

28

ESPALHAMENTO RAMAN RESSONANTE DE FONONS

EM CAMPO MAGNÉTICO

Tese de Doutorado
apresentada ao Insti-
tuto de Física "Gleb
Wataghin" da Univer-
sidade Estadual de
Campinas.

SÃO PAULO

1975

Ao

Frank e

ã Carla, Claudia e Laura

com muito amor e carinho...

Meus agradecimentos a

Prof.Dr. R. Luzzi, orientador da tese, com quem foi um prazer trabalhar.

Dr. J. Nodvik e Dr. J. Tiommo, pela participação na minha formação profissional.

Dr. Marcelo O.C. Gomes, amigo de longa data, pela boa vontade demonstrada sempre que recorria à sua opinião e crítica.

Instituto de Física da Universidade de São Paulo e colegas do Departamento de Física dos Materiais e Mecânica, pelo acolhimento.

Dr. Frank P. Missell, que me deu apoio e me manteve feliz, mesmo nas horas mais difíceis.

Regina K. Obata, pelo precioso auxílio na parte de datilografia e estética desta tese.

Enfim, a todos que me ajudaram, direta ou indiretamente, o meu muito obrigado.

	pág.
RESUMO	1
I - INTRODUÇÃO	2
II - CÁLCULO DA SECÇÃO DE ESPALHAMENTO	6
II.1 - Discussão da Hamiltoniana	6
II.2 - Cálculo da Matriz $\hat{S}$	7
II.3 - Eficiência Raman, Coeficiente de Extinção e Secção de Espalhamento Raman	19
III - INTRODUÇÃO DE VIDA MÉDIA	24
III.1 - Estados Quase-Estacionários	24
III.2 - Propagador de Elétrons	25
III.3 - Inclusão de Vida Média na Secção de Espalha- mento	27
III.4 - Secção de Espalhamento em Função da Densida- de Espectral e Propagador de Fonons	33
IV - CÁLCULO DA "FORMA DE LINHA"	38
IV.1 - Função de Green a Tempo Duplo Dependente da Temperatura	38
IV.2 - Cálculo da Função de Green a Tempo Duplo	40
IV.3 - Obtenção da "Forma de Linha"	51
IV.4 - Cálculo do Amortecimento: $\gamma_q(\omega)$	55
IV.5 - Cálculo do Amortecimento - Parte de Renormali- zação de Frequência	64
V - CÁLCULO DA "INTENSIDADE"	68
VI - APLICAÇÃO PARA GaAs E DISCUSSÃO DOS RESULTADOS ...	73

VI.1 - Aplicação para GaAs	73
VI.2 - Comentários Finais	85
APÊNDICE 1 - Gás de Elétrons em Presença de Campo Magnético	89
APÊNDICE 2 - Cálculo da Função de Green $G^0(\underline{r}t, \underline{r}'t')$ para um Gás de Elétrons em Presença de Campo Magnético	95
APÊNDICE 3 - Eficiência Raman e Secção de Espalhamento Raman	98
APÊNDICE 4 - Cálculo da Intensidade Raman na Ausência de Amortecimento	101
REFERÊNCIAS	106

R_E_S_U_M_O

Neste trabalho o espalhamento Raman por fonons óticos longitudinais em presença de campo magnético é considerado. Estudamos um material semiconductor tipo (n), para campos magnéticos tais que a frequência do fonon ótico longitudinal (ω_0) esteja na vizinhança de um múltiplo inteiro da frequência ciclotrônica dos elétrons. Para isso desenvolvemos um tratamento teórico onde, através de um formalismo de matriz S , chegamos a uma generalização do método de van Hove para o caso de estados quase-estacionários. Isso nos permite relacionar a secção de espalhamento com a função de Green a tempo duplo e portanto usar o esquema discutido no já clássico artigo de Zubarev. Assim, é feito um cálculo da eficiência Raman, com inclusão de vida média para fonons e elétrons devida em parte, à forte interação elétron-fonon nessas condições.

Completamos o trabalho com um estudo detalhado da forma de linha e intensidade Raman como função do campo magnético nessa região. Efeitos interessantes são discutidos e uma aplicação ao caso específico do GaAs é feita. Não são incluídos efeitos de temperatura.

I - INTRODUÇÃO

É nosso objetivo neste trabalho estudar o espalhamento Raman de luz por fonons LO, em presença de campo magnético constante. Especificamente estamos interessados em entender como a interação eletrôn-fonon tipo Fröhlich, afeta a forma da linha e a intensidade Raman nessas condições. Ao atacar este problema, vamos tocar um campo que tem despertado grande interesse, a parte de introdução de amortecimento dependente da frequência e suas consequências para as características do espectro estudado. Para fonons-LO de frequência no infra-vermelho e momentum aproximadamente nulo, os efeitos da interação elétron-fonon são mais relevantes se a frequência do fonon (ω_0), for aproximadamente igual a um número inteiro de frequências ciclotrônicas (ω_c). Portanto, um estudo detalhado da variação da forma de linha e intensidade Raman, como função do campo magnético é feito visando regiões de campo tais que $\omega_0 \sim n\omega_c$.

Ao tratar espalhamento Raman de luz por fonons LO em presença de campos dessa ordem, devemos notar que, embora os elétrons não participem diretamente do processo de espalhamento é de se esperar que o espectro de luz espalhada seja fortemente influenciado pela presença dos elétrons, via interação eletrôn-fonon. Da mesma forma, o espectro de espalhamento Raman direto de luz por elétrons em níveis de Landau, para $n\omega_c \sim \omega_0$ deve refletir a interação com fonons na rede.⁽¹⁾ Um ponto de vista, é o de que nessa região não temos mais um estado puro de fonons e sim estados mistos fônons-níveis de Landau, o que se reflete no espectro espalhado. Tratar os estados como estados puros e incluir a interação entre eles através de um amortecimento dependente da frequência, é a forma alternativa de encarar o problema que adotaremos em nosso trabalho. A grande simplificação

introduzida por tratarmos os estados como independentes tem um preço a ser pago. Os amortecimentos são funções extremamente complicadas e cálculos explícitos, no caso mais geral, são excessivamente trabalhosos. Nesse estudo desprezamos efeitos de temperatura em favor da obtenção de formas explícitas que nos levam a um melhor entendimento. Essa limitação não é séria, uma vez que em linhas gerais os resultados obtidos devem ser aplicáveis a baixas temperaturas.

Como vamos considerar espalhamento Raman em semi-condutores tipo n, faremos um rápido resumo dos processos que podem ser importantes na análise do espectro Raman nesses materiais, na região $\omega_0 \approx n\omega_c$.

A possibilidade de espalhamento Raman por eletrons de condução em presença de campo magnético foi primeiramente sugerida por Wolff.⁽²⁾ Ele mostrou que em semi-condutores tipo n, tendo banda de condução não parabólica, pequenos "gap" e massa efetiva, a secção de espalhamento Raman por eletrons em níveis de Landau é finita e o efeito pode ser detetado experimentalmente. Esse tipo de espalhamento Raman-magnético foi realmente observado em InAs e InSb,^(3,4) materiais de alta não parabolicidade da banda.

Além do processo direto de espalhamento de luz por eletrons em níveis de Landau, temos o processo normal de espalhamento de luz por fonons óticos, descrito por Loudon em seu clássico artigo⁽⁵⁾ e que não exige a presença de campo magnético. Esse processo, com as modificações cabíveis continua a existir em presença de campo magnético e é mediado pela formação de pares virtuais eletrons-buraco (processo interbanda). Loudon chama a atenção que em semi-condutores polares, os fonons óticos longitudinais interagem fortemente com os eletrons através de uma hamiltoniana tipo Fröhlich, que juntamente com o $A \cdot p$ da

hamiltoniana eletron-radiação, tem papel preponderante no espalhamento de luz por esse tipo de fonon. Finalmente, Genkin e Zil'berberg ⁽⁶⁾ notam que em presença de campo magnético, um ou outro tipo de processo pode existir para espalhamento de luz por fonons óticos longitudinais em semi-condutores tipo n. Esse processo é semelhante ao anterior, mas é mediado por transições virtuais intrabanda, ou seja, pela transição virtual entre dois níveis de Landau na mesma banda. Essas transições podem ser ditas por qualquer dos dois termos da hamiltoniana de radiação (seja do tipo $\underline{A}^2$ ou o do tipo $\underline{A} \cdot \underline{p}$) sendo que a maior importância de um ou outro termo é estabelecida pela ordem de grandeza da frequência de ciclotron (ω_c). O processo que envolve o termo $\underline{A} \cdot \underline{p}$ intra-banda só é preponderante se ω_c é da ordem da frequência do "laser" e não é considerado por nós. O que envolve o termo $\underline{A}^2$ é importante se $n\omega_c \approx \omega_0$ e é o que nos interessa mais de perto.

Estudaremos dois aspectos principais do espalhamento, isto é: a "intensidade" e a "forma de linha" Raman. A "forma de linha" é fortemente afetada pela interação eletron-fonon e é consequência da inclusão da vida média nos estados de fonon. Ela corresponde, no caso estritamente estacionário, à delta de conservação de energia. Desde que tenhamos espalhamento por fonons LO a "forma da linha" independe do processo de espalhamento, mas deve depender da geometria, ou seja, do particular fonon espalhado. Para o cálculo da intensidade devemos considerar quais os processos que contribuem para o espalhamento. É a intensidade que determina entre eles, qual o dominante. Estudamos em detalhe, em nosso trabalho, o processo que envolve o termo $\underline{A}^2$ intrabanda, sugerido por Genkin. Por ser ele ressonante para $\omega_0 \approx n\omega_c$ é o que apresenta características mais interessantes, sendo a intensidade Raman por ele determinada função

do campo magnético nessa região de campos.

Uma vez definido o problema que vamos tratar, resta saber em que condições o espectro Raman tem como contribuição dominante na região $\omega_0 \approx n\omega_c$, o processo calculado por nós. Para se estudar a interação elétron-fonon LO, tipo Fröhlich, a escolha natural é um semicondutor polar, onde em muitos casos essa interação é dominante. Como nesses materiais o espalhamento direto por níveis de Landau pode ser importante, devemos escolher um material com "gap" grande de forma a evitar efeitos de não parabolicidade da banda e assim eliminar do espectro processos do tipo descrito por Wolff. Devemos também considerar como o processo descrito por Loudon, envolvendo o termo $\underline{A} \cdot \underline{p}$ (inter-banda) contribui na região de interesse. Embora esse processo seja de ordem superior (envolvendo um maior número de interações), não é claro que seja de menor importância por vários motivos. Em primeiro lugar devemos observar que os diferentes termos da hamiltoniana de interação contribuem com diferentes intensidades. Outro ponto importante a notar é que na banda de condução o número de elétrons existentes e que contribuem para o processo intrabanda é várias ordens de grandeza menor que os que participam no processo interbanda envolvendo a banda de valência.

Escolhemos um material, GaAs, que satisfaz nossos requisitos e fizemos um cálculo de ordem de grandeza baseado no modelo de duas bandas ⁽⁷⁾ para estimar a importância relativa do processo envolvendo o termo $\underline{A} \cdot \underline{p}$ (inter-banda). Nas condições impostas por nós em nossos cálculos, o processo tipo A^2 é fortemente dominante e portanto, nessas circunstâncias, nosso cálculo se aplica à análise do espectro Raman obtido.

II - CÁLCULO DA SECÇÃO DE ESPALHAMENTO

II.1 - Discussão da Hamiltoniana

Para tratar a interação de luz com o cristal considerado, em presença de campo magnético constante, vamos tomar uma hamiltoniana da forma $H = H_0 + H_I$. Aqui H_0 é a soma das hamiltonianas de campos livres de radiação, fonons e eletrons, estando estes últimos distribuídos em níveis de Landau devido a presença de campo magnético. H_I é a soma das hamiltonianas de interação a duas quase-partículas, no caso eletrón-fonon-LO e eletrón-radiação, uma vez que não temos acoplamento direto radiação-fonon-LO.

Trataremos explicitamente as duas interações acima, essenciais à própria existência do espalhamento, dando especial atenção à interação eletrón-fonon-LO, que na região de ressonância $\omega_0 \approx n\omega_c$, introduz interessante dependência em frequência, na vida média das quase-partículas interagentes. O efeito de outras interações, devido a presença de impurezas, fonons acústicos, etc..., sobre o sistema considerado, será levado em conta atribuindo fenomenologicamente às quase-partículas uma vida média finita e independente da frequência.

Explicitamente temos para H_0 :

$$H_0 = H_R + H_e + H_f \quad (II.1.1)$$

onde

$$H_R = \sum_{\underline{k}, \lambda} \hbar \omega_{\underline{k}, \lambda} c_{\underline{k}, \lambda}^+ c_{\underline{k}, \lambda}$$

$$H_f = \sum_{\underline{q}} \hbar \omega_{\underline{q}} b_{\underline{q}}^+ b_{\underline{q}} \quad (II.1.2)$$

$$H_e = \sum_{\substack{n\sigma \\ k_x k_z}} E_n a_{n\sigma}^+ a_{n\sigma} \\ k_z k_x$$

Aqui $E_{n, k_z} = (n + 1/2) \hbar \omega_c + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*}$ é a energia de excitação do estado eletrônico e $\omega_c = \frac{eH_0}{m^*c}$, onde H_0 , o campo externo, é tomado na direção z . No mais, a notação é usual; $a_{n\sigma, k_x k_z}$ e $a_{n\sigma, k_x k_z}^+$ são operadores de aniquilação e criação de elétrons, obedecendo regras de comutação de Fermi, m^* é a massa efetiva dos elétrons, e e c são respectivamente a carga eletrônica e a velocidade da luz. $b_{\underline{q}}^+$, $b_{\underline{q}}$, $c_{\underline{k}_\lambda, \lambda}^+$ e $c_{\underline{k}_\lambda, \lambda}$ se referem a operadores de criação e aniquilação de fonons-LO e fons respectivamente, obedecendo regras de comutação de bosons.

Aqui nos referimos ao Apêndice 1, onde resolvemos a equação de Schrödinger para um gás de elétrons em presença de campo magnético constante e a parte H_e é obtida. A parte perturbativa

$$H_I = H_{ef} + H_{eR} \quad (\text{II.1.3})$$

está descrita por extenso no mesmo apêndice, que dedicamos essencialmente a uma rápida dedução de H_{ef} e H_{eR} .

II.2 - Cálculo da Matriz $\hat{S}$

Nesta secção partimos da hipótese de que os campos livres de radiação, fonons e elétrons em níveis de Landau, são um bom estado assintótico para o nosso problema e usamos o formalismo de matriz $\hat{S}$, em mais baixa ordem de perturbação para obter a probabilidade de transição, e a partir daí (ver A-3) achar a eficiência Raman para o espalhamento. Tomamos estados assintóticos não interagentes e a interação é suposta "ligada" adiabaticamente. Como a participação dos elétrons é virtual (não estamos interessados no processo que leva a uma mudança real nos

níveis eletrônicos), o sistema eletrônico está inicialmente em seu estado fundamental, permanecendo no estado fundamental ao fim do processo. A baixas temperaturas (0° K) não temos fonons inicialmente na rede. Com $n_{\underline{k}_{\ell}}$ fotons incidentes, o estado inicial fica:

$$|i\rangle = |\phi_0\rangle |n_{\underline{k}_{\ell}}\rangle_R |0\rangle_f$$

O processo de espalhamento Raman de luz por fonon tem como resultado um fonon na rede e um foton espalhado de frequência mais baixa. Em primeira aproximação podemos escrever o estado final como:

$$|f\rangle = |\phi_0\rangle |n_{\underline{k}_{\ell}} - 1, 1_{\underline{k}_R}\rangle_R |1_{\underline{q}_0}\rangle_f$$

Aqui $\underline{k}_{\ell}$ se refere à luz incidente (laser), $\underline{k}_R$ à radiação espalhada e $|\phi_0\rangle$ ao estado fundamental do sistema eletrônico.

A matriz $\hat{S}$ é definida como: (8a)

$$\begin{aligned} \hat{S} &\equiv \hat{P} \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \hat{H}_I(t) dt \right\} = \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{-i}{\hbar} \right)^n \frac{1}{n!} \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \dots \int_{-\infty}^{\infty} dt_n \hat{P} [\hat{H}_I(t_1) \dots \hat{H}_I(t_n)] \end{aligned} \quad (\text{II.2.1})$$

onde $\hat{P} [\dots]$ é um operador de ordenação temporal e os operadores $\hat{H}_I(t)$ são dados na representação de interação. A probabilidade de transição entre os estado inicial e final, depois de um tempo muito longo é dada por $W_{fi}(\infty)$ e pode ser ligada à eficiência Raman de forma simples, como veremos nas secções II.3 e A-3. A probabilidade de transição é dada por: (8)

$$W_{fi}(\infty) = | \langle f | \hat{S} | i \rangle |^2 \quad (\text{II.2.2})$$

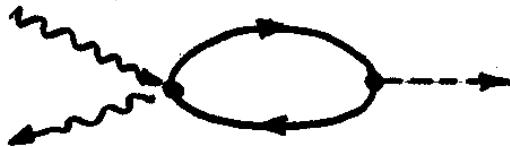
Devemos, portanto, calcular os elementos de matriz $\hat{S}$ entre os estados inicial e final, o que faremos em mais baixa ordem de perturbação.

Para os estados inicial e final especificados, os elementos de matriz correspondentes a $S^{(0)}$ (espalhamento elástico) e $S^{(1)}$ (onde só haveria contribuição se a hamiltoniana contivesse termo de interação direta fonon-radiação) são nulos. Calcularemos, portanto, $\langle f | \hat{S}^{(2)} | i \rangle$, como termo dominante.

Usando o termo $n = 2$ na expansão (II.2.1), temos:

$$\hat{S}^{(2)} = \left(\frac{-i}{\hbar} \right)^2 \frac{1}{2!} \int_{-\infty}^{\infty} dt \int_{-\infty}^{\infty} dt' \hat{P} [\hat{H}_I(t) \hat{H}_I(t')] \quad (\text{II.2.3})$$

Aqui $\hat{H}_I(t) = \hat{H}_{ef}(t) + \hat{H}_{eR}(t)$, mas dentre os termos do produto $\hat{H}_I(t) \hat{H}_I(t')$ só contribuem os que resultem na aniquilação de 1 foton incidente com a criação de 1 fonon e 1 foton espalhado, ou seja, termos com 2 vértices do tipo



ou equivalente, envolvendo o termo (tipo A^2) da hamiltoniana H_{eR} (descrito no Apêndice 1) em um dos vértices e H_{ef} no outro.

