

"ESPALHAMENTO MAGNETO-RAMAN POR  
NÍVEIS DE LANDAU"

ELONEID FELIPE VASCONCELOS

CENTO DE FISICA CENTRO DE CIÊNCIAS

UNIVERSIDADE FEDERAL DO CEARÁ

TESE DE MESTRADO

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação  
Universidade Federal do Ceará  
Sistema de Bibliotecas

Gerada automaticamente pelo módulo Catalog, mediante os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

---

V45e Vasconcelos, Eloneid Felipe.  
Espalhamento Magneto-Raman por níveis de Landau / Eloneid Felipe Vasconcelos.  
-1980.  
73 f.

Dissertação (mestrado) – Universidade Federal do Ceará, Centro de Ciências, Programa de Pós-Graduação em Física, Fortaleza, 1990.

Orientação: Prof. Dr. Júlio Auto Neto .

1. Espalhamento - Física. 2. Raman, Espectroscopia de. 3. Níveis de Landau. I. Título.

CDD 530

---

"ESPALHAMENTO MAGNETO-RAMAN POR NÍVEIS  
DE LANDAU"

.Eloneid Felipe Vasconcelos

Dissertação apresentada ao Curso de Pós-Graduação em Física da  
Universidade Federal do Ceará, como parte dos requisitos para  
a obtenção do grau de Mestre em Ciência.

Comissão Julgadora:

Júlio Auto Neto (UFC)  
Orientador

Fcº Cesar de Sá Barreto (UFMG)

Francisco Alcides Germano (UFC)

Aprovada em, 08 de Abril de 1980.

## DEDICATÓRIA

A meu marido, Dimas, que com seu incentivo e compreensão está do meu lado em todas as horas.

À minha mãe que com tantos sacrifícios me proporcionou condições de chegar até este trabalho.

À memória de meu pai.

## AGRADECIMENTOS

Ao Prof. Júlio Auto Neto pela dedicação e paciência com que orientou este trabalho.

Ao Prof. Roberto Luzzi pela proposição deste trabalho, pelo interesse e ajuda prestada no desenvolvimento do mesmo.

Aos Profs. Francisco Alcides Germano, José Evangelista de Carvalho Moreira e Vicente Walmick Almeida Vieira pelo auxílio prestado nos cálculos computacionais e sem cuja ajuda a execução das figuras deste trabalho teria sido bem mais difícil.

A todas as pessoas que direta ou indiretamente contribuíram para a realização deste trabalho.

## RESUMO

Espalhamento Raman por transições eletrônicas entre níveis de Landau é considerado. Calcula-se a seção de choque diferencial incluindo efeitos da interação elétron-fonon LO para um semiconductor tipo-n, usando o formalismo das funções de Green. Uma aplicação é feita para o caso específico do GaAs em campos magnéticos intensos.

## ABSTRACT

Raman scattering by electronic transitions between Landau levels is considered. We calculate the differential cross section including effects of the electron-L0 phonon interaction for an n-doped semiconductor, making use of the Green function formalism. An application is made for the specific case of GaAs in strong magnetic fields.

## Í N D I C E.

	PÁG.
CAPÍTULO 1 - Introdução .....	1
CAPÍTULO 2 - Seção de Choque de Espalhamento	
2.1 - A Hamiltoniana .....	5
2.2 - Cálculo da Seção de Choque .....	8
CAPÍTULO 3 - Cálculo da Função de Green .....	17
CAPÍTULO 4 - Aplicação e Comentários Finais	
4.1 - Aplicação ao GaAs .....	40
4.2 - Comentários Finais .....	48
FIGURA 1 - .....	50
FIGURA 2 - .....	51
APÊNDICE A - Cálculos dos Elementos de Matriz ...	52
APÊNDICE B - Cálculo do Operador de Espalhamento ....	56
APÊNDICE C - Cálculo dos Elementos de Matriz	
$\langle l\vec{k}   e^{\pm i\vec{q}\cdot\vec{r}}   l'\vec{k}' \rangle$ .....	64
REFERÊNCIAS - .....	72

## CAPÍTULO 1

### INTRODUÇÃO

O estudo de plasmas em semicondutores dopados ou fotoinjetados, tem sido um campo ativo de pesquisas nos últimos anos devido ao interesse na compreensão de suas propriedades microscópicas e suas aplicações na prática. Plasmas de semicondutores são sistemas físicos bastante interessantes devido à flexibilidade na escolha de número de características tais como energia de Fermi, massa efetiva, tipos diferentes de portadores, frequência do plasma, frequência do fonon, ressonância ciclotrônica, etc.

Experiências sobre espalhamento de luz têm sido usadas para estudar as propriedades de plasmas de semicondutores obtendo assim informações sobre excitações de modos coletivos e de quase-partícula única, bem como sobre processos de relaxação e o acoplamento da radiação com o plasma. A presença de campos externos adiciona uma nova dimensão ao problema.

Quando um sólido contendo portadores de carga móveis é colocado em um campo magnético, suas funções de onda e níveis de energia são alterados. O acoplamento dos elétrons com o campo magnético é representado pela introdução do momento cinético<sup>[1]</sup>

$$\vec{\pi} = \vec{p}_0 - \frac{e}{c} \vec{A}_0$$

As equações de movimento são formalmente idênticas às do oscilador harmônico simples. O movimento ao longo do eixo-z não é afetado pelo campo magnético, de modo que nesta direção o movimento é como o de uma partícula livre. A energia é escrita como:

$$E = \left(n + \frac{1}{2}\right) \omega_c + \frac{k_z^2}{2m^*}$$

O primeiro termo na expressão da energia corresponde ao movimento ciclotrônico transversal que é agora quantizado com níveis de energia adjacentes separados por  $\omega_c$ . Estes são chamados dos níveis de Landau<sup>{2}</sup>. Em Mecânica Clássica este movimento transversal é o movimento em um círculo sobre um centro fixo. No tratamento quântico o centro da órbita não é definido pois as coordenadas  $x_0$  e  $y_0$ , que classicamente corresponderiam às coordenadas do centro da órbita, não comutam e portanto não podem ser determinadas simultaneamente.

A expressão para a energia não contém a quantidade  $k_x$ , isto significa que para um cristal de dimensões  $L_x$ ,  $L_y$ ,  $L_z$ , os níveis de energia são degenerados com degenerescência  $\frac{eB_0}{2\pi c} L_x L_z$ , sendo  $B_0$  o valor do campo magnético. Em virtude da grande degenerescência dos níveis de Landau, pode-se admitir todos os elétrons localizados no estado de energia mais baixa ( $n = 0$ ,  $k_z = 0$ ), se a concentração de portadores for suficientemente baixa.

O espalhamento inelástico de luz por um sistema de elétrons na presença de um campo magnético que resulta na excitação dos elétrons de um nível de Landau para outro é cha

modo espalhamento Raman por níveis de Landau.

A possibilidade de espalhamento Raman por elétrons móveis em cristais em um campo magnético, foi primeiramente sugerida por Wolff<sup>{3}</sup>. Ele mostrou que em um semiconductor tipo n, tendo uma banda de condução não-parabólica, um pequeno "gap" de energia e uma pequena massa efetiva, a seção de choque de espalhamento é finita e pode ser detectada experimentalmente.

Na aproximação de dipolo nenhum espalhamento envolvendo transições entre diferentes níveis de Landau encontrado devido à harmonicidade dos níveis de energia. Os níveis de Landau igualmente espaçados refletem o fato de que o elétron em um campo magnético comporta-se como um oscilador harmônico e nenhum resultado finito é encontrado para a seção de choque. Entretanto, se as propriedades dos elétrons são anarmônicas, o processo Raman apresenta um elemento de matriz finito. No trabalho de Wolff<sup>{4}</sup> esta anarmonicidade deve-se à não-parabolicidade da banda de condução. Wolff mostrou que a não-parabolicidade muda apreciavelmente a reação coletiva dos elétrons nos sólidos. Em particular ela dá origem a uma nova forma de espalhamento de luz aproximadamente elástico que pode ser usado para medir a distribuição de velocidades dos elétrons em situações de não equilíbrio.

Espalhamento Raman por portadores móveis em um campo magnético também é estudado por Yafet<sup>{5}</sup> que faz uma extensão ao trabalho de Wolff. Nesse trabalho além de considerar espalhamento por elétrons em que o número quântico do nível de Landau muda por  $\Delta n = 2$ , Yafet também calcula a seção

de choque de espalhamento por buracos na banda de valência e as transições devidas à inversão do spin com  $\Delta n = 0$ .

Patel e Slusher<sup>{6}</sup> estudaram o espalhamento inelástico de luz em InAs encontrando linhas Stokes com transições eletrônicas de  $\Delta n = 1, 2$ .

O objetivo deste trabalho é estudar o espalhamento de luz pelos elétrons. Os fônons apesar de não participarem diretamente no processo, exercem grande influência no espectro da luz espalhada. Esta influência é devida à interação entre os elétrons e os fônons longitudinais óticos, interação esta que é representada pela hamiltoniana de Fröhlich. Esta interação provoca uma mistura nos estados dos elétrons e é responsável pela anarmonicidade de forma que os elementos de matriz não mais se anulam. Este tipo de anarmonicidade devida ao acoplamento de polaron de Fröhlich, também foi introduzida por Harper<sup>{7}</sup> no seu trabalho.

No desenvolvimento deste trabalho é usado o método das funções de Green segundo Zubarev<sup>{8}</sup>.

No capítulo 3 obtém-se o resultado para a seção de choque em termos de um fator de amortecimento e uma aplicação específica dos resultados obtidos é feita no capítulo 4 para um cristal de Arseneto de Gálio (GaAs).

## CAPÍTULO 2

## SEÇÃO DE CHOQUE DE ESPALHAMENTO

## 2.1 - A hamiltoniana

Considere-se um semicondutor tipo n, de bandas parabólicas na presença de um campo magnético estático  $B_0$ , na direção-Z, descrito por um potencial vetor  $A_0$  no calibre de Landau,  $A_0 = (-yB_0, 0, 0)$ . Um feixe monocromático de fotons de uma fonte de laser tendo frequência  $\omega_L$  incide sobre a amostra. A energia dos fotons incidentes  $\omega_L$ , é muito menor do que o "gap" da banda para garantir a penetração da luz no interior da amostra cristalina. A hamiltoniana que descreve este sistema é dada por:

$$H = H_E + H_{LO} + H_{ELO} + H_R + H_{ER} \quad (2.1)$$

Devido à presença do campo magnético, a energia do eletrón é quantizada em níveis de Landau acrescida da contribuição da energia livre devida ao movimento ao longo da direção-Z. Assim sendo a hamiltoniana dos eletrons na banda de condução  $H_E$ , é dado por:

$$\sum_{nk_z} \omega_n(k_z) c_{nk_z}^\dagger(t) c_{nk_z}(t) \quad (2.2a)$$

$$\text{com } \omega_n(k_z) = (n + \frac{1}{2})\omega_c + \frac{k_z^2}{2m^*} \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

Aqui  $\omega_c = \frac{eB_0}{m^*c}$  é a frequência de ciclotron e  $m^*$  é a massa

efetiva do elétron na banda de condução. Em todo o trabalho adota-se o sistema de unidades em que  $\hbar$  pode ser considerado igual a 1.  $c_{nk_z}$  ( $c_{nk_z}^\dagger$ ) são os operadores aniquilação (criação) de elétrons nos estados de Landau e obedecem as regras de comutação para os operadores de Fermi.

As funções de onda dos elétrons são as funções de Landau  $|n, k_x, k_z\rangle$  ou de uma maneira abreviada  $|n, \vec{k}\rangle$ .  $n$  é o número quântico do nível de Landau.

Para simplificar o problema, os termos dependentes de spin são omitidos. Tais termos realmente existem e dão origem ao espalhamento Raman "spin-flip" que tem sido observado em  $I_n S_b$  e  $I_n A_s$ . Entretanto os efeitos causados pelos termos contendo o spin, são relativamente pequenos sobre transições orbitais como é o caso do espalhamento Raman por níveis de Landau. Estas transições são o objetivo principal deste trabalho de modo que fica justificada a omissão de termos dependentes do spin na hamiltoniana do sistema.

$H_{LO}$  é a energia dos fonons LO, que são considerados sem dispersão, dentro de um modelo de Einstein com frequência  $\omega_{LO}$ , assim:

$$H_{LO} = \omega_{LO} \sum_{\vec{q}} \left[ b_{\vec{q}}^\dagger(t) b_{\vec{q}}(t) + \frac{1}{2} \right] \quad (2.2b)$$

$\vec{q}$  varia sobre a zona de Brillouin,  $b_{\vec{q}}^\dagger$  ( $b_{\vec{q}}$ ) são os operadores aniquilação (criação) de fonons LO no estado  $|\vec{q}\rangle$  e obedecem às relações de comutação para os operadores de Bose.

A interação entre elétrons e fonons LO é tomada na forma de uma hamiltoniana de Fröhlich<sup>{9}</sup>:

$$H_{E10} = \sum_{n,n'} \sum_{\vec{k},\vec{k}'} \sum_{\vec{q}} F(\vec{q}) \langle n'\vec{k}' | e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} | n\vec{k} \rangle C_{n'\vec{k}'}^\dagger(t) C_{n\vec{k}}(t) \left( b_{\vec{q}}^\dagger(t) - b_{-\vec{q}}(t) \right) \quad (2-2c)$$

sendo  $F(\vec{q})$  dado por:

$$F(\vec{q}) = i \frac{e}{|\vec{q}|} \left( \frac{2\pi\omega_{l0}}{V_0} \right)^{1/2} \left( \frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_0} \right)^{1/2}$$

A energia da radiação é escrita como:

$$H_R = \sum_{\mu, \vec{Q}_\mu} \omega_{\vec{Q}_\mu} a_{\mu, \vec{Q}_\mu}^\dagger(t) a_{\mu, \vec{Q}_\mu}(t) \quad (2.2d)$$

Onde  $\mu$  e  $\vec{Q}_\mu$  são a polarização e o vetor de onda dos fons.  $a_{\mu, \vec{Q}_\mu}^\dagger$  e  $a_{\mu, \vec{Q}_\mu}$  são os operadores aniquilação (criação) para os fons no modo  $(\mu, \vec{Q}_\mu)$ .

A interação entre o sistema de eletrons e o campo eletromagnético da radiação descrito pelo potencial vetor  $\vec{A}(\vec{r}, t)$ , é levada em conta através da substituição do momentum canônico  $\vec{\pi}$  por  $\vec{\pi} - \frac{e}{c} \vec{A}$ , onde  $\vec{\pi} = \vec{p}_0 - \frac{e}{c} \vec{A}_0$  sendo  $\vec{p}_0 = -i\nabla$  momentum linear e  $\vec{A}_0$ , como já foi mencionado é o potencial vetor do campo magnético estático.

O interesse deste trabalho é investigar transições de eletrons entre níveis de Landau. Assim sendo o termo  $A^2$  apresenta contribuição para os elementos de matriz entre diferentes estados eletrônicos já que o potencial vetor  $\vec{A}$  é escrito apenas em termos de operadores de fons. Desse modo é levada em conta apenas a contribuição de  $\vec{A} \cdot \vec{\pi}$  até segunda ordem em teoria de perturbação. A interação entre os eletrons e a radiação eletromagnética é então dada por:

$$H_{ER} = \frac{e}{m^2 c} \sum_{n n'} \sum_{\vec{k} \vec{k}'} \sum_{\mu \mu'} \langle n' \vec{k}' | \vec{A}(\vec{r}) \cdot \vec{\pi} | n \vec{k} \rangle c_{n \vec{k}}^\dagger(t) c_{n' \vec{k}'}(t) \begin{pmatrix} a_{\mu \vec{q}_\mu}^\dagger(t) + a_{\mu \vec{q}_\mu}(t) \end{pmatrix} \quad (2-2e)$$

O potencial vetor da radiação escrito em termos dos operadores de fons tem a seguinte forma [10]:

$$\vec{A}(\vec{r}, t) = \sum_{\mu \vec{q}_\mu} \sqrt{\frac{2\pi c^2}{V_0 \omega_{\vec{q}_\mu}}} e^{i\vec{q}_\mu \cdot \vec{r}} \left( \vec{e}_{\mu \vec{q}_\mu} a_{\mu \vec{q}_\mu}(t) + \vec{e}_{\mu, \vec{q}_\mu}^* a_{\mu \vec{q}_\mu}^\dagger(t) \right)$$

$V_0$  é volume do sistema.

A hamiltoniana descrita na equação (2.1) pode ser reescrita como:

$$H = H_0 + H_{INT}.$$

Sendo  $H_0$  a parte não perturbada da hamiltoniana e  $H_{INT}$ , neste problema, é representado apenas pela interação entre a radiação eletromagnética e o sistema de eletrons. Assim  $H_0$  é dado por:

$$H_0 = H_E + H_{LO} + H_{ELO} + H_R \quad (2.3)$$

## 2.II - Cálculo da seção de choque

Considere-se o espalhamento de um foton de luz do laser do estado  $(\omega_L, \vec{k}_L)$  para o estado com energia e propagação ao longo da direção  $\vec{k}_S$  dentro de um ângulo sólido  $d\Omega$ , acompanhado pela transição de um eletron nos níveis de Landau de  $\Delta n = 2$ . Para se obter a seção de choque para este espalhamento, torna-se necessário calcular a probabilidade

de transição entre os estados inicial e final do sistema.

A seção de choque é dada em termos da probabilidade de transição como:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{V_0}{c} \int d\omega_S \rho(\omega_S) W_{i \rightarrow f}(\omega) \quad (2.4)$$

$V_0$  é o volume do sistema,  $\rho(\omega_S)$  é a densidade de estados de fons em frequência  $\omega_S$  e  $W_{i \rightarrow f}$  é a probabilidade por unidade de tempo de uma transição entre o estado inicial  $i$ , para o estado final  $f$ . O estado inicial se refere ao foton no estado  $|\omega_L, k_L\rangle$  e o eletron em um determinado nível de Landau  $|n\rangle$  e o estado final se refere ao foton no estado  $|\omega_S, k_S\rangle$  e o eletron no nível de Landau  $n + \Delta n$  com  $\Delta n = 2$ .

