorname{Sinh}(\ell\beta b^2)}\right\}$$

APÊNDICE J - Autovalores em primeira aproximação

A primeira aproximação para o cálculo dos autovalores consiste em considerar

$$A(s,\ell-s) \simeq \exp\left[-\frac{(q_x^2+q_y^2)}{2b^2}\right] \qquad (J-1)$$

Assim (IV-2) é dada por

$$\lambda_j(\vec{q}) = \frac{b^2}{4\pi^2}\int_{-\infty}^{\infty} dp_z \sum_{\ell=1}^{\infty} (-)^{\ell+1} z^{\ell} \frac{\cosh(q\ell\beta b^2/2)}{\sinh(\ell\beta b^2)} \exp\left(-\frac{q_\perp^2}{2b^2}\right) \times \psi(\ell,q_z,p_z) \qquad (J-2)$$

onde

$$q_\perp^2 = q_x^2 + q_y^2 \qquad (J-3)$$

e

$$\psi(\ell,q_z,p_z) = \frac{e^{-\ell\beta p_z^2} - e^{-\ell\beta(p_z+q_z)^2}}{\left(\frac{2\pi i j}{\beta}\right) + (q_z^2+2p_zq_z)} \qquad (J-4)$$

Colocando-se (J-4) em (J-2) teremos:

$$\lambda_j(\vec{q}) = \frac{2b^2}{4\pi^2}\int_{-\infty}^{\infty} dp_z \sum_{\ell=1}^{\infty} (-)^{\ell+1} z^{\ell} \frac{\cosh(q\ell\beta b^2/2)}{\sinh(\ell\beta b^2)} \exp\left(-\frac{q_\perp^2}{2b^2}\right) e^{-\ell\beta p_z^2} \frac{2p_zq_z+q_z^2}{\left(\frac{2\pi j}{\beta}\right)^2+(2p_zq_z+q_z^2)^2} \qquad (J-5)$$

Introduzindo coordenadas adimensionais $\vec{q}\rightarrow p_F\vec{q}; \vec{p}\rightarrow p_F\vec{p}$ e a transformação de Mellin(I-12) temos:

$$\lambda_j(\vec{q}) = \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} \frac{ds}{(2\pi i)} \frac{b^2}{2\pi^2 P_F} \int_{-\infty}^{\infty} dP_z \frac{\pi}{\sin(\pi s)} e^{(1-P_z^2)s/\delta} \frac{\cosh(g\alpha s/2)}{\sinh(\alpha s)} \exp\left[-\frac{P_F^2 q_\perp^2}{2b^2}\right] \times$$

$$\times \frac{2P_z q_z + q_z^2}{(q_z^2 + 2P_z q_z)^2 + (2\pi j \delta)^2} \qquad \text{(J-6)}$$

mas de (C-3) temos:

$$\int_{c-i\infty}^{c+i\infty} ds \frac{e^{(1-P_z^2)s/\delta}}{s^{\nu+1}} = 0 \quad \text{se} \quad |P_z| > 1 \qquad \text{(J-7)}$$

logo

$$\lambda_j(\vec{q}) = \frac{b^2}{2\pi^2 P_F} \int_{-1}^{1} dP_z \exp\left(-\frac{P_F^2 q_\perp^2}{2b^2}\right) \cdot \frac{(2P_z q_z + q_z^2)}{(q_z^2 + 2P_z q_z)^2 + (2\pi j \delta)^2} \times \Omega \qquad \text{(J-8)}$$

onde

$$\Omega \equiv \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} \frac{\pi}{\sin(\pi s)} e^{(1-P_z^2)s/\delta} \frac{\cosh(g\alpha s/2)}{\sinh(\alpha s)} \qquad \text{(J-9)}$$