Portanto, a contribuição para $\langle f | \hat{S}^{(2)} | i \rangle$ vem do termo que envolve

$$\hat{P} [\hat{W}_2(t) \hat{H}_{ef}(t') + \hat{H}_{ef}(t) \hat{W}_2(t')] \quad (\text{II.2.4})$$

Onde (ver A-1) deixando implícito $v \rightarrow \infty$ temos:

$$\begin{aligned} \hat{W}_2(t) = \sum_{\substack{\mathbf{k}\mathbf{n} \\ \mathbf{k}'\mathbf{n}' \\ \mathbf{k}_\lambda \mathbf{k}_\mu}} A_{\lambda\mu} \int_{-\infty}^{\infty} d^3r \phi_{\mathbf{k}, \mathbf{n}}^*(\mathbf{r}) \{ c_{\mathbf{k}_\lambda}^+(t) e^{-i\mathbf{k}_\lambda \cdot \mathbf{r}} + c_{\mathbf{k}_\lambda}(t) e^{i\mathbf{k}_\lambda \cdot \mathbf{r}} \} \cdot \\ \cdot \{ c_{\mathbf{k}_\mu}^+(t) e^{-i\mathbf{k}_\mu \cdot \mathbf{r}} + c_{\mathbf{k}_\mu}(t) e^{i\mathbf{k}_\mu \cdot \mathbf{r}} \} \phi_{\mathbf{k}, \mathbf{n}}(\mathbf{r}) a_{\mathbf{k}, \mathbf{n}}^+(t) a_{\mathbf{k}, \mathbf{n}}(t) \end{aligned} \quad (II.2.5)$$

$$H_{ef}(t) = \sum_{\substack{\mathbf{k}\mathbf{n} \\ \mathbf{k}'\mathbf{n}' \\ \mathbf{q}}} V_q \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} d^3r \phi_{\mathbf{k}, \mathbf{n}}^*(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} \phi_{\mathbf{k}', \mathbf{n}'}(\mathbf{r}) \right\} \{ b_{\mathbf{q}}(t) + b_{\mathbf{q}}^+(t) \} a_{\mathbf{k}, \mathbf{n}}^+(t) a_{\mathbf{k}', \mathbf{n}'}(t) \quad (II.2.6)$$

Onde $\phi_{\mathbf{k}, \mathbf{n}}(\mathbf{r})$ é a solução da equação de Schrödinger para 1 elétron (A-1).

$$\phi_{\mathbf{k}, \mathbf{n}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{L_x L_y}} \left(\frac{1}{2^{n_\lambda} \lambda \sqrt{\pi} n!} \right)^{1/2} h_n \left(\frac{y}{\lambda} - \lambda k_x \right) e^{-1/2 \left(\frac{y}{\lambda} - \lambda k_x \right)^2} e^{i(k_x x + k_z z)} \quad (II.2.7)$$

Por conveniência repetimos aqui as convenções adotadas

$$V_q = i \frac{e}{q} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{v}} \omega_q^{1/2} \left(\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_0} \right)^{1/2}, \quad \lambda = \left(\frac{\hbar c}{e H_0} \right)^{1/2}$$

$$A_{\lambda\mu} = \frac{\pi \hbar e^2}{v m^* c} \frac{(\hat{e}_\lambda \cdot \hat{e}_\mu)}{\epsilon_\infty^{1/2} \sqrt{k_\lambda k_\mu}}, \quad L_x L_y L_z = v$$

$$c_{\mathbf{k}_\lambda}(t) = c_{\mathbf{k}_\lambda} e^{-i\omega_{\mathbf{k}_\lambda} t}, \quad b_{\mathbf{q}}(t) = b_{\mathbf{q}} e^{-i\omega_{\mathbf{q}} t} \quad e$$

$$a_{\mathbf{k}, \mathbf{n}}(t) = a_{\mathbf{k}, \mathbf{n}} e^{-i/\hbar E_{\mathbf{k}_z, \mathbf{n}} t} \quad (II.2.8)$$

Chamamos a atenção para nossa notação no caso dos elétrons onde $\underline{k} \rightarrow k_x, k_z, \sigma$ e n se refere ao número do nível de Landau e h_n são polinômios de Hermite de ordem n . No mais, a notação é usual, sendo v o volume considerado e $\hat{e}_\lambda$ o vetor unitário na direção de polarização da luz.

Introduzimos aqui os operadores de campo para elétrons que usaremos a seguir

$$\hat{\psi}_I(\underline{r}, t) = \sum_{\underline{k}n} \phi_{\underline{k}n}(\underline{r}) a_{\underline{k}n}(t) \quad (II.2.9)$$

$$\hat{\psi}_I^+(\underline{r}, t) = \sum_{\underline{k}n} \phi_{\underline{k}n}^*(\underline{r}) a_{\underline{k}n}^+(t)$$

Substituindo II.2.5 e II.2.6 em II.2.4 e conservando apenas os termos que resultarão não nulos entre os estados iniciais e finais, ficamos com um produto temporal da forma:

$$\begin{aligned} 2\hat{P} \left[\sum_{\substack{\underline{k}_\lambda \underline{k}_\mu \\ \underline{q}}} A_{\lambda\mu} V_q c_{\underline{k}_\lambda}^+(t) c_{\underline{k}_\mu}(t) b_q^+(t') \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} d^3r \hat{\psi}_I^+(\underline{r}, t) e^{i(\underline{k}_\mu - \underline{k}_\lambda) \cdot \underline{r}} \hat{\psi}_I(\underline{r}, t) \right\} \right. \\ \cdot \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} d^3r' \hat{\psi}_I^+(\underline{r}', t') e^{-i\underline{q} \cdot \underline{r}'} \hat{\psi}_I(\underline{r}', t') \right\} + \sum_{\substack{\underline{k}_\lambda \underline{k}_\mu \\ \underline{q}}} A_{\lambda\mu} V_q b_q^+(t) c_{\underline{k}_\lambda}^+(t') c_{\underline{k}_\mu}(t') \cdot \\ \cdot \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} d^3r' \hat{\psi}_I^+(\underline{r}', t') e^{i(\underline{k}_\mu - \underline{k}_\lambda) \cdot \underline{r}'} \hat{\psi}_I(\underline{r}', t') \right\} \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} d^3r \hat{\psi}_I^+(\underline{r}, t) e^{-i\underline{q} \cdot \underline{r}} \hat{\psi}_I(\underline{r}, t) \right\} \Big] \quad (II.2.10) \end{aligned}$$

o fator de 2 vem do fato de que temos em II.2.5 dois termos iguais criando um foton e destruindo outro (trocando $\mu \leftrightarrow \lambda$).

Por conveniência, uma vez que vamos usar o teorema de

Wick, (9a) queremos substituir o operador de ordenação temporal $\hat{P}$, por uma generalização do mesmo, o operador $\hat{T}$. Este último, além de ordenar no tempo, inclui uma mudança de sinal no caso de uma permutação ímpar de fermions. Eventualmente os operadores $\hat{P}$ e $\hat{T}$ podem incluir sinais diferentes para parcelas sobre as quais operam, mas em nosso caso, como temos sempre pares de operadores de fermions referentes ao mesmo tempo, podemos substituir $\hat{P}$ por $\hat{T}$ sem alterar a expressão. O produto temporal pode ser separado num produto $\hat{T}$ de bosons vezes um produto $\hat{T}$ de fermions. Usando

$$\hat{T} [c_{\underline{k}_{\lambda}}^+(t) c_{\underline{k}_{\mu}}(t) b_{\underline{q}}^+(t')] = c_{\underline{k}_{\lambda}}^+(t) c_{\underline{k}_{\mu}}(t) b_{\underline{q}}^+(t')$$

e usando II.2.10 como produto temporal na expressão para $\hat{S}^{(2)}$ obtemos:

$$\langle f | \hat{S}^{(2)} | i \rangle = 4 \langle f | \frac{1}{2\hbar^2} \int_{-\infty}^{\infty} d^3r dt \int_{-\infty}^{\infty} d^3r' dt' .$$

$$\cdot \sum_{\substack{\underline{k}_{\mu} \underline{k}_{\lambda} \\ \underline{q}}} A_{\lambda\mu} V_q c_{\underline{k}_{\lambda}}^+(t) c_{\underline{k}_{\mu}}(t) b_{\underline{q}}^+(t') e^{i(\underline{k}_{\mu}-\underline{k}_{\lambda}) \cdot \underline{r}} e^{-iq \cdot \underline{r}'} .$$

$$\cdot T [\hat{\psi}_I^+(\underline{r}, t) \hat{\psi}_I(\underline{r}, t) \hat{\psi}_I^+(\underline{r}', t') \hat{\psi}_I(\underline{r}', t')] | i \rangle$$

(II.2.11)

Um novo fator de 2 aparece pois o segundo termo em II.2.10 é equivalente ao primeiro, trocando $t \rightleftharpoons t'$.

Os elementos de matriz, entre $| i \rangle$ e $| f \rangle$ são se não nulos se um foton de momentum $\underline{k}_{\ell}$ for aniquilado criando um foton de momentum $\underline{k}_R$ e um fonon (q_0). Portanto

$\langle f | \hat{S}^{(2)} | i \rangle$ fica usando $| i \rangle$ e $| f \rangle$ definidos anteriormente:

$$\begin{aligned} \langle f | \hat{S}^{(2)} | i \rangle &= \frac{2 A_{R\ell} V_{q_0}}{\hbar^2} \int_{-\infty}^{\infty} d^3 r dt \int_{-\infty}^{\infty} d^3 r' dt' \cdot \\ &\cdot e^{-i(\omega_{k_\ell} - \omega_{k_R})t} e^{i\omega_{q_0}t'} \sqrt{n_{k_\ell}} e^{i(\underline{k}_\ell - \underline{k}_R) \cdot \underline{r}} e^{-i\underline{q}_0 \cdot \underline{r}'} \cdot \\ &\cdot \langle \phi_0 | T [\hat{\psi}_I^+(\underline{r}, t) \hat{\psi}_I(\underline{r}, t) \hat{\psi}_I^+(\underline{r}', t') \hat{\psi}_I(\underline{r}', t')] | \phi_0 \rangle \end{aligned}$$

(II.2.12)

Para calcular o produto temporal usamos o teorema de Wick e obtemos:

$$\begin{aligned} \langle \phi_0 | \hat{T} \{ \hat{\psi}_I^+(\underline{r}, t) \hat{\psi}_I(\underline{r}, t) \hat{\psi}_I^+(\underline{r}', t') \hat{\psi}_I(\underline{r}', t') \} | \phi_0 \rangle &= \\ &= -G^0(\underline{r}t, \underline{r}t') G^0(\underline{r}'t', \underline{r}'t'^+) + G^0(\underline{r}t, \underline{r}'t') G^0(\underline{r}'t', \underline{r}t) \end{aligned}$$

(II.2.13)

Aqui

$$G^0(\underline{r}t, \underline{r}'t') = -i \langle \phi_0 | \hat{T} [\hat{\psi}_I(\underline{r}, t) \hat{\psi}_I^+(\underline{r}', t')] | \phi_0 \rangle ,$$

é a função de Green ($T = 0^\circ K$) para um gás de elétrons livres em presença de campo magnético constante. Um cálculo para $G^0(\underline{r}t, \underline{r}'t')$ é feito em detalhe no Apêndice 2, e aqui nos limitamos a citar o resultado

$$\begin{aligned} G^0(\underline{r}t, \underline{r}'t') &= \sum_{\underline{k}n} \phi_{\underline{k}n}(\underline{r}) \phi_{\underline{k}n}^*(\underline{r}') \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega(t-t')} \cdot \\ &\cdot \left\{ \frac{\theta(|k_z| - k_{zF}^{(n)})}{\omega - \omega_{k_z n} + i\eta} + \frac{\theta(k_{zF}^{(n)} - |k_z|)}{\omega - \omega_{k_z n} - i\eta} \right\} \end{aligned}$$

(II.2.14)

Aqui

$$\omega_{k_z n} = E_{k_z n} / \hbar$$

$$k_{zF}^{(n)} = \left[\{ \epsilon_F - \hbar \omega_c (n+1/2) \} \frac{2m^*}{\hbar^2} \right]^{1/2}$$

e

$$\theta(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ 1 & x > 0 \end{cases}$$

onde ϵ_F é a energia de Fermi do gás.

O primeiro termo na expressão (II.2.13) é diferente de zero para $\omega_{q_0} = 0$, o que não é satisfeito aqui pois temos fonon ótico e assim só contribui o segundo termo

$$G^0(\underline{r}t, \underline{r}'t') G^0(\underline{r}'t', \underline{r}t)$$

Usando II.2.14, obtemos:

$$\begin{aligned} G^0(\underline{r}t, \underline{r}'t') G^0(\underline{r}'t', \underline{r}t) &= \sum_{\substack{\underline{k}\underline{k}' \\ \tilde{n}\tilde{n}'}} \phi_{\underline{k}}(\underline{r}) \phi_{\underline{k}}^*(\underline{r}') \phi_{\underline{k}'}(\underline{r}') \phi_{\underline{k}'}^*(\underline{r}) \\ &\cdot \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} e^{-i\omega(t-t')} e^{i\omega'(t-t')} \\ &\cdot \left\{ \frac{\theta(|k_z| - k_{zF}^{(n)})}{\omega - \omega_{k_z n} + i\eta} + \frac{\theta(k_{zF}^{(n)} - |k_z|)}{\omega - \omega_{k_z n} - i\eta} \right\} \\ &\cdot \left\{ \frac{\theta(|k'_z| - k_{zF}^{(n')})}{\omega' - \omega_{k'_z n'} + i\eta} + \frac{\theta(k_{zF}^{(n')} - |k'_z|)}{\omega' - \omega_{k'_z n'} - i\eta} \right\} \end{aligned} \quad (II.2.15)$$

Substituindo II.2.13 e II.2.15 em II.2.12, obte

mos:

$$\begin{aligned}
 \langle f | \hat{S}^{(2)} | i \rangle = & \sum_{\substack{\underline{k}, \underline{k}' \\ \underline{n}, \underline{n}'}} \frac{2A_{R\ell} V q_0 \sqrt{n_{k_\ell}}}{\pi^2} \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} d^3 r \phi_{\underline{k}}(\underline{r}) e^{i(\underline{k}_\ell - \underline{k}_R) \cdot \underline{r}} \phi_{\underline{k}'}^*(\underline{r}) \right\} \cdot \\
 & \cdot \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} d^3 r' \phi_{\underline{k}'}(\underline{r}') e^{-i q_0 \cdot \underline{r}'} \phi_{\underline{k}}^*(\underline{r}') \right\} \cdot \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} \cdot \\
 & \cdot \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-i(\omega_{k_\ell} - \omega_{k_R} + \omega - \omega')t} \right\} \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} dt' e^{i(\omega_{q_0} + \omega - \omega')t'} \right\} \cdot \\
 & \cdot \left\{ \frac{\theta(|k_z| - k_{zF}^{(n)}) \theta(|k'_z| - k_{zF}^{(n')})}{(\omega - \omega_{k_z} + i\eta)(\omega' - \omega_{k'_z} + i\eta)} + \frac{\theta(|k_z| - k_{zF}^{(n)}) \theta(k_{zF}^{(n')} - |k'_z|)}{(\omega - \omega_{k_z} + i\eta)(\omega' - \omega_{k'_z} - i\eta)} + \right. \\
 & \left. + \frac{\theta(k_{zF}^{(n)} - |k_z|) \theta(|k'_z| - k_{zF}^{(n')})}{(\omega - \omega_{k_z} - i\eta)(\omega' - \omega_{k'_z} + i\eta)} + \frac{\theta(k_{zF}^{(n)} - |k_z|) \theta(k_{zF}^{(n')} - |k'_z|)}{(\omega - \omega_{k_z} - i\eta)(\omega' - \omega_{k'_z} - i\eta)} \right\}
 \end{aligned}
 \tag{II.2.16}$$

Resolvendo a parte espacial usando as funções $\phi_{\underline{k}}(\underline{r})$ definidas em II.2.7, temos: ($\underline{k}_\ell - \underline{k}_R = \underline{Q}$)

$$\int_{-\infty}^{\infty} d^3 r \phi_{\underline{k}}(\underline{r}) e^{i \underline{Q} \cdot \underline{r}} \phi_{\underline{k}'}^*(\underline{r}) = \delta_{\underline{k}_z, \underline{k}_z + \underline{Q}_z} \delta_{\underline{k}_x, \underline{k}_x + \underline{Q}_x} I_{\underline{n}, \underline{n}'}^{Q \underline{k}_x \underline{k}_x}
 \tag{II.2.17}$$

onde

$$\begin{aligned}
 I_{\underline{n}, \underline{n}'}^{Q \underline{k}_x \underline{k}_x} &= e^{i Q_y \lambda^2 \left(\frac{\underline{k}_x + \underline{k}'_x}{2} \right)} I_{\underline{n}, \underline{n}'}^Q \\
 I_{\underline{n}, \underline{n}'}^Q &= 2^{\frac{\underline{n}' - \underline{n}}{2}} \frac{\underline{n}!}{\underline{n}'!} (-1)^{\underline{n}' - \underline{n}} \left(\frac{\lambda}{2} (Q_x + i Q_y) \right)^{\underline{n}' - \underline{n}} e^{-\frac{\lambda^2}{4} Q^2} L_{\underline{n}' - \underline{n}}^{\underline{n}' - \underline{n}} \left(\frac{\lambda^2}{2} Q_\perp^2 \right)
 \end{aligned}$$

$\underline{n}' > \underline{n}$

Aqui temos $Q_\perp^2 = Q_x^2 + Q_y^2$ e $L_{\underline{n}' - \underline{n}}^{\underline{n}' - \underline{n}} (\dots)$ são polinômios

mios de Laguerre. Efetuando as integrações com relação ao tempo, e substituindo a parte espacial pelo seu valor, a Eq. (II.2.16) resulta em:

$$\begin{aligned}
 \langle f | \hat{S}^{(2)} | i \rangle = & \frac{2A_{R\ell} V_{q_0} \sqrt{n} k_\ell}{\hbar^2} \sum_{\substack{\vec{k}, \vec{k}', \\ \vec{n}, \vec{n}'}} \delta_{\vec{k}', \vec{k}_z + Q_z} \delta_{\vec{k}', \vec{k}_x + Q_x} \delta_{\vec{k}', \vec{k}_z + q_{0z}} \delta_{\vec{k}', \vec{k}_x + q_{0x}} \\
 & \cdot e^{i\lambda^2 \left(\frac{k_x + k'_x}{2} \right) (Q_y - q_{0y})} I_{Q_\perp, \vec{n}, \vec{n}'} I_{q_{0\perp}, \vec{n}, \vec{n}'}^* \delta(\omega_{k_\ell} - \omega_{k_R} - \omega_{q_0}) \\
 & \cdot \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \left\{ \frac{\theta(|k_z| - k_{zF}^{(n)}) \theta(|k'_z| - k_{zF}^{(n')})}{(\omega - \omega_{k_z}^{(n)} + i\eta) (\omega + \omega_{q_0} - \omega_{k_z'}^{(n')} + i\eta)} + \right. \\
 & + \frac{\theta(|k_z| - k_{zF}^{(n)}) \theta(k_{zF}^{(n)} - |k'_z|)}{(\omega - \omega_{k_z}^{(n)} + i\eta) (\omega + \omega_{q_0} - \omega_{k_z'}^{(n')} - i\eta)} + \frac{\theta(k_{zF}^{(n)} - |k_z|) \theta(|k'_z| - k_{zF}^{(n')})}{(\omega - \omega_{k_z}^{(n)} - i\eta) (\omega + \omega_{q_0} - \omega_{k_z'}^{(n')} + i\eta)} + \\
 & \left. + \frac{\theta(k_{zF}^{(n)} - |k_z|) \theta(k_{zF}^{(n')} - |k'_z|)}{(\omega - \omega_{k_z}^{(n)} - i\eta) (\omega + \omega_{q_0} - \omega_{k_z'}^{(n')} - i\eta)} \right\} \quad (II.2.18)
 \end{aligned}$$

Integrando no plano complexo em ω vemos que o primeiro e o último termo dão contribuição nula pois não possuem resíduos em um dos semi-planos; obtemos, então, usando as funções δ para eliminar a soma em $\vec{k}'$

$$\begin{aligned}
 \langle f | \hat{S}^{(2)} | i \rangle = & \frac{4\pi i \sqrt{n} k_\ell A_{R\ell} V_{q_0}}{\hbar^2} \delta_{Q_x, q_{0x}} \delta_{Q_z, q_{0z}} \delta(\omega_{k_\ell} - \omega_{k_R} - \omega_{q_0}) \\
 & \cdot \left\{ \sum_{\vec{k}_x} e^{i\lambda^2 k_x (Q_y - q_{0y})} \right\} e^{i\lambda^2 \frac{Q_x}{2} (Q_y - q_{0y})} \sum_{\substack{\vec{k}_z, \vec{n} \\ \vec{n}', \vec{\sigma}}} I_{Q_\perp, \vec{n}, \vec{n}'} I_{q_{0\perp}, \vec{n}, \vec{n}'}^*
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & \left\{ \frac{\theta(|k_z| - k_{zF}^{(n)}) \theta(k_{zF}^{(n')} - |k_z + q_{0z}|)}{\omega_{k_z + q_{0z}}^{(n)} \omega_{q_0} \omega_{k_z}^{(n)}} + \right. \\
 & \left. + \frac{\theta(k_{zF}^{(n)} - |k_z|) \theta(|k_z + q_z| - k_{zF}^{(n')})}{\omega_{q_0} \omega_{k_z}^{(n)} \omega_{k_z + q_{0z}}^{(n')}} \right\} \quad (II.2.19)
 \end{aligned}$$

Para efetuar a soma em k_x nos referimos ao Apêndice 1, e usamos $k_x = \frac{2\pi}{L_x} N_x$ onde N_x é inteiro tal que $0 < N_x < \frac{L_y L_x}{2\pi\lambda^2}$. Além disso, condições de contorno periódicas dão

$$Q_y = \frac{2\pi}{L_y} m_y \quad e \quad q_{0y} = \frac{2\pi}{L_y} m'_y$$

Assim temos:

$$\sum_{k_x} e^{i\lambda^2(Q_y - q_{0y})k_x} = \sum_{N_x} e^{i \frac{2\pi}{L_x} \lambda^2 (Q_y - q_{0y})}$$

Tomando $\lim L_x \rightarrow \infty$ e passando da soma a uma integral obtemos finalmente

$$\sum_{k_x} e^{i\lambda^2(Q_y - q_{0y})k_x} = \frac{L_x L_y}{2\pi\lambda^2} \delta_{Q_y, q_{0y}}$$

Aqui devemos notar que o momentum é conservado no processo; $k_L - k_R = q_0$, e que portanto, q_0 é da ordem do momentum do foton.