A probabilidade de transição é dada por:

$$W_{i \rightarrow f} = |\langle f|S|i\rangle|^2 \quad (2.5)$$

Sendo a matriz de espalhamento  $S$ , dada em termos do operador de espalhamento  $T$  através da seguinte equação:

$$\langle f|S|i\rangle = -2\pi i \delta(E_f - E_i) \langle f|T|i\rangle \quad (2.6)$$

No espalhamento de luz acompanhado pela transição eletrônica nos níveis de Landau de  $\Delta n = 2$ , os elementos de matriz de primeira ordem não contribuem pois estes são nulos ou responsáveis pelo espalhamento elástico que não é o caso abordado neste trabalho. Conclui-se então que o termo dominante da matriz  $S$  é dado pelo elemento de matriz em segunda

...dem  $\langle f | S_2 | i \rangle$ . Deste elemento de matriz os termos que são importantes para o processo estudado são representados pelos diagramas de Feynman abaixo:

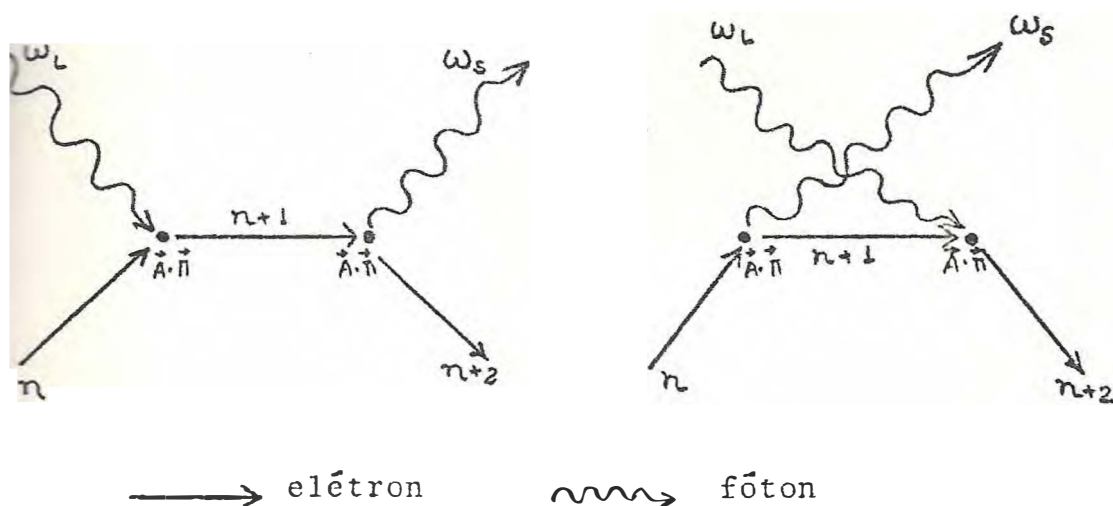


Fig. 1

Desenvolvendo-se as equações (2.5) e (2.6) e substituindo-se o resultado de  $W_i \rightarrow f$  em (2.4), obtém-se para a seção de choque de espalhamento a seguinte expressão:

$$\frac{d^2 \sigma}{d\Omega d\omega_S} = \rho(\omega_S) \frac{V_0}{c} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} \langle T^\dagger(t) T(0) \rangle dt \quad (2.7)$$

de  $\omega = \omega_L - \omega_S$  é a energia transferida no espalhamento e o termo  $\langle T^\dagger(t) T(0) \rangle$  é a média estatística dos operadores  $T^\dagger(t)$  e  $T(0)$  à temperatura  $T$ :

$$\langle T^\dagger(t) T(0) \rangle = \text{tr}(\rho_0 T^\dagger(t) T(0)) \quad (2.8)$$

é o operador densidade:

$= e^{-H_0/k_B T} Z^{-1}$  sendo  $Z$  a função de partição:

$$Z = \text{tr} \left[ e^{-H_0/k_B T} \right].$$

O cálculo para a obtenção do operador de espalhamento  $T$  é desenvolvido no apêndice B. Apenas a expressão final é mostrada aqui:

$$T(t) = - \left( \frac{2}{m^* c} \right)^2 A_S A_L \sum_{\vec{n}, \vec{k}} \left[ \frac{\langle (n+2)\vec{k} | \vec{z}_S^* \cdot \vec{\Pi} | (n+1)\vec{k} \rangle \langle (n+1)\vec{k} | \vec{z}_L \cdot \vec{\Pi} | n\vec{k} \rangle}{\omega_{n+1k_z} - \omega_{nk_z} - \omega_L} + \frac{\langle (n+2)\vec{k} | \vec{z}_L \cdot \vec{\Pi} | (n+1)\vec{k} \rangle \langle (n+1)\vec{k} | \vec{z}_S^* \cdot \vec{\Pi} | n\vec{k} \rangle}{\omega_{n+1k_z} - \omega_{nk_z} + \omega_S} \right] c_{n+2k_z}^\dagger(t) c_{nk_z}(t) \quad (2-9)$$

Se a expressão para o operador  $T$  dado na equação (2.9) for substituída em (2.7), observa-se que a seção de choque dependerá diretamente de uma função correlação dependente do tempo:

$$J(t) = \langle A(t) B(0) \rangle \quad (2.10)$$

onde  $A(t) = c_{nk_z}^\dagger(t) c_{n+2k_z}(t)$

$$B(0) = c_{n+2k_z}^\dagger(0) c_{nk_z}(0)$$

Esta função correlação contém praticamente toda a informação sobre o espectro de espalhamento Raman de materiais.

Introduz-se a função densidade espectral, envolvendo os operadores  $A(t)$  e  $B(0)$  definida por [11]:

$$J_{AB}(\omega) = \sum_{ab} \frac{e^{-\beta\omega_b}}{Z} \langle a|A(t)|b\rangle \langle b|B(0)|a\rangle \delta(\omega + \omega_a - \omega_b) \quad (2-11)$$

que tem a propriedade de:

$$\langle A(t)B(0) \rangle = \int d\omega J_{AB}(\omega) e^{-i\omega(t + i\beta)} \quad (2.12a)$$

$$\langle B(0)A(t) \rangle = \int d\omega J_{AB}(\omega) e^{-i\omega t} \quad (2.12b)$$

Substituindo-se a equação (2.12a) em (2.7), já com o operador T substituído pela eq. (2.9), obtêm-se:

$$\begin{aligned} \frac{d^2 \sigma}{d\omega d\omega_s} = & \frac{iV_0}{c} \left( \frac{e}{m^*c} \right)^4 \rho(\omega_s) |A_s|^2 |A_L|^2 \sum_{nl} \sum_{\vec{k} \vec{k}''} \left\{ \frac{\langle (n+2)\vec{k} | \vec{e}_s \cdot \vec{\pi} | (n+1)\vec{k} \rangle \langle (n+1)\vec{k} | \vec{e}_L \cdot \vec{\pi} | n\vec{k} \rangle}{\omega_{n+1k_z} - \omega_{nk_z} - \omega_L} + \right. \\ & + \frac{\langle (n+2)\vec{k} | \vec{e}_L \cdot \vec{\pi} | (n+1)\vec{k} \rangle \langle (n+1)\vec{k} | \vec{e}_s \cdot \vec{\pi} | n\vec{k} \rangle}{\omega_{n+1k_z} - \omega_{nk_z} + \omega_s} \left. \right\} \left\{ \frac{\langle (l+2)\vec{k}'' | \vec{e}_s \cdot \vec{\pi} | (l+1)\vec{k}'' \rangle \langle (l+1)\vec{k}'' | \vec{e}_L \cdot \vec{\pi} | l\vec{k}'' \rangle}{\omega_{l+1k_z''} - \omega_{lk_z''} - \omega_L} + \right. \\ & \left. + \frac{\langle (l+2)\vec{k}'' | \vec{e}_L \cdot \vec{\pi} | (l+1)\vec{k}'' \rangle \langle (l+1)\vec{k}'' | \vec{e}_s \cdot \vec{\pi} | l\vec{k}'' \rangle}{\omega_{l+1k_z''} - \omega_{lk_z''} + \omega_s} \right\} \left[ J_{AB}(\omega) e^{\beta\omega} \right] \quad (2-13) \end{aligned}$$

Neste ponto é conveniente introduzir a função de Green retardada, de duplo tempo, dependente da temperatura expressa em termos dos operadores A(t) e B(0). Esta função de Green é relacionada com a função densidade espectral através da relação {8}:

$$J_{AB}(\omega) = i \left[ \frac{G(\omega + i\epsilon) - G(\omega - i\epsilon)}{e^{\beta\omega} - 1} \right] \quad (2.14)$$

de o limite  $\epsilon \rightarrow 0$  é subentendido e  $\beta = \frac{1}{k_B T}$  sendo a constante de Boltzmann.

Substituindo-se a equação (2.14) em (2.13), obtêm-se para a seção de choque o seguinte resultado:

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega d\omega_s} = & i V_0 \left( \frac{e}{m^* c} \right)^4 \frac{\rho(\omega_s) |A_s|^2 |A_L|^2}{1 - e^{-\beta \hbar \omega}} \sum_n \sum_{\vec{k}, \vec{k}''} \left( \frac{\langle (n+2)\vec{k} | \vec{e}_s \cdot \vec{\Pi} | (n+1)\vec{k} \rangle \langle (n+1)\vec{k} | \vec{e}_L \cdot \vec{\Pi} | n\vec{k} \rangle}{\omega_{n+1k_z} - \omega_{nk_z} - \omega_L} + \right. \\ & + \frac{\langle (n+2)\vec{k} | \vec{e}_L \cdot \vec{\Pi} | (n+1)\vec{k} \rangle \langle (n+1)\vec{k} | \vec{e}_s \cdot \vec{\Pi} | n\vec{k} \rangle}{\omega_{n+1k_z} - \omega_{nk_z} + \omega_s} \left. \right) \left( \frac{\langle (l+2)\vec{k}'' | \vec{e}_s \cdot \vec{\Pi} | (l+1)\vec{k}'' \rangle \langle (l+1)\vec{k}'' | \vec{e}_L \cdot \vec{\Pi} | l\vec{k}'' \rangle}{\omega_{l+1k_z''} - \omega_{lk_z''} - \omega_L} + \right. \\ & + \left. \frac{\langle (l+2)\vec{k}'' | \vec{e}_L \cdot \vec{\Pi} | (l+1)\vec{k}'' \rangle \langle (l+1)\vec{k}'' | \vec{e}_s \cdot \vec{\Pi} | l\vec{k}'' \rangle}{\omega_{l+1k_z''} - \omega_{lk_z''} + \omega_s} \right)^2 \left[ G(\omega + i\epsilon) - G(\omega - i\epsilon) \right] \quad (2-15) \end{aligned}$$

A função de Green é definida por:

$$G(t_0) = \left\langle \left\langle c_{n\vec{k}_z}^\dagger(t) c_{n+2\vec{k}_z}(t); c_{l+2\vec{k}_z}^\dagger(0) c_{l\vec{k}_z}(0) \right\rangle \right\rangle = -i \theta(t) \left\langle \left[ c_{n\vec{k}_z}^\dagger(t) c_{n+2\vec{k}_z}(t), c_{l+2\vec{k}_z}^\dagger(0) c_{l\vec{k}_z}(0) \right] \right\rangle \quad (2-16)$$

onde os colchetes [...], como é usual, indicam o comutador dos operadores de cada lado da vírgula e a função  $\theta(t)$  é a função descontínua que se relaciona com a função delta de Dirac através da equação:

$$\theta(t) = \int_{-\infty}^t \delta(t) dt.$$

Aplicando-se as relações de comutação para a equação (2.16) obtém-se: \*

$$\begin{aligned} & \left[ c_{nk_z}^+(t) c_{n+2, k_z}(t), c_{l+2, k_z'''}(0) c_{lk_z'''}(0) \right] = \\ & = \left[ c_{nk_z}^+(t) c_{n+2, k_z}(t), c_{n+2, k_z}(0) c_{nk_z}(0) \right] \delta_{nl} \delta_{k_z k_z'''} \end{aligned}$$

De modo que se pode expressar a função de Green de finida pela equação (2.17), da seguinte maneira:

$$G(t,0) = -i\theta(t) \left\langle \left[ c_{nk_z}^+(t) c_{n+2, k_z}(t), c_{n+2, k_z}^+(0) c_{nk_z}(0) \right] \right\rangle \delta_{nl} \delta_{k_z k_z'''} \quad (2.17)$$

Outra maneira de se expressar o resultado (2.17) é:

$$\begin{aligned} G(n, k_z, n+2, k_z; l+2, k_z''', l, k_z''') & = \\ & = G(n, k_z, n+2, k_z; n+2, k_z, nk_z | t) \delta_{nl} \delta_{k_z k_z'''} \end{aligned} \quad (2.17a)$$

Na expressão da seção de choque de espalhamento dada pela equação (2.16), aparecem elementos de matriz do tipo:

$$\langle n\vec{k} | \vec{e}_L \cdot \vec{\pi} | n'\vec{k}' \rangle$$

O cálculo desses elementos de matriz desenvolvido no apêndice A dá os seguintes resultados:

$$\langle (n+2)\vec{k} | \vec{e}_S \cdot \vec{\pi} | (n+1)\vec{k} \rangle = -e_S^{(+)} \left[ (n+2)m^* \omega_c / 2 \right]^{1/2} \quad (2.18a)$$

$$\langle (n+1)\vec{k} | \vec{e}_L \cdot \vec{\pi} | n\vec{k} \rangle = -e_L^{(-)} \left[ (n+1)m^* \omega_c / 2 \right]^{1/2} \quad (2.18b)$$

$$\text{onde } \vec{e}_S^{(+)} = e_S^{(x)} + ie_S^{(y)} \quad (2.19a)$$

$$\vec{e}_L^{(-)} = e_L^{(x)} - ie_L^{(y)} \quad (2.19b)$$

Desse modo a expressão para a seção de choque tornar-se-á:

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\omega_S} = \frac{iV_0 m^* \omega_C \left(\frac{e}{m^* c}\right)^4}{2c} \frac{\rho(\omega_S)}{1 - e^{-\beta\omega}} \sum_{n\vec{k}} |A_S|^2 |A_L|^2 \left| \frac{e_S^{(+)} e_L^{(-)} \sqrt{(n+1)(n+2)}}{\omega_{n+1k_2} - \omega_{nk_2} - \omega_L} + \frac{e_L^{(-)} e_S^{(+)} \sqrt{(n+1)(n+2)}}{\omega_{n-1k_2} - \omega_{nk_2} + \omega_S} \right|^2 \left( G(\omega + i\varepsilon) - G(\omega - i\varepsilon) \right) \quad (2.20)$$

A interação entre os elétrons e os fonons, representada pela hamiltoniana de Fröhlich na eq. (2.2c), é suficientemente pequena de modo que pode ser considerada como parte da hamiltoniana não perturbada. Entretanto, devido a essa interação os estados dos elétrons são misturados de maneira que não se pode mais considerá-los como perfeitamente estacionários. Atribue-se então a esses estados um tempo de vida  $\tau$  de uma maneira fenomenológica [10]. Levando-se em conta tal condição, a diferença nas energias de níveis de Landau vizinhos, como aparece no denominador da equação (2.20) será:

$$\omega_{n+1k_2} - \omega_{nk_2} = \omega_C - i\gamma_{n,n+1}$$

sendo  $\gamma_{n,n+1}$  relacionado com os tempos de vida dos estados de Landau da seguinte forma:  $\gamma_{n,n+1} = \frac{1}{2} \left( \frac{1}{\tau_n} + \frac{1}{\tau_{n+1}} \right)$  com  $\tau_n$  e  $\tau_{n+1}$  os tempos de vida dos estados de Landau correspondentes.

Substituindo-se a diferença  $\omega_{n+1k_2} - \omega_{nk_2}$  por  $\omega_C - i\gamma$  levando-se em conta que  $\omega = \omega_L - \omega_S$  e ainda que a frequência e ciclotron  $\omega_C$ , obtêm-se, após alguns cálculos:

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\omega_s} = \frac{i V_0 m^* \omega_c}{2C} \left[ \frac{e}{m^* C} \right]^4 \frac{\rho(\omega_s) |A_s|^2 |A_L|^2}{1 - e^{-\beta\omega}} \sum_{\vec{n}, \vec{k}} \left| e_s^{(+)} e_L^{(-)} \sqrt{(n+1)(n+2)} \left[ \frac{2\omega_c - \omega + 2i\gamma}{\omega_L^2} \right] \right|^2 \times$$

$$\times \left[ G(\omega + i\epsilon) - G(\omega - i\epsilon) \right] \quad (2-21)$$

A seção de choque de espalhamento ficará, portanto, conhecida se for calculada a função de Green definida na equação (2.17). Este é o objetivo do próximo capítulo.

## CAPÍTULO 3

## CÁLCULO DA FUNÇÃO DE GREEN

A função de Green

No capítulo anterior a seção de choque é expressa em termos de uma função correlação dependente do tempo, que por sua vez é relacionada com uma função de Green retardada de duplo tempo de acordo com o trabalho desenvolvido por Zubarev. Vê-se então a necessidade de calcular a função de Green definida na equação (2.17) e re-escrita abaixo:

$$G(t,0) = -i\theta(t) \left\langle \left[ c_{nk_z}^\dagger(t) c_{n+2 k_z}(t), c_{n+2 k_z}^\dagger(0) c_{nk_z}(0) \right] \right\rangle$$

A equação de movimento para esta função de Green é:

$$i \frac{dG}{dt}(t,0) = \delta(t) \left\langle \left[ c_{nk_z}^\dagger(t) c_{n+2 k_z}(t), c_{n+2 k_z}^\dagger(0) c_{nk_z}(0) \right] \right\rangle - i\theta(t) \left\langle \left[ i \frac{d}{dt} \left( c_{nk_z}^\dagger(t) c_{n+2 k_z}(t) \right), c_{n+2 k_z}^\dagger(0) c_{nk_z}(0) \right] \right\rangle \quad (3.1)$$

Os operadores dependentes do tempo satisfazem equação de movimento do tipo:

$$i \frac{d}{dt} \left( c_{nk_z}^\dagger(t) c_{n+2 k_z}(t) \right) = \left[ c_{nk_z}^\dagger(t) c_{n+2 k_z}(t), H_0 \right] \quad (3.2)$$

Sendo  $H_0$  a parte não perturbada da hamiltoniana, definida na equação (2. ) e cada um dos seus termos expressos pelas

equações (2.2a) a (2.2d).