A integral Ω acima, como no caso do gás ideal, pode ser calculada tomando-se as contribuições oriundas do polo da origem e dos polos imaginários. A contribuição dos polos da origem nos dá:

$$\Omega_0 = \frac{1 - P_z^2}{\gamma} \qquad \text{(J-10)}$$

e a contribuição dos polos imaginários nos dá:

$$\Omega_{imag} = \frac{\sqrt{2}\,\pi}{\alpha}\left\{ \sum_{\ell=1}^{\infty} (-)^{\ell} \frac{\cos(g\ell\pi/2)\,\sin\left(\frac{\ell\pi}{\gamma}-\frac{\pi}{4}\right)}{\sinh(\ell\pi^2/\alpha)} \left[\cos\left(\frac{\ell\pi}{\gamma}P_z^2\right) + \sin\left(\frac{\ell\pi}{\gamma}P_z^2\right)\right]\right.$$

$$\left. - \sum_{\ell=1}^{\infty} (-)^{\ell} \frac{\cos(g\ell\pi/2)\,\cos\left(\ell\pi/\gamma-\pi/4\right)}{\sinh(\ell\pi^2/\alpha)} \left[\sin\left(\frac{\ell\pi}{\gamma}P_z^2\right) - \cos\left(\frac{\ell\pi}{\gamma}P_z^2\right)\right]\right\} \qquad (J-11)$$

Assim teremos

$$\lambda_j(\vec{q}) = \lambda_j^{non}(\vec{q}) + \lambda_j^{osc}(\vec{q}) \qquad (J-12)$$

$$\lambda_j^{osc}(\vec{q}) = \frac{b^2}{\pi P_F \alpha} \exp\left(-\frac{q_\perp^2}{2\gamma}\right) \cdot \left[\sum_{\ell=1}^{\infty} (-)^{\ell} \frac{\cos(g\ell\pi/2)\,\sin\left(\frac{\ell\pi}{\gamma}-\frac{\pi}{4}\right)}{\sinh(\ell\pi^2/\alpha)} \left(\frac{I_1+I_2}{\sqrt{2}}\right) + \right.$$

$$\left. + \sum_{\ell=1}^{\infty} (-)^{\ell} \frac{\cos(g\ell\pi/2)\,\cos(\ell\pi/\gamma-\pi/4)}{\sinh(\ell\pi^2/\alpha)} \left(\frac{I_1-I_2}{\sqrt{2}}\right)\right] \qquad (J-13)$$

onde

$$I_1(q_z) = \int_{-1}^{1} \frac{q_z^2+2P_z q_z}{(q_z^2+2P_z q_z)^2+(2\pi j\delta)^2} \cos\left(\frac{\ell\pi}{\gamma}P_z^2\right) dP_z \qquad (J-14)$$

$$I_2(q_z) = \int_{-1}^{1} \frac{q_z^2+2P_z q_z}{(q_z^2+2P_z q_z)^2+(2\pi j\delta)^2} \sin\left(\frac{\ell\pi}{\gamma}P_z^2\right) dP_z \qquad (J-15)$$

e

$$\lambda_j^{non}(\vec{q}) = \frac{b^2}{2\pi^2 P_F \gamma} \exp\left(-\frac{q_\perp^2}{2\gamma}\right) \times I_3 \qquad (J-16)$$

onde

$$I_3(q_z) = \int_{-1}^{1} dP_z \frac{(2P_z q_z + q_z)^2\,(1-P_z^2)}{(q_z^2+2P_z q_z)^2+(2\pi j\delta)^2} \qquad (J-17)$$

A integral $I_3(q_z)$ não é difícil e nos dá:

$$I_3(q_z) = \frac{1}{2}\left\{1 - \frac{1}{8}\left(q_z - \frac{4}{q_z} - \frac{1}{q_z^3}(2\pi j\delta)^2\right) \ln\left[\frac{(2\pi j\delta)^2 + (q_z^2+2q_z)^2}{(2\pi j\delta)^2 + (q_z^2-2q_z)^2}\right]\right.$$

$$\left. - \frac{(2\pi j\delta)}{2q_z}\left[\tan^{-1}\left(\frac{q_z^2+2q_z}{2\pi j\delta}\right) - \tan^{-1}\left(\frac{q_z^2-2q_z}{2\pi j\delta}\right)\right]\right\} \qquad \text{(J-18)}$$