Isso nos permite fazer duas aproximações que tornam o resultado mais simples e que são válidas para q_0 pequeno. Vamos desprezar q_{0z} em face a k_z e vamos tomar $\omega_q = \omega_0$, in-

dependente do momentum, desprezando efeitos de dispersão. Como $I_{q_{\perp}}^{nn'}$ é simétrico em n, n' podemos trocar n em n' no primeiro membro da expressão II.2.19.

Lembrando que $\omega_{k_z}^{n_z} = (n + 1/2)\omega_c + \frac{\hbar k_z^2}{2m^*}$ temos dentro das aproximações feitas:

$$\begin{aligned} & \frac{\theta(|k_z| - k_{zF}^{(n')})\theta(k_{zF}^{(n)} - |k_z + q_{oz}|)}{\omega_{k_z}^{n_z} + q_o - \omega_{q_o} - \omega_{k_z}^{n'_z}} + \frac{\theta(k_{zF}^{(n)} - |k_z|)\theta(|k_z + q_{oz}| - k_{zF}^{(n')})}{\omega_{q_o} + \omega_{k_z}^{n_z} - \omega_{k_z}^{n'_z} + q_{oz}} = \\ & \approx \frac{\theta(|k_z| - k_{zF}^{(n')})\theta(k_{zF}^{(n)} - |k_z|)}{\frac{k_z q_{oz} \hbar}{m^*} - (n' - n)\omega_c - \omega_o} + \frac{\theta(k_{zF}^{(n)} - |k_z|)\theta(|k_z| - k_{zF}^{(n')})}{\omega_o - (n' - n)\omega_c - \frac{k_z q_{oz} \hbar}{m^*}} \end{aligned} \quad (II.2.20)$$

Notando que os numeradores no resultado (II.2.20) são não nulos para $k_{zF}^{(n)} > k_{zF}^{(n')}$ ou seja $n' > n$ e que $k_{zF}^{(n)} = 0$ se $n > n_o$, onde n_o é o nível de Landau de mais alta ordem ainda ocupado no estado fundamental, podemos escrever II.2.19 como:

$$\begin{aligned} \langle f | S^{(2)} | i \rangle &= \frac{4\pi i \sqrt{n} k_\ell^A \ell_R V q_o}{\hbar^2} \delta(\omega_{k_\ell} - \omega_{k_R} - \omega_o) \delta_{q_o, 0} \sum_{n' > n} \sum_{n=0}^{n_o} |I_{q_{\perp}}^{nn'}|^2 \cdot \\ &\cdot \frac{v}{2\pi^2 \lambda^2} \int_{-\infty}^{\infty} dk_z \theta(|k_z| - k_{zF}^{(n')}) \theta(k_{zF}^{(n)} - |k_z|) \cdot \\ &\cdot \left\{ \frac{1}{\frac{k_z q_{oz} \hbar}{m^*} - \omega_o - (n' - n)\omega_c} + \frac{1}{\omega_o - (n' - n)\omega_c - \frac{k_z q_{oz} \hbar}{m^*}} \right\} \end{aligned} \quad (II.2.21)$$

Finalmente, reorganizando a expressão acima, obtemos para $\langle f | \hat{S}^{(2)} | i \rangle$:

$$\langle f | S^{(2)} | i \rangle = \frac{i 2 \sqrt{n_{k_\ell}} A_{\ell R} V_q v}{\pi \hbar^2 \lambda^2} \delta(\omega_{k_\ell} - \omega_{k_R} - \omega_0) \sum_{n' > n} \sum_{n=0}^{n_0} |I_{q_\ell}|_{nn'}^2 \cdot$$

$$\cdot \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\theta(|k_z| - k_{zF}^{(n')}) \theta(k_{zF}^{(n)} - |k_z|) 2(n' - n) \omega_c}{(\omega_0 - \frac{k_z q_z \hbar}{m^*})^2 - ((n' - n) \omega_c)^2} \quad (II.2.22)$$

Ao obter a expressão acima, somamos sobre todos os possíveis estados finais de fonons (q_0) e usamos a $\delta_{q_0, Q}$. Assim temos o elemento de matriz $\hat{S}$ entre um estado inicial de n_{k_ℓ} ftons e um estado final onde um desses ftons é espalhado com momento k_R , com emissão de um fonon. Para simplificar a notação, continuamos a usar q (sem o índice 0) para o momento do fonon, mas tendo em mente que $q \equiv k_\ell - k_R$.

II.3 - Eficiência Raman, Coeficiente de Extinção e Secção de Espalhamento Raman.

As três grandezas citadas acima são formas alternativas de caracterizar o espectro Raman e são vastamente usadas na literatura e às vezes alguma confusão é gerada. Por isso, dedicamos o Apêndice 3 a uma clarificação do significado de cada uma das expressões. Todas elas estão relacionadas com a probabilidade de transição entre os estados inicial e final, por unidade de tempo. Chamamos a atenção de que nosso cálculo foi feito para luz espalhada com momentum bem definido k_R . Na realidade o que se mede numa experiência Raman é o número de ftons recolhidos por unidade de tempo por um detetor. Esse aparelho detecta todo fton espalhado em sua direção, o que abrange um pequeno ângulo sólido $d\Omega$. Portanto, as grandezas definidas em A-3 estão na realidade relacionadas com a probabilidade por unidade de tempo para um fton ser espalhado com uma gama de momentos k_R dentro de um pequeno ângulo sólido.

Com esta ressalva, prosseguimos para calcular P_{fi} , a probabilidade de transição por unidade de tempo, a partir de $\langle f|\hat{S}|i\rangle$.

Para achar a probabilidade de transição $W_{fi}(\infty)$, na aproximação estabelecida, devemos substituir II.2.22 em II.2.2. Ao fazer isso, fica claro que a expressão para $W_{fi}(\infty)$ contém o quadrado da $\delta(\omega_{k_\ell} - \omega_{k_R} - \omega_0)$. Para obter P_{fi} vamos reescrever esse quadrado como:

$$\begin{aligned} \delta^2(\omega_{k_\ell} - \omega_{k_R} - \omega_0) &= \delta(\omega_{k_\ell} - \omega_{k_R} - \omega_0) \lim_{T \rightarrow \infty} \int_{-T/2}^{T/2} e^{i(\omega_{k_\ell} - \omega_{k_R} - \omega_0)t} \frac{dt}{2\pi} = \\ &= \delta(\omega_{k_\ell} - \omega_{k_R} - \omega_0) \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{T}{2\pi} \end{aligned} \quad (II.3.1)$$

Como, por definição, a probabilidade de transição por unidade de tempo é dada por $\frac{W_{fi}(\infty)}{\lim_{T \rightarrow \infty} T}$, temos para um momento bem definido k_R :

$$P_{fi}(k_R) = \delta(\omega_{k_\ell} - \omega_{k_R} - \omega_0) \frac{2 n_{k_\ell} v^2}{\pi^3 \hbar^4 \lambda^4} |A_{\ell R} V_q|^2.$$

$$\cdot \left| \sum_{n' > n} \sum_{n=0}^{n_0} \left| I_{q_1} \right|_{nn'}^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\theta(|k_z| - k_{zF}^{(n)}) \theta(k_{zF}^{(n)} - |k_z|) 2(n'-n)\omega_c}{\left(\omega_0 - \frac{k_z q_z \hbar}{m^*}\right)^2 - ((n'-n)\omega_c)^2} dk_z \right|^2$$

(II.3.2)

Para achar a probabilidade por unidade de tempo de um foton ser recebido pelo detetor, devemos somar para todo k_R contido no ângulo sólido $d\Omega$.

$$P_{fi}(d\Omega) = \sum_{k_R \rightarrow d\Omega} P_{fi}(k_R) = \frac{v}{(2\pi)^3} \int_{d\Omega} \int_0^\infty k_R^2 P_{fi}(k_R) dk_R d\Omega \quad (II.3.3)$$

Usando a $\delta(\omega_{k_\ell} - \omega_{k_R} - \omega_0)$ e a relação entre k_R e ω_{k_R} para efetuar a integração em k_R obtemos:

$$P_{fi}(d\Omega) = \frac{v}{(2\pi)^3} \cdot \frac{\omega_{k_R}^2}{c^3 \epsilon_\infty^{-3/2}} \cdot \frac{2 n_{k_\ell} v^2}{\pi^3 \hbar^4 \lambda^4} \left| A_{\ell R} V_q \right|^2 \cdot \left| \sum_{n' > n} \sum_{n=0}^{n_0} \left| I_{q_{\perp}} \right|_{nn'}^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\theta(|k_z| - k_{zF}^{(n')}) \theta(k_{zF}^{(n)} - |k_z|) 2(n'-n)\omega_c}{(\omega_0 - \frac{k_z q_z \hbar}{m^*})^2 - ((n'-n)\omega_c)^2} dk_z \right|^2 d\Omega \quad (II.3.4)$$

onde $\omega_{k_R} = \omega_{k_\ell} - \omega_0$.

Finalmente, usando que $\omega_R \approx \omega_\ell \gg \omega_0$ e a relação entre ω_{k_ℓ} e k_ℓ obtemos:

$$P_{fi}(d\Omega) = \frac{v}{(2\pi)^3} \cdot \frac{\omega_{k_\ell}^2}{c^3 \epsilon_\infty^{-3/2}} \cdot \frac{2 n_{k_\ell} v^2}{\pi^3 \hbar^4 \lambda^4} \left| A_{\ell R} V_q \right|^2 \cdot \left| \sum_{n' > n} \sum_{n=0}^{n_0} \left| I_{q_{\perp}} \right|_{nn'}^2 \int_{-\infty}^{\infty} dk_z \frac{2(n'-n)\omega_c \theta(|k_z| - k_{zF}^{(n')}) \theta(k_{zF}^{(n)} - |k_z|)}{(\omega_0 - \frac{k_z q_z \hbar}{m^*})^2 - ((n'-n)\omega_c)^2} \right|^2 d\Omega \quad (II.3.5)$$

Onde

$$\left| A_{\ell R} V_q \right|^2 = \frac{2\pi^3 \hbar^3 \omega_0 e^6 (\hat{e}_R \cdot \hat{e}_\ell)}{v^3 m^{*2} (\omega_{k_\ell} \omega_{k_R}) \epsilon_\infty^2 q^2} \left(\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_0} \right) \quad (II.3.6)$$

A eficiência Raman ^(A-4) é essencialmente a probabilidade de ter um foton espalhado na direção do detetor, quando ele atravessa o cristal. A eficiência Raman depende essencial-

mente da espessura do cristal (a palavra cristal aqui é usada no sentido, não do cristal real como um todo, e sim da região de interesse para o processo), ou seja, do caminho que o foton deve percorrer nessa região. Uma definição mais geral é dada por Loudon,⁽⁵⁾ porém é de interpretação física mais obscura. Como vemos em A-4 a eficiência Raman S_R é dada por

$$S_R = \frac{P_{fi}(d\Omega)L}{n_l c \epsilon_\infty^{-1/2}} \quad (\text{II.3.7})$$

onde L é a espessura.

A secção de espalhamento Raman σ e o coeficiente de extinção h diferem entre si por um fator de volume.^(A-4)

$$d\sigma = \frac{P_{fi}(d\Omega)v}{n_l c \epsilon_\infty^{-1/2}} \quad (\text{II.3.8})$$

$$dh = \frac{P_{fi}(d\Omega)}{n_l c \epsilon_\infty^{-1/2}} \quad (\text{II.3.9})$$

Aqui notamos que se a secção de espalhamento tem unidades de área e que portanto o coeficiente de extinção tem unidades de (comprimento)⁻¹.

Pode parecer estranho que a secção de espalhamento assim definida dependa do volume. Salientamos ^(A-4) que, apesar da analogia formal com a definição de secção de espalhamento para processos menos elaborados, a secção assim definida é a secção de espalhamento total vista pelo foton e não a secção de espalhamento por "centro espalhador", devendo, pois, depender do volume. Aqui notamos que em seu trabalho,⁽⁶⁾ Genkin et.al. dá uma secção de espalhamento com dimensões de cm^{-1} , que a rigor é o coeficiente de extinção.

Finalmente, definimos a secção de espalhamento diferencial, que inclui a forma da linha Raman; ou seja, onde se omite a integração sobre o espectro de frequências (o coeficiente de extinção na sua forma diferencial é obtido imediatamente omitindo o volume).

Usando II.3.8 e a definição de $P_{fi}(d\Omega)$ obtemos imediatamente:

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\omega_R} = c_q \left| \sum_{n' > n} \sum_{n=0}^{n_0} |I_{q_{\perp}}|_{nn'}^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk_z^2 (n'-n) \omega_c \theta(|k_z| - k_{zF}^{(n')}) \theta(k_{zF}^{(n)} - |k_z|)}{(\omega_0 - \frac{k_z^2 q_z^2}{m^*})^2 - ((n'-n)\omega_c)^2} \right|^2 \cdot \delta(\omega_{k_\ell} - \omega_{k_R} - \omega_0) \quad (\text{II.3.10})$$

$$c_q = \frac{e^6 \omega_0 v(\hat{e}_R \cdot \hat{e}_\ell)}{2c^4 m^{*2} q^2 \pi^3 \hbar \lambda^4} \left(\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_0} \right)$$

$$|I_{q_{\perp}}|_{nn'}^2 = \frac{n!}{n'!} \left(\frac{\lambda^2 q_\perp^2}{2} \right)^{n'-n} e^{-\frac{\lambda^2}{2} q_\perp^2} \left| L_n^{n'-n} \left(\frac{\lambda^2}{2} q_\perp^2 \right) \right|^2$$

Onde $L_\alpha^\beta(x)$ são polinômios associados de Laguerre. Nos concentraremos no estudo da secção de espalhamento diferencial no resto do nosso trabalho, ressaltando que tendo esta grandeza qualquer outra pode ser facilmente obtida.

III - INTRODUÇÃO DE VIDA MÉDIA

III.1 - Estados Quase-Estacionários

Na parte II, ao calcularmos a secção de espalhamento Raman, tomamos os estados de fonons e elétrons como estritamente estacionários, ou seja, como estados de vida média infinita. Na verdade, esses estados interagem entre si e com o resto do sistema e são na realidade estados quase-estacionários, isto é, estados de vida média muito longa, comparada com os períodos característicos, mas finita. Esses estados são caracterizados por uma lei de decaimento exponencial,^(8b) que determina a probabilidade de, após decorrido um certo tempo, a quase-partícula considerada ainda estar no estado que ocupava inicialmente. Mais explicitamente, se sabemos que no tempo inicial t_i , a partícula está num determinado estado E , a probabilidade de encontrar a partícula nesse estado no tempo t é: ($\Gamma \ll \omega_s$, frequência característica)

$$P_E(t) = \frac{\int \phi_E^*(\underline{x}, t) \phi_E(\underline{x}, t) d^3x}{\int \phi_E^*(\underline{x}, t_i) \phi_E(\underline{x}, t_i) d^3x} = e^{-\Gamma(t-t_i)} \quad (\text{III.1.1})$$

onde

$$\int \phi_E^*(\underline{x}, t_i) \phi_E(\underline{x}, t_i) d^3x = 1 \quad (\text{III.1.2})$$

Para tratar estados quase-estacionários, notamos⁽¹⁰⁾ que, a equação (III.1.1) é obtida se acrescentarmos à dependência temporal do estado estacionário, um fator $e^{-\Gamma/2(t-t_i)}$, onde t_i é definido por (II.1.2).. Assim, a dependência temporal da função de onda $\phi_E(\underline{x}, t)$ no caso de um estado quase-estacionário é da forma

$$e^{-i(\frac{E}{\hbar} - i \frac{\Gamma}{2})t} e^{-\frac{\Gamma}{2} t_i}$$

onde $t_i < t$.