∴ equação (3.2) então, torna-se:

$$\begin{aligned}
 i \frac{d}{dt} \left( c_{nk_z}^\dagger(t) c_{n+2k_z}(t) \right) &= \left[ c_{nk_z}^\dagger(t) c_{n+2k_z}(t), H_E \right] + \\
 + \left[ c_{nk_z}^\dagger(t) c_{n+2k_z}(t), H_{LO} \right] &+ \left[ c_{nk_z}^\dagger(t) c_{n+2k_z}(t), H_{ELO} \right] + \\
 + \left[ c_{nk_z}^\dagger(t) c_{n+2k_z}(t), H_R \right] & \quad (3.3)
 \end{aligned}$$

A hamiltoniana para o sistema de fonons,  $H_{LO}$ , e para a radiação,  $H_R$ , são ambas expressas em função de operadores de Bose que comutam com os operadores de Fermi  $c_{nk_z}^\dagger(t) c_{n+2k_z}(t)$ . Com estas observações e as equações (2.2) vê-se que a equação de movimento para a função de Green será dada por:

$$\begin{aligned}
 i \frac{dG(t,0)}{dt} &= \delta(t) \left\langle \left[ c_{nk_z}^\dagger(t) c_{n+2k_z}(t), c_{n+2k_z}^\dagger(0) c_{nk_z}(0) \right] \right\rangle - \\
 - i \theta(t) &\left\{ \sum_{\vec{m}, \vec{k}} \omega_{\vec{m}, \vec{k}} \left\langle \left[ c_{nk_z}^\dagger(t) c_{n+2k_z}(t), c_{m\vec{k}_z}^\dagger(t) c_{m\vec{k}_z}(t) \right], c_{n+2k_z}^\dagger(0) c_{nk_z}(0) \right\rangle + \right. \\
 + \sum_{\vec{m}, \vec{m}', \vec{k}, \vec{k}', \vec{q}} &F(\vec{q}) \langle m' \vec{k}' | e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} | m \vec{k} \rangle \left\langle \left[ c_{nk_z}^\dagger(t) c_{n+2k_z}(t), c_{m\vec{k}_z}^\dagger(t) c_{m\vec{k}_z}(t) \left( b_{\vec{q}}^\dagger(t) - \right. \right. \right. \\
 \left. \left. \left. - b_{-\vec{q}}(t) \right) \right], c_{n+2k_z}^\dagger(0) c_{nk_z}(0) \right\rangle \right\} & \quad (3-4)
 \end{aligned}$$

Usando as relações de comutação para os operadores de Fermi, obtém-se:

$$\langle [c_{nk_z}^\dagger(t)c_{n+2k_z}(t), c_{n+2k_z}^\dagger(0)c_{nk_z}(0)] \rangle = e^{-2i\omega_c t} \left\{ \langle N_{nk_z} \rangle - \langle N_{n+2k_z} \rangle \right\}$$

$$\begin{aligned} [c_{nk_z}^\dagger(t)c_{n+2k_z}(t), c_{mk_z}^\dagger(t)c_{mk_z}(t)] &= c_{nk_z}^\dagger(t)c_{mk_z}(t)\delta_{m,n+2}\delta_{k_z k_z'} - \\ &- c_{mk_z}^\dagger(t)c_{n+2k_z}(t)\delta_{mn}\delta_{k_z k_z'} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} [c_{nk_z}^\dagger(t)c_{nk_z}(t), c_{mk_z}^\dagger(t)c_{mk_z}(t)(b_{\vec{q}}^\dagger(t) - b_{\vec{q}}(t))] &= \left\{ c_{nk_z}^\dagger(t)c_{mk_z}(t)\delta_{m,n+2}\delta_{k_z k_z''} - \right. \\ &\left. - c_{mk_z}^\dagger(t)c_{n+2k_z}(t)\delta_{nm}\delta_{k_z k_z''} \right\} (b_{\vec{q}}^\dagger(t) - b_{\vec{q}}(t)) \end{aligned}$$

Aplicando os resultados acima à equação (3-4), obtém-se:

$$\begin{aligned} i \frac{dG(t,0)}{dt} &= \delta(t) \left\{ \langle N_{nk_z} \rangle - \langle N_{n+2k_z} \rangle \right\} + 2\omega_c G(t,0) + \\ &+ \sum_{mk'} \sum_{\vec{q}} F(\vec{q}) \langle (n+2)\vec{k} | e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} | mk' \rangle \langle \langle c_{nk_z}^\dagger(t)c_{n+2k_z}(t)(b_{\vec{q}}^\dagger(t) - b_{\vec{q}}(t)); c_{n+2k_z}^\dagger(0)c_{nk_z}(0) \rangle \rangle - \\ &- \sum_{mk'} \sum_{\vec{q}} F(\vec{q}) \langle mk' | e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} | n\vec{k} \rangle \langle \langle c_{nk_z}^\dagger(t)c_{n+2k_z}(t)(b_{\vec{q}}^\dagger(t) - b_{\vec{q}}(t)); c_{n+2k_z}^\dagger(0)c_{nk_z}(0) \rangle \rangle \quad (3-5) \end{aligned}$$

$$\text{Onde } \langle N_{nk_z} \rangle = \langle c_{nk_z}^\dagger(0)c_{nk_z}(0) \rangle \quad (3-6)$$

A equação de movimento expressa em (3.5) dá origem a novos tipos de funções de Green de ordem mais alta do que aquela definida na eq. (2.17). Estas novas funções são expressas em termos de operadores de Fermi e de Bose e são dadas a seguir:

$$G_1(t,0) = \left\langle\left\langle c_{nk_z}^\dagger(t) c_{mk_z}(t) b_q^\dagger(t); c_{n+2k_z}^\dagger(0) c_{nk_z}(0) \right\rangle\right\rangle \quad (3.7a)$$

$$G_2(t,0) = \left\langle\left\langle c_{nk_z}^\dagger(t) c_{mk_z}(t) b_q(t); c_{n+2k_z}^\dagger(0) c_{nk_z}(0) \right\rangle\right\rangle \quad (3.7b)$$

$$G_3(t,0) = \left\langle\left\langle c_{mk_z}^\dagger(t) c_{n+2k_z}(t) b_q^\dagger(t); c_{n+2k_z}^\dagger(0) c_{nk_z}(0) \right\rangle\right\rangle \quad (3.7c)$$

$$G_4(t,0) = \left\langle\left\langle c_{mk_z}^\dagger(t) c_{n+2k_z}(t) b_q(t); c_{n+2k_z}^\dagger(0) c_{nk_z}(0) \right\rangle\right\rangle \quad (3.7d)$$

Evidentemente todas as funções acima definidas podem ser expressas em termos da média estatística do comutador entre os operadores e o procedimento adotado para obter-se as equações de movimento é o mesmo que foi usado para obter-se a equação de movimento da função de Green original. Tem-se então:

$$i \frac{d}{dt} G_j(t,0) = \frac{d\theta(t)}{dt} \left\langle \left[ A_j(t), B(0) \right] \right\rangle + \left\langle\left\langle i \frac{d}{dt} A_j(t); B(0) \right\rangle\right\rangle \quad (3.8)$$

onde  $j = 1, 2, 3, 4$  e o operador  $A_j(t)$  é o operador dependente do tempo para cada uma das funções dadas:

$$A_1(t) = c_{nk}^\dagger(t) c_{mk, z}(t) b_{\vec{q}}^\dagger(t) \quad (3.9a)$$

$$A_2(t) = c_{nk}^\dagger(t) c_{mk, z}(t) b_{\vec{q}}(t) \quad (3.9b)$$

$$A_3(t) = c_{mk, z}^\dagger(t) c_{n+2, k_z}(t) b_{\vec{q}}^\dagger(t) \quad (3.9c)$$

$$A_4(t) = c_{mk, z}^\dagger(t) c_{n+2, k_z}(t) b_{\vec{q}}(t) \quad (3.9d)$$

$$\text{operador } B(o) = c_{n+2, k_z}^\dagger(o) c_{nk}(o).$$

Os operadores  $A_j(t)$  obedecem às mesmas equações de movimento do tipo expresso em (3.3). Convém lembrar que agora o comutador com a hamiltoniana dos fonons,  $H_{L0}$ , não é nulo pois os operadores  $A_j(t)$  são definidos, também, em termos de operadores para os fonons.

As equações de movimento para as novas funções de Green são:

$$\begin{aligned}
\frac{dS_1(t,0)}{dt} &= \left\langle b_{\vec{q}}^{\dagger}(t) \left( c_{n\vec{k}_2}^{\dagger}(0) c_{n\vec{k}_2}(0) \delta_{m, n+2} \delta_{\vec{k}_2, \vec{k}_2'} - c_{n+2\vec{k}_2}^{\dagger}(0) c_{m\vec{k}_2'}(0) \right) e^{i(\omega_{n\vec{k}_2} - \omega_{m\vec{k}_2'})t} \right\rangle + \\
&- \sum_{n\vec{k}_1} \sum_{\vec{q}_1} F(\vec{q}_1) \langle n\vec{k}_1 | e^{i\vec{q}_1 \cdot \vec{r}_1} | n\vec{k}_1' \rangle \left\langle \left\langle c_{n\vec{k}_2}^{\dagger}(t) c_{n\vec{k}_2}(t) b_{\vec{q}}^{\dagger}(t) (b_{\vec{q}}^{\dagger}(t) - b_{-\vec{q}}^{\dagger}(t)); e_{n+2\vec{k}_2}^{\dagger}(0) c_{n\vec{k}_2}(0) \right\rangle \right\rangle - \\
&- \sum_{n\vec{k}_1} \sum_{\vec{q}_1} F(\vec{q}_1) \langle n\vec{k}_1 | e^{i\vec{q}_1 \cdot \vec{r}_1} | n\vec{k}_1' \rangle \left\langle \left\langle c_{n\vec{k}_2}^{\dagger}(t) c_{m\vec{k}_2'}(t) (b_{\vec{q}}^{\dagger}(t) - b_{-\vec{q}}^{\dagger}(t)) b_{\vec{q}}^{\dagger}(t); e_{n+2\vec{k}_2}^{\dagger}(0) c_{n\vec{k}_2}(0) \right\rangle \right\rangle + \\
&\left[ \omega_{m\vec{k}_2'} - \omega_{n\vec{k}_2} - \omega_{L0} \right] G_1(t, 0) \tag{3-10a}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{dS_2(t,0)}{dt} &= \left\langle b_{-\vec{q}}^{\dagger}(t) \left( c_{n\vec{k}_2}^{\dagger}(0) c_{n\vec{k}_2}(0) \delta_{m, n+2} \delta_{\vec{k}_2, \vec{k}_2'} - c_{n+2\vec{k}_2}^{\dagger}(0) c_{m\vec{k}_2'}(0) \right) e^{i(\omega_{n\vec{k}_2} - \omega_{m\vec{k}_2'})t} \right\rangle + \\
&+ \sum_{n\vec{k}_1} \sum_{\vec{q}_1} F(\vec{q}_1) \langle n\vec{k}_1 | e^{i\vec{q}_1 \cdot \vec{r}_1} | n\vec{k}_1' \rangle \left\langle \left\langle c_{n\vec{k}_2}^{\dagger}(t) c_{n\vec{k}_2}(t) b_{-\vec{q}}^{\dagger}(t) (b_{\vec{q}}^{\dagger}(t) - b_{-\vec{q}}^{\dagger}(t)); e_{n+2\vec{k}_2}^{\dagger}(0) c_{n\vec{k}_2}(0) \right\rangle \right\rangle - \\
&- \sum_{n\vec{k}_1} \sum_{\vec{q}_1} F(\vec{q}_1) \langle n\vec{k}_1 | e^{i\vec{q}_1 \cdot \vec{r}_1} | n\vec{k}_1' \rangle \left\langle \left\langle c_{n\vec{k}_2}^{\dagger}(t) c_{m\vec{k}_2'}(t) (b_{\vec{q}}^{\dagger}(t) - b_{-\vec{q}}^{\dagger}(t)) b_{-\vec{q}}^{\dagger}(t); e_{n+2\vec{k}_2}^{\dagger}(0) c_{n\vec{k}_2}(0) \right\rangle \right\rangle + \\
&\left[ \omega_{m\vec{k}_2'} - \omega_{n\vec{k}_2} + \omega_{L0} \right] G_2(t, 0) \tag{3-10b}
\end{aligned}$$

$$\frac{idG_3(t,0)}{dt} = \left\langle b_{\vec{q}}^\dagger(t) \left( c_{m\vec{k}_z}^\dagger(0) c_{n\vec{k}_z}(0) - c_{n+2\vec{k}_z}^\dagger(0) c_{n+2\vec{k}_z}(0) \delta_{mn} \delta_{\vec{k}_z\vec{k}'_z} \right) e^{i(\omega_{m\vec{k}_z} - \omega_{n+2\vec{k}_z})t} \right\rangle +$$

$$+ \sum_{n'\vec{k}'_z} \sum_{\vec{q}'_z} F(\vec{q}'_z) \langle (n+2)\vec{k} | e^{i\vec{q}'_z \cdot \vec{r}} | n'\vec{k}'_z \rangle \left\langle \left\langle c_{m\vec{k}_z}^\dagger(t) c_{n\vec{k}_z}(t) b_{\vec{q}}^\dagger(t) (b_{\vec{q}}^\dagger(t) - b_{-\vec{q}'_z}^\dagger(t)); c_{n+2\vec{k}_z}^\dagger(0) c_{n\vec{k}_z}(0) \right\rangle \right\rangle -$$

$$\sum_{n'\vec{k}'_z} \sum_{\vec{q}'_z} F(\vec{q}'_z) \langle n'\vec{k}'_z | e^{i\vec{q}'_z \cdot \vec{r}} | m\vec{k}_z \rangle \left\langle \left\langle c_{n'\vec{k}'_z}^\dagger(t) c_{n+2\vec{k}_z}(t) (b_{\vec{q}'_z}^\dagger(t) - b_{-\vec{q}'_z}^\dagger(t)) b_{\vec{q}}(t); c_{n+2\vec{k}_z}^\dagger(0) c_{n\vec{k}_z}(0) \right\rangle \right\rangle +$$

$$+ \left( \omega_{n+2\vec{k}_z} - \omega_{m\vec{k}'_z} - \omega_{L0} \right) G_3(t,0)$$

(3-10c)

$$\frac{idG_4(t,0)}{dt} = \left\langle b_{-\vec{q}}^\dagger(t) \left( c_{m\vec{k}_z}^\dagger(0) c_{n+2\vec{k}_z}(0) - c_{n+2\vec{k}_z}^\dagger(0) c_{n+2\vec{k}_z}(0) \delta_{nm} \delta_{\vec{k}_z\vec{k}'_z} \right) e^{i(\omega_{m\vec{k}_z} - \omega_{n\vec{k}_z})t} \right\rangle +$$

$$\sum_{n'\vec{k}'_z} \sum_{\vec{q}'_z} F(\vec{q}'_z) \langle (n+2)\vec{k} | e^{i\vec{q}'_z \cdot \vec{r}} | n'\vec{k}'_z \rangle \left\langle \left\langle c_{m\vec{k}_z}^\dagger(t) c_{n'\vec{k}'_z}(t) b_{-\vec{q}}^\dagger(t) (b_{\vec{q}'_z}^\dagger(t) - b_{-\vec{q}'_z}^\dagger(t)); c_{n+2\vec{k}_z}^\dagger(0) c_{n\vec{k}_z}(0) \right\rangle \right\rangle -$$

$$- \sum_{n'\vec{k}'_z} \sum_{\vec{q}'_z} F(\vec{q}'_z) \langle n'\vec{k}'_z | e^{i\vec{q}'_z \cdot \vec{r}} | m\vec{k}_z \rangle \left\langle \left\langle c_{n'\vec{k}'_z}^\dagger(t) c_{n+2\vec{k}_z}(t) (b_{\vec{q}'_z}^\dagger(t) - b_{-\vec{q}'_z}^\dagger(t)) b_{-\vec{q}}(t); c_{n+2\vec{k}_z}^\dagger(0) c_{n\vec{k}_z}(0) \right\rangle \right\rangle +$$

$$\left( \omega_{n+2\vec{k}_z} - \omega_{m\vec{k}'_z} + \omega_{L0} \right) G_4(t,0)$$

(3-10d)

Um novo tipo de função de Green foi introduzido:

$$G'(t,0) = \left\langle\left\langle c_{\ell k_z}^\dagger(t) c_{j k_z}(t) b_{\vec{q}}^\dagger(t) \left( b_{\vec{q}}^\dagger(t) - b_{\vec{q}}(t) \right) ; c_{n+2 k_z}^\dagger(0) c_{n k_z}(0) \right\rangle\right\rangle$$

$$G''(t,0) = \left\langle\left\langle c_{\ell k_z}^\dagger(t) c_{j k_z}(t) \left( b_{\vec{q}}^\dagger(t) - b_{\vec{q}}(t) \right) b_{\vec{q}}(t) ; c_{n+2 k_z}^\dagger(0) c_{n k_z}(0) \right\rangle\right\rangle$$

Poder-se-ia continuar a construir, para estas funções, equações de movimento obtendo-se assim uma cadeia de equações acopladas. Uma maneira de desacoplar as equações fazer uso de uma aproximação nas equações (3.10) em que os operadores para fonons, são substituídos pelos seus valores médios onde for possível<sup>{8}</sup>, isto é:

$$b_{\vec{q}}^\dagger(b_{\vec{q}}^\dagger, - b_{\vec{q}}) \rightarrow \langle b_{\vec{q}}^\dagger(b_{\vec{q}}^\dagger, - b_{\vec{q}}) \rangle \quad (3.11a)$$

$$b_{\vec{q}}(b_{\vec{q}}^\dagger, - b_{\vec{q}}) \rightarrow \langle b_{\vec{q}}(b_{\vec{q}}^\dagger, - b_{\vec{q}}) \rangle \quad (3.11b)$$

Durante a transição entre os estados inicial e final, ocorre a criação e a aniquilação de fonons. Considerando o sistema em equilíbrio, pode-se admitir que, em média, o número de fonons criados é igual ao número de fonons aniquilados. Portanto os termos do tipo  $\langle b_{\vec{q}}^\dagger b_{\vec{q}}^\dagger \rangle$  e  $\langle b_{\vec{q}} b_{\vec{q}} \rangle$  devem

ser nulos.