Assim teremos para a parte constante dos autovalores:

$$\lambda_j^{non}(\vec{q}) = \frac{P_F}{4\pi^2} e^{-q_\perp^2/2\gamma} \cdot \left\{1 - \frac{1}{8}\left(q_z - \frac{4}{q_z} - \frac{1}{q_z^3}(2\pi j\delta)^2\right) \ln\left[\frac{(2\pi j\delta)^2 + (q_z^2+2q_z)^2}{(2\pi j\delta)^2 \;\; (q_z^2-2q_z)^2}\right]\right.$$

$$\left. - \frac{(2\pi j\delta)}{2q_z}\left[\tan^{-1}\left(\frac{q_z^2+2q_z}{2\pi j\delta}\right) - \tan^{-1}\left(\frac{q_z^2-2q_z}{2\pi j\delta}\right)\right]\right\} \qquad \text{(J-19)}$$

APÊNDICE K - Cálculo de $I_1(q_z)$ e $I_2(q_z)$

De (J-14) temos:

$$I_2(q_z) = \int_0^1 dP_z \frac{q_z^2 - 2P_z q_z}{(q_z^2 - 2P_z q_z)^2 + (2\pi j\delta)^2} \operatorname{Sin}\left(\frac{\ell\pi}{\gamma} P_z^2\right) + \int_0^1 dP_z \frac{q_z^2 + 2P_z q_z}{(q_z^2 + 2P_z q_z)^2 + (2\pi j\delta)^2} \operatorname{Sin}\left(\frac{\ell\pi}{\gamma} P_z^2\right) \qquad (K-1)$$

Fazendo a mudança de variável $\pi\ell/\gamma\, P_z^2 = x$, teremos:

$$I_2(q_z) = \left(\frac{\gamma}{\pi\ell}\right)^{1/2} \int_0^{\pi\ell/\gamma} \left[\frac{q_z^2 - 2q_z x^{1/2}\left(\frac{\gamma}{\pi\ell}\right)^{1/2}}{\left(q_z^2 - 2q_z x^{1/2}\left(\frac{\gamma}{\pi\ell}\right)^{1/2}\right)^2 + (2\pi j\delta)^2} + \frac{q_z^2 + 2q_z x^{1/2}\left(\frac{\gamma}{\pi\ell}\right)^{1/2}}{\left(q_z^2 + 2q_z x^{1/2}\left(\frac{\gamma}{\pi\ell}\right)^{1/2}\right)^2 + (2\pi j\delta)^2} \right] \frac{\sin x\, dx}{2x^{1/2}} \qquad (K-2)$$

Como dentro das condições dHVA, $\gamma \ll 1$; e o integrando é importante para x pequeno, podemos considerar o limite $\frac{\pi\ell}{\gamma} \to \infty$; e expandir o integrando retendo o termo de ordem mais baixa.

$$I_2(q_z) \simeq \left(\frac{\gamma}{\pi\ell}\right)^{1/2} \frac{q_z^2}{q_z^4 + (2\pi j\delta)^2} \int_0^\infty \frac{\operatorname{Sin} x}{x^{1/2}}\, dx \qquad (K-3)$$

Colocando-se o valor da integral acima[31,36] obtemos:

$$I_2(q_z) \simeq \left(\frac{\gamma}{2\ell}\right)^{1/2} \frac{q_z^2}{q_z^4 + (2\pi j\delta)^2} \qquad (K-4)$$

Analogamente temos para $I_1(q_z)$:

$$I_1(q_z) \simeq \left(\frac{\gamma}{\pi \ell}\right)^{1/2} \frac{q_z^2}{q_z^4 + (2\pi j \delta)^2} \int_0^{\infty} \frac{\cos x}{x^{1/2}}\, dx \qquad (K-5)$$