III.2 - Propagador de Elétrons

Vamos estudar as consequências para o cálculo da secção de espalhamento, da introdução de vida média nos estados de elétrons. Vemos claramente, da fórmula (II.2.12), que a partição dos elétrons vem através do propagador $G^0(\underline{r}t, \underline{r}'t')$ calculado no Apêndice 2. Nesta secção, recalcularemos $G^0(\underline{r}t, \underline{r}'t')$ para o caso de estados eletrônicos quase-estacionários. Faremos uso da dependência temporal dada em II.1 e em linhas gerais seguiremos o mesmo raciocínio usado em A-2. Definindo t_i como sendo o tempo em que a probabilidade de encontrar a partícula no estado especificado é 1 (ver II.1.2), temos para os operadores de campo:

$$\hat{\psi}_I(\underline{r}, t) = \sum_{\underline{k}n} \phi_{\underline{k}n}(\underline{r}) a_{\underline{k}n} e^{-i\omega_{nk_z} t} e^{-\Gamma/2(t-t_i)} \quad (\text{III.2.1})$$

$$\hat{\psi}_I^+(\underline{r}, t) = \sum_{\underline{k}n} \phi_{\underline{k}n}^*(\underline{r}) a_{\underline{k}n}^+ e^{i\omega_{nk_z} t} e^{-\Gamma/2(t-t_i)}$$

Seguindo Fetter e Walecka, ^(9b) expressamos $a_{\underline{k}n}$ em termos de $a_{(+)\underline{k}n}$ e $a_{(-)\underline{k}n}$ como foi feito em A-2 e obtemos:

$$\begin{aligned} \hat{\psi}_I(\underline{r}, t) = & \sum_{\substack{\underline{k}n \\ k_z > k_{zF}^{(n)}}} \phi_{\underline{k}}(\underline{r}) a_{(+)\underline{k}\tilde{n}} e^{-i\omega_{nk_z} t} e^{-\Gamma/2(t-t_i)} + \\ & + \sum_{\substack{\underline{k}n \\ k_z < k_{zF}^{(n)}}} \phi_{\underline{k}}(\underline{r}) a_{(-)\underline{k}\tilde{n}}^+ e^{-i\omega_{nk_z} t} e^{-\Gamma/2(t-t_i)} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\hat{\psi}_I^+(\underline{r}', t') = & \sum_{\substack{\underline{k}n \\ k_z > k_{zF}}} \phi_{\underline{k}}^*(\underline{r}') a_{(+)\underline{k}}^+ e^{i\omega_{\underline{k}n} t'} e^{-\Gamma/2(t'-t_i)} + \\
& + \sum_{\substack{\underline{k}n \\ k_z < k_{zF}}} \phi_{\underline{k}}^*(\underline{r}') a_{(-)\underline{k}} e^{i\omega_{\underline{k}n} t'} e^{-\Gamma/2(t'-t_i)}
\end{aligned}
\tag{III.2.2}$$

Aqui, o operador $a_{(+)}$ se refere a um elétron e $a_{(-)}$ a um buraco. O propagador $G^0(\underline{r}t, \underline{r}'t')$ dado pela equação

$$iG^0(\underline{r}t, \underline{r}'t') = \langle \phi_0 | T [\hat{\psi}_I(\underline{r}, t) \hat{\psi}_I^+(\underline{r}', t')] | \phi_0 \rangle$$

nos diz essencialmente que uma partícula é criada em t' ($a_{(+)}^+$) e destruída num instante posterior t (isto é, se $t > t'$, então $t' = t_i$); ou que um buraco é criado em t ($a_{(-)}^+$) e destruído em t' (ou seja, se $t' < t$, $t = t_i$). Portanto, temos, notando que $a_{(-)}|\phi_0\rangle = a_{(+)}|\phi_0\rangle = 0$

$$\begin{aligned}
iG^0(\underline{r}t, \underline{r}'t') = & \left\{ \theta(t-t') \sum_{\substack{\underline{k}n \\ k_z > k_{zF}}} \phi_{\underline{k}}(\underline{r}) \phi_{\underline{k}}^*(\underline{r}') e^{-i\omega_{\underline{k}n}(t-t')} \right. \\
& \cdot e^{-\Gamma/2(t-t_i)} e^{-\Gamma/2(t'-t_i)} - \theta(t'-t) \sum_{\substack{\underline{k}n \\ k_z < k_{zF}}} \phi_{\underline{k}}(\underline{r}) \phi_{\underline{k}}^*(\underline{r}') \cdot \\
& \cdot e^{-i\omega_{\underline{k}n}(t-t')} e^{-\Gamma/2(t-t_i)} e^{-\Gamma/2(t'-t_i)} \left. \right\}
\end{aligned}
\tag{III.2.3}$$

Substituindo t_i por seu valor em cada parcela e incorporando Γ à frequência, obtemos:

$$iG^0(\underline{r}t, \underline{r}'t') = \sum_{\underline{k}n} \phi_{\underline{k}}(\underline{r}) \phi_{\underline{k}}^*(\underline{r}') \{ \theta(t-t') \theta(|k_z| - k_{zF}^{(n)}) e^{-i(\omega_{\underline{k}n} - i\frac{\Gamma}{2})(t-t')} - \theta(t'-t) e^{-i(\omega_{\underline{k}n} + i\frac{\Gamma}{2})(t-t')} \theta(k_{zF}^{(n)} - |k_z|) \}$$

(III.2.4)

III.3 - Inclusão de Vida Média na Secção de Espalhamento

Como vimos na secção II, a única parte que contribui para $\langle f | S^{(2)} | i \rangle$, no produto temporal é dada por $G^0(\underline{r}t, \underline{r}'t') G^0(\underline{r}'t', \underline{r}t)$. Este produto é facilmente obtido usando o resultado III.2.4 da secção anterior, e contém todo efeito da inclusão de vida média nos estados de elétrons.

$$G^0(\underline{r}t, \underline{r}'t') G^0(\underline{r}'t', \underline{r}t) = \sum_{\substack{\underline{k}\underline{k}' \\ \underline{n}\underline{n}'}} \phi_{\underline{k}}(\underline{r}) \phi_{\underline{k}}^*(\underline{r}') \phi_{\underline{k}'}(\underline{r}') \phi_{\underline{k}'}^*(\underline{r}) \cdot \\ \cdot \{ \theta(t-t') e^{-i(\omega_{\underline{k}n} - i\frac{\Gamma}{2})(t-t')} e^{-i(\omega_{\underline{k}'n'} + i\frac{\Gamma}{2})(t'-t)} \cdot \\ \cdot \theta(|k_z| - k_{zF}^{(n)}) \theta(k_{zF}^{(n')} - |k_z'|) + \theta(t'-t) e^{-i(\omega_{\underline{k}n} + i\frac{\Gamma}{2})(t-t')} \cdot \\ \cdot e^{-i(\omega_{\underline{k}'n'} - i\frac{\Gamma}{2})(t'-t)} \theta(|k_z'| - k_{zF}^{(n')}) \theta(k_{zF}^{(n)} - |k_z|) \}$$

(III.3.1)

Resta agora, introduzir no cálculo, a vida média para os estados de fonon. Gostaríamos de seguir o mesmo raciocínio que utilizamos até agora, e voltando à fórmula II.2.11 vemos que o fonon é criado no tempo t' , que passa a ser o tempo inicial t_i para estes estados. O tempo t_o final, no entanto,

depende de como generalizamos a grandeza que estamos calculando. Vamos generalizar a probabilidade de transição $W_{fi}(t_0)$ como sendo a probabilidade de encontrarmos um estado de fonon e um foton espalhado quando verificamos o sistema num tempo t_0 , $t_0 \rightarrow \infty$. Com essa definição para W_{fi} fica claro que a dependência temporal para os estados de fonon é a forma

$$e^{i\omega_0 t'} e^{-\gamma/2(t_0 - t')}$$

onde $t_0 \rightarrow \infty$, como o estado assintótico final.

Como consequência da generalização do conceito de W_{fi} , a relação entre a probabilidade de transição por unidade de tempo P_{fi} e $W_{fi}(\infty)$ deve ser também generalizada.

$$W_{fi}(\infty) = \lim_{t_0 \rightarrow \infty} W_{fi}(t_0) = \lim_{t_0 \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{t_0} P_{fi} e^{-\gamma(t_0 - t)} dt = \frac{P_{fi}}{\gamma} \quad (\text{III.3.2})$$

Isto nos diz que $W_{fi}(\infty)$ está relacionada com a probabilidade de criarmos um fonon em t e ele ainda existir em t_0 . Notem que se $\gamma = 0$ recaímos na definição usual. (ver II.3.1)

Podemos agora prosseguir substituindo o produto $\hat{T}$ na expressão II.2.12 para obter:

$$\begin{aligned} \langle f | S^{(2)} | i \rangle = & \frac{2A_{R\ell} V_q}{\hbar^2} \sum_{\substack{k, k' \\ \tilde{n}, \tilde{n}'}} \sqrt{n_{k_\ell}} \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} d^3 r \phi_{\tilde{n}}(\underline{r}) e^{i(\underline{k}_\ell - \underline{k}_R) \cdot \underline{r}} \phi_{\tilde{n}'}^*(\underline{r}) \right\} \cdot \\ & \cdot \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} d^3 r' \phi_{\tilde{n}'}(\underline{r}') e^{-i\underline{q} \cdot \underline{r}'} \phi_{\tilde{n}}^*(\underline{r}') \right\} \cdot \int_{-\infty}^{t_0} dt \int_{-\infty}^{t_0} dt' e^{-i(\omega_{k_\ell} - \omega_{k_R})t} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \cdot e^{i\omega_0 t'} e^{-\frac{\Gamma}{2}(t_0 - t')} \{ \theta(t - t') e^{-i(\omega_{k_z} - \omega_{k'_z} - i\frac{\Gamma + \Gamma'}{2})(t - t')} \\
& \cdot \theta(|k_z| - k_{zF}^{(n)}) \theta(k_{zF}^{(n')} - |k'_z|) + \theta(t' - t) e^{-i(\omega_{k'_z} - \omega_{k_z} - i\frac{\Gamma + \Gamma'}{2})(t' - t)} \\
& \cdot \theta(|k'_z| - k_{zF}^{(n')}) \theta(k_{zF}^{(n)} - |k_z|) \} \quad (\text{III.3.3})
\end{aligned}$$

onde $\Gamma = \Gamma_{k_z}^{n_z}$.

Devemos resolver as integrais em t e t' , uma vez que o resto da expressão não é afetada pela introdução de vida média. A primeira parcela na integração, usando $\theta(t - t')$ para obrigar $t' < t$, nos dá, fazendo $\omega_{k_L} - \omega_{k_R} \equiv \omega$:

$$\begin{aligned}
& \lim_{t_0 \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{t_0} dt' \int_{t'}^{t_0} dt e^{-i(\omega + \omega_{k_z} - \omega_{k'_z} - i\frac{\Gamma + \Gamma'}{2})t} e^{i(\omega_{k_z} - \omega_{k'_z} + \omega_0 - i\frac{\Gamma + \Gamma'}{2})t'} e^{-\frac{\gamma}{2}(t_0 - t')} = \\
& \lim_{t_0 \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{t_0} dt' \frac{e^{i(\omega_{k_z} - \omega_{k'_z} + \omega_0 - i\frac{\Gamma + \Gamma'}{2})t'} e^{-\frac{\gamma}{2}(t_0 - t')}}{-i(\omega + \omega_{k_z} - \omega_{k'_z} - i\frac{\Gamma + \Gamma'}{2})} \{ e^{-i(\omega + \omega_{k_z} - \omega_{k'_z} - i\frac{\Gamma + \Gamma'}{2})t} \Big|_{t'}^{t_0} \} = \\
& = \frac{1}{i(\omega + \omega_{k_z} - \omega_{k'_z} - i\frac{\Gamma + \Gamma'}{2})} \lim_{t_0 \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{t_0} dt' e^{-i(\omega - \omega_0)t'} e^{-\frac{\gamma}{2}(t_0 - t')}
\end{aligned} \quad (\text{III.3.4})$$

De forma análoga, resolvemos para a segunda parcela, onde $t' > t$.

$$\lim_{t_0 \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{t_0} dt' \int_{-\infty}^{t'} dt e^{-i(\omega_{k_z'} - \omega_{k_z} - i\frac{\Gamma+\Gamma'}{2} - \omega_0)t'} e^{-\frac{\gamma}{2}(t_0-t')} e^{i(\omega_{k_z'} - \omega_{k_z} - i\frac{\Gamma+\Gamma'}{2} - \omega)t} =$$

$$= \frac{1}{i(\omega_{k_z'} - \omega_{k_z} - i\frac{\Gamma+\Gamma'}{2} - \omega)} \lim_{t_0 \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{t_0} dt' e^{-i(\omega - \omega_0)t'} e^{-\frac{\gamma}{2}(t_0-t')}$$

(III.3.5)

Substituindo III.3.4 e III.3.5 em III.3.3 obtemos uma expressão análoga a II.2.19, onde a integração em t' corresponde à $2\pi\delta(\omega_{k_\ell} - \omega_{k_R} - \omega_0)$ e no denominador foi introduzida uma parte imaginária correspondente à vida média finita dos estados eletrônicos. Procedendo da mesma forma que na secção II, obtemos uma expressão semelhante a II.2.21. (Note que as expressões III.3.6 e II.2.21 são idênticas no limite Γ, Γ' e $\gamma \rightarrow 0$.)

$$\langle f | S^{(2)} | i \rangle = \lim_{t_0 \rightarrow \infty} \left\{ \int_{-\infty}^{t_0} dt' e^{-i(\omega - \omega_0)t'} e^{-\frac{\gamma}{2}(t_0-t')} \right\} \cdot$$

$$\cdot \frac{2i\sqrt{n_{k_\ell}} A_{\ell R} V_{qV}}{\hbar^2 2\pi^2 \lambda^2} \sum_{n' > n} \sum_{n=0}^{n_0} |I_{q_{nn'}}|^2 \int_{-\infty}^{\infty} dk_z \theta(|k_z| - k_{zF}^{(n)}) \theta(k_{zF}^{(n)} - |k_z|) \cdot$$

$$\cdot \left\{ \frac{1}{\hbar k_{zq_z} - \frac{m^*}{m} - (n'-n)\omega_c - \omega + i\frac{\Gamma+\Gamma'}{2}} + \frac{1}{\frac{k_{zq_z}\hbar}{m^*} - \omega - (n'-n)\omega_c - \frac{\Gamma+\Gamma'}{2}} \right\}$$

(III.3.6)

A integral em t' fica:

$$\lim_{t_0 \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{t_0} dt' e^{-i(\omega - \omega_0)t'} e^{-\frac{\gamma}{2}(t_0 - t')} e^{-\frac{\gamma}{2}t_0} \frac{e^{-i(\omega - \omega_0 + i\frac{\gamma}{2})t'}}{-i(\omega - \omega_0 + i\frac{\gamma}{2})} \Big|_{-\infty}^{t_0} =$$

$$= \lim_{t_0 \rightarrow \infty} \frac{e^{-i(\omega - \omega_0)t_0}}{-i(\omega - \omega_0 + i\frac{\gamma}{2})} \quad (\text{III.3.7})$$

A probabilidade de transição envolve o módulo quadrado de $\langle f | S^{(2)} | i \rangle$. Quadrando a expressão III.3.6 e usando III.3.2 para P_{fi} obtemos:

$$P_{fi} = \frac{\gamma}{(\omega - \omega_0)^2 + (\frac{\gamma}{2})^2} \cdot \left| \frac{2i\sqrt{n} A_{\ell R} V_q}{\hbar^2 2\pi^2 \lambda^2} \cdot \sum_{n' > n} \sum_{n=0}^{n_0} |I_{q_{\perp}}|_{nn'}^2 \int_{-\infty}^{\infty} dk_z \theta(|k_z| - k_{zF}^{(n')}) \theta(k_{zF}^{(n)} - |k_z|) \cdot \left\{ \frac{1}{(\frac{\hbar k_z q_z}{m^*} - (n' - n)\omega_c - \omega + i\frac{\Gamma + \Gamma'}{2})} + \frac{1}{(\omega - (n' - n)\omega_c - \frac{k_z q_z \hbar}{m^*} + i\frac{\Gamma + \Gamma'}{2})} \right\} \right|^2$$

(III.3.8)

Finalmente, procedendo como na secção II, obtemos para secção de espalhamento:

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\omega} = C_q \left| \sum_{n' > n} \sum_{n=0}^{n_0} \int_{-\infty}^{\infty} dk_z \theta(|k_z| - k_{zF}^{(n')}) \theta(k_{zF}^{(n)} - |k_z|) \cdot \left\{ \frac{1}{(\omega - (n' - n)\omega_c - \frac{k_z q_z \hbar}{m^*} + i\frac{\Gamma + \Gamma'}{2})} - \frac{1}{(\omega + (n' - n)\omega_c - \frac{k_z q_z \hbar}{m^*} - i\frac{\Gamma + \Gamma'}{2})} \right\} \right|^2 \cdot$$

$$\cdot \frac{\gamma/2\pi}{(\omega_0 - \omega)^2 - (\frac{\gamma}{2})^2} \quad (\text{III.3.9})$$

onde C_q é dado em (II.3.10) e $\omega \equiv \omega_{k_\ell} - \omega_{k_R}$ é a frequência da "excitação" criada no cristal. No limite em que Γ, Γ' e $\gamma \rightarrow 0$ recuperamos II.3.8 como era de se esperar.

A expressão III.3.9 foi obtida supondo um amortecimento real. Na verdade, o amortecimento pode ser mais geral, (10) englobando parte real (decaimento) e parte imaginária (renormalização), ambas dependentes da frequência. Essa generalização pode ser facilmente incluída, pois não acarreta nenhuma mudança substancial no procedimento aqui adotado. Fazendo $\frac{\gamma}{2} = \gamma(\omega) - iP(\omega)$ obtemos a generalização da expressão III.3.9.

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\omega} = I(\omega) L(\omega)$$

$$I(\omega) = c_q \left| \sum_{n' > n} \sum_{n=0}^{n_0} I_{q_{\perp}, nn'} \right|^2 \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} dk_z \frac{\theta(|k_z| - k_{zF}^{(n')}) \theta(k_{zF}^{(n)} - |k_z|)}{(\omega - (n' - n)\omega_c - \frac{k_z q_z h}{m^*} + i\frac{\Gamma + \Gamma'}{2})} - \int_{-\infty}^{\infty} dk_z \frac{\theta(|k_z| - k_{zF}^{(n')}) \theta(k_{zF}^{(n)} - |k_z|)}{(\omega + (n' - n)\omega_c - \frac{k_z q_z h}{m^*} - i\frac{\Gamma + \Gamma'}{2})} \right|^2$$

$$L(\omega) = \frac{1}{\pi} \frac{\gamma(\omega)}{(\omega - \omega_0 - P(\omega))^2 + \gamma(\omega)^2}$$

(III.3.10)

Podemos dividir a secção de espalhamento como fizemos acima. Uma parte que depende do tipo de interação considerado, ou seja, das hamiltonianas de interação e a outra intrinsecamente relacionada com a partícula espalhadora. Normalmente $L(\omega)$ varia drasticamente com a frequência, tendo um pico em torno de um certo valor e determina a forma de linha Raman, enquanto que $I(\omega)$ é praticamente constante na região relevante e dá a intensi

sidade Raman. No caso ressonante que estudamos aqui, esse esquema simplificado não é válido, pois $I(\omega)$ pode depender fortemente da frequência. Por motivos de ordem prática, continuaremos usando a nomenclatura "forma de linha" para $L(\omega)$ e "intensidade" para $I(\omega)$. Usaremos as expressões entre aspas para lembrar que elas perdem seu significado usual e são apenas denominações para $L(\omega)$ e $I(\omega)$.

III.4 - Secção de Espalhamento em Função da Densidade Espectral e Propagador de Fonons.