Como já foi mencionado no capítulo 2, a hamiltoniana de Fröhlich atua como uma pequena perturbação. Entretanto esta hamiltoniana faz parte de  $H_0$ , a hamiltoniana considerada não perturbada. Isto se explica em virtude da interação entre os elétrons e os fônons ser considerada tão pequena que os estados perturbados não diferem muito dos estados não-perturbados. Desta maneira pode-se calcular a média dos operadores  $\langle b_{\vec{q}}^\dagger b_{\vec{q}'}^\dagger \rangle$  e  $\langle b_{\vec{q}} b_{\vec{q}'} \rangle$  fazendo a aproximação de que a hamiltoniana  $H_0$  não contém o termo de Fröhlich. Sendo assim (\*):

$$\langle b_{\vec{q}}^\dagger b_{\vec{q}'}^\dagger \rangle = Z^{-1} \sum_{n(\vec{Q})} \sum_{n(\vec{K})} \exp\left[-(\omega_{L0} + \omega_{n, k_z})/k_B T\right] \sqrt{(n_{\vec{q}'} + 1)(n_{\vec{q}} + 1)} \times \\ \times \langle n(\vec{K}) | n(\vec{K}) \rangle \langle n(\vec{Q}) | n(\vec{Q}) + \delta_{\vec{Q}\vec{q}'} + \delta_{\vec{Q}\vec{q}} \rangle$$

---

(\*) Representa-se pelo ket  $|n(\vec{Q})\rangle$  o estado do sistema de fônons cuja distribuição de vetores de onda é a função  $n(\vec{Q})$ . Ao se criar um fonon com vetor de onda  $\underline{q}$  esta distribuição é alterada para  $n(\vec{Q}) + \delta_{\vec{Q}\vec{q}}$ . Tem-se portanto nesta notação

$$b_{\vec{q}}^\dagger |n(\vec{Q})\rangle = \sqrt{n_{\vec{q}} + 1} |n(\vec{Q}) + \delta_{\vec{Q}\vec{q}}\rangle$$

De forma semelhante o estado do sistema de elétrons cuja distribuição de momento é  $n(\vec{K})$  é representado pelo ket  $|n(\vec{K})\rangle$ .

Conclue-se então que  $\langle b_{\vec{q}}^{\dagger} b_{\vec{q}'}^{\dagger} \rangle = \text{zero}$ .

Do mesmo modo obtém-se  $\langle b_{\vec{q}} b_{\vec{q}'} \rangle = \text{zero}$ .

Os únicos termos que são diferentes de zero são do tipo

$$\langle b_{\vec{q}}^{\dagger} b_{-\vec{q}} \rangle :$$

$$\begin{aligned} \langle b_{\vec{q}}^{\dagger} b_{-\vec{q}} \rangle &= Z^{-1} \sum_{n(\vec{Q})} \sum_{n(\vec{K})} \langle n(\vec{Q}) n(\vec{K}) | e^{-H_0/k_B T} b_{\vec{q}}^{\dagger} b_{-\vec{q}} | n(\vec{Q}) n(\vec{K}) \rangle = \\ &= Z^{-1} \sum_{n(\vec{Q})} \sum_{n(\vec{K})} \sqrt{n_{\vec{q}} n_{-\vec{q}}} \langle n(\vec{K}) | n(\vec{K}) \rangle \langle n(\vec{Q}) - \delta_{\vec{Q}\vec{q}} | n(\vec{Q}) - \\ &\quad - \delta_{\vec{Q}-\vec{q}} \rangle \exp\left\{ -(\omega_{L0} + \omega_{n k_z}) t / k_B T \right\} \end{aligned}$$

Esta expressão será diferente de zero apenas quando  $\vec{q} = -\vec{q}'$ ,  
tem-se então:

$$\begin{aligned} \langle b_{\vec{q}}^{\dagger} b_{-\vec{q}} \rangle &= Z^{-1} \sum_{n(\vec{Q})} \sum_{n(\vec{K})} e^{-(\omega_{L0} + \omega_{n k_z}) t / k_B T} \langle n(\vec{K}) | n(\vec{K}) \rangle \langle n(\vec{Q}) | n(\vec{Q}) \rangle n_{\vec{q}} = \\ &= Z^{-1} \sum_{n(\vec{Q})} \sum_{n(\vec{K})} e^{-(\omega_{L0} + \omega_{n k_z}) t / k_B T} \langle n(\vec{K}) | n(\vec{K}) \rangle \langle n(\vec{Q}) | n_{\vec{q}} | n(\vec{Q}) \rangle = \\ &= Z^{-1} \sum_{n(\vec{Q})} \sum_{n(\vec{K})} e^{-(\omega_{L0} + \omega_{n k_z}) t / k_B T} \langle n(\vec{K}) | n(\vec{K}) \rangle \langle n(\vec{Q}) | b_{\vec{q}}^{\dagger} b_{-\vec{q}} | n(\vec{Q}) \rangle = \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= Z^{-1} \sum_{n(\vec{Q})} \sum_{n(\vec{K})} e^{-(\omega_0 + \omega_{nk_2})t/k_B T} \langle n(\vec{Q})n(\vec{K}) | N_{\vec{Q}} | n(\vec{Q})n(\vec{K}) \rangle = \\
&= Z^{-1} \sum_{n(\vec{Q})} \sum_{n(\vec{K})} \langle n(\vec{Q})n(\vec{K}) | e^{-H_0/k_B T} N_{\vec{Q}} | n(\vec{Q})n(\vec{K}) \rangle = \langle N_{\vec{Q}} \rangle \quad (3.12)
\end{aligned}$$

De acordo com o resultado expresso na equação (3.12) pode-se fazer as seguintes substituições:

$$\langle b_{\vec{q}}^{\dagger}(t) (b_{\vec{q}'}^{\dagger}(t) - b_{\vec{q}'}(t)) \rangle \rightarrow -\langle N_{\vec{q}} \rangle \delta(\vec{q} + \vec{q}') \quad (3.13)$$

$$\langle b_{\vec{q}}(t) (b_{\vec{q}'}^{\dagger}(t) - b_{\vec{q}'}(t)) \rangle \rightarrow \left( \langle N_{\vec{q}} \rangle + 1 \right) \delta(\vec{q} + \vec{q}') \quad (3.14)$$

onde  $\langle N_{\vec{q}} \rangle = \langle b_{\vec{q}}^{\dagger} b_{\vec{q}} \rangle$ .

Note-se que no modelo de Einstein todos os fonons óticos têm a mesma energia e portanto o número médio de ocupação  $\langle N_{\vec{q}} \rangle$ , dado por  $\langle N_{\vec{q}} \rangle = \left( e^{-\omega_{LO}/k_B T} - 1 \right)^{-1}$ , é independente de  $\vec{q}$ . O índice  $\vec{q}$  pode ser então abandonado, isto é:

$$\langle b_{\vec{q}}^{\dagger} b_{\vec{q}} \rangle = \langle N_{LO} \rangle$$

Usando o mesmo procedimento, obtém-se que a média estatística dos operadores  $b_{\vec{q}}$  e  $b_{\vec{q}}^{\dagger}$  é nula. Portanto os termos do tipo:

$$\left\langle b_{\vec{q}}^{\dagger} \left( c_{nk_z}^{\dagger} c_{nk_z} \delta_{m,n+2} \delta_{k_z k'_z} c_{n+2, k_z}^{\dagger} c_{n+2, k_z} \right) e^{i(\omega_{nk_z} - \omega_{mk'_z})t} \right\rangle$$

$$\left\langle b_{-\vec{q}}^{\dagger} \left( c_{nk_z}^{\dagger} c_{nk_z} \delta_{m,n+2} \delta_{k_z k'_z} c_{n+2, k_z}^{\dagger} c_{n+2, k_z} \right) e^{i(\omega_{nk_z} - \omega_{mk'_z})t} \right\rangle,$$

são nulos dentro da aproximação considerada.

Obtém-se então, as equações de movimento para as funções de Green:

$$i \frac{dG_1(t,0)}{dt} = - \langle N_{l0} \rangle \sum_{n, \vec{k}'} F(\vec{q}) \langle n, \vec{k}' | e^{-i\vec{q} \cdot \vec{R}} | n, \vec{k} \rangle \left\langle \left\langle c_{nk_2}^{\dagger}(t) c_{n'k_2'}(t); c_{n+2k_2}^{\dagger}(0) c_{nk_2}(0) \right\rangle \right\rangle +$$

$$+ (1 + \langle N_{l0} \rangle) \sum_{n, \vec{k}'} F(\vec{q}) \langle n, \vec{k}' | e^{-i\vec{q} \cdot \vec{R}} | n, \vec{k} \rangle \left\langle \left\langle c_{n'k_2'}^{\dagger}(t) c_{mk_2'}(t); c_{n+2k_2}^{\dagger}(0) c_{nk_2}(0) \right\rangle \right\rangle +$$

$$+ \left[ \omega_{mk_2'} - \omega_{nk_2} - \omega_{l0} \right] G_1(t,0)$$

(3-15 a)

$$\frac{dG_2(t,0)}{dt} = (1 + \langle N_{L0} \rangle) \sum_{n\vec{k}'} F(\vec{q}) \langle m\vec{k}' | e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} | n\vec{k}' \rangle \langle\langle c_{n\vec{k}_z}^\dagger(t) c_{n\vec{k}_z}(t); c_{n+2\vec{k}_z}^\dagger(0) c_{n\vec{k}_z}(0) \rangle\rangle$$

$$- \langle N_{L0} \rangle \sum_{n\vec{k}'} F(\vec{q}) \langle n\vec{k}' | e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} | n\vec{k}' \rangle \langle\langle c_{n\vec{k}_z}^\dagger(t) c_{m\vec{k}_z}(t); c_{n+2\vec{k}_z}^\dagger(0) c_{n\vec{k}_z}(0) \rangle\rangle +$$

$$+ \left[ \omega_{m\vec{k}_z} - \omega_{n\vec{k}_z} + \omega_{L0} \right] G_2(t,0) \quad (3-15b)$$

$$\frac{dG_3(t,0)}{dt} = - \langle N_{L0} \rangle \sum_{n\vec{k}'} F(\vec{q}) \langle (n+2)\vec{k}' | e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} | n\vec{k}' \rangle \langle\langle c_{m\vec{k}_z}^\dagger(t) c_{n\vec{k}_z}(t); c_{n+2\vec{k}_z}^\dagger(0) c_{n\vec{k}_z}(0) \rangle\rangle +$$

$$+ (1 + \langle N_{L0} \rangle) \sum_{n\vec{k}'} F(\vec{q}) \langle n\vec{k}' | e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} | m\vec{k}' \rangle \langle\langle c_{n\vec{k}_z}^\dagger(t) c_{n+2\vec{k}_z}(t); c_{n+2\vec{k}_z}^\dagger(0) c_{n\vec{k}_z}(0) \rangle\rangle +$$

$$+ \left[ \omega_{n+2\vec{k}_z} - \omega_{m\vec{k}_z} - \omega_{L0} \right] G_3(t,0) \quad (3-15c)$$

$$\begin{aligned}
\frac{dG_4(t,0)}{dt} &= (1 + \langle N_{L0} \rangle) \sum_{n, \vec{k}} F(\vec{q}) \langle (n+2)\vec{k} | e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}} | n, \vec{k} \rangle \langle \langle c_{m\vec{k}_z}^\dagger(t) c_{n\vec{k}_z}(t); c_{n+2\vec{k}_z}^\dagger(0) c_{n\vec{k}_z}(0) \rangle \rangle \\
&- \langle N_{L0} \rangle \sum_{n, \vec{k}} F(\vec{q}) \langle n, \vec{k} | e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}} | m, \vec{k} \rangle \langle \langle c_{n\vec{k}_z}^\dagger(t) c_{n+2\vec{k}_z}(t); c_{n+2\vec{k}_z}^\dagger(0) c_{n\vec{k}_z}(0) \rangle \rangle + \\
&+ \left( \omega_{n+2\vec{k}_z} - \omega_{m\vec{k}_z} + \omega_{L0} \right) G_4(t,0) \quad (3-15d)
\end{aligned}$$

Tem-se então as equações de movimento desacopladas, expressas em termos de funções de Green semelhantes à original, definida na equação (2.17), isto é, as equações (3.15) são expressas em termos de funções de Green do tipo:

$$\begin{aligned}
&\langle \langle c_{\ell\vec{k}'_z}^\dagger(t) c_{j\vec{k}''_z}(t); c_{n+2\vec{k}_z}^\dagger(0) c_{n\vec{k}_z}(0) \rangle \rangle = \\
&= -i\theta(t) \langle [c_{\ell\vec{k}'_z}^\dagger(t) c_{j\vec{k}''_z}(t), c_{n+2\vec{k}_z}^\dagger(0) c_{n\vec{k}_z}(0)] \rangle \quad (3.16)
\end{aligned}$$

Desenvolvendo o comutador entre os operadores de Fermi, dentro da aproximação considerada para a hamiltoniana não perturbada, obtém-se:

$$\begin{aligned}
&\langle \langle c_{n\vec{k}_z}^\dagger(t) c_{n'\vec{k}'_z}(t); c_{n+2\vec{k}_z}^\dagger(0) c_{n\vec{k}_z}(0) \rangle \rangle = \\
&= \langle \langle c_{n\vec{k}_z}^\dagger(t) c_{n+2\vec{k}_z}(t); c_{n+2\vec{k}_z}^\dagger(0) c_{n\vec{k}_z}(0) \rangle \rangle \delta_{n', n+2} \delta_{\vec{k}'_z, \vec{k}_z} \quad (3.17)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \left\langle\left\langle c_{n'k'_z}^\dagger(t) e_{mk'_z}(t); c_{n+2k_z}^\dagger(0) c_{nk_z}(0) \right\rangle\right\rangle = \\ & = \left\langle\left\langle c_{nk_z}^\dagger(t) c_{n+2k_z}(t); c_{n+2k_z}^\dagger(0) c_{nk_z}(0) \right\rangle\right\rangle \delta_{n',n} \delta_{k'_z k_z} \end{aligned} \quad (3.18)$$

$$\begin{aligned} & \left\langle\left\langle c_{mk'_z}^\dagger(t) c_{n'k'_z}(t); c_{n+2k_z}^\dagger(0) c_{nk_z}(0) \right\rangle\right\rangle = \\ & = \left\langle\left\langle c_{nk_z}^\dagger(t) c_{n+2k_z}(t); c_{n+2k_z}^\dagger(0) c_{nk_z}(0) \right\rangle\right\rangle \delta_{n',n+2} \delta_{k'_z k_z} \end{aligned} \quad (3.19)$$

$$\begin{aligned} & \left\langle\left\langle c_{n'k'_z}^\dagger(t) c_{n+2k_z}(t); c_{n+2k_z}^\dagger(0) c_{nk_z}(0) \right\rangle\right\rangle = \\ & = \left\langle\left\langle c_{nk_z}^\dagger(t) c_{n+2k_z}(t); c_{n+2k_z}^\dagger(0) c_{nk_z}(0) \right\rangle\right\rangle \delta_{n',n} \delta_{k'_z k_z} \end{aligned} \quad (3.20)$$

Com estes resultados e observando-se (2.17), as equações (3.15) podem ser escritas como segue:

$$\begin{aligned} \frac{idg_1(t,0)}{dt} = & \left[ \omega_{mk'_z} - \omega_{nk_z} - \omega_{L0} \right] G_1(t,0) - F(\vec{q}) \left[ \langle N_{L0} \rangle \langle m\vec{k}' | e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} | (n+2)\vec{k} \rangle - \right. \\ & \left. - (1 + \langle N_{L0} \rangle) \langle n\vec{k}' | e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} | n\vec{k} \rangle \right] G(t,0) \end{aligned} \quad (3-21a)$$

$$\begin{aligned} \frac{idg_2(t,0)}{dt} = & \left[ \omega_{mk'_z} - \omega_{nk_z} + \omega_{L0} \right] G_2(t,0) + F(\vec{q}) \left[ (1 + \langle N_{L0} \rangle) \langle m\vec{k}' | e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} | (n+2)\vec{k} \rangle - \right. \\ & \left. - \langle N_{L0} \rangle \langle n\vec{k}' | e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} | n\vec{k} \rangle \right] G(t,0) \end{aligned} \quad (3-21b)$$

$$\frac{dG_3(t,0)}{dt} = \left[ \omega_{n+2k_z} - \omega_{mk_z} - \omega_{L0} \right] G_3(t,0) - F(\vec{q}) \left[ \langle N_{L0} \rangle \langle (n+2)\vec{k} | e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} | (n+2)\vec{k} \rangle \right. \\ \left. - (1 + \langle N_{L0} \rangle) \langle n\vec{k} | e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} | m\vec{k} \rangle \right] G(t,0) \quad (3.21c)$$

$$\frac{dG_4(t,0)}{dt} = \left[ \omega_{n+2k_z} - \omega_{nk_z} + \omega_{L0} \right] G_4(t,0) + F(\vec{q}) \left[ (1 + \langle N_{L0} \rangle) \langle (n+2)\vec{k} | e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} | (n+2)\vec{k} \rangle \right. \\ \left. - \langle N_{L0} \rangle \langle n\vec{k} | e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} | m\vec{k} \rangle \right] G(t,0) \quad (3.21d)$$

A relação entre a função de Green e a função intensidade espectral,  $J(\omega)$ , expressa pela equação (2.14), mostra a necessidade de se calcular a transformada de Fourier da função de Green:

$$G(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int e^{i\omega t} G(t,0) dt \quad (3.22)$$

que satisfaz também às relações:

$$\pm \frac{dG}{dt}(t,0) = \int_{-\infty}^{\infty} \omega e^{-i\omega t} G(\omega) d\omega \quad (3.23a)$$

$$\omega G(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} i dG(t, 0) dt \quad (3.23b)$$