Inserindo-se o valor da integral acima[31,36] temos:

$$I_1(q_z) \simeq \left(\frac{\gamma}{2\ell}\right)^{1/2} \frac{q_z^2}{q_z^4 + (2\pi j \delta)^2} \qquad (K-6)$$

APÊNDICE L - Correção dos autovalores

As correções aos autovalores dados por (IV-6)(IV-12), utilizando a tabela IV-1, são dadas por:

$$\lambda_c(\vec{q},j) = \lambda_{c_1}(\vec{q},j) + \lambda_{c_2}(\vec{q},j) + \lambda_{c_3}(\vec{q},j) \qquad \text{(L-1)}$$

onde, definindo-se

$$E(s,t) \equiv A(s,t) - \exp\left(-\frac{q_\perp^2}{2b^2}\right) \qquad \text{(L-2)}$$

temos:

$$\lambda_{c_1}(\vec{q},j) = \frac{z\, b^2}{\beta^{1/2} 4\pi^{3/2}} \frac{\cosh(q\alpha/2)}{\sinh(\beta b^2)} \left[\int_0^{\beta'} M(0,1)\, E(0,1)\, e^{-2\pi i j \alpha'/\beta} d\alpha' + \int_{\beta-\beta'}^{\beta} M(0,1)\, E(0,1)\, e^{-2\pi i j \alpha'/\beta} d\alpha' \right] \qquad \text{(L-3)}$$

$$\lambda_{c_2}(\vec{q},j) = \frac{b^2}{\beta^{1/2} 4\pi^{3/2}} \sum_{\ell=2}^{\infty} (-)^{\ell+1} \frac{z^\ell \cosh(q\ell\alpha/2)}{\ell^{1/2} \sinh(\ell\alpha)} \int_{\beta-\beta'}^{\beta} M(\ell-1,1)\, E(\ell-1,1)\, e^{-2\pi i j \alpha'/\beta} d\alpha' \qquad \text{(L-4)}$$

$$\lambda_{c_3}(\vec{q},j) = \frac{b^2}{\beta^{1/2} 4\pi^{3/2}} \sum_{\ell=2}^{\infty} (-)^{\ell+1} \frac{z^\ell \cosh(q\ell\alpha/2)}{\ell^{1/2} \sinh(\ell\alpha)} \int_0^{\beta'} M(0,\ell)\, E(0,\ell)\, e^{-2\pi i j \alpha'/\beta} d\alpha' \qquad \text{(L-5)}$$

Colocando-se os valores da tabela IV.1 nas fórmulas acima teremos para as correções dos autovalores:

$$\lambda_c(\vec{q},j) \simeq X \cdot K(\vec{q},j) \tag{L-6}$$

onde

$$X = \frac{b^2}{\beta^{1/2}\, 2\pi^{3/2}\epsilon_F} \sum_{\ell=1}^{\infty} (-)^{\ell+L} \frac{z^\ell \cosh(q\beta\ell/2)}{\ell^{1/2}\sinh(\alpha\ell)} \tag{L-7}$$

$$K(\vec{q},j) = \epsilon_F \left[\int_0^{\beta'} \cos\left(\frac{2\pi j\alpha'}{\beta}\right) e^{-q^2\alpha'} d\alpha' - e^{-q_z^2/2b^2} \int_0^{\beta'} \cos\left(\frac{2\pi j\alpha'}{\beta}\right) e^{-q_z^2\alpha'} d\alpha' \right] \tag{L-8}$$

Utilizando-se a transformação de Mellin(I-12) do capítulo (I) temos:

$$X = \frac{b^2}{\beta^{1/2}\, 2\pi^{3/2}\epsilon_F} \cdot \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} \frac{\pi}{\sin\pi s}\, e^{s/\delta} \frac{\cosh(q\alpha s/2)}{\sinh(\alpha s)\, s^{1/2}} ds \qquad 0<c<1 \tag{L-9}$$