Para achar a forma de linha $L(\omega)$, devemos relacioná-la com grandezas conhecidas ou calculáveis, uma vez que o amortecimento, introduzido fenomenologicamente, não tem sua forma especificada. Voltamos, portanto, à expressão (II.2.11) e supomos que $b_q^+(t')$ se refira à criação de um fonon já perturbado pela interação com o resto do sistema. Podemos reescrever esta expressão como:

$$\begin{aligned} \langle f | \hat{S}^{(2)} | i \rangle &= \frac{2A_{\ell R} V_{q_0}}{\pi^2} \sqrt{n_{k_\ell}} \int_{-\infty}^{\infty} d^3 r dt \int_{-\infty}^{\infty} d^3 r' dt' e^{-i(\omega_{k_\ell} - \omega_{k_R})t} \\ &\cdot \langle 1 | b_{q_0}^+(t') | 0 \rangle e^{i(k_\ell - k_R) \cdot \underline{r}} e^{-iq_0 \cdot \underline{r}'} \\ &\cdot \langle \phi_0 | T [\hat{\psi}_I^+(\underline{r}, t) \hat{\psi}_I(\underline{r}, t) \hat{\psi}_I^+(\underline{r}', t') \hat{\psi}_I(\underline{r}', t')] | \phi_0 \rangle \end{aligned}$$

(III.4.1)

Expressando o produto temporal em termos de propagador $G^0(\underline{r}t, \underline{r}'t')$ e usando a expressão III.3.1 obtemos o

análogo de III.3.3.

$$\begin{aligned}
 \langle f | S^{(2)} | i \rangle = & 2A_{R\ell} V_{q_0} \sqrt{n_{k_\ell}} \sum_{\substack{\vec{k}, \vec{k}' \\ \vec{n}, \vec{n}'}} \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} d^3 r \phi_{\vec{n}}(\vec{r}) e^{i(\vec{k}_\ell - \vec{k}_R) \cdot \vec{r}} \phi_{\vec{k}, \vec{n}}^*(\vec{r}) \right\} \cdot \\
 & \cdot \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} d^3 r' \phi_{\vec{k}'}(\vec{r}') e^{-i\vec{q}_0 \cdot \vec{r}'} \phi_{\vec{k}, \vec{n}}^*(\vec{r}') \right\} \cdot \int_{-\infty}^{\infty} dt \int_{-\infty}^{\infty} dt' e^{-i(\omega_{k_\ell} - \omega_{k_R}) t'} \cdot \\
 & \cdot \langle 1 | b_{q_0}^+(t') | 0 \rangle \{ \theta(t-t') e^{-i(\omega_{k_z} - \omega_{k_z'} - i\frac{\Gamma+\Gamma'}{2})(t-t')} \cdot \\
 & \cdot \theta(|k_z| - k_{zF}^{(n)}) \theta(k_{zF}^{(n')} - |k_z|) + \theta(t'-t) e^{-i(\omega_{k_z'} - \omega_{k_z} - i\frac{\Gamma+\Gamma'}{2})(t'-t)} \cdot \\
 & \cdot \theta(|k_z'| - k_{zF}^{(n')}) \theta(k_{zF}^{(n)} - |k_z|) \} \quad (III.4.2)
 \end{aligned}$$

Essa expressão é semelhante à III.3.3, diferindo somente nas funções de t' . Procedendo da mesma forma que na secção III.3 obtemos com $\underline{q} = \underline{k}_\ell - \underline{k}_R$:

$$\begin{aligned}
 \langle f | S^{(2)} | i \rangle = & \frac{2\pi i A_{R\ell} V_{q_0} \sqrt{n_{k_\ell}}}{\hbar^2 \pi^2 \lambda^2} \sum_{n' > n} \sum_{n=0}^{n_0} |I_{q_1, \vec{n}, \vec{n}'}|^2 \int_{-\infty}^{\infty} dk_z \theta(|k_z| - k_{zF}^{(n')}) \theta(k_{zF}^{(n)} - |k_z|) \cdot \\
 & \cdot \left\{ \frac{1}{\hbar k_{zq_z} - (n'-n)\omega_c - \omega + i\frac{\Gamma+\Gamma'}{2}} + \frac{1}{\omega - (n'-n)\omega_c - \frac{k_{zq_z}\hbar}{m^*} + i\frac{\Gamma+\Gamma'}{2}} \right\} \cdot \\
 & \cdot \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt' e^{-i\omega t'} \langle 1 | b_q^+(t') | 0 \rangle
 \end{aligned}$$

(III.4.3)

Para obter a probabilidade de transição W_{fi} devemos achar o módulo quadrado da expressão acima. Isso implica em termos um resultado proporcional ao quadrado do módulo da integral em t' .

Antes de prosseguir, citamos Zubarev ⁽¹¹⁾ como referência e introduzimos as definições de função de correlação no tempo e densidade espectral para o caso específico de fonons.

$$F_q(t, t') = \langle b_q(t) b_q^\dagger(t') \rangle$$

$$F_q(t, t') = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega(t-t')} e^{\hbar\omega/KT} J(\omega) d\omega \quad (\text{III.4.4})$$

$$J_q(\omega) = \frac{i}{2\pi} (e^{\hbar\omega/KT} - 1)^{-1} \{ G_q(\omega+i\epsilon) - G_q(\omega-i\epsilon) \}$$

Aqui, T é a temperatura, $G_q(\omega)$ a transformada da função de Green a tempo duplo $G_q(t-t')$ definida segundo a referência na secção IV.1 e o valor médio é tomado sobre um ensemble grancanônico na forma (IV.1.2). Para o caso particular de $T = 0^\circ K$ a média se reduz ao estado fundamental e toma a forma:

$$F_q(t, t') = \langle 0 | b_q(t) b_q^\dagger(t') | 0 \rangle = \sum_r \langle 0 | b_q(t) | r \rangle \langle r | b_q^\dagger(t') | 0 \rangle \quad (\text{III.4.5})$$

Aqui r é um conjunto completo dos estados de fonon, mas apenas $r = 1$ realmente contribui na soma. Portanto, temos:

$$F_q(t, t') = \langle 0 | b_q(t) | 1 \rangle \langle 1 | b_q^\dagger(t') | 0 \rangle \quad (\text{III.4.6})$$

Para achar a probabilidade de transição, queremos o

módulo quadrado da parte temporal em III.4.3

$$\left| \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega t'} \langle 1 | b_q^+(t') | 0 \rangle dt' \right|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dt'}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dt}{2\pi} e^{-i\omega(t'-t)} \cdot \langle 0 | b_q(z) | 1 \rangle \langle 1 | b_q^+(t') | 0 \rangle =$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dt}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dt'}{2\pi} e^{i\omega(t-t')} F_q(t-t')$$

(III.4.7)

Usando III.4.4 temos que a expressão acima pode ser escrita como:

$$\lim_{T \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dt'}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dt}{2\pi} e^{i\omega(t-t')} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' e^{-i\omega'(t-t')} e^{\hbar\omega'/KT} J_q(\omega') =$$

$$= \lim_{T \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' e^{\hbar\omega'/KT} J_q(\omega') \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dt'}{2\pi} e^{i(\omega'-\omega)t'} \delta(\omega'-\omega) =$$

$$= \lim_{T \rightarrow 0} \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dt'}{2\pi} \right\} e^{\hbar\omega/KT} J_q(\omega)$$

(III.4.8)

Usando a relação entre $J_q(\omega)$ e a função de Green temos:

$$\left| \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega t'} \langle 1 | b_q^+(t') | 0 \rangle dt' \right|^2 = \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dt'}{2\pi} \right\} \frac{i}{2\pi} \frac{e^{\hbar\omega/KT}}{e^{\hbar\omega/KT} - 1} \cdot \{ G_q(\omega+i\epsilon) - G_q(\omega-i\epsilon) \}$$

(III.4.9)

Passando o $\lim T \rightarrow 0$, obtemos:

$$\left| \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-i\omega t'}}{2\pi} \langle 1 | b_q^+(t') | 0 \rangle dt' \right|^2 = \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dt'}{2\pi} \right\} \frac{i}{2\pi} \{ G_q(\omega+i\epsilon) - G_q(\omega-i\epsilon) \}$$

(III.4.10)

Finalmente, usando II.3.8 e a definição de $P_{fi}(d\Omega)$ obtemos:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega d\omega} = I(\omega) L(\omega)$$

$$L(\omega) = \frac{i}{2\pi} \{ G_q(\omega+i\epsilon) - G_q(\omega-i\epsilon) \} = - \frac{1}{\pi} \text{Im } G_q(\omega+i\epsilon)$$

onde $\epsilon \rightarrow 0$ e $I(\omega)$ é dado por III.3.10.

Na secção IV obtemos a função $G_q(\omega)$ para os fonons levando em conta a interação elétron-fonon, o que nos leva a uma expressão calculável para $L(\omega)$. Conseguimos também nessa mesma secção uma forma para o amortecimento $\gamma(\omega) = iP(\omega)$, introduzido fenomenologicamente na secção III.3.

Convem notar que nossa definição de $G_q(\omega)$, transformada da função de Green a tempo duplo $G_q(t-t')$, difere da de Zubarev ⁽¹¹⁾ por um fator de 2π , o que se reflete na relação III.4.4.

IV - CÁLCULO DA "FORMA DE LINHA"

IV.1 - Função de Green a Tempo Duplo Dependente da Temperatura

Para o cálculo da forma de linha convém introduzir a função de Green a tempo duplo $G(t - t')$. Nesta secção, seguimos o artigo de Zubarev ⁽¹¹⁾ e estabelecemos definições e propriedades que usaremos. Embora estejamos, no momento, interessados em $T = 0^\circ K$, aproveitando a potência do método, nesta secção trabalharemos com funções dependentes da temperatura para uso futuro, e fazemos o limite para $T = 0^\circ K$ ao fim do cálculo.

A função de Green a tempo duplo é definida como:

$$G(t-t') = \langle\langle A(t); B(t') \rangle\rangle \equiv -i \langle \hat{T} \{ A(t) B(t') \} \rangle \quad (IV.1.1)$$

onde o valor médio é da forma:

$$\langle O \rangle = Q^{-1} \text{Tr} (e^{-\frac{H}{KT}} O) \quad (IV.1.2)$$

sendo

$$Q^{-1} = \text{Tr} e^{-H/KT}$$

$$H = \hat{H} - \mu \hat{N} \quad (IV.1.3)$$

$$A(t) = e^{i H t / \hbar} A_s e^{-i H t / \hbar}$$

Aqui, T é a temperatura, $\hat{H}$ a hamiltoniana independente do tempo, $\hat{N}$ o operador número total de partículas e $A(t)$ e $B(t)$ são operadores A_s e B_s , expressos na representação de Heisenberg. Será útil para nós obter a equação de movimento para a função de Green, assim definida:

$$\langle\langle A(t); B(t') \rangle\rangle = -i \theta(t-t') \langle A(t) B(t') \rangle - i n \theta(t'-t) \langle B(t') A(t) \rangle$$

$\eta = \pm 1$, onde a escolha depende do problema, sendo geralmente escolhido o sinal (+) para operadores de bosons e (-) para fermions. A equação de movimento fica:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} G(t-t') &= -i \frac{d}{dt} \{ \theta(t-t') \} \langle A(t) B(t') \rangle - i\eta \frac{d}{dt} \{ \theta(t'-t) \} \langle B(t') A(t) \rangle - \\ &- i\theta(t-t') \langle \frac{dA}{dt}(t), B(t') \rangle - i\eta \theta(t'-t) \langle B(t') \frac{dA}{dt}(t) \rangle = \\ &= -i\delta(t-t') \langle [A(t), B(t)]_{\pm} \rangle + \langle\langle \frac{dA}{dt}(t); B(t') \rangle\rangle \end{aligned} \quad (IV.1.5)$$

Usando

$$\frac{d}{dt} \theta(t-t') = \delta(t-t')$$

e

$$i\hbar \frac{dA}{dt}(t) = [A(t), H]_{-}$$

obtemos:

$$i \frac{d}{dt} G(t-t') = \delta(t-t') \langle [A(t), B(t)]_{\pm} \rangle + \frac{1}{\hbar} \langle\langle [A(t), \hat{H}]; B(t') \rangle\rangle \quad (IV.1.6)$$

Analogamente, podemos definir as funções retardada e avançada $G_r(t-t')$ e $G_a(t-t')$ que formalmente obedecem a mesma equação acima:

$$G_r(t-t') = \langle\langle A(t); B(t') \rangle\rangle_r = -i\theta(t-t') \langle [A(t), B(t')]_{\pm} \rangle$$

$$G_a(t-t') = \langle\langle A(t); B(t') \rangle\rangle_a = i\theta(t-t') \langle [A(t), B(t')]_{\pm} \rangle$$

IV.2 - Cálculo da Função de Green a Tempo Duplo

Estando interessados na forma de linha Raman na região $\omega_0 \approx n\omega_c$, devemos tratar com especial atenção a influência da interação elétron-fonon. Não que em princípio a contribuição desse tipo de fenômeno para o amortecimento seja maior que a devida a outros tipos de interação, mas principalmente porque estamos numa região onde há ressonância entre os dois sistemas. Nessa região, o amortecimento devido à interação elétron-fonon pode variar drasticamente com a frequência ω ou com o campo H_0 (através de ω_c), a medida que nos afastamos ou aproximamos da ressonância. Quando o efeito desse amortecimento sobre fonons foi bastante forte para se sobrepor ao amortecimento de "background" devido a outras interações, a linha Raman aparecerá fortemente desviada da forma Lorentziana, refletindo propriedades do sistema na região anômala.

Nessa parte, calcularemos a função de Green a tempo duplo dependente da temperatura para elétrons e fonons em presença de campo magnético constante, para um sistema de fonons e elétrons, levando em conta a interação elétron-fonon. Os efeitos de outras interações não incluídas nesse modelo, mas existentes no cristal, serão levados em conta adicionando ao amortecimento uma contribuição de "background" independente da frequência e do campo magnético.

Prosseguimos aqui para calcular $G_q(t-t') = \langle\langle b_q(t); b_q^+(t') \rangle\rangle$ e $G_{kn}(t-t') = \langle\langle a_{kn}(t); a_{kn}^+(t') \rangle\rangle$ cujas descontinuidades nos darão informações sobre o amortecimento para fonons e elétrons respectivamente.

Seguindo o método sugerido por Zubarev, (11) escrevemos as equações de movimento para as funções de Green $G_q(t-t')$ e $G_{kn}(t-t')$. Essas equações são acopladas através da parte interativa da Hamiltoniana e para resolver o sistema introduzi-

mos aproximações apropriadas que levam a um desacoplamento.

Assim, temos, usando (IV.1.6) e as definições de $G_q(t-t')$ e $G_{\underline{k}\underline{n}}(t-t')$:

$$i \frac{d}{dt} G_q(t-t') = \delta(t-t') \langle [b_{\underline{q}}(t), b_{\underline{q}}^+(t)] \rangle + \frac{1}{\hbar} \langle\langle [b_{\underline{q}}(t), \hat{H}]; b_{\underline{q}}^+(t') \rangle\rangle$$

$$i \frac{d}{dt} G_{\underline{k}\underline{n}}(t-t') = \delta(t-t') \langle [a_{\underline{k}\underline{n}}(t), a_{\underline{k}\underline{n}}^+(t)] \rangle + \frac{1}{\hbar} \langle\langle [a_{\underline{k}\underline{n}}(t), \hat{H}]; a_{\underline{k}\underline{n}}^+(t') \rangle\rangle$$

(IV.2.1)

Precisamos especificar $\hat{H} = \hat{H} - \mu \hat{N}$ onde $\hat{N} = \sum_{\underline{k}\underline{n}} a_{\underline{k}\underline{n}}^+ a_{\underline{k}\underline{n}}$ e μ se refere aqui ao potencial químico para os elétrons. A hamiltoniana $\hat{H}$ inclui a parte eletrônica $\hat{H}_e$, a parte de fonons $\hat{H}_f$ e a parte interativa $\hat{H}_{ef}$ abaixo:

$$\hat{H}_e = \sum_{\underline{k}\underline{n}} E_{\underline{k}\underline{n}} a_{\underline{k}\underline{n}}^+ a_{\underline{k}\underline{n}}$$

$$\hat{H}_f = \sum_{\underline{q}} \hbar \omega_{\underline{q}} b_{\underline{q}}^+ b_{\underline{q}}$$

(IV.2.2)

$$\hat{H}_{ef} = \sum_{\substack{\underline{k}\underline{n} \\ \underline{k}'\underline{n}' \\ \underline{q}}} V_{\underline{q}} \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} \phi_{\underline{k}}^*(\underline{r}) e^{i\underline{q} \cdot \underline{r}} \phi_{\underline{k}'}(\underline{r}) d^3 r \right\} a_{\underline{k}\underline{n}}^+ a_{\underline{k}'\underline{n}'} (b_{\underline{q}} + b_{-\underline{q}}^+)$$

Onde relembramos que em nossa notação $\underline{k} = k_x, k_z, \sigma$ e nos referimos a (II.2.17) onde a integral na expressão para $\hat{H}_{ef}$ é dada em termos de $I_{\underline{nn}'} = I_{\underline{nn}'}^{\underline{q}\underline{k}_x}$, onde usamos $k_x = k'_x + q_x$. (Na expressão de $I_{\underline{nn}'}^{\underline{q}\underline{k}_x}$ trocar nk_x em $n'k'_x$ equivale a trocar q_x em $-q_x$). Obtemos finalmente:

$$\hat{H} = \sum_{\underline{k}n} T_{kz} a_{\underline{k}n}^+ a_{\underline{k}n} + \sum_{\underline{q}} \hbar \omega_{\underline{q}} b_{\underline{q}}^+ b_{\underline{q}} + \sum_{\substack{\underline{k}n \\ \tilde{n}_1 \underline{q}}} V_{\underline{q}} I_{nn_1}^{\underline{k} \underline{q}} a_{\tilde{n}}^{k+q} a_{\tilde{n}_1}^k (b_{\underline{q}} + b_{-\underline{q}}^+)$$

onde

$$T_{kz} = E_{kz} - \mu = \hbar \omega_c (n + \frac{1}{2}) + \frac{k_z^2 \hbar^2}{2m^*} - \mu \quad (\text{IV.2.3})$$

Voltando a IV.2.1, devemos calcular $[b_{\underline{q}}(t), \hat{H}]$ e $[a_{\underline{k}n}(t), \hat{H}]$.