Re-escrevendo a equação (3.5) de uma forma mais compacta:

$$i \frac{dG}{dt}(t, 0) = \delta(t) \left[ \langle N_{nk_z} \rangle - \langle N_{n+2k_z} \rangle \right] + 2\omega_c G(t, 0) + \\ + \sum_{\vec{q}} \sum_{m\vec{k}'} F(\vec{q}) \langle (n+2)\vec{k} | e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} | m\vec{k}' \rangle \left[ G_1(t, 0) - G_2(t, 0) \right] - \\ - \sum_{m\vec{k}'} \sum_{\vec{q}} F(\vec{q}) \langle m\vec{k}' | e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} | n\vec{k} \rangle \left[ G_3(t, 0) - G_4(t, 0) \right], \quad (3.24)$$

e substituindo a equação (3.24) em (3.23b) obtém-se:

$$(\omega - 2\omega_c) G(\omega) = \sum_{m\vec{k}'} \sum_{\vec{q}} F(\vec{q}) \left\{ \langle (n+2)\vec{k} | e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} | m\vec{k}' \rangle \left[ G_1(\omega) - G_2(\omega) \right] - \right. \\ \left. - \langle m\vec{k}' | e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} | n\vec{k} \rangle \left[ G_3(\omega) - G_4(\omega) \right] \right\} + \\ + \frac{1}{2\pi} \left[ \langle N_{nk_z} \rangle - \langle N_{n+2k_z} \rangle \right] \quad (3-25)$$

Outrossim, tomando as transformadas de Fourier das equações (3.21) obtém-se:

$$\begin{aligned}
& \left[ \omega - \omega_{mk'_z} + \omega_{nk_z} + \omega_{LO} \right] G_1(\omega) = \\
& = -F(\vec{q}) \left[ \langle N_{LO} \rangle \langle \vec{m}\vec{k}' | e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} | (n+2)\vec{k} \rangle - \right. \\
& \left. - \left( 1 + \langle N_{LO} \rangle \right) \langle \vec{n}\vec{k} | e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} | \vec{n}\vec{k} \rangle \right] G(\omega) \quad (3.26a)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \left[ \omega - \omega_{mk'_z} + \omega_{nk_z} - \omega_{LO} \right] G_2(\omega) = \\
& = F(\vec{q}) \left[ \left( 1 + \langle N_{LO} \rangle \right) \langle \vec{m}\vec{k}' | e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} | (n+2)\vec{k} \rangle - \right. \\
& \left. - \langle N_{LO} \rangle \langle \vec{n}\vec{k} | e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} | \vec{n}\vec{k} \rangle \right] G(\omega) \quad (3.26b)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \left[ \omega - \omega_{n+2 k_z} + \omega_{mk'_z} + \omega_{LO} \right] G_3(\omega) = \\
& = -F(\vec{q}) \langle N_{LO} \rangle \langle (n+2)\vec{k} | e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} | (n+2)\vec{k} \rangle - \\
& - \left[ 1 + \langle N_{LO} \rangle \right] \langle \vec{n}\vec{k} | e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} | \vec{m}\vec{k}' \rangle G(\omega) \quad (3.26c)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \left[ \omega - \omega_{n+2 k_z} + \omega_{nk'_z} - \omega_{LO} \right] G_4(\omega) = \\
& = F(\vec{q}) \left[ \left( 1 + \langle N_{LO} \rangle \right) \langle (n+2)\vec{k} | e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} | (n+2)\vec{k} \rangle - \right. \\
& \left. - \langle N_{LO} \rangle \langle \vec{n}\vec{k} | e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} | \vec{m}\vec{k}' \rangle \right] G(\omega) \quad (3.26d)
\end{aligned}$$

Finalmente, substituindo-se as equações (3.26) em (3.25), obtém-se:

$$G(\omega) = \frac{1}{2\pi} \left( \frac{\langle N_{nk_z} \rangle - \langle N_{n+2k_z} \rangle}{\omega - 2\omega_c - M'(\omega)} \right) \quad (3.27)$$

Foi introduzida a função  $M'(\omega)$  que por analogia com a teoria quântica de campos pode ser chamada de operador massa:

$$\begin{aligned} M'(\omega) = & \sum_{\vec{m}\vec{k}} \sum_{\vec{q}} F^2(\vec{q}) \left\{ \langle (n+2)\vec{k} | e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} | m\vec{k} \rangle \left[ - \left( \frac{\langle N_{L0} \rangle}{\omega - \omega_{m\vec{k}_z} + \omega_{n\vec{k}_z} + \omega_{L0}} \right) + \right. \right. \\ & + \left. \frac{1 + \langle N_{L0} \rangle}{\omega - \omega_{m\vec{k}_z} + \omega_{n\vec{k}_z} - \omega_{L0}} \right] \langle m\vec{k} | e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} | (n+2)\vec{k} \rangle + \left( \frac{1 + \langle N_{L0} \rangle}{\omega - \omega_{m\vec{k}_z} + \omega_{n\vec{k}_z} + \omega_{L0}} \right) + \\ & + \left. \frac{\langle N_{L0} \rangle}{\omega - \omega_{m\vec{k}_z} + \omega_{n\vec{k}_z} - \omega_{L0}} \right] \langle n\vec{k} | e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} | m\vec{k} \rangle - \langle m\vec{k} | e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} | n\vec{k} \rangle \times \\ & \times \left[ - \left( \frac{\langle N_{L0} \rangle}{\omega - \omega_{n+2\vec{k}_z} + \omega_{m\vec{k}_z} + \omega_{L0}} \right) + \frac{1 + \langle N_{L0} \rangle}{\omega - \omega_{n+2\vec{k}_z} + \omega_{m\vec{k}_z} - \omega_{L0}} \right] \langle (n+2)\vec{k} | e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} | (n+2)\vec{k} \rangle + \\ & + \left. \left( \frac{1 + \langle N_{L0} \rangle}{\omega - \omega_{n+2\vec{k}_z} + \omega_{m\vec{k}_z} + \omega_{L0}} \right) + \frac{\langle N_{L0} \rangle}{\omega - \omega_{n+2\vec{k}_z} + \omega_{m\vec{k}_z} - \omega_{L0}} \right] \langle n\vec{k} | e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} | m\vec{k} \rangle \left. \right\} \end{aligned}$$

(3-28)

Até agora a energia  $\omega$  foi considerada como uma quantidade real. Supondo que ela tem uma pequena parte imaginária, diferente de zero:

$$\omega = \text{Re}\omega + i\text{Im}\omega \rightarrow \omega = \omega + i\varepsilon$$

onde  $\varepsilon$  é uma pequena quantidade que tende a zero. Assim es creve-se a equação (3.27) do seguinte modo:

$$G(\omega \pm i\varepsilon) = \frac{1}{2\pi} \left[ \frac{\langle N_{nk_z} \rangle - \langle N_{n+2 k_z} \rangle}{\omega \pm i\varepsilon - 2\omega_c - M'(\omega \pm i\varepsilon)} \right] \quad (3.29)$$

O operador massa  $M'(\omega \pm i\varepsilon)$  pode ser expresso como sendo composto por uma parte real mais uma parte imaginária :

$$M'(\omega \pm i\varepsilon) = M(\omega) \mp i\Gamma(\omega) \quad (3.30)$$

Pode-se obter a parte imaginária de  $M'(\omega)$  usando a identidade simbólica:

$$\frac{1}{\omega + \Omega \pm i\varepsilon} = \frac{1}{\omega + \Omega} \mp i\pi\delta(\omega + \Omega) \quad (3.31)$$

onde o limite  $\varepsilon \rightarrow 0$  é subentendido.

Com as equações (3.30) e (3.31) obtêm-se:

$$\begin{aligned}
\Gamma(\omega) = & \pi \sum_{\vec{k}'} \sum_{\vec{q}} F^2(\vec{q}) \left\{ \langle (n+2)\vec{k} | e^{i\vec{q}\cdot\vec{\lambda}} | m\vec{k} \rangle \left[ - \langle N_{L0} \rangle \delta(\omega - \omega_{m\vec{k}_z'} + \omega_{n\vec{k}_z} + \omega_{L0}) + \right. \right. \\
& + (1 + \langle N_{L0} \rangle) \delta(\omega - \omega_{m\vec{k}_z'} + \omega_{n\vec{k}_z} - \omega_{L0}) \left. \right] \langle m\vec{k}' | e^{-i\vec{q}\cdot\vec{\lambda}} | (n+2)\vec{k} \rangle + \\
& + \langle n\vec{k} | e^{-i\vec{q}\cdot\vec{\lambda}} | n\vec{k} \rangle \left( (1 + \langle N_{L0} \rangle) \delta(\omega - \omega_{m\vec{k}_z'} + \omega_{n\vec{k}_z} + \omega_{L0}) + \langle N_{L0} \rangle \delta(\omega - \omega_{m\vec{k}_z'} + \right. \\
& \left. \left. + \omega_{n\vec{k}_z} - \omega_{L0}) \right) \right] - \langle m\vec{k}' | e^{i\vec{q}\cdot\vec{\lambda}} | n\vec{k} \rangle \left[ - \langle N_{L0} \rangle \delta(\omega - \omega_{n+2\vec{k}_z} + \omega_{m\vec{k}_z'} + \omega_{L0}) + \right. \\
& + (1 + \langle N_{L0} \rangle) \delta(\omega - \omega_{n+2\vec{k}_z} + \omega_{m\vec{k}_z'} - \omega_{L0}) \left. \right] \langle (n+2)\vec{k} | e^{-i\vec{q}\cdot\vec{\lambda}} | (n+2)\vec{k} \rangle + \\
& + \langle n\vec{k} | e^{-i\vec{q}\cdot\vec{\lambda}} | m\vec{k}' \rangle \left( (1 + \langle N_{L0} \rangle) \delta(\omega - \omega_{n+2\vec{k}_z} + \omega_{m\vec{k}_z'} + \omega_{L0}) + \langle N_{L0} \rangle \delta(\omega - \omega_{n+2\vec{k}_z} + \right. \\
& \left. \left. + \omega_{m\vec{k}_z'} - \omega_{L0}) \right) \right] \left. \right\} \quad (3-32)
\end{aligned}$$

A parte real de  $M'(\omega + i\varepsilon)$  designada por  $M(\omega)$  tem a mesma expressão que (3.28) com  $\omega$  real.

Aplicando a equação (3.46) à expressão (3.42) e usando os resultados expressos nas equações (3.44) e (3.45), tem-se:

$$G(\omega+i\varepsilon) - G(\omega-i\varepsilon) = -\frac{i}{\pi} \left[ \langle N_{nk_z} \rangle - \langle N_{n+2k_z} \rangle \right] \frac{\Gamma(\omega)}{(\omega - 2\omega_c - M(\omega))^2 + \Gamma^2(\omega)}$$

(3-33)

No que segue, pode-se supor que  $M(\omega)$  pode ser incorporado na massa efetiva do elétron, isto é,  $M(\omega)$  simplesmente renormaliza a frequência de ciclotron:

$$2\omega_c + M(\omega) = 2\tilde{\omega}_c$$

onde  $\tilde{\omega}_c$  é a frequência de ciclotron renormalizada, assim:

$$G(\omega+i\varepsilon) - G(\omega-i\varepsilon) = -\frac{i}{\pi} \left[ \langle N_{nk_z} \rangle - \langle N_{n+2k_z} \rangle \right] \frac{\Gamma(\omega)}{(\omega - \tilde{\omega}_c)^2 + \Gamma^2(\omega)}$$

(3-34)

No capítulo 2, a seção de choque de espalhamento foi, finalmente, expressa em termos do imaginário da transformada de Fourier da função de Green dada aqui pela equação (3.48). Se este resultado for substituído na equação (2.21), ter-se-á a seção de choque em sua expressão final, dada em termos de um fator de amortecimento representado pelo termo  $\Gamma(\omega)$  expresso na equação (3.45):

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\omega_s} = C \frac{\rho(\omega_s) |A_s|^2 |A_L|^2}{1 - e^{-\beta\hbar\omega}} \sum (e_s^{(+)} e_s^{(-)})^2 (n+1)(n+2) \left[ \langle N_{nk_z} \rangle - \langle N_{n+2k_z} \rangle \right] \left| \frac{2\omega_c - \omega + 2i\gamma}{\omega_L^2} \right|^2 \frac{1}{\pi} \left[ \frac{\Gamma(\omega)}{(\omega - \tilde{\omega}_c)^2 + \Gamma^2(\omega)} \right] \quad (3-35)$$

onde  $C$  é um fator constante dado por:

$$C = \frac{V_0 m^* \omega_c}{c} \left( \frac{e}{m^* c} \right)^4$$

No próximo capítulo, estes resultados serao aplicados ao estudo do espalhamento inelástico de luz por níveis de Landau em um cristal de GaAs, tipo-n.

## CAPÍTULO 4

## 4.1 APLICAÇÃO AO GaAs

Este capítulo é dedicado ao estudo dos resultados obtidos nos capítulos anteriores, aplicados ao Arseneto de Gálio (GaAs). Justifica-se a escolha deste material por sua banda de condução aproximadamente parabólica e, portanto a contribuição eletrônica para o espectro Raman, através de processos sugeridos por Wolff<sup>{4}</sup> é muito pequena. Considera-se uma concentração da ordem de  $5 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ , de modo que em temperaturas suficientemente baixas, os elétrons na banda de condução ocupem somente os estados  $n = 0, k_z = 0$ .

Nos cálculos que se seguem, são usados os seguintes valores para os parâmetros do GaAs.

$$m^* = 0,068 m_0 \{12\}, \text{ sendo } m_0 \text{ a massa do elétron.}$$

$$\omega_{LO} = 36,7 \text{ meV} \{13\}$$

$$\alpha^* = 0,06 \{14\}$$

$$\epsilon_\infty = 10,90 \{15\}$$

$$\epsilon_0 = 12,90 \{15\}$$

Em temperaturas próximas de 0K, tem-se  $\langle N_{LO} \rangle$ , que é dado por:

$$\langle N_{LO} \rangle = \frac{1}{e^{\omega_{LO}/K_B T} - 1} \quad (4-1)$$

aproximadamente igual a zero. Nestas condições, a equação para o fator de amortecimento  $\Gamma(\omega)$  fica sendo:

$$\Gamma(\omega) = \pi \sum_{\vec{m}\vec{k}'} \sum_{\vec{q}} F^2(q) \left\{ -|\langle 2\vec{k} | e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} | m\vec{k}' \rangle|^2 \delta(\omega - \omega_{m\vec{k}'_Z} - \omega_{00} - \omega_{LO}) + \right. \\ \left. + \langle 2\vec{k} | e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} | m\vec{k}' \rangle \langle 0\vec{k} | e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} | 0\vec{k} \rangle \delta(\omega - \omega_{m\vec{k}'_Z} + \omega_{00} + \omega_{LO}) \right. \\ \left. + \langle m\vec{k}' | e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} | 0\vec{k} \rangle \langle 2\vec{k} | e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} | 2\vec{k} \rangle \delta(\omega - \omega_{20} + \omega_{m\vec{k}'_Z} - \omega_{LO}) \right. \\ \left. - |\langle m\vec{k}' | e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} | 0\vec{k} \rangle|^2 \delta(\omega - \omega_{20} + \omega_{m\vec{k}'_Z} + \omega_{LO}) \right\} \quad (4-2)$$

Os elementos de matriz do tipo  $\langle l\vec{k} | e^{\pm i\vec{q}\cdot\vec{r}} | l'\vec{k}' \rangle$  são calculados no apêndice C e são expressos da seguinte forma:

$$\langle l\vec{k} | e^{\pm i\vec{q}\cdot\vec{r}} | l'\vec{k}' \rangle = \frac{\lambda}{L_x L_z} \delta(k_x, k'_x \mp q_x) \delta(k'_z, k_z \mp q_z) \\ e^{\pm \frac{i\lambda^2}{2}(k_x + k'_x)q_y} e^{\frac{\lambda^2}{4} q_z^2} I_{ll'} \quad (4-3)$$

$$I_{\ell\ell'} = \begin{cases} \frac{\ell-\ell'}{2} \left(\frac{\ell'!}{\ell!}\right)^{1/2} \left[ \mp \frac{\lambda}{2}(q_x - iq_y) \right]^{\ell-\ell'} L_{\ell'}^{\ell-\ell'} \left(\frac{\lambda^2}{2} q_{\perp}^2\right) & \text{se } \ell \gg \ell' \\ \frac{\ell'-\ell}{2} \left(\frac{\ell!}{\ell'!}\right)^{1/2} \left[ \pm \frac{\lambda}{2}(q_x + iq_y) \right]^{\ell'-\ell} L_{\ell}^{\ell'-\ell} \left(\frac{\lambda^2}{2} q_{\perp}^2\right) & \text{se } \ell' \gg \ell \end{cases} \quad (4-4)$$

$L_1^k(x)$  são as funções associadas de Laguerre.

Em particular para  $\ell = \ell' = 0$ , tem-se:

$$\langle 0\vec{k} | e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} | 0\vec{k} \rangle = \lambda 4\pi^2 \delta(q_x) \delta(q_z) e^{iq_y k_x \lambda^2} e^{-\frac{\lambda^2}{4} q_y^2} L_0 \left(\frac{\lambda^2}{2} q_y^2\right) \quad (4-5)$$

$$\lambda^2 = \frac{1}{m^* \omega_c} \quad ; \quad q_{\perp}^2 = q_x^2 + q_y^2$$

$L_x$  e  $L_z$  são dimensões do cristal.