A integral acima, como no caso do gás ideal, é calculada tomando-se as contribuições do polo da origem e dos polos imaginários, e temos:

$$X = \frac{2b^2}{3\pi^2\beta^{1/2}\alpha\delta^{3/2}\epsilon_F} \left\{ 1 + \frac{3}{4}\delta^2\left[\frac{q^2\alpha^2}{8} - \frac{\alpha^2}{6} + \frac{\pi^2}{6}\right] + \frac{3\pi}{2}\alpha^{1/2}\delta^{3/2} \sum_{\ell=1}^{\infty} (-)^\ell \frac{\cos(\ell\pi q/2)\sin\left(\frac{\ell\pi}{\delta} - \frac{\pi}{4}\right)}{\ell^{1/2}\sinh(\ell\pi^2/\alpha)} \right\} \tag{L-10}$$

Efetuando-se a integral em (L-8), mudando para variáveis sem dimensão ($\vec{q} \longrightarrow P_F\vec{q}$) e escolhendo $\beta' = 1/2b^2$ temos:

$$K(\vec{q},j) = \frac{q^2}{q^4+(2\pi j\delta)^2} - \frac{q_z^2}{q_z^4+(2\pi j\delta)^2} e^{-q_z^2/2\gamma} - e^{-q^2/2\gamma}\cos\left(\frac{2\pi j\delta}{2\gamma}\right)\left[\frac{q^2}{q^4+(2\pi j\delta)^2} - \frac{q_z^2}{q_z^4+(2\pi j\delta)^2}\right]$$
$$+ e^{-q^2/2\gamma}\sin\left(\frac{2\pi j\delta}{2\gamma}\right)(2\pi j\delta)\left(\frac{1}{q^4+(2\pi j\delta)^2} - \frac{1}{q_z^4+(2\pi j\delta)^2}\right) \tag{L-11}$$

Assim temos:

$$\lambda_c(\vec{q},j) = \lambda_c^{non}(\vec{q},j) + \lambda_c^{osc}(\vec{q},j) \tag{L-12}$$

onde

$$\lambda_c^{non}(\vec{q},j) = \frac{2b^2}{3\pi^2\beta^{1/2}\alpha\epsilon_F\delta^{3/2}}\left[1 + \frac{3}{4}\delta^2\left(\frac{g^2\alpha^2}{8} - \frac{\alpha^2}{6} + \frac{\pi^2}{6}\right)\right]\cdot K(\vec{q},j) \tag{L-13}$$

$$\lambda_c^{osc}(\vec{q},j) = \frac{b^2}{\pi\beta^{1/2}\alpha^{1/2}\epsilon_F}\sum_{\ell=1}^{\infty}(-)^{\ell}\frac{\cos(g\ell\pi/2)\,\sin\left(\frac{\ell\pi}{\delta} - \frac{\pi}{4}\right)}{\ell^{1/2}\,\sinh(\ell\pi^2/\alpha)}\cdot K(\vec{q},j) \tag{L-14}$$

APÊNDICE M - Cálculo de $\ln \Xi_{\Delta r}^{non}(1)$

Para o cálculo de (IV-45) podemos usar (IV-38) e expandir o logarítmo em potências de $\lambda_{(1)}^{non}\, u(\vec{q})$, e temos:

$$\ln \Xi_{\Delta r}^{non}(1) = \frac{2 P_F^3 V}{(2\pi)^3 \delta} \int_{-\infty}^{\infty} du \int_0^{\sqrt{2\gamma}} q_1\, dq_1 \int_0^1 q_2\, dq_2 \sum_{n=2}^{\infty} (-)^n \frac{\left(\lambda_{(1)}^{non}\, u(\vec{q})\right)^n}{n} \qquad \text{(M-1)}$$