Segundo IV.1.3,

$$b_{\underline{q}}(t) = e^{i\hat{H}t/\hbar} b_{\underline{q}} e^{-i\hat{H}t/\hbar}$$

e portanto,

$$[b_{\underline{q}}(t), \hat{H}] = e^{i\hat{H}t/\hbar} [b_{\underline{q}}, \hat{H}] e^{-i\hat{H}t/\hbar}$$

Mas, temos:

$$[b_{\underline{q}}, \hat{H}] = \sum_{\underline{q}'} \hbar \omega_{\underline{q}'} [b_{\underline{q}}, b_{\underline{q}'}^+ b_{\underline{q}'}] + \sum_{\substack{\underline{k}n \\ \tilde{n}_1 \underline{q}'}} V_{\underline{q}'} I_{nn_1}^{\underline{k} \underline{q}'} a_{\tilde{n}}^{k+q'} a_{\tilde{n}_1}^k [b_{\underline{q}}, (b_{\underline{q}'} + b_{-\underline{q}'}^+)] =$$

$$= \sum_{\underline{q}'} \hbar \omega_{\underline{q}'} b_{\underline{q}} \delta_{\underline{q}, \underline{q}'} + \sum_{\substack{\underline{k}n \\ \tilde{n}_1 \underline{q}'}} V_{\underline{q}'} I_{nn_1}^{\underline{k} \underline{q}'} a_{\tilde{n}}^{k+q'} a_{\tilde{n}_1}^k \delta_{\underline{q}, \underline{q}'} =$$

$$= \hbar \omega_{\underline{q}} b_{\underline{q}} + \sum_{\substack{\underline{k}n \\ \tilde{n}_1}} V_{-\underline{q}} I_{nn_1}^{\underline{k} -\underline{q}} a_{\tilde{n}}^{k-\underline{q}} a_{\tilde{n}_1}^k \quad (\text{IV.2.4})$$

notando que $e^{i\hat{H}t/\hbar} e^{-i\hat{H}t/\hbar} \equiv 1$ podemos achar:

$$[b_{\underline{q}}(t), \hat{H}] = \hbar \omega_{\underline{q}} b_{\underline{q}}(t) + \sum_{\underline{k} n n_1} V_{-\underline{q}} I_{nn_1}^{-q \underline{k}_x} a_{\underline{k}-\underline{q}}^+(t) a_{\underline{k}}(t) \quad (IV.2.5)$$

Como $[b_{\underline{q}}(t), b_{\underline{q}}^+(t)] = 1$ a equação (IV.2.1) fica:

$$i \frac{d}{dt} G_{\underline{q}}(t-t') = \delta(t-t') + \omega_{\underline{q}} \langle\langle b_{\underline{q}}(t); b_{\underline{q}}^+(t') \rangle\rangle + \\ + \frac{1}{\hbar} \sum_{\underline{k} n} V_{-\underline{q}} I_{nn_1}^{-q \underline{k}_x} \langle\langle a_{\underline{k}-\underline{q}}^+(t) a_{\underline{k}}(t); b_{\underline{q}}^+(t') \rangle\rangle \quad (IV.2.6)$$

De forma análoga, obtemos:

$$i \frac{d}{dt} G_{\underline{k}}(t-t') = \delta(t-t') + \frac{T_{\underline{k}_z n}}{\hbar} \langle\langle a_{\underline{k}}(t); a_{\underline{k}}^+(t') \rangle\rangle + \\ + \sum_{\underline{q} \tilde{n}_2} V_{\underline{q}} I_{nn_2}^{q(\underline{k}-\underline{q})_x} \hbar^{-1} \langle\langle a_{\underline{k}-\underline{q}}(t) (b_{\underline{q}}(t) + b_{-\underline{q}}^+(t)); a_{\underline{k}}^+(t') \rangle\rangle \quad (IV.2.7)$$

Para simplificar a notação, definimos:

$$C_{\underline{k}-\underline{q}, \underline{k}}^q \equiv \langle\langle a_{\underline{k}-\underline{q}}^+(t) a_{\underline{k}}(t); b_{\underline{q}}^+(t') \rangle\rangle \\ A_{\underline{k}-\underline{q}, \underline{q}}^{\underline{k} n} \equiv \langle\langle a_{\underline{k}-\underline{q}}(t) b_{\underline{q}}(t); a_{\underline{k}}^+(t') \rangle\rangle \quad (IV.2.8)$$

$$B_{\underline{k}-\underline{q}, -\underline{q}}^{\underline{k}, n} \equiv \langle\langle a_{\underline{k}-\underline{q}}(t) b_{-\underline{q}}^+(t); a_{\underline{k}}^+(t') \rangle\rangle$$

Finalmente, as equações de movimento IV.2.1 ficam:

$$\begin{aligned}
 i \frac{d}{dt} G_q(t-t') &= \delta(t-t') + \omega_q G_q(t-t') + \\
 &+ \frac{1}{\hbar} \sum_{\substack{\underline{k}n \\ \tilde{n}_1}} V_{-q} I_{nn_1}^{nn_1} C_{\tilde{n}, \underline{k}}^{q, k} \\
 i \frac{d}{dt} G_{\underline{k}n}(t-t') &= \delta(t-t') + \frac{T_{k_z n}}{\hbar} G_{\tilde{n}}(t-t') + \\
 &+ \frac{1}{\hbar} \sum_{\substack{\underline{q}n_2 \\ \tilde{n}_2}} V_q I_{nn_2}^{nn_2} \{ A_{\tilde{n}_2, \underline{q}}^{kn} + B_{\tilde{n}_2, -\underline{q}}^{kn} \}
 \end{aligned}
 \tag{IV.2.9}$$

Para completar o sistema de equações (IV.2.9), vamos precisar de equações para $A_{\tilde{n}_2, \underline{q}}^{kn}$, $B_{\tilde{n}_2, -\underline{q}}^{kn}$ e $C_{\tilde{n}}^{q, k}$ que por sua vez virão expressas em termos de funções de Green envolvendo maior número de operadores (de ordem superior). Para quebrar essa cadeia e resolver o sistema, devemos, em algum ponto, introduzir simplificações que levem a um desacoplamento.

Prosseguindo, escreveremos a equação de movimento para as novas funções de Green envolvidas:

Por exemplo, para $C_{\tilde{n}, \underline{k}}^{q, k}$

$$\begin{aligned}
 i \frac{d}{dt} C_{\tilde{n}, \underline{k}}^{q, k} &= \delta(t-t') \langle [a_{\tilde{n}, \underline{q}}^+(t) a_{\tilde{n}_1, \underline{k}}(t), b_{\underline{q}}^+(t')] \rangle + \\
 &+ \frac{1}{\hbar} \langle\langle [a_{\tilde{n}, \underline{q}}^+(t) a_{\tilde{n}, \underline{k}}(t), \hat{H}]; b_{\underline{q}}^+(t') \rangle\rangle
 \end{aligned}
 \tag{IV.2.10}$$

Mas temos:

$$\begin{aligned}
 [a_{\tilde{n}, k-q}^+ a_{\tilde{n}_1, k}, \hat{H}] &= \sum_{\tilde{k}_1, n_2} T_{\tilde{k}_1, n_2, z} [a_{\tilde{n}, k-q}^+ a_{\tilde{n}_1, k}, a_{\tilde{n}_2, k_1}^+ a_{\tilde{n}_2, k_1}] + \\
 &+ \sum_{\substack{\tilde{k}_1, n_2 \\ \tilde{n}_3, q'}} V_{q'} I_{n_2, n_3} [a_{\tilde{n}, k-q}^+ a_{\tilde{n}_1, k}, a_{\tilde{n}_2, k_1+q}^+ a_{\tilde{n}_3, k_1}] (b_{\tilde{q}, k} + b_{-\tilde{q}, k}) = \\
 &= \sum_{\tilde{k}_1, n_2} T_{\tilde{k}_1, n_2, z} \{ -\delta_{\tilde{k}_1, k-q} a_{\tilde{n}, k-q}^+ a_{\tilde{n}_1, k} + \delta_{\tilde{k}_1, k} a_{\tilde{n}, k-q}^+ a_{\tilde{n}_1, k} \} + \\
 &+ \sum_{\substack{\tilde{k}_1, n_2 \\ \tilde{n}_3, q'}} V_{q'} I_{n_2, n_3} \{ \delta_{\tilde{k}_1+q, k} a_{\tilde{n}, k-q}^+ a_{\tilde{n}_1, k} - \delta_{\tilde{k}_1, k-q} a_{\tilde{n}_2, k_1+q}^+ a_{\tilde{n}_3, k_1} \} (b_{\tilde{q}, k} + b_{-\tilde{q}, k}) = \\
 &= (T_{\tilde{k}_z, n_1} - T_{(k-q)_z, n}) a_{\tilde{n}, k-q}^+ a_{\tilde{n}_1, k} + \sum_{\tilde{n}_3, q'} V_{q'} I_{n_1, n_3} a_{\tilde{n}, k-q}^+ a_{\tilde{n}_3, k-q} (b_{\tilde{q}, k} + b_{-\tilde{q}, k}) - \\
 &- \sum_{\tilde{q}', n_2} V_{q'} I_{n_2, n} a_{\tilde{k}-q+q, k}^+ a_{\tilde{n}_2, k} (b_{\tilde{q}', k} - b_{-\tilde{q}', k})
 \end{aligned}
 \tag{IV.2.11}$$

Finalmente, incluindo a dependência temporal, substituindo na equação IV.2.10 e multiplicando por $\hbar$ obtemos:

$$\begin{aligned}
 i\hbar \frac{d}{dt} C_{\tilde{n}, k-q, k}^q &= (T_{\tilde{k}_z, n_1} - T_{(k-q)_z, n}) C_{\tilde{n}, k-q, k}^q + \\
 &+ \sum_{\tilde{q}', n_3} V_{q'} I_{n_1, n_3} \langle\langle a_{\tilde{n}, k-q}^+(t) a_{\tilde{n}_3, k-q}(t) (b_{\tilde{q}', k}(t) + b_{-\tilde{q}', k}(t); b_{\tilde{q}}(t')) \rangle\rangle -
 \end{aligned}$$

$$- \sum_{\underline{q}' n_2} V_{\underline{q}'} I_{n_2 n_1}^{(k-q)} \ll a_{\underline{k}-\underline{q}+\underline{q}'}^+(t) a_{\underline{k}}(t) (b_{\underline{q}}(t) + b_{-\underline{q}}(t)); b_{\underline{q}}^+(t') \gg \quad (IV.2.12)$$

De maneira análoga, obtemos as equações de movimento para as funções $A_{\underline{k}-\underline{q}, \underline{q}}^{kn}$ e $B_{\underline{k}-\underline{q}, -\underline{q}}^{kn}$. Omitimos aqui as passagens intermediárias chamando apenas a atenção para o fato de que $\underline{q}$ é sempre diferente de ZERO.

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} A_{\underline{k}-\underline{q}, \underline{q}}^{kn} &= (T_{n_2}^{(k-q)} + \hbar\omega_{\underline{q}}) A_{\underline{k}-\underline{q}, \underline{q}}^{kn} + \\ &+ \sum_{\underline{q}' n_3} V_{\underline{q}'} I_{n_2 n_3}^{(k-q'-q)} \ll a_{\underline{k}-\underline{q}-\underline{q}'}(t) (b_{\underline{q}'}(t) + b_{-\underline{q}'}(t)) b_{\underline{q}}(t); a_{\underline{k}}^+(t') \gg + \\ &+ \sum_{\substack{n_1 k_1 \\ n_3}} V_{-\underline{q}'} I_{n_1 n_3}^{(k-q', k_1)} \ll a_{\underline{k}-\underline{q}'}(t) a_{\underline{k}_1-\underline{q}'}^+(t) a_{\underline{k}_1}(t); a_{\underline{k}}^+(t') \gg \\ i\hbar \frac{d}{dt} B_{\underline{k}-\underline{q}, -\underline{q}}^{kn} &= (T_{n_2}^{(k-q)} - \hbar\omega_{-\underline{q}}) B_{\underline{k}-\underline{q}, -\underline{q}}^{kn} + \\ &+ \sum_{\substack{n_3 \underline{q}' \\ n_2 n_3}} V_{\underline{q}'} I_{n_2 n_3}^{(k-q'-q)} \ll a_{\underline{k}-\underline{q}-\underline{q}'}(t) (b_{\underline{q}'}(t) + b_{-\underline{q}'}^+(t)) b_{-\underline{q}}^+(t); a_{\underline{k}}^+(t') \gg - \\ &- \sum_{\substack{n_1 k_1 \\ n_3}} V_{-\underline{q}'} I_{n_1 n_3}^{(k-q', k_1)} \ll a_{\underline{k}-\underline{q}'}(t) a_{\underline{k}_1-\underline{q}'}^+(t) a_{\underline{k}_1}(t); a_{\underline{k}}^+(t') \gg \end{aligned} \quad (IV.2.13)$$

Para desacoplar a cadeia fazemos as seguintes aproximações, arranjando em pares, operadores a mesmo tempo:

$$\langle\langle a_{\underline{\tilde{n}}_2, \underline{\tilde{n}}_3}^{+k-q}(t) a_{\underline{\tilde{n}}_3}^{k-q'}(t) b_{\underline{q}'}(t); b_{\underline{q}}^{+}(t') \rangle\rangle \approx \delta_{\underline{q}, \underline{q}'} \bar{n}_{\underline{\tilde{n}}_2, \underline{\tilde{n}}_3}^{k-q} G_{\underline{q}}(t-t')$$

$$\langle\langle a_{\underline{\tilde{n}}_2, \underline{\tilde{n}}_3}^{+k-q}(t) a_{\underline{\tilde{n}}_3}^{k-q'}(t) b_{\underline{q}'}^{+}(t); b_{\underline{q}}(t') \rangle\rangle \approx 0 \quad \text{pois} \quad \langle\langle b_{\underline{q}}^{+}(t); b_{\underline{q}}^{+}(t') \rangle\rangle = 0$$

$$\langle\langle a_{\underline{\tilde{n}}_2, \underline{\tilde{n}}_1}^{+k-q+q'}(t) a_{\underline{\tilde{n}}_1}^k(t) b_{\underline{q}'}^{+}(t); b_{\underline{q}}^{+}(t') \rangle\rangle \approx 0$$

$$\langle\langle a_{\underline{\tilde{n}}_2, \underline{\tilde{n}}_1}^{+k-q+q'}(t) a_{\underline{\tilde{n}}_1}^k(t) b_{\underline{q}'}(t); b_{\underline{q}}^{+}(t') \rangle\rangle \approx \delta_{\underline{q}', \underline{q}} \bar{n}_{\underline{\tilde{n}}_2, \underline{\tilde{n}}_1}^k G_{\underline{q}}(t-t')$$

$$\langle\langle a_{\underline{\tilde{n}}_2, \underline{\tilde{n}}_3}^{+k-q-q'}(t) b_{\underline{q}'}(t) b_{\underline{q}}(t); a_{\underline{\tilde{n}}}^{+k}(t') \rangle\rangle \approx 0 \quad \langle b_{\underline{q}'}(t) b_{\underline{q}}(t) \rangle = 0$$

$$\langle\langle a_{\underline{\tilde{n}}_2, \underline{\tilde{n}}_3}^{+k-q-q'}(t) b_{\underline{q}'}^{+}(t) b_{\underline{q}}(t); a_{\underline{\tilde{n}}}^{+k}(t') \rangle\rangle \approx \delta_{\underline{q}, -\underline{q}'} \bar{v}_{\underline{\tilde{n}}_2, \underline{\tilde{n}}_3}^{\underline{q}} G_{\underline{\tilde{n}}}^k(t-t')$$

$$\langle\langle a_{\underline{\tilde{n}}_2}^{+k-q}(t) a_{\underline{\tilde{n}}_1}^{+k_1-q}(t) a_{\underline{\tilde{n}}_3}^{k_1}(t); a_{\underline{\tilde{n}}}^{+k}(t') \rangle\rangle \approx \delta_{\underline{\tilde{n}}_2, \underline{\tilde{n}}_1}^{k_1, k} \delta_{\underline{n}_3, \underline{n}}^{(1-\bar{n}_{\underline{\tilde{n}}_2}^{k-q})} G_{\underline{\tilde{n}}}^k(t-t')$$

$$\langle\langle a_{\underline{\tilde{n}}_2, \underline{\tilde{n}}_3}^{+k-q-q'}(t) b_{\underline{q}'}(t) b_{\underline{q}}^{+}(t); a_{\underline{\tilde{n}}}^{+k}(t') \rangle\rangle \approx \delta_{\underline{q}, -\underline{q}'} \delta_{\underline{n}_3, \underline{n}}^{(1+\bar{v}_{\underline{q}})} G_{\underline{\tilde{n}}}^k(t-t')$$

$$\langle\langle a_{\underline{\tilde{n}}_2, \underline{\tilde{n}}_3}^{+k-q-q'}(t) b_{\underline{q}'}^{+}(t) b_{\underline{q}}^{+}(t); a_{\underline{\tilde{n}}}^{+k}(t') \rangle\rangle \approx 0$$

(IV.2.14)

onde $\bar{n}_{\underline{k}\underline{n}} \equiv \langle a_{\underline{k}\underline{n}}^{+}(t) a_{\underline{k}\underline{n}}(t) \rangle$ e $\bar{v}_{\underline{q}} \equiv \langle b_{\underline{q}}^{+}(t) b_{\underline{q}}(t) \rangle$, com valor médio definido por (IV.1.2).

Esse desacoplamento leva à aproximação de Hartree-Fock

generalizada, onde correlações dinâmicas simultâneas a duas partículas são desprezadas. (11,12)

Usando essa aproximação nas equações IV.2.12 e IV.2.13 obtemos o conjunto aproximado abaixo, que, juntamente com as equações exatas IV.2.9, formam um sistema de equações solúvel para $G_q(t-t')$ e $G_{kn}(t-t')$.

$$i\hbar \frac{d}{dt} C_{\tilde{n}n_1}^q(k-q, k) = (T_{k_z} - T_{(k-q)_z}) C_{\tilde{n}, \tilde{n}_1}^q(k-q, k) + V_q I_{n_1, n} (\bar{n}_{k-q} - \bar{n}_{k'}) G_q(t-t')$$

$$i\hbar \frac{d}{dt} A_{\tilde{n}_2}^{kn}(k-q, q) = (T_{(k-q)_z} + \hbar\omega_q) A_{\tilde{n}_2}^{kn}(k-q, q) + V_{-q} I_{n_2, n} (\bar{v}_q + 1 - \bar{n}_{k-q}) G_k(t-t')$$

$$i\hbar \frac{d}{dt} B_{\tilde{n}_1}^{kn}(k-q, q) = (T_{(k-q)_z} - \hbar\omega_q) B_{\tilde{n}_1}^{kn}(k-q, q) + V_{-q} I_{n_2, n} (\bar{v}_q - \bar{n}_{k-q}) G_k(t-t')$$

(IV.2.15)

Aqui, passamos para o espaço transformado em termos do qual o sistema composto por IV.2.9 e IV.2.15 é facilmente resolúvel. Definimos a função transformada:

$$G(t) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} G(E/\hbar) e^{-i\frac{E}{\hbar}t} dE \quad (IV.2.16)$$

onde $G(t)$ aqui, é qualquer das funções de Green definidas acima. Em termos da transformada, a equação para $C_{\tilde{n}n_1}^q(k-q, k)$ fica:

$$(E - T_{k_z} + T_{(k-q)_z}) C_{\tilde{n}n_1}^q(k-q, k) (E\hbar^{-1}) = V_q I_{n_1, n} (\bar{n}_{k-q} - \bar{n}_{k'}) G_q(E\hbar^{-1})$$

(IV.2.17)

Facilmente obtemos $C_{\tilde{n}, k-q, \tilde{n}_1}^q (E\hbar^{-1})$ como função de $G_q(E\hbar^{-1})$.