Usando as equações (4-3), (4-4) e (4-5) em (4-2), os termos do tipo  $\langle \ell\vec{k} | e^{\pm i\vec{q}\cdot\vec{r}} | \ell'\vec{k}' \rangle \langle n\vec{k} | e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} | n\vec{k} \rangle$  se anulam. As delta de Kroenecker contidas na expressão (4-2) permitem que as somas sobre  $k'_x$  e  $k'_z$  sejam feitas imediatamente. A expressão para  $\Gamma(\omega)$  fica então com o seguinte aspecto:

$$\begin{aligned}
\Gamma(\omega) = & - \frac{\pi \lambda^2}{(L_x L_z)^2} \sum_m \sum_{\vec{q}} F^2(\vec{q}) e^{-\frac{\lambda^2}{2} q_{\perp}^2} \left[ |I_{2m}|^2 \delta\left(\omega - \right. \right. \\
& \left. \left. - m\omega_c - \frac{q_z^2}{2m} - \omega_{LO}\right) + |I_{0m}|^2 \delta\left(\omega + (m-2)\omega_c + \frac{q_z^2}{2m} + \right. \right. \\
& \left. \left. + \omega_{LO}\right) \right] \quad (4.6)
\end{aligned}$$

Por conservação de energia, representada pelas funções delta de Dirac da equação (4-6), vê-se que na soma sobre o índice  $m$  apenas algumas parcelas da série contribuem. De fato, no primeiro termo de (4-6) só contribuem as parcelas para as quais  $\omega - m\omega_c - \frac{q_z^2}{2m} - \omega_{LO} = 0$ , ou seja,  $\omega - m\omega_c - \omega_{LO} > 0$  donde se conclui que as únicas parcelas não nulas no primeiro termo de (4-6) são aquelas para as quais

$$m \leq \frac{\omega}{\omega_c} - \frac{\omega_{LO}}{\omega_c}$$

Um raciocínio semelhante leva ao resultado que no segundo termo de (4-6) as únicas parcelas não nulas da série são as que têm

$$m \leq 2 - \frac{\omega}{\omega_c} - \frac{\omega_{LO}}{\omega_c}$$

Para uma transferência de energia da ordem de  $\omega = 2\omega_c$  obtém-se que no segundo termo  $m < -\frac{\omega_{LO}}{\omega_c}$ , ou seja, o segundo termo de (4-6) não contribue em nada nesta região do espectro e po de ser totalmente abandonado.

A expressão (4-6) simplifica-se ainda consideravelmente quando o campo magnético,  $B_0$ , tem um valor entre 112 KGauss e 223 KGauss. Com isto o valor para a energia de ciclotron,  $\omega_c$ , estará entre 18,5 meV e 36,8 meV, isto é, o valor de  $\omega_{LO}/\omega_c$  estará entre 1 e 2. Neste caso o único valor de  $m$  que satisfaz à relação  $m < -\frac{\omega_{LO}}{\omega_c}$ , portanto satisfaz conservação da energia é o valor  $m = 0$ . A contribuição para o fator de amortecimento  $\Gamma(\omega)$ , será apenas da primeira parcela da série:

$$\Gamma(\omega) = -\frac{\pi\lambda^2}{(L_x L_z)^2} \sum_{\vec{q}} F^2(\vec{q}) e^{-\frac{\lambda^2}{2} q_{\perp}^2} |I_{20}|^2 \delta(\omega - \omega_{0k'_z} + \omega_{00} - \omega_{LO}) \quad (4-7)$$

No modelo de Fröhlich o termo  $F(\vec{q})$  é dado por:

$$F(\vec{q}) = i \frac{e}{|\vec{q}|} \sqrt{\frac{2\pi\omega_{LO}}{V_e} \left( \frac{1}{\epsilon_0} - \frac{1}{\epsilon_0} \right)^{1/2}} \quad (4-8a)$$

Em termos da constante de acoplamento  $\alpha$ ,  $F(\vec{q})$  é:

$$F(\vec{q}) = \frac{i}{|\vec{q}|} \sqrt{\frac{\alpha\pi}{V_e} \left( \frac{(2\omega_{LO})^3}{m^*} \right)^{1/4}} \quad (4-8b)$$

Sendo  $\alpha$  dado por{14}

$$\alpha = e^2 \sqrt{\frac{m^*}{2\omega_{LO}}} \left[ \frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_0} \right] \quad (4-9)$$

Como já foi mencionado no capítulo 2,  $\alpha$  é a constante de acoplamento de Fröhlich, que para o cristal de GaAs tem valor 0,06 e  $V_0$  é o volume do sistema.

Usando a eq. (4-8b) juntamente com o fato que  $L_0^k(x) = 1$  e transformando-se a soma em  $\vec{q}$  em uma integral obtém-se:

$$\Gamma(\omega) = \frac{\pi^2 \lambda^2}{(L_x L_z)^2} \frac{\alpha}{V_0} \sqrt{\frac{(2\omega_{LO})^3}{m^*}} \frac{V_0}{(2\pi)^3} \int d^3q \frac{e^{-\frac{\lambda^2}{2} q_\perp^2}}{q} \left( \frac{\lambda^2}{4} q_\perp^2 \right) \delta\left(\omega - \omega_{LO} - \frac{q_z^2}{2m^*}\right) \quad (4-10)$$

A integral (4-10) é mais facilmente realizada em coordenadas cilíndricas  $d^3q = q_\perp dq_\perp d\varphi dq_z$ . Fazendo uso da identidade

$$\delta\left(\omega - \omega_{LO} - \frac{q_z^2}{2m^*}\right) = \sum_i \frac{1}{i \left| \frac{\partial}{\partial q_z} \Omega(q_z) \right|} \delta(q_z - q_i) \quad (4-11)$$

Sendo  $\Omega(q_z) = \frac{q_z^2}{2m^*}$ .  $q_i$  são os valores de  $q_z$  para os quais  $\Omega(q_z) = \omega - \omega_{LO}$ . Com isto determina-se  $q_i$ :

$$q_i = \pm \sqrt{2m^* \omega_c \left( \frac{\omega}{\omega_c} - \frac{\omega_{LO}}{\omega_c} \right)^{1/2}} \quad (4-12)$$

e fazendo-se a transformação de variáveis:

$$x = \frac{\lambda^2 q_i^2}{2}, \quad \text{obtem-se}$$

$$\Gamma(\omega) = \frac{\alpha \lambda^2 \omega_{LO}}{2(L_x L_z)^2} \sqrt{\frac{2\omega_{LO}}{m^*}} \sum_i \frac{1}{|q_i|} \int_0^\infty dx \frac{x^2 e^{-x}}{x + \frac{\lambda^2}{2} q_i^2} \quad (4-13)$$

A expressão para  $\Gamma(\omega)$  finalmente será dada como:

$$\begin{aligned} \Gamma(\omega) = & \frac{\alpha \lambda^2 \omega_{LO}}{2(L_x L_z)^2 m^*} \sqrt{\frac{\omega_{LO}}{\omega_c} \left| \frac{\omega_c}{\omega - \omega_{LO}} \right|^{1/2}} \left\{ \left[ \frac{\omega}{\omega_c} - \right. \right. \\ & \left. \left. - \frac{\omega_{LO}}{\omega_c} \right]^2 \exp \left( \frac{\omega}{\omega_c} - \frac{\omega_{LO}}{\omega_c} \right) E_1 \left( \frac{\omega}{\omega_c} - \frac{\omega_{LO}}{\omega_c} \right) - \right. \\ & \left. - \left[ \frac{\omega}{\omega_c} - \frac{\omega_{LO}}{\omega_c} + 1 \right] \right\} \quad (4-14) \end{aligned}$$

$E_1(x)$  é a função integral exponencial definida como [16]:

$$E_1(x) = \int_x^\infty \frac{e^{-t}}{t} dt \quad |\arg x| < \pi \quad (4-15)$$

$E_1(x)$  também é dado pela expansão em série:

$$E_1(x) = -\gamma - \ln x - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n x^n}{n n!} \quad |\arg x| < \pi \quad (4-16)$$

Aqui  $\gamma$  é a constante de Euler,  $\gamma = 0,57721$

A expressão (4-13) pode ainda ser desenvolvida um pouco mais, e assim tem-se para  $\Gamma(\omega)$  a expressão:

$$\Gamma(\omega) \frac{\alpha \lambda^2 \omega_{L0}}{2(L_x L_z)^2 m^*} \sqrt{\frac{\omega_{L0}}{\omega_c}} \left( \left( \frac{\omega}{\omega_c} - \frac{\omega_{L0}}{\omega_c} \right)^{3/2} \exp \left( \frac{\omega}{\omega_c} - \frac{\omega_{L0}}{\omega_c} \right) E_1 \left( \frac{\omega}{\omega_c} - \frac{\omega_{L0}}{\omega_c} \right) - \left( \frac{\omega}{\omega_c} - \frac{\omega_{L0}}{\omega_c} \right)^{1/2} + \left( \frac{\omega}{\omega_c} - \frac{\omega_{L0}}{\omega_c} \right)^{-1/2} \right) \quad (4-17)$$

O fator de amortecimento  $\Gamma(\omega)$  é mostrado na figura 2 para três diferentes valores de campo magnético.

Para avaliar a seção de choque, usa-se o resultado da equação (3-49) com  $\Gamma(\omega)$  dado pela equação (4-17).

Na figura 3 mostra-se a seção de choque para os mesmos valores de campo magnético da figura 2.

O objetivo deste trabalho foi calcular a seção de choque de espalhamento por um sistema elétron-fonon LO na presença de um campo magnético estático. O fato do sistema estar imerso em campo magnético, produz mudanças nos seus níveis de energia e autofunções, de modo que os elementos de matriz são calculados entre estados de Landau.

Os fonons, apesar de participarem do processo apenas virtualmente, têm um papel muito importante uma vez que a interação entre os elétrons e os fonons longitudinais ópticos contribui com a anarmonicidade necessária a fim de que os elementos de matriz envolvidos no operador de espalhamento  $T$  sejam diferentes de zero. Dessa maneira obtém-se um resultado finito para a seção de choque.

No desenvolvimento do trabalho foi usado o método das funções de Green obtendo-se a seção de choque em termos de um fator de amortecimento.

Uma aplicação foi feita na primeira parte deste capítulo para um cristal de Arseneto de Gálio. Nessa aplicação considerou-se que os elétrons estariam localizados no estado fundamental, suposição perfeitamente razoável uma vez que os níveis de Landau são altamente degenerados e foi considerada uma baixa concentração de portadores e temperatura nas vizinhanças de 0 K. Os cálculos para o fator de amortecimento ficaram bastante simplificados quando o campo magnético foi considerado com valores entre 112 KGauss e 223 KGauss. Campos magnéticos com intensidades dessa ordem já são conseguidos

em laboratórios, justificando-se portanto, o uso desses valores.

As figuras 2 e 3 ilustram, respectivamente, o fator de amortecimento  $\Gamma(\omega)$  e a seção de choque diferencial de espalhamento para três valores diferentes do campo magnético. Observa-se na figura 3 que a intensidade da luz espalhada aumenta com o campo. O que se supõe deste resultado, é que experimentalmente, os efeitos deste tipo de espalhamento sejam mais bem observados para grandes valores do campo magnético. Na figura 3 a maior intensidade corresponde ao valor de  $\omega_{LO}/\omega_c = 1,2$  o que significa campos da ordem de 180 KGauss.

Os gráficos das figuras 2 e 3 foram feitos para valores de  $\gamma/\omega_c = 0,05$ . Para valores menores o resultado para a seção de choque mostrado na figura 3 não foi observado. Pequenos valores de  $\gamma$ , para cada  $\omega_c$ , significam grandes valores para o tempo de vida dos estados de Landau. Quanto maior for o tempo de vida, menos se observa o espalhamento, pois o estado passará a se comportar praticamente como um estado estacionário e a anarmonicidade necessária para que a seção de choque seja diferente de zero tenderá a desaparecer. Por outro lado, os valores de  $\gamma/\omega_c$  não podem ser muito grandes pois, para cada  $\omega_c$ ,  $\gamma$  muito grande significa tempos de vida muito pequenos. Assim sendo a perturbação provocada pela interação entre os elétrons e os fonons, será grande de modo que a hamiltoniana de Fröhlich não poderá mais ser considerada como fazendo parte da hamiltoniana não perturbada como foi feito neste trabalho.

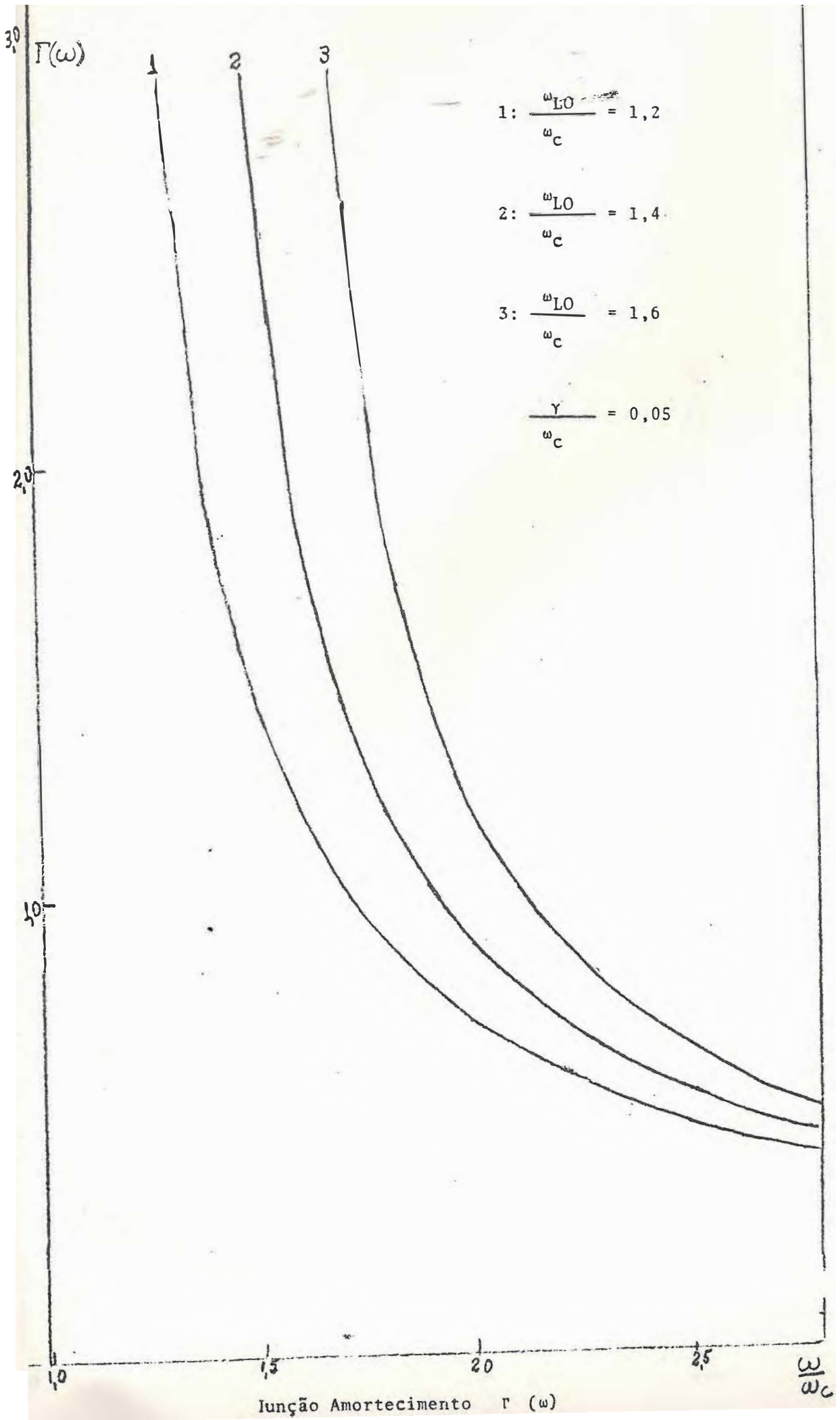


Fig. 2

$\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\omega_s}$

1:  $\frac{\omega_{LO}}{\omega_c} = 1,2$

$$1: \frac{\omega_{LO}}{\omega_c} = 1,2$$

$$2: \frac{\omega_{LO}}{\omega_c} = 1,4$$

$$3: \frac{\omega_{LO}}{\omega_c} = 1,6$$

$$\frac{\gamma}{\omega_c} = 0,05$$

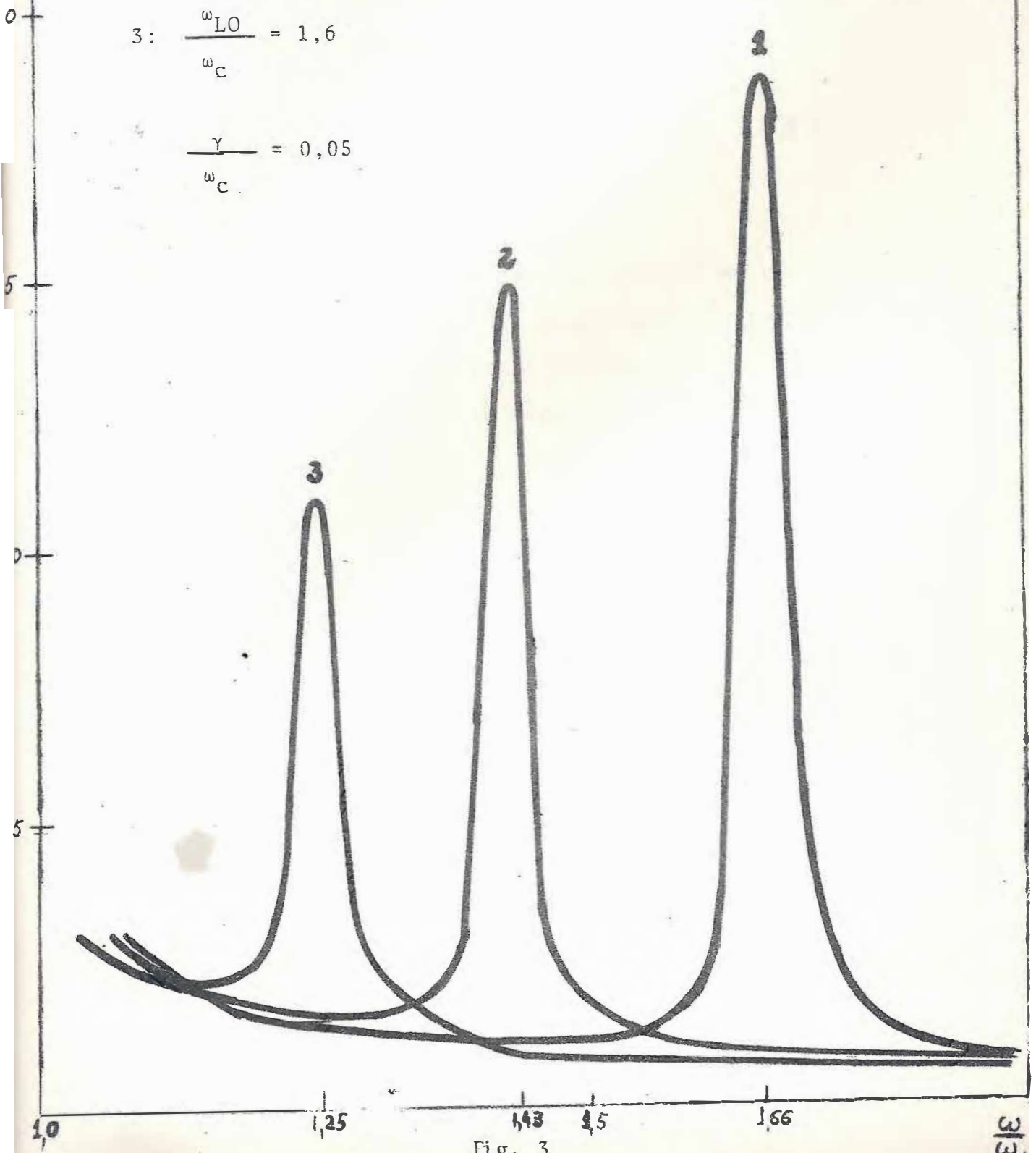


Fig. 3

Seção de Choque de Espalhamento

## APÊNDICE A

CÁLCULO DOS ELEMENTOS DE MATRIZ DE  $\vec{e} \cdot \vec{\pi}$ 

Este apêndice é dedicado ao cálculo detalhado dos elementos de matriz do tipo

$$\langle (n+2)\vec{k} | \vec{e}_S^* \cdot \vec{\pi} | (n+1)\vec{k} \rangle \text{ e } \langle (n+1)\vec{k} | \vec{e}_L \cdot \vec{\pi} | n\vec{k} \rangle,$$

que ocorrem na equação (2.9).