Usando-se a transformação de Mellin do tipo (I-12) do capítulo (I) temos:

$$\ln \Xi_{\Delta r}^{non}(1) = -\frac{P_F^3 V}{4\delta\pi^3} \int_{-\infty}^{\infty} du \int_0^{\sqrt{2\gamma}} q_1\, dq_1 \int_0^1 q_2\, dq_2 \cdot \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} \frac{\pi}{\sin(\pi t)} \cdot \frac{1}{t} \cdot \left(\frac{2\delta}{\pi} \frac{R(u)}{q^2}\right)^t dt \qquad \text{(M-2)}$$

$$1 < c < 2$$

Onde o contorno da integração em t mostrado na fig. M.1, pode ser modificado pelos contornos dos polos reais; mostrado na figura M.2.

Efetuando as integrações em $\vec{q}$, e chamando

$$a_1 = 1 + 2\gamma \;;\; a_2 = 2\gamma \quad \text{e} \quad a_3 = 1 \qquad \text{(M-3)}$$

obtemos

$$\ln \Xi_{\Delta r}^{non}(1) = -\sum_{k=1}^{3} \frac{P_F^3 V}{8\pi^2 \delta} a_k^2 \int_0^{\infty} du \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} \frac{ds}{\sin(\pi s)} \cdot \frac{\;}{s(1-s)(2-s)} \left[\frac{2\delta}{a_k \pi} R(u)\right]^s \quad 1<c<2 \qquad \text{(M-4)}$$