Procedendo de forma análoga, podemos achar $A_{\tilde{n}_2, k-q, q}^{kn} (E\hbar^{-1})$ e $B_{\tilde{n}_2, k-q, -q}^{kn} (E\hbar^{-1})$ em termos de $G_{\tilde{n}}(E\hbar^{-1})$:

$$C_{\tilde{n}, k-q, \tilde{n}_1}^q (E\hbar^{-1}) = \frac{V_q I_{n, n}^{q(k-q)_x} (\bar{n}_{k-q} - \bar{n}_{\tilde{n}_1})}{(E - T_{k_z, n_1} + T_{(k-q)_z, n})} G_q(E\hbar^{-1})$$

$$A_{\tilde{n}_2, k-q, q}^{kn} (E\hbar^{-1}) = \frac{V_{-q} I_{n_2, n}^{k_x, -q} (\bar{v}_q + 1 - \bar{n}_{k-q})}{(E - T_{(k-q)_z, n_2} - \hbar\omega_q)} G_{\tilde{n}}(E\hbar^{-1})$$

$$B_{\tilde{n}_2, k-q, -q}^{kn} (E\hbar^{-1}) = \frac{V_{-q} I_{n_2, n}^{k_x, -q} (\bar{v}_{-q} + \bar{n}_{k-q})}{(E - T_{(k-q)_z, n_2} + \hbar\omega_q)} G_{\tilde{n}}(E\hbar^{-1})$$

(IV.2.18)

Lembrando que a função $\delta(t-t')$ pode ser escrita como:

$$\delta(t-t') = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-iE(t-t')/\hbar} dE$$

obtemos as equações transformadas para IV.2.9 :

$$E\hbar^{-1} G_q(E\hbar^{-1}) = 1 + \omega_q G_q(E\hbar^{-1}) + \frac{1}{\hbar} \sum_{\tilde{n}_1} V_{-q} I_{nn_1}^{k_x, -q} C_{\tilde{n}, k-q, \tilde{n}_1}^q (E\hbar^{-1})$$

$$\begin{aligned}
 E\hbar^{-1}G_{\vec{k}}(E\hbar^{-1}) = 1 + T_{k_z} \hbar^{-1}G_{\vec{k}}(E\hbar^{-1}) + \\
 + \frac{1}{\hbar} \sum_{\vec{q}n_2} V_q I_{nn_2} \{ A_{\vec{k}-\vec{q},\vec{q}}^{kn}(\hbar^{-1}) + B_{\vec{k}-\vec{q},-\vec{q}}^{kn}(\hbar^{-1}) \}
 \end{aligned}
 \tag{IV.2.19}$$

Antes de continuar convem notar que $V_{-q} = V_q^*$,

$$I_{-qk_x} = I_{q(k-q)_x}^* \quad \text{e que portanto,}$$

$$V_{-q} V_q I_{\vec{n}\vec{n}_1} I_{q(k_x-q)_x} = |V_q I_{q\perp}^{\vec{n}\vec{n}_1}|^2$$

(IV.2.20)

onde $|I_{q\perp}^{\vec{n}\vec{n}_1}|^2$ é dado em II.3.10.

Substituindo IV.2.18 em IV.2.19 e usando IV.2.20, temos:

$$G_q(E\hbar^{-1}) = \frac{1}{(E\hbar^{-1} - \omega_q - P_q(E\hbar^{-1}))} \tag{IV.2.21}$$

onde

$$P_q(E\hbar^{-1}) = \sum_{\vec{k}n} \frac{|A_q I_{q\perp}^{\vec{n}\vec{n}_1}|^2}{\hbar^2} \frac{(\vec{n}_{\vec{k}-\vec{q}} - \vec{n}_{\vec{k}n_1})}{(E\hbar^{-1} - T_{k_z} \hbar^{-1} + T_{(k-q)_z} \hbar^{-1})}$$

Da mesma forma obtemos:

$$G_{\vec{k}n}(E\hbar^{-1}) = \frac{1}{(E\hbar^{-1} - T_{k_z} \hbar^{-1} - M_{\vec{k}n}(E\hbar^{-1}))} \tag{IV.2.22}$$

onde

$$M_{\vec{k}}(E\hbar^{-1}) = \sum_{\vec{q}n_2} \frac{|A_q I_{q\perp}^{\vec{n}\vec{n}_2}|^2}{\hbar^2} \left\{ \frac{\vec{v}_q + 1 - \vec{n}_{\vec{k}-\vec{q}}}{\hbar^{-1}E - \hbar^{-1}T_{(k-q)_z} - \omega_q} + \frac{\vec{v}_{-q} + \vec{n}_{\vec{k}-\vec{q}}}{\hbar^{-1}E - \hbar^{-1}T_{(k-q)_z} + \omega_q} \right\}$$

IV.3 - Obtenção da "Forma de Linha"

Como vimos na secção III.4 , a "forma de linha" está relacionada com a função de Green pela relação (III.4.11), onde ω é real e $\epsilon \rightarrow 0$.

$$L(\omega) = \frac{i}{2\pi} \{ G(\omega+i\epsilon) - G(\omega-i\epsilon) \} = - \frac{1}{\pi} \text{Im } G_q(\omega+i\epsilon) \quad (\text{IV.3.1})$$

Uma vez calculada a função de Green $G_q(E\hbar^{-1})$ podemos obter $G_q(\omega\pm i\epsilon)$ fazendo $E = \hbar(\omega\pm i\epsilon)$.

$$G_q(\omega\pm i\epsilon) = \frac{1}{\omega - \omega_q - P(\omega\pm i\epsilon)} \quad (\text{IV.3.2})$$

Usando a identidade formal

$$\frac{1}{\omega_0 - \omega \pm i\epsilon} \equiv P \frac{1}{\omega_0 - \omega} \mp i\pi\delta(\omega_0 - \omega)$$

onde P indica valor principal, temos:

$$P_q(\omega\pm i\epsilon) = P_q(\omega) \mp i\gamma_q(\omega)$$

$$P_q(\omega) = P \sum_{\substack{n_1, k \\ n}} \frac{|V_{q, q_{\perp}}^{I_{nn_1}}|^2}{\hbar^2} \frac{(\bar{n}_{k-q} - \bar{n}_k)}{\bar{n}_1} \frac{1}{\omega - T_{k_z} \hbar^{-1} + T_{(k-q)_z} \hbar^{-1}}$$

$$\gamma_q(\omega) = \frac{\pi}{\hbar^2} \sum_{\substack{n_1, n \\ k}} |V_{q, q_{\perp}}^{I_{nn_1}}|^2 (\bar{n}_{k-q} - \bar{n}_k) \delta(\omega - T_{k_z} \hbar^{-1} + T_{(k-q)_z} \hbar^{-1})$$

Da mesma forma, para elétrons, temos:

$$G_{\vec{k}}(\omega \pm i\epsilon) = \frac{1}{\omega - \hbar^{-1} T_{\vec{k}} - M(\omega \pm i\epsilon)}$$

$$M(\omega \pm i\epsilon) = M_{\vec{k}}(\omega) \mp i\gamma_{\vec{k}}(\omega)$$

$$M_{\vec{k}}(\omega) = P \sum_{\vec{q}, n_2} \frac{|V_{\vec{q}} I_{\vec{q}, \vec{k}}|^2}{\hbar^2} \left\{ \frac{(\bar{v}_{\vec{q}} + 1 - \bar{n}_{\vec{k}-\vec{q}})}{\omega - T_{(\vec{k}-\vec{q})} \hbar^{-1} - \omega_{\vec{q}}} + \frac{(\bar{v}_{-\vec{q}} + \bar{n}_{\vec{k}-\vec{q}})}{\omega - T_{(\vec{k}-\vec{q})} \hbar^{-1} + \omega_{\vec{q}}} \right\}$$

$$\gamma_{\vec{k}} = \frac{\pi}{\hbar^2} \sum_{\vec{q}, n_2} |V_{\vec{q}} I_{\vec{q}, \vec{k}}|^2 \left\{ (\bar{v}_{\vec{q}} + 1 - \bar{n}_{\vec{k}-\vec{q}}) \delta(\omega - \hbar^{-1} T_{(\vec{k}-\vec{q})} - \omega_{\vec{q}}) + \right.$$

$$\left. + (\bar{v}_{-\vec{q}} + \bar{n}_{\vec{k}-\vec{q}}) \delta(\omega - \hbar^{-1} T_{(\vec{k}-\vec{q})} + \omega_{\vec{q}}) \right\}$$

(IV.3.4)

Vemos que as grandezas acima dependem da temperatura através dos valores médios $\bar{n}_{\vec{k}}$ e $\bar{v}_{\vec{q}}$. Vamos introduzir aqui as densidades espectrais $J_{\vec{q}}(\omega)$ e $J_{\vec{k}}(\omega)$ definidas por Zubarev (11) e já citadas anteriormente. Elas podem ser obtidas da função de Green e fornecem uma equação integral para $\bar{n}_{\vec{k}}$ e $\bar{v}_{\vec{q}}$. Obtemos assim um sistema de equações auto consistentes para $\bar{n}_{\vec{k}}$, $\bar{v}_{\vec{q}}$, $\gamma_{\vec{k}}$, $\gamma_{\vec{q}}$, $M_{\vec{k}}$, $P_{\vec{q}}$. Temos:

$$J_{\vec{q}}(\omega) = \frac{i(e^{\hbar\omega/KT} - 1)^{-1}}{2\pi} \{ G_{\vec{q}}(\omega + i\epsilon) - G_{\vec{q}}(\omega - i\epsilon) \} =$$

$$\begin{aligned}
 &= \frac{\gamma_q(\omega) (e^{\frac{\hbar\omega}{KT}} - 1)^{-1}}{\pi(\omega - \omega_q - P_q(\omega))^2 + (\gamma_q(\omega))^2} \\
 J_{\tilde{n}}^k(\omega) &= \frac{i(e^{\hbar\omega/KT} + 1)^{-1}}{2\pi} \{ G_{\tilde{n}}^k(\omega + i\varepsilon) - G_{\tilde{n}}^k(\omega - i\varepsilon) \} = \\
 &= \frac{\gamma_{\tilde{n}}^k(\omega) (e^{\hbar\omega/KT} + 1)^{-1}}{\pi(\omega - T_{\tilde{n}}^k \hbar^{-1} - M_{\tilde{n}}^k(\omega))^2 + (\gamma_{\tilde{n}}^k(\omega))^2}
 \end{aligned}
 \tag{IV.3.5}$$

Com essa definição, as equações para $\bar{n}_k$ e $\bar{v}_q$ em função de $\gamma_q(\omega)$, $\gamma_{\tilde{n}}^k(\omega)$, $P_q(\omega)$ e $M_{\tilde{n}}^k(\omega)$ ficam:

$$\begin{aligned}
 \bar{n}_{\tilde{n}}^k &= \int_{-\infty}^{\infty} J_{\tilde{n}}^k(\omega) d\omega = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\gamma_{\tilde{n}}^k(\omega) (e^{\hbar\omega/KT} + 1)^{-1} d\omega}{(\omega - T_{\tilde{n}}^k \hbar^{-1} - M_{\tilde{n}}^k(\omega))^2 + (\gamma_{\tilde{n}}^k(\omega))^2} \\
 \bar{v}_q &= \int_{-\infty}^{\infty} J_q(\omega) d\omega = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\gamma_q(\omega) (e^{\hbar\omega/KT} - 1)^{-1} d\omega}{(\omega - \omega_q - P_q(\omega))^2 + (\gamma_q(\omega))^2}
 \end{aligned}
 \tag{IV.3.6}$$

Para uma temperatura arbitrária, devemos resolver as equações IV.3.6 juntamente com as obtidas para $P_q(\omega)$, $M_{\tilde{n}}^k(\omega)$, $\gamma_q(\omega)$ e $\gamma_{\tilde{n}}^k(\omega)$ de forma auto-consistente. Este problema em sua forma mais geral é bastante complexo.

Passamos agora a nos restringir ao problema concreto

que queremos resolver. A grande simplificação vem do fato de estarmos a baixa temperatura (0°K). Nesse limite $v_q = 0$ e em boa aproximação, temos:

$$\bar{n}_{\tilde{k}} = 0 \quad \text{se} \quad T_{k_z} > 0 \quad \text{ou seja} \quad \text{se} \quad E_{k_z} > \mu$$

$$\bar{n}_{\tilde{k}} = 1 \quad \text{se} \quad T_{k_z} < 0 \quad \text{ou seja} \quad \text{se} \quad E_{k_z} < \mu$$

$\mu = \epsilon_F =$ energia de Fermi.

Nesse limite podemos calcular $\gamma_q(\omega)$ e $P_q(\omega)$ e assim obter uma expressão para a forma de linha usando (IV.3.1) e (IV.3.2) obtemos:

$$L(\omega) = \frac{1}{\pi} \frac{\gamma_q(\omega)}{(\omega - \omega_q - P_q(\omega))^2 + (\gamma_q(\omega))^2}$$

(III.3.7)

Aqui ressaltamos que q se refere ao momentum do fonon que participa do espalhamento, ou seja, fonons com $q \approx 0$ (da ordem do momentum da luz). Nessa região $\omega_q = \omega_0$ e devemos notar que recuperamos a forma III.3.10, obtida anteriormente.

IV.4 - Cálculo do Amortecimento: $\gamma_q(\omega)$.

Como vimos na secção anterior

$$\gamma_q(\omega) = \frac{\pi}{\hbar^2} \sum_{\substack{\mathbf{k}n \\ \tilde{n}'}} |V_{q \frac{\mathbf{k}n}{q_{\perp}}}|^2 (\bar{n}_{\mathbf{k}-q, \tilde{n}} - \bar{n}_{\mathbf{k}, \tilde{n}'}) \delta(\omega - T_{\mathbf{k}, \tilde{n}'} \hbar^{-1} + T_{(\mathbf{k}-q), \tilde{n}} \hbar^{-1}) \quad (\text{IV.4.1})$$

Para $T = 0^{\circ}\text{K}$, as parcelas da expressão acima só serão diferentes de zero, quando um dos estados de elétron que nela figuram estiver vazio e o outro ocupado. Se a concentração de portadores for tal que o nível de Fermi está abaixo do nível de Landau $n_0 + 1$ temos: (Note que n_0 é o nível de Landau de mais alta ordem a ser ocupado no estado fundamental)

i) para ter $\omega > 0$ $\omega = (T_{\mathbf{k}, \tilde{n}'} - T_{(\mathbf{k}-q), \tilde{n}}) \hbar^{-1}$ devemos ter $T_{\mathbf{k}, \tilde{n}'} > T_{(\mathbf{k}-q), \tilde{n}}$, ou seja $n' \geq n$.

ii) Estamos interessados, como já frisamos antes, no amortecimento para fonons óticos com $q \approx 0$. Portanto, devemos ter a diferença de energia $T_{\mathbf{k}, \tilde{n}'} - T_{(\mathbf{k}-q), \tilde{n}}$ da ordem da energia de um fonon ótico e a diferença de momentum $q \approx 0$, ou seja, transição quase vertical entre dois níveis de Landau (Isso proíbe $n = n'$, que seria o processo dominante no caso de fonons acústicos).

iii) Como já notamos, as parcelas não nulas de $\gamma_q(\omega)$ são as que tem um dos estados de elétron $(\mathbf{k}n')$ acima do nível de Fermi ($\bar{n}_{\mathbf{k}n'} = 0$) e o outro estado $(\mathbf{k}-q, n)$ abaixo ($\bar{n}_{\mathbf{k}-q, n} = 1$). Assim, $n = 0, 1, \dots, n_0$ e $n' = n_0 + 1, \dots$.

Para simplificar a notação, escrevemos $\gamma_q(\omega)$ como:

$$\gamma_q(\omega) = \sum_{n=0}^{n_0} \gamma_q^{(n)}(\omega)$$

$$\gamma_q(\omega) = \sum_{n=n_0+1}^{\infty} \frac{\pi}{\hbar^2} |V_q I_{nn'}|_{q_z}^2 \sum_{\underline{k}} \delta(\omega - \hbar^{-1} T_{k_z}^{n'} + \hbar^{-1} T_{(k-q)_z}^{(n)}) \quad (\text{IV.4.2})$$

onde $(n, \underline{k}-q)$ deve ser um estado ocupado e $(n', \underline{k})$ um estado vazio. Existem, portanto, restrições em $\underline{k}$, isto é, a soma é sobre k_z tal que $|k_z - q_z| < k_{zF}^{(n)}$ (condição para que $(n, \underline{k}-q)$ esteja ocupado) e $|k_z| > k_{zF}^{(n')}$ (condição para que $(n', \underline{k})$ esteja vazio). A grandeza $k_{zF}^{(n)}$ já foi definida anteriormente e se lembrarmos que a 0°K o potencial químico $\mu = \epsilon_F$, energia de Fermi, temos:

$$k_{zF}^{(n)} = \left[(\epsilon_F - (n+1/2)\omega_c) \frac{2m}{\hbar^2} \right]^{1/2} \quad \text{se } n \leq n_0 \quad (\text{IV.4.3})$$

$$k_{zF}^{(n)} = 0 \quad \text{se } n > n_0$$

Fisicamente, $k_{zF}^{(n)}$ é o estado de maior momentum ainda ocupado a 0°K , no nível de Landau n . Portanto, se $n > n_0$ é de se esperar $k_{zF}^{(n)} = 0$.

Usando a definição de $T_{k_z n}$ dada em IV.2.3, temos para a função δ

$$\begin{aligned} \delta(\omega - \hbar^{-1} T_{k_z}^{n'} + \hbar^{-1} T_{(k-q)_z}^{(n)}) &= \delta(\omega - (n' - n)\omega_c - \frac{\hbar k_z q_z}{m^*} + \frac{\hbar q_z^2}{2m^*}) = \\ &= \frac{m^*}{q_z \hbar} \delta(\Omega_{nn'} - k_z) \end{aligned}$$

$$\Omega_{nn'} = (\omega - \omega_c) \frac{m^*}{q_z \hbar} + \frac{q_z}{2} \quad (\text{IV.4.4})$$

Passando a soma em k_z a uma integral e somando em k_x e σ , temos:

$$\gamma_q^{(n)}(\omega) = \frac{vm^*}{2\pi^3 q_z \pi \lambda^2} \sum_{n'=n}^{\infty} |V_q I_{nn'}|_{q_{\perp}}^2 \int_{k_z} dk_z \delta(\Omega_{nn'} - k_z) \quad (IV.4.5)$$

Para calcular a integral, vamos desprezar q_z em face a k_z . Embora essa restrição não seja necessária, não altera o problema de maneira significativa, sendo compatível com as aproximações já feitas e tendo a vantagem de simplificar bastante as fórmulas a serem obtidas. Nessa aproximação o domínio de integração de k_z é tal que $k_{zF}^{(n')} < |k_z| < k_{zF}^{(n)}$ (devido a restrição no número de ocupação discutida na pág.) e

$$\int_{k_z} dk_z \delta(\Omega_{nn'} - k_z) = \begin{cases} 1 & \text{se } \frac{q_z \hbar k_{zF}^{(n')}}{m^*} < |\omega - (n' - n)\omega_c| < \frac{k_{zF}^{(n)} q_z \hbar}{m^*} \\ 0 & \text{se } n' \text{ é tal que a desigualdade acima não se verifique.} \end{cases} \quad (IV.4.6)$$

Para q_z da ordem do momentum da luz esse intervalo é bastante estreito em frequência e o único termo não nulo na soma em n' é aquele para o qual $(n' - n)\omega_c \sim \omega$. Assim o termo não nulo vai depender da região de frequência estudada e $\gamma_q^{(n)}(\omega)$ só é diferente de ZERO para regiões de frequência tais que a frequência é aproximadamente um número inteiro de frequências ciclotrônicas. Fazendo $n' - n = \ell$, obtemos:

$$\gamma_q^{(n)}(\omega) = \frac{vm^*}{2\pi^3 q_z \pi \lambda^2} |V_q I_{n, n+\ell}|_{q_{\perp}}^2 \quad \text{se } \omega \approx \ell \omega_c$$

$$= 0 \quad \text{se } \omega \text{ longe de } \ell \omega_c \quad (IV.4.7)$$

Usando expressões apropriadas para $|A_q|^2 e \frac{|I_{n,n+l}|^2}{q_{\perp}}$ temos, para $\beta^{(n+l)} < |\omega - l\omega_c| < \beta^{(n)}$:

$$\gamma_q^{(n)}(\omega) = \sum_{l=1}^{\infty} O_{q_{\perp} q_z} \frac{n!}{(n+l)!} \rho^{l-1} |L_n^l(\rho)|^2 e^{-\rho}$$

$$O_{\frac{q_{\perp}}{q_z}} = \frac{e^2 m^* \omega_o q_{\perp}^2}{\hbar^2 2 (q_{\perp}^2 + q_z^2) q_z} \left(\frac{1}{\epsilon_{\infty}} - \frac{1}{\epsilon_o} \right) \quad (\text{IV.4.8})$$

$$\rho = \frac{q_{\perp}^2 \hbar c}{2eH} = \frac{q_{\perp}^2 \lambda^2}{2}, \quad \beta^{(n)} = \frac{\hbar q_z k_{zF}^{(n)}}{m^*}$$

Normalmente, para os casos de interesse $\rho \ll 1$ e podemos simplificar bastante a expressão acima, lembrando que $e^{-\rho} \approx 1$ e $L_n^l(\rho) \approx L_n^l(0) = \binom{n+l}{n} = \frac{(n+l)!}{n! l!}$

$$\gamma_q^{(n)}(\omega) = \sum_{l'=1}^{\infty} O_{q_{\perp} q_z} \frac{\rho^{l'-1}}{(l'!)^2} \frac{(n+l')!}{n!} \quad \text{se } \beta^{(n+l)} < |\omega - l'\omega_c| < \beta^{(n)}$$

= 0

se isso não é verdade para nenhum l' .