Como já foi mencionado, um elétron em um campo magnético tem os níveis de energia quantizados em níveis de Landau e o acoplamento dos elétrons e o campo magnético é representado pela introdução de um momento cinético  $\vec{\pi}$ :

$$\vec{\pi} = \vec{p}_O - \frac{e}{c} \vec{A}_O \quad (\text{A-1})$$

com  $\vec{p}_O = -i\hbar \nabla$  e  $\vec{A}_O$  o potencial vetor do campo magnético estático na direção z.

Define-se os operadores  $\pi_+$  e  $\pi_-$  como:

$$\pi_+ = \pi_x + i\pi_y \quad (\text{A-2a})$$

$$\pi_- = \pi_x - i\pi_y \quad (\text{A-2b})$$

Usando as equações (A-2) escreve-se  $\vec{e}_S^* \cdot \vec{\pi}$  e  $\vec{e}_L \cdot \vec{\pi}$

como:

$$\vec{e}_S^* \cdot \vec{\pi} = \frac{1}{2} \vec{e}_S^{(+)} \pi_+ + \frac{1}{2} \vec{e}_S^{(-)} \pi_- + e_S^{*(z)} \pi_z \quad (\text{A-3a})$$

$$\vec{e}_L \cdot \vec{\pi} = \frac{1}{2} e_L^{(-)} \pi_+ + \frac{1}{2} e_L^{(+)} \pi_- + e_L^{(z)} \pi_z \quad (\text{A-3b})$$

$$\text{onde} \quad \vec{e}^{(+)} = e^{(x)} + ie^{(y)} \quad (\text{A-4a})$$

$$\vec{e}^{(-)} = e^{(x)} - ie^{(y)} \quad (\text{A-4b})$$

Usando as equações (A-1) e (A-2) pode-se desenvolver os operadores  $\pi_+$  e  $\pi_-$  dentro do calibre de Landau, isto é:

$$\pi_+ = p_x - m^* \omega_c y + ip_y \quad (\text{A-5a})$$

$$\pi_- = p_x - m^* \omega_c y - ip_y \quad (\text{A-5b})$$

A equação de Schrödinger para o elétron em um campo magnético é formalmente idêntico à de um oscilador harmônico linear com frequência  $\omega_c = eB_0/m^*c$  sobre o ponto  $y_0 = cp_x/eB_0$ . As equações (A-5) podem ser escritas como:

$$\pi_+ = -m^* \omega_c (y - y_0) + ip_y \quad (\text{A-6a})$$

$$\pi_- = -m^* \omega_c (y - y_0) - ip_y \quad (\text{A-6b})$$

Introduzindo uma mudança de variáveis:

$$\xi = \sqrt{m^* \omega_c} (y - y_0) \quad \text{e} \quad p_y = \sqrt{m^* \omega_c} p_\xi,$$

obtem-se:

$$\pi_+ = - \sqrt{2m^*\omega_c} \hat{\alpha}^\dagger \quad (\text{A-7a})$$

$$\pi_- = - \sqrt{2m^*\omega_c} \hat{\alpha} \quad (\text{A-7b})$$

Sendo  $\hat{\alpha}^\dagger$  e  $\hat{\alpha}$  dados por:

$$\hat{\alpha} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \xi + i \frac{\partial}{\partial \xi} \right), \quad \hat{\alpha}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \xi - i \frac{\partial}{\partial \xi} \right).$$

Os operadores  $\hat{\alpha}^\dagger$  e  $\hat{\alpha}$  são os operadores criação e aniquilação de excitações ciclotrônicas semelhantes aos operadores criação e aniquilação do oscilador harmônico <sup>[10]</sup>. Os operadores  $\pi_+$  e  $\pi_-$  obedecem então às equações:

$$\pi_+ |n\rangle = \sqrt{2m^*\omega_c (n+1)} |n+1\rangle \quad (\text{A-8a})$$

$$\pi_- |n\rangle = \sqrt{2m^*\omega_c n} |n-1\rangle \quad (\text{A-8b})$$

Usando as equações (A-3) e (A-8) nos elementos de matriz, os termos do tipo:

$$\langle (n+2)\vec{k} | e_S^{(-)} \pi_- | (n+1)\vec{k} \rangle, \quad \langle (n+1)\vec{k} | e_S^{*(z)} \pi_z | n\vec{k} \rangle,$$

$$\langle (n+2)\vec{k} | e_S^{(-)} \pi_- | (n+1)\vec{k} \rangle \text{ e } \langle (n+1)\vec{k} | e_L^{*(z)} \pi_z | n\vec{k} \rangle \text{ são}$$

nulos. Então tem-se apenas:

$$\langle (n + 2)\vec{k} | \vec{e}_S^* \cdot \vec{\pi} | (n + 1)\vec{k} \rangle = -e_S^{(+)} \left[ \frac{(n + 2)m^* \omega_C}{2} \right]^{1/2} \quad (\text{A-9a})$$

$$\langle (n + 1)\vec{k} | \vec{e}_L \cdot \vec{\pi} | n\vec{k} \rangle = -e_L^{(-)} \left[ \frac{(n + 1)m^* \omega_C}{2} \right]^{1/2} \quad (\text{A-9b})$$

## APÊNDICE B

## CÁLCULO DO OPERADOR DE ESPALHAMENTO T

A expressão para o operador de espalhamento T é obtida neste apêndice com maiores detalhes.

Um feixe de ftons no estado  $|\omega_L k_L\rangle \equiv |L\rangle$  incide sobre um sistema de N eletrons no estado  $|n k_x k_z\rangle \equiv |n\vec{k}\rangle$  causando uma transição para o estado  $|m \vec{k}'\rangle$  enquanto a luz espalhada no estado  $|\omega_s k_s\rangle \equiv |s\rangle$ . A probabilidade de transição de que isto ocorra é:

$$W_{i \rightarrow f} = |\langle f | s | i \rangle|^2 \quad (\text{B-1})$$

sendo s a matriz de espalhamento e os estados  $|i\rangle$  e  $|f\rangle$  dados por:

$$|i\rangle \equiv |n\vec{k}\rangle |\omega_L \vec{k}_L\rangle \quad (\text{B-2a})$$

$$|f\rangle \equiv |m\vec{k}'\rangle |\omega_s \vec{k}_s\rangle \quad (\text{B-2b})$$

Como já foi mencionado no capítulo 2, os termos do minantes que contribuem para os dois diagramas de Feynman da fig. 1, são provenientes do elemento de matriz de 2ª ordem:

$$\langle f | s_2 | i \rangle = -i^2 \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \int_{-\infty}^{t_1} dt_2 \langle f | H_{ER}(t_1) H_{ER}(t_2) | i \rangle \quad (\text{B-3})$$

Para um sistema de  $N$  eletrons, o operador  $H_{ER}(t)$  é:

$$H_{ER}(t) = \frac{e}{m^* c} \sum_{\substack{m, n \\ \vec{k}', \vec{k}}} \langle m\vec{k}' | \vec{A} \cdot \vec{\pi} | n\vec{k} \rangle c_{m\vec{k}'_z}^\dagger(t) c_{n\vec{k}_z}(t) \quad (B-4)$$

$\vec{A} \cdot \vec{\pi}$  pode ser escrito em termos dos operadores  $\pi_+$  e  $\pi_-$ :

$$\vec{A} \cdot \vec{\pi} = \frac{1}{2} (A_x - iA_y) \pi_+ + \frac{1}{2} (A_x + iA_y) \pi_- + A_z \pi_z \quad (B-5)$$

$$\pi_+ = \pi_x + i\pi_y \quad (B-6a)$$

$$\pi_- = \pi_x - i\pi_y \quad (B-6b)$$

Como os operadores  $\pi_+$  e  $\pi_-$  operam como criadores e aniquiladores de excitações ciclotrônicas enquanto que os estados de Landau são auto estados de  $\pi_z$  e o operador  $A(\vec{r}, t)$  não atua sobre os eletrons, a expressão para  $H_{ER}(t)$  só será diferente de zero para aquelas em que  $m = n + 1$  ou  $n$  ou  $n - 1$

$$H_{ER}(t) = \frac{e}{m^* c} \sum_{\vec{k}} \left\{ \langle (n+1)\vec{k} | \vec{A} \cdot \vec{\pi} | n\vec{k} \rangle c_{(n+1)\vec{k}_z}^\dagger(t) c_{n\vec{k}_z}(t) \right. \\ + \langle (n-1)\vec{k} | \vec{A} \cdot \vec{\pi} | n\vec{k} \rangle c_{(n-1)\vec{k}_z}^\dagger(t) c_{n\vec{k}_z}(t) + \\ \left. + \langle n\vec{k} | \vec{A} \cdot \vec{\pi} | n\vec{k} \rangle c_{n\vec{k}_z}^\dagger(t) c_{n\vec{k}_z}(t) \right\} \quad (B-7)$$

A expressão (B-3) envolve o produto dos operadores  $H_{ER}(t_1) H_{ER}(t_2)$ :

$$\begin{aligned}
H_{ER}(t_1) H_{ER}(t_2) &= \left( \frac{e}{m^* c} \right)^2 \sum_{nn'} \sum_{\vec{k}\vec{k}'} \left[ \langle (n+1)\vec{k} | \vec{A} \cdot \vec{\Pi} | n\vec{k} \rangle c_{n+1k_2}^\dagger(t_1) c_{nk_2}(t_1) + \right. \\
&+ \langle (n-1)\vec{k} | \vec{A} \cdot \vec{\Pi} | n\vec{k} \rangle c_{n-1k_2}^\dagger(t_1) c_{nk_2}(t_1) + \langle n\vec{k} | \vec{A} \cdot \vec{\Pi} | n\vec{k} \rangle c_{nk_2}^\dagger(t_1) c_{nk_2}(t_1) \left. \right] + \\
&+ \left[ \langle (n+1)\vec{k} | \vec{A} \cdot \vec{\Pi} | n\vec{k} \rangle c_{n+1k_2}^\dagger(t_2) c_{nk_2}(t_2) + \langle (n-1)\vec{k} | \vec{A} \cdot \vec{\Pi} | n\vec{k} \rangle c_{n-1k_2}^\dagger(t_2) c_{nk_2}(t_2) + \right. \\
&+ \langle n\vec{k} | \vec{A} \cdot \vec{\Pi} | n\vec{k} \rangle c_{nk_2}^\dagger(t_2) c_{nk_2}(t_2) \left. \right] \quad (B-8)
\end{aligned}$$

No desenvolvimento da expressão acima muitos termos não contribuirão para o espalhamento Raman estudado neste trabalho. Os termos importantes que descrevem o espalhamento são:

$$\begin{aligned}
H_{ER}(t_1)H_{ER}(t_2) &= \left(\frac{e}{m^2c}\right)^2 \sum_{\vec{n}, \vec{k}} \left\{ \langle (n+2)\vec{k} | \vec{A} \cdot \vec{\Pi} | (n+1)\vec{k} \rangle \times \right. \\
&\times \langle (n+1)\vec{k} | \vec{A} \cdot \vec{\Pi} | n\vec{k} \rangle c_{n+2, k_z}^\dagger(t_1) c_{n, k_z}(t_2) \exp\left[i\omega_{n+1, k_z}(t_2-t_1)\right] + \\
&+ \langle (n-2)\vec{k} | \vec{A} \cdot \vec{\Pi} | (n-1)\vec{k} \rangle \langle (n-1)\vec{k} | \vec{A} \cdot \vec{\Pi} | n\vec{k} \rangle c_{n-2, k_z}^\dagger(t_1) c_{n, k_z}(t_2) \times \\
&\left. \times \exp\left[i\omega_{n-1, k_z}(t_2-t_1)\right] \right\} \quad (B-9)
\end{aligned}$$

O primeiro termo corresponde à componente Stokes do espalhamento e o segundo corresponde à componente anti-Stokes. No que segue o segundo termo é abandonado uma vez que a componente anti-Stokes é muito pequena nas temperaturas de interesse neste trabalho.

O potencial vetor  $\vec{A}$  da radiação eletromagnética, pode ser escrito em termos de operadores criação e aniquilação de ftons:

$$\vec{A}(\vec{r}, t) = \sum_{\vec{Q}_\mu} \sqrt{\frac{2\pi c^2}{v\omega_{\vec{Q}_\mu}}} e^{i\vec{Q}_\mu \cdot \vec{r}} \left( \vec{e}_{\mu, \vec{Q}_\mu} a_{\mu, \vec{Q}_\mu}(t) + \vec{e}_{\mu-\vec{Q}_\mu}^* a_{\mu-\vec{Q}_\mu}^\dagger(t) \right) \quad (B-10)$$

$\vec{e}_{\vec{Q}_\mu}$  é o vetor unitário de polarização dos ftons.

Seja 
$$e^{i\vec{Q}_\mu \cdot \vec{r}} \sqrt{\frac{2\pi c^2}{v\omega_{\vec{Q}_\mu}}} = F_{\mu\vec{Q}_\mu}$$

Usando a expressão (B-10) em (B-9) obtém-se:

$$H_{EK}(t_1)H_{EK}(t_2) = \left(\frac{e}{m^*c}\right)^2 \sum_{n\vec{k}} \sum_{\mu\vec{Q}_\mu} \sum_{\mu'\vec{Q}'_\mu} \left( F_{\mu\vec{Q}_\mu} F_{\mu'\vec{Q}'_\mu} \langle (n+2)\vec{k} | \vec{e}_{\mu\vec{Q}_\mu} \cdot \vec{\pi} | (n+1)\vec{k} \rangle \times \right.$$

$$\times \langle (n+1)\vec{k} | \vec{e}_{\mu'\vec{Q}'_\mu}^* \cdot \vec{\pi} | n\vec{k} \rangle a_{\mu\vec{Q}_\mu}(t_1) a_{\mu'\vec{Q}'_\mu}^\dagger(t_2) +$$

$$\left. + \langle (n+2)\vec{k} | \vec{e}_{\mu'\vec{Q}'_\mu}^* \cdot \vec{\pi} | (n+1)\vec{k} \rangle \langle (n+1)\vec{k} | \vec{e}_{\mu\vec{Q}_\mu} \cdot \vec{\pi} | n\vec{k} \rangle a_{\mu'\vec{Q}'_\mu}^\dagger(t_1) a_{\mu\vec{Q}_\mu}(t_2) \right) \times$$

$$\times c_{n+2k_z}^\dagger(t_1) c_{nk_z}(t_2) \exp\left[i\omega_{n+1k_z}(t_2-t_1)\right]$$

(B-11)

Os termos envolvendo a criação e aniquilação de 2 fons, não foram considerados no espalhamento em questão.