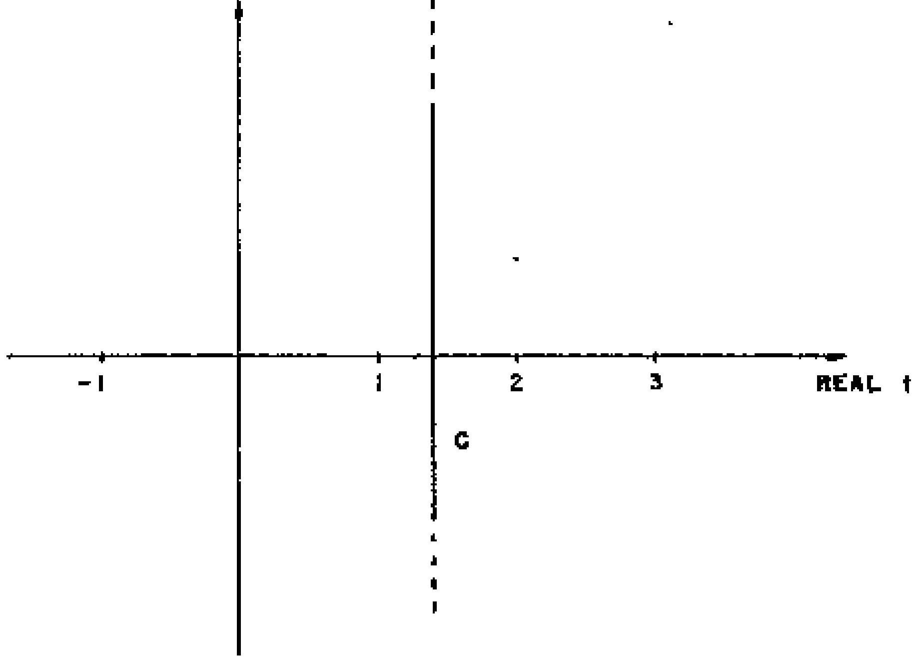


Figura M.1

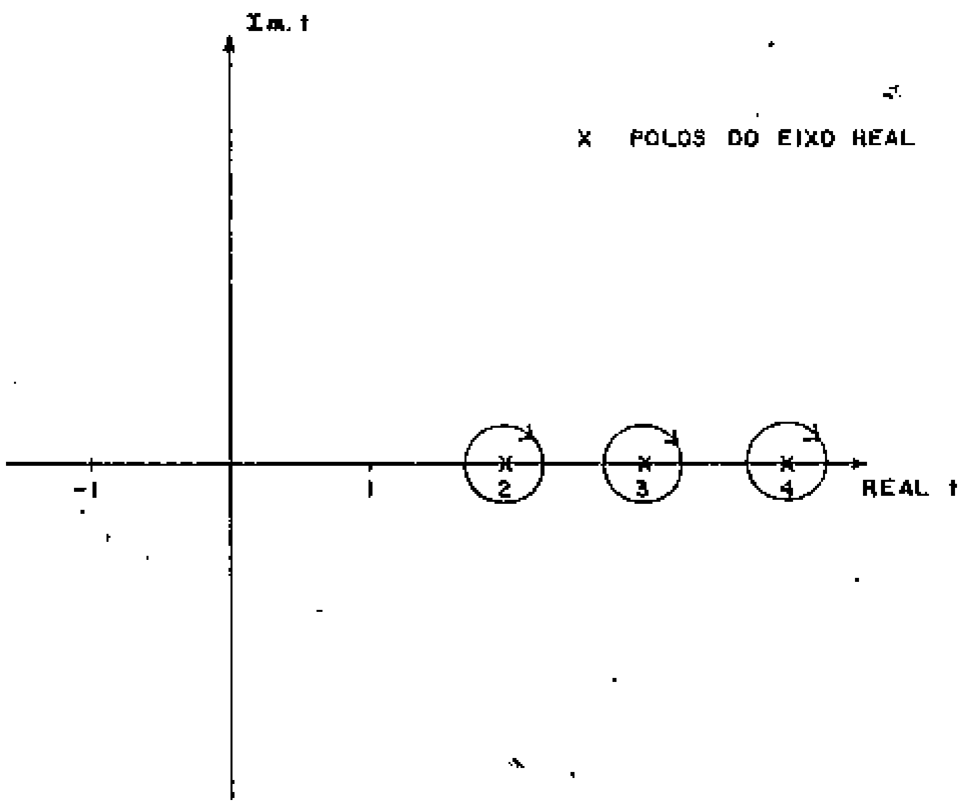


Figura M.2

Efetuando-se a integral complexa nos contornos dos polos reais obtemos:

$$\ln \Xi^{non}_{\Delta r}(1) = -\sum_{k=1}^{3} \frac{a_k^3 p_F^5 \beta V}{8\pi^3} \left\{ \frac{1}{2}\left(\frac{2s}{a_k \pi}\right)^2 \left(\frac{3}{2} - \ln\left(\frac{2s}{\pi a_k}\right)\right) \int_0^{\infty} R^2(u)\, du \right.$$

$$\left. - \frac{1}{2}\left(\frac{2s}{\pi a_k}\right)^2 \int_0^{\infty} R^2(u) \ln R(u)\, du + \sum_{n=3}^{\infty} \frac{(-)^{n+1}}{n(n-1)(n-2)} \left(\frac{2s}{\pi a_k}\right)^n \int_0^{\infty} R^n(u)\, du \right\} \qquad \text{(M-5)}$$

Mas de acordo com Isihara e Kojima[38], as integrais na somatória envolvem potências altas de s; assim consideraremos somente os primeiros termos da equação acima. Segundo Isihara e Kojima[38] temos:

$$\mathbb{C}_1 = \int_0^{\infty} R^2(u)\, du = \frac{\pi}{3}(1 - \ln 2) = .3213355 \qquad \text{(M-6)}$$

$$\mathbb{C}_2 = -\int_0^{\infty} R^2(u) \ln R(u)\, du = .1769447 \qquad \text{(M-7)}$$

Assim temos:

$$\ln \Xi^{non}_{\Delta r}(1) = \frac{p_F^5 \beta V s^2}{4\pi^5} \left\{ \left(\frac{3}{2}\mathbb{C}_1 + \mathbb{C}_2\right) - \mathbb{C}_1 \ln\left(\frac{2s}{\pi}\right) + \mathbb{C}_1 \ln\left(\frac{2\gamma'}{2\gamma'+1}\right) \right\} \qquad \text{(M-8)}$$