(IV.4.9)

Para amortecimento pequeno, a forma de $L(\omega)$ nos diz que os efeitos de amortecimento vem a ser importantes para $\omega \sim \omega_o$, fixando a região de frequência importante para o cálculo como $\omega \approx \omega_o \approx l\omega_c$. Dados o material e o campo magnético H_o , o valor de l está fixado e podemos desprezar na expressão (IV.4.9) toda parcela $l' \neq l$. A expressão final para $\gamma_q(\omega)$ fica:

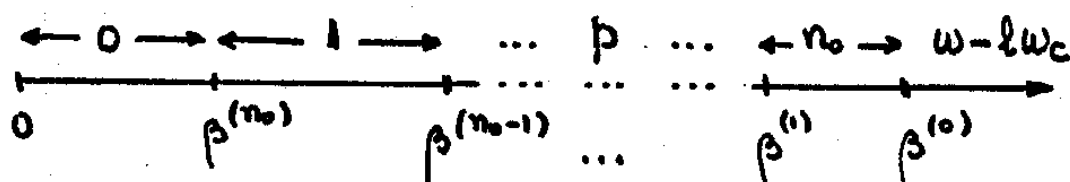
$$\gamma_q(\omega) = \sum_{n=0}^{n_0} o_{q_1 q_2} \frac{\rho^{\ell-1}}{(\ell!)^2} \frac{(n+\ell)!}{n!} \quad \beta^{(n+\ell)} < |\omega - \ell\omega_c| < \beta^{(n)} \quad (IV.4.10)$$

Onde ℓ é determinado pela condição de ressonância $\omega_0 \approx \ell\omega_c$.

Embora possamos tomar a forma dada acima como final, ela não é prática, pois para aplicá-la, devemos selecionar quais as parcelas não nulas no intervalo de frequência considerado.

Buscamos agora uma expressão que já evidencie quais os termos não nulos para uma dada frequência.

Desejamos achar o amortecimento na região $\omega \approx \ell\omega_c$ num cristal onde a concentração de portadores é tal que o mais alto nível de Landau ainda ocupado no estado fundamental é o de número quântico n_0 . Vamos substituir o intervalo de frequência em regiões numeradas, tal que a região p é a que satisfaz $\beta^{(n_0 - p+1)} < |\omega - \ell\omega_c| < \beta^{(n_0 - p)}$ como mostra a figura. ($p = 0, 1, 2, \dots, n_0$)



Chamando $\gamma_p^{(\ell)}$ o amortecimento na região p para a condição de ressonância ℓ , temos:

$$\gamma_p^{(\ell)} = \sum_s \gamma^{(\ell, s)} = \sum_s o_{q_1 q_2} \frac{\rho^{\ell-1}}{(\ell!)^2} \frac{(s+\ell)!}{s!}$$

onde s toma os valores: (IV.4.11)

$$(n_0 - p) \geq s > n_0 - (\ell + p)$$

$$s \geq 0$$

Notem que o amortecimento $\tilde{c}$ é constante em cada sub-
intervalo p .

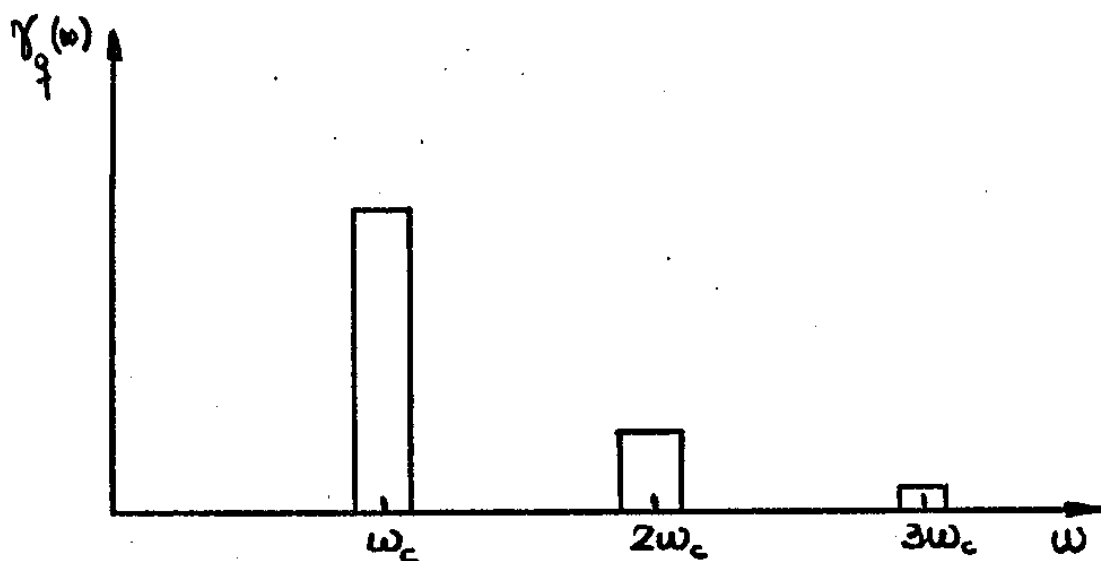
Como exemplo, tomemos o caso $n_0 = 0$, onde apenas o
nível $n = 0$ está ocupado. Nesse caso só temos uma região,
 $p = 0$.

$$\gamma_0^\ell = \sum_s \gamma^{(\ell, s)} \quad \text{onde} \quad \begin{array}{l} 0 \geq s > -\ell \\ s \geq 0 \end{array} \quad \text{só resta} \quad s = 0$$

Assim, temos neste caso:

$$\gamma_0^{(\ell)}(\omega) = \rho_{q_\perp q_z} \frac{1}{\ell!} \rho^{\ell-1}$$

na região $p = 0$ dada por $\beta^{(1)} = 0 < |\omega - \omega_c \ell| < \beta^{(0)}$



A figura acima está fora de escala e tem como objeti-
vo dar uma idéia da forma da função $\gamma_q(\omega)$.

Em escala, as regiões onde $\gamma_q(\omega) \neq 0$ são bem mais
estreitas em frequência. Aqui tomamos $\rho \approx 1/2$, mas geralmen-
te ρ é muito menor, o que provoca um decaimento bastante for-

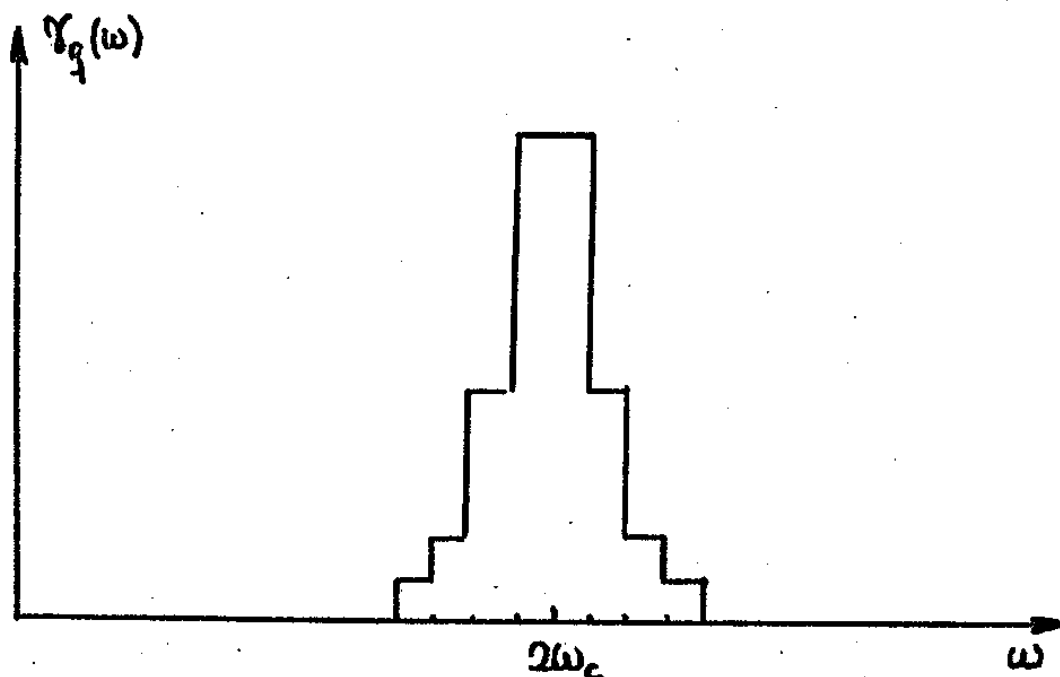
te de $\gamma_q(\omega)$ com a ressonância ℓ . Normalmente, apenas para ℓ bastante pequeno $\gamma^{(\ell)}(\omega)$ supera a contribuição de "background".

Vamos agora fixar a ressonância $\ell = 2$ e tomar $n_0 = 3$, para ilustrar um caso mais geral. Nesse caso temos quatro regiões, $p = 0, 1, 2, 3$.

$$\gamma_p^{(2)} = \sum_s \theta_{q_\perp q_z} \frac{\rho}{4} \frac{(s+2)!}{s!} \quad s \geq 0$$

$p = 0$	$3 \geq s > 1$	$s = 2, 3$	$\gamma_0^{(2)} = 8 \theta_{q_\perp q_z} \rho$
$p = 1$	$2 \geq s > 0$	$s = 1, 2$	$\gamma_1^{(2)} = 15/4 \theta_{q_\perp q_z} \rho$
$p = 2$	$1 \geq s > -1$	$s = 0, 1$	$\gamma_2^{(2)} = 5/4 \theta_{q_\perp q_z} \rho$
$p = 3$	$0 \geq s > -2$	$s = 0$	$\gamma_3^{(2)} = 1/2 \theta_{q_\perp q_z} \rho$

Esquemáticamente temos, para $\ell = 2$, nesse caso:

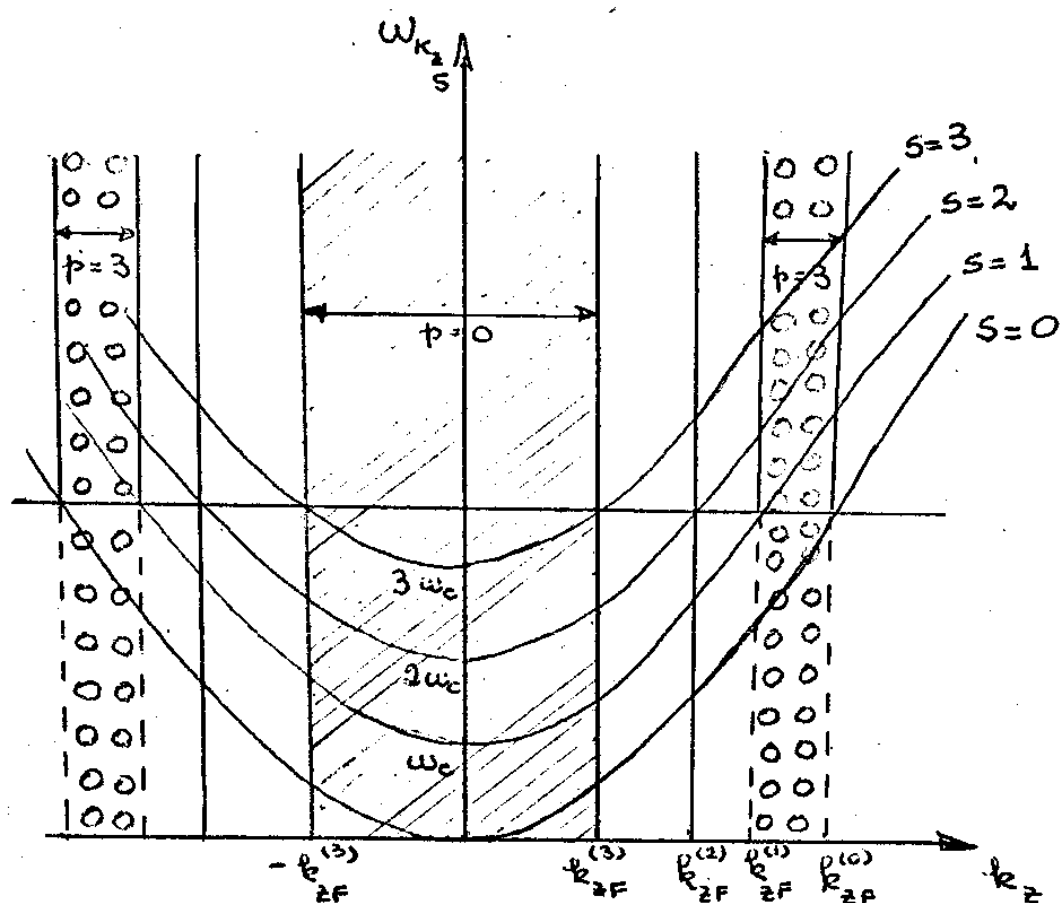


É interessante tentar entender fisicamente a forma de IV.4.11 para $\gamma_q(\omega)$. O amortecimento está relacionado com a possibilidade de se ter uma transição eletrônica interferindo com o fonon em questão (criando ou absorvendo). Desprezando a quantidade de movimento do fonon, ele só poderia ser criado ou absorvido numa transição "vertical" entre dois níveis eletrônicos, cuja diferença de energia fosse igual à energia do fonon. A condição $\beta^{(n)} < |\omega - \ell\omega_c| < \beta^{(n)}$, que pode ser reescrita como $k_{zF}^{(n')} < |\omega - \ell\omega_c| \frac{m^*}{q_z \hbar} < k_{zF}^{(n)}$ espelha esse fato.

Para q_z rigorosamente nulo, apenas $\omega \equiv \ell\omega_c$ satisfaz a condição que possibilita a transição e apenas essa frequência de fonon seria afetada pela interação elétron-fonon. Nesse caso $\beta^{(n)} = \beta^{(n')} = 0$ e a região $\gamma_q(\omega) \neq 0$ se restringe a um ponto.

Aqui, como $q_z \approx 0$, mas não rigorosamente nulo, podemos permitir que ω se afaste ligeiramente de $\ell\omega_c$ ainda obtendo $\gamma_q(\omega) \neq 0$. Satisfazemos a condição de conservação de energia necessária à transição permitindo que as quantidades de movimento dos dois estados eletrônicos envolvidos sejam ligeiramente diferentes (na componente z). Isso explica a participação de q_z na limitação das regiões de γ_q não nulo. A delimitação de regiões de frequência dependendo em $k_{zF}^{(n)}$ (ou $\beta^{(n)}$) pode ser entendida representando as possíveis transições graficamente. Consideramos as condições do exemplo acima. Temos os níveis $s = 0, 1, 2, 3$ ocupados e estamos procurando transições na região $\ell = 2$, $\omega \approx 2\omega_c$. Na figura mostramos as regiões $p = 3$ e $p = 0$ que citaremos como exemplo. Para $p = 3$ vamos procurar quais os elétrons que tem possibilidade de fazer uma transição pulando dois níveis, ou seja, absorvendo $\omega \approx 2\omega_c$. Como nessa região apenas o estado $s = 0$ está ocupado, só um

elêtron nesse estado pode fazer a transição. Note que ele encontra um estado vazio dois níveis acima para onde ir após absorver o fonon (Para $T = 0^0\text{K}$, nenhum estado pode emitir fonons). Portanto, na região $p = 3$, apenas o nível $s = 0$ contribui para a vida média do fonon.



Para $p = 0$ (região tracejada na figura), o nível $s = 0$ não contribui, pois o nível $s = 2$ está ocupado nessa região e o elêtron não teria para onde ir ao absorver um fonon de frequência $\omega \approx 2\omega_c$, numa transição vertical. Pela mesma razão o elêtron no nível $s = 1$ não contribui e assim, na região $p = 0$ somente elêtrons em $s = 2, 3$ contribuem para a vida média do fonon ótico longitudinal de baixo momentum considerado.

Aqui, encerramos a parte referente a $\gamma_q(\omega)$, notando

que na prática, tomaremos como amortecimento $\gamma_q(\omega) + \gamma_0$ onde γ_0 se refere a interações outras que não a elétron fonon, e é dominante para ℓ grande.

IV.5 - Cálculo do Amortecimento - Parte de Renormalização de Frequência

Para termos todos os elementos necessários à obtenção da "forma de linha" $L(\omega)$, devemos calcular $P_q(\omega)$ para $T=0^\circ K$. Usando a expressão IV.3.5 para $P_q(\omega)$ e efetuando a soma em $\underline{k} \equiv (k_x, k_z, \sigma)$, obtemos:

$$P_q(\omega) = \sum_{nn'} \frac{v}{2\pi^2 \lambda^2 \hbar^2} |V_{q1}^{nn'}|_{q_z}^2 \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} dk_z \frac{(\bar{n}_{k-q} - \bar{n}_k)}{\bar{n}_{\tilde{n}}} \frac{1}{\omega - T_{k_z}^{n'} - T_{(k-q)_z}^{n-1}} \right\} \quad (IV.5.1)$$

Nas condições de nosso cálculo, para que a integral acima seja não nula, devemos ter um dos estados $(\underline{k}-q, n)$ e $(\underline{k}, n')$ que nela figuram ocupado, e o outro não. Temos duas alternativas:

$$\begin{aligned} \text{i) } n \leq n_0 \quad |k_z - q_z| < k_{zF}^{(n)} \quad \text{ou seja} \quad \bar{n}_{k-q} = 1 \\ n' > n \quad |k_z| > k_{zF}^{(n)} \quad \bar{n}_{k, n'} = 0 \end{aligned}$$

Desprezando q