Substituindo-se (B-11) em (B-3) e efetuando as integrais envolvidas obtém-se:

$$\begin{aligned}
\langle f | S_2 | i \rangle = & -i \left( \frac{e}{m^* c} \right)^2 2\pi \sum_{\vec{n}k} \sum_{\vec{q}_\mu, \vec{q}'_\mu} F_{\mu, \vec{q}_\mu} F_{\mu, \vec{q}'_\mu} \langle f | \left\{ \langle (n+2)\vec{k} | \vec{e}_{\mu, \vec{q}_\mu} \cdot \vec{\Pi} | (n+1)\vec{k} \rangle \times \right. \\
& \times \langle (n+1)\vec{k} | \vec{e}_{\mu', \vec{q}'_\mu}^* \cdot \vec{\Pi} | n\vec{k} \rangle a_{\mu, \vec{q}_\mu}^\dagger a_{\mu', \vec{q}'_\mu}^\dagger e_{n+2k_z}^\dagger e_{nk_z} \delta \left( \omega_{n+2k_z} - \omega_{nk_z} - \right. \\
& \left. \left. - (\omega_{\mu, \vec{q}_\mu} - \omega_{\mu', \vec{q}'_\mu}) \right) \frac{1}{\omega_{nk_z} - \omega_{n+1k_z} - \omega_{\mu, \vec{q}_\mu}} + \langle (n+2)\vec{k} | \vec{e}_{\mu, \vec{q}_\mu} \cdot \vec{\Pi} | (n+1)\vec{k} \rangle \times \right. \\
& \times \langle (n+1)\vec{k} | \vec{e}_{\mu', \vec{q}'_\mu} \cdot \vec{\Pi} | n\vec{k} \rangle a_{\mu', \vec{q}'_\mu}^\dagger a_{\mu, \vec{q}_\mu} e_{n+2k_z}^\dagger e_{nk_z} \delta \left( \omega_{n+2k_z} - \omega_{nk_z} - \right. \\
& \left. \left. - (\omega_{\mu', \vec{q}'_\mu} - \omega_{\mu, \vec{q}_\mu}) \right) \frac{1}{\omega_{nk_z} - \omega_{n+1k_z} + \omega_{\mu', \vec{q}'_\mu}} \right\} | i \rangle
\end{aligned}$$

(B-12)

Quando o elétron sofre uma transição do estado  $|n\rangle$  para o estado  $|n+2\rangle$ , o fóton é espalhado do estado  $|L\rangle$  para o estado  $|s\rangle$ . Assim quando os operadores  $a_{\mu, \vec{q}_\mu}^\dagger$  e  $a_{\mu, \vec{q}_\mu}$  são aplicados ao estado inicial, um fóton é destruído no estado  $|L\rangle$  e criado no estado  $|s\rangle$ . Portanto a soma sobre  $\mu, \vec{q}_\mu$  e

$\mu' \vec{Q}_\mu$ , na primeira parcela desaparece sobrando apenas os valores de  $\vec{Q}_\mu = \vec{Q}_L$  e  $\vec{Q}'_{\mu'} = \vec{Q}_S$ . O mesmo se aplica à 2ª parcela, agora  $\vec{Q}'_{\mu'} = \vec{Q}_L$  e  $\vec{Q}_\mu = \vec{Q}_S$ . A equação (B-12) torna-se:

$$\begin{aligned} \langle f | S_2 | i \rangle = & -2\pi i \left( \frac{e}{m^* c} \right)^2 \sum_{\vec{n}\vec{k}} \langle f | \left\{ \left\langle \frac{\langle (n+2)\vec{k} | \vec{e}_L \cdot \vec{\Pi} | (n+1)\vec{k} \rangle \langle (n+1)\vec{k} | \vec{e}_S^* \cdot \vec{\Pi} | n\vec{k} \rangle}{\omega_{n\vec{k}_z} - \omega_{(n+1)\vec{k}_z} - \omega_S} + \right. \right. \\ & \left. \left. + \frac{\langle (n+2)\vec{k} | \vec{e}_S^* \cdot \vec{\Pi} | (n+1)\vec{k} \rangle \langle (n+1)\vec{k} | \vec{e}_L \cdot \vec{\Pi} | n\vec{k} \rangle}{\omega_{n\vec{k}_z} - \omega_{(n+1)\vec{k}_z} + \omega_L} \right\} A_S A_L c_{n+2\vec{k}_z}^\dagger c_{n\vec{k}_z} \right) | i \rangle \times \\ & \times \delta \left[ (\omega_{n+2\vec{k}_z} - \omega_{n\vec{k}_z}) - (\omega_L - \omega_S) \right] \end{aligned} \quad (B-13)$$

Da relação entre a matriz  $s$  e o operador  $T$  [10]:

$$\langle f | s | i \rangle = 2\pi i \delta(\omega_f - \omega_i) \langle f | T | i \rangle \quad (B-14)$$

Comparando (B-14) e (B-13) conclue-se que o operador  $T$  é dado por:

$$\begin{aligned}
 T(t) = & - \left( \frac{e}{m^* c} \right)^2 A_s A_L \sum_{\vec{n}\vec{k}} \left\{ \frac{\langle (n+2)\vec{k} | \vec{e}_s \cdot \vec{\pi} | (n+1)\vec{k} \rangle \langle (n+1)\vec{k} | \vec{e}_L \cdot \vec{\pi} | n\vec{k} \rangle}{\omega_{n+1k_z} - \omega_{nk_z} - \omega_L} + \right. \\
 & \left. + \frac{\langle (n+2)\vec{k} | \vec{e}_L \cdot \vec{\pi} | (n+1)\vec{k} \rangle \langle (n+1)\vec{k} | \vec{e}_s \cdot \vec{\pi} | n\vec{k} \rangle}{\omega_{n+1k_z} - \omega_{nk_z} + \omega_s} \right\} c_{n+2k_z}^\dagger(t) c_{nk_z}(t)
 \end{aligned}$$

(B-15)

## APÊNDICE C

CÁLCULO DOS ELEMENTOS DE MATRIZ  $\langle \ell \vec{k} | e^{\pm i \vec{q} \cdot \vec{r}} | \ell' \vec{k}' \rangle$ 

O objetivo deste apêndice é mostrar o cálculo dos elementos de matriz do tipo  $\langle \ell \vec{k} | e^{\pm i \vec{q} \cdot \vec{r}} | \ell' \vec{k}' \rangle$  que aparecem nas expressões para  $M(\omega)$  e  $\Gamma(\omega)$  equações (3-32) e (3-33). Como já foi mencionado anteriormente, os estados  $|\ell k\rangle$  são dados pelas funções de Landau:

$$|\ell \vec{k}\rangle = \frac{1}{\sqrt{L_x L_z}} e^{ik_x x} e^{ik_z z} \chi_\ell(y) = \psi_{\ell k}(\mathbf{r}) \quad (\text{C-1})$$

$$\text{onde } \chi_\ell(y) = C_\ell \exp\left[-\frac{(y - y_0)^2}{2\lambda^2}\right] H_\ell\left[\frac{y - y_0}{\lambda}\right] \quad (\text{C-2})$$

Aqui  $H_\ell$  são os polinômios de Hermite.

$$C_\ell = \left[ \frac{1}{\sqrt{\pi} 2^\ell \ell!} \right]^{1/2}$$

$y_0$  corresponde à coordenada clássica,  $y$ , do centro da órbita no plano  $x - y$  e é dado por:

$$y_0 = \lambda^2 k_x \quad (\text{C-3})$$

Sendo  $\lambda^2 = \frac{1}{m^* \omega_c}$ ,  $m^*$  é a massa efetiva do elétron e  $\omega_c$  é a frequência de ciclotron.

Denotando por  $I$  o elemento de matriz  $\langle \mathbf{k} | e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} | \mathbf{k}' \rangle$   
e usando a forma integral:

$$I = \frac{C_p C_{p'}}{L_x L_z} \delta_{k'_x, k_x - q_x} \delta_{k'_z, k_z - q_z} \int dy \exp \left\{ i q_y y - \left( \frac{y - y_0}{2\lambda} \right)^2 - \left( \frac{y - y'_0}{2\lambda} \right)^2 \right\} \times$$

$$\times H_\ell \left[ \frac{y - y_0}{\lambda} \right] H_{\ell'} \left[ \frac{y - y'_0}{\lambda} \right] \quad (C-4)$$

Denotando por  $A$  o expoente:

$$A = i q_y y - \left( \frac{y - y_0}{2\lambda} \right)^2 - \left( \frac{y - y'_0}{2\lambda} \right)^2, \quad (C-5)$$

obtém-se após uma manipulação algébrica:

$$A = - \frac{1}{\lambda^2} \left[ y - \frac{1}{2} (y_0 + y'_0 + i \lambda^2 q_y) \right]^2 -$$

$$- \frac{1}{\lambda^2} \left[ \frac{(y_0 - y'_0)^2}{4} + \frac{\lambda^4 q_y^2}{4} + i \frac{(y_0 + y'_0)}{2} \lambda^2 q_y \right] \quad (C-6)$$

Do resultado da integração em  $x$  tem-se que

$$k'_x = k_x - q_x$$

Desde que  $y'_0 = \lambda^2 k'_x$ , substituindo-se  $y'_0$  e  $k'_x$  na ex

pressão para  $\Delta$  chega-se ao resultado:

$$A = -\frac{\lambda^2}{4} q_{\perp}^2 + \frac{i\lambda^2}{2} (k_x + k'_x) q_y - \left( \frac{y - \lambda^2 k_x}{\lambda} + \frac{\lambda}{2} (q_x - iq_y) \right)^2 \quad (C-7)$$

onde  $q_{\perp}^2 = q_x^2 + q_y^2$

Substituindo o resultado (C-7) em (C-4), obtêm-se:

$$I = \frac{C_p C_{p'}}{L_x L_z} \delta_{k'_x, k_x - q_x} \delta_{k'_z, k_z - q_z} e^{-\frac{\lambda^2}{4} q_{\perp}^2} \exp \left\{ i \frac{\lambda^2}{2} (k_x + k'_x) q_y \right\} \times \\ \times \int dy \exp \left\{ - \left( \frac{y - \lambda^2 k_x}{\lambda} + \frac{\lambda}{2} (q_x - iq_y) \right)^2 \right\} \times \\ \times H_p \left( \frac{y - \lambda^2 k_x}{\lambda} \right) H_{p'} \left( \frac{y - \lambda^2 k'_x}{\lambda} \right) \quad (C-8)$$

O interesse agora é calcular a integral em  $y$ . Para isso será adotada a seguinte notação:

$$I_{\ell\ell'}(\vec{q}) = \int dy \exp \left\{ - \left[ \frac{y - \lambda^2 k_x}{\lambda} + \right. \right. \\ \left. \left. + \frac{\lambda}{2} (q_x - iq_y)^2 \right] \right\} H_\ell \left( \frac{y - \lambda^2 k_x}{\lambda} \right) H_{\ell'} \left( \frac{y - \lambda^2 k_x}{\lambda} \right) \quad (C-9)$$

Mudando a variável para  $y'$  tem-se:

$$I_{\ell\ell'}(\vec{q}) = \lambda e^{-\frac{\lambda^2}{4} (q_x - iq_y)^2} \int dy' \exp \left[ -y'^2 - \right. \\ \left. - \lambda y' (q_x - iq_y) \right] H_\ell(y') H_{\ell'}(y' + \lambda q_x) \quad (C-10)$$

Usando a fórmula de Rodrigues para os polinômios de Hermite:

$$H_\ell(y') = (-1)^\ell e^{y'^2} \frac{d^\ell}{dy'^\ell} e^{-y'^2} \quad (C-11)$$

A expressão (C-10) depois de algum desenvolvimento terá a seguinte forma:

$$I_{\ell\ell'}(\vec{q}) = \lambda (-1)^{\ell+\ell'} e^{\frac{\lambda^2}{2} q_x^2} \int dy' \left[ \exp -y'^2 + \right. \\ \left. + \frac{\lambda}{2} (q_x + iq_y)^2 \right] \frac{d^\ell}{dy'^\ell} e^{-y'^2} \frac{d^{\ell'}}{dy'^{\ell'}} e^{-(y'+\lambda q_x)^2} \quad (C-12)$$

Efetuada uma mudança de variáveis:  $y' + \frac{\lambda}{2} (q_x + iq_y) = u$  obtém-se:

$$I_{\ell\ell'}(\vec{q}) = (-1)^{\ell+\ell'} \lambda e^{\frac{\lambda^2}{2} q_1^2} \int du e^{\frac{u^2}{\ell}} e^{-\frac{(u-\eta)^2}{\ell'}} e^{-\frac{(u+\eta')^2}{\ell'}} \quad (C-13)$$

onde:  $\eta = \frac{\lambda}{2} (q_x + iq_y)$  (C-14)

$$\eta' = \frac{\lambda}{2} (q_x - iq_y) \quad (C-15)$$

Note-se agora que qualquer função de  $y' = u - \eta$ , satisfaz às seguintes relações:

$$\frac{df}{dy'} = \frac{df}{du} \frac{\partial u}{\partial y'} = \frac{df}{du} \quad (C-16)$$

$$\frac{df}{dy'} = \frac{df}{d\eta} \frac{\partial \eta}{\partial y'} = - \frac{df}{d\eta} \quad (C-17)$$

Com estas relações a equação (C-13) pode ser escrita assim:

$$I_{\ell\ell'}(\vec{q}) = (-1)^{\ell+\ell'} \lambda e^{\frac{\lambda^2}{2} q_1^2} \frac{d^\ell}{d\eta^\ell} \frac{d^{\ell'}}{d\eta'^{\ell'}} \int du e^{u^2 - (u-\eta)^2 - (u+\eta')^2} \quad (C-18)$$

Com algum desenvolvimento algébrico, chega-se à:

$$I_{\ell\ell'}(\vec{q}) = (-1)^{\ell+\ell'} \lambda e^{\frac{\lambda^2}{2} q_{\perp}^2} \frac{d^{\ell}}{d\eta^{\ell}} \frac{d^{\ell'}}{d\eta'^{\ell'}} e^{(\eta-\eta')^2 - (\eta^2 + \eta'^2)} \times$$

$$\times \int_{-\infty}^{\infty} e^{-[u - (\eta - \eta')]^2} du \quad (C-1)$$

A integral em  $u$  é tabelada e o resultado para  $I_{\ell\ell'}(\vec{q})$  é:

$$I_{\ell\ell'}(\vec{q}) = (-1)^{\ell+\ell'} \lambda \sqrt{\pi} e^{\frac{\lambda^2}{2} q_{\perp}^2} \frac{d^{\ell}}{d\eta^{\ell}} \frac{d^{\ell'}}{d\eta'^{\ell'}} e^{-2\eta\eta'} \quad (C-20)$$

Considerando  $\ell > \ell'$ , deriva-se  $\ell$  vezes em relação a  $\eta$  e introduzindo uma nova variável:  $x = 2\eta\eta'$ , tem-se:

$$I_{\ell\ell'}(\vec{q}) = (-2)^{\ell'} \lambda \sqrt{\pi} e^{\frac{\lambda^2}{2} q_{\perp}^2} \eta^{\ell'-\ell} \frac{d^{\ell'}}{dx^{\ell'}} (x^{\ell} e^{-x}) \quad (C-21)$$

Usando a fórmula de Rodrigues para os polinômios associados de Laguerre:

$$L_{\ell'}^{l-\ell'}(x) = \frac{\ell!}{\ell'!} \frac{e^x}{x^{\ell-\ell'}} \frac{d^{\ell'}}{dx^{\ell'}} x^{\ell} e^{-x} \quad (C-22)$$

e as expressões para  $x$ ,  $\eta$  e  $\eta'$  obtêm-se finalmente:

$$I_{\ell\ell'} = (-1)^{\ell'} 2^{\ell} \ell'! \lambda \sqrt{\pi} \left[ \frac{\lambda}{2} (q_x - i q_y) \right]^{\ell-\ell'} L_{\ell'}^{\ell-\ell'} \left( \frac{\lambda^2}{2} q_{\perp}^2 \right), \quad \ell > \ell' \quad (\text{C-23})$$

Com o resultado (C-23) a equação (C-4) tem a seguinte forma:

$$\begin{aligned} \langle \ell \vec{k} | e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} | \ell' \vec{k}' \rangle &= \frac{(-1)^{\ell'}}{L_x L_z} 2^{\frac{\ell-\ell'}{2}} \left( \frac{\ell'!}{\ell!} \right)^{1/2} \lambda \delta_{k_x', k_x} \delta_{k_z', k_z} q_x e^{-\frac{\lambda^2}{4} q_{\perp}^2} \times \\ &\times \left\{ \frac{\lambda}{2} \begin{pmatrix} q_x - i q_y \\ q_x + i q_y \end{pmatrix} \right\}^{\ell-\ell'} e^{i \frac{\lambda^2}{2} (k_x + k_x') q_y} L_{\ell'}^{\ell-\ell'} \left( \frac{\lambda^2}{2} q_{\perp}^2 \right) \quad \text{se } \ell > \ell' \end{aligned} \quad (\text{C-24})$$

Do mesmo modo obtém-se um resultado semelhante para  $\langle \ell \vec{k} | e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}} | \ell' \vec{k}' \rangle$ . Se  $\ell' > \ell$ , obtém-se um resultado idêntico a (C-24) para o elemento de matriz. Pode-se então escrever o resultado:

$$\langle \ell \vec{k} | e^{\pm i\vec{q} \cdot \vec{r}} | \ell' \vec{k}' \rangle = \frac{\lambda}{L_x L_z} \delta_{k_x', k_x} \delta_{k_z', k_z} e^{\pm i (k_x + k_x') q_y} e^{-\frac{\lambda^2}{4} q_{\perp}^2} I_{\ell\ell'} \quad (\text{C-25})$$

onde  $I_{\ell\ell'}$  agora é dado por:

$$I_{\ell\ell'} = \begin{cases} 2^{\frac{\ell-\ell'}{2}} \left( \frac{\ell'!}{\ell!} \right)^{1/2} \left( \mp \frac{\lambda}{2} (q_x - iq_y) \right)^{\ell-\ell'} L_{\ell'}^{\ell-\ell'} \left( \frac{\lambda^2}{2} q_{\pm}^2 \right) & \text{se } \ell > \ell' \\ 2^{\frac{\ell'-\ell}{2}} \left( \frac{\ell!}{\ell'!} \right)^{1/2} \left( \pm \frac{\lambda}{2} (q_x + iq_y) \right)^{\ell'-\ell} L_{\ell}^{\ell'-\ell} \left( \frac{\lambda^2}{2} q_{\pm}^2 \right) & \text{se } \ell' > \ell \end{cases}$$

(C-26)

## R E F E R Ê N C I A S

1. M.H.Johnson e B.A. Lippmann, Phys. Rev 76, 828, (1949).
2. L.D.Landau e E.M. Lifshitz, Quantum Mechanics-Non-Relativistic Theory - Vol. 3 - Addison-wesley).
3. P.A.Wolff, Phys. Rev. Letters 16, 225 (1966).
4. P.A.Wolff, Phys. Rev. 171, 436 (1968).
5. Y.Yafet, Phys. Rev. 152, 858 (1966).
6. C.K.N.Patel e R.E.Slusher, Phys. Rev. 167, 413, (1968).
7. P.G.Harper, Phys. Rev. 178, 1229, (1969).
8. D.N.Zubarev, Sov. Phys. Uspekhi, 3, 320 (1960).
9. H.Fröhlich, Adv. in Phys. 3, 325 (1954).
10. Ver por exemplo A.S.Davydov, Quantum Mechanics(Addison-Wesley).
11. N.N.Bogolyubov e S.V.Tyablikov - Sov. Phys.Doklady, 4, 589 (1959).
12. C.Hilsum-Some Key Features of III-V Compounds: Semiconductors and Semimetals, R.K. Willardson e Albert C. Beer (editores) - Vol. 1, pág. 9 (Academic Press).
13. R.Luzzi e L.C.M.Miranda - Physics Reports 43,423(1978).
14. R.N.Hall, J.H.Racette e H.Ehreinreich,Phys.Rev.Letters, 4, 456 (1960).

15. M.Hass e R.W.Herz, J.Phys. Chem. Solids, 19, 21

16. Milton Abramowitz e Irene A.Stegun, Handbook of Mathematical Functions, pág. 227 (Dover Publications).