REFERÊNCIAS

1. M.Gell-Mann and K.A.Brueckner, Phys.Rev. 106, 364(1957).
2. E.W.Montroll and J.Ward, Phys.Fluids 1, 55(1958).
3. C.Bloch and C.de Dominicis, Nucl.Phys. 7, 459(1958); 10, 181(1959).
4. T.D.Lee and C.N.Yang, Phys.Rev. 113, 1165(1959).
5. D.Pines, "The many body problem"(Benjamin, New York, 1961).
6. A.Isihara, Pogr.Theoret.Phys.(kyoto) Suppl.44,1(1969).
7. W.J. de Haas and P.M.Van Alphen, Commun.Phys.Lab.Univ. Leinden, nº 212 (1930)
8. W.J. de Haas and P.M.Van Alphen, Commun.Phys.Lab.Univ. Leiden, 220 d(1932).
9. D.Shoenberg and M.Z.Uddin, Proc.Roy.Soc.A, 156, 687(1936).
10. D. Shoenberg, Proc.Roy.Soc. A, 170, 341(1939).
11. M.Blackman, Proc.Roy.Soc. A, 166, 1(1938).
12. L.Landau, Z.Physik 64, 629 (1930).
13. R.Peierls, Z. Phys. 81, 186(1933).
14. I.M.Lifshitz and A.M.Kosevich, Zh.Eksperim. i Teor.Fiz.29, 730 (1955) (Soviet Phys. JETP 2, 636(1956)).
15. E.H.Sondheimer and A.H.Wilson, Proc.Roy.Soc.(London) A210, 173(1951).
16. R.B.Dingle, Proc.Roy.Soc.(London) A211, 500(1952).
17. R.B.Dingle, Proc.Roy.Soc.(London) A211, 517(1952).
18. H.Ichimura and S.Tanaka, Pogr.Theoret.Phys.(Kyoto) 25, 315 (1961).
19. A.Isihara, J.Tsai and M.Wadati, Phys.Rev. A3, 990(1971).
20. A.Isihara, "Statistical Physics" (Academic Press, New York and London, 1971).
21. R.Kubo, "Statistical Mechanics" (North-Holland Publishing Company, Amsterdam, 1965).
22. J.G.Mavroides et al, Phys.Rev.Letters 9, 451(1962).
23. L.R.Testardi and J.H.Condon.Phys. Rev. B 1, 3928(1970).
24. J.M.V.Martins and F.P.Missel, Phys.Letters A 49, 163(1974).
25. J.M.V.Martins, tese de doutoramento no I.F.USP.
26. W.Kohn, Phys.Rev. 123, 1242(1961).

27. C.Kittel, "Introduction to Solid State Physics" (John Wiley & Sons, Inc, New York, London, Sydney, Toronto, 1971).

28. G.Arfken "Mathematcial Methods for Physicists"(Academic Press, New York and London, 1970).

29. W. Pauli, Z.Physik. 41, 81(1927).

30. P.M.Morse and H. Feshbach, "Methods of Theoretical Physics" (McGraw-Hill Co., Tokyo, 1953).

31. M.Abramowitz and A. Segun "Handbook of Mathematical Functions (Dover Publications, New York, 1965).

32. I.S.Gradshteyn and I.M.Ryzhik "Table of integral, sērie and products" (Academic Press, New York, 1965).

33. D.Shoenberg, Progr.in Low Temp.Phys. 2, 226(1957).

34. W.Mercouroff "La Surface de Fermi des Mētaux"(Masson et C[ie], Paris, 1967).

35. S.Rodriguez, Phys.Rev. 132, 535(1963).

36. S.Moriguti, K.Udagawa and S.Ichimatsu "A table of matematical formulae"(I wanami Phublishing Company, Tokyo, 1975).

37. D.Y.Kojima and A.Isihara, Z.Physik B 25, 167(1976).

38. A.Isihara and D.Y.Kojima, Z.Physik B 21, 33 (1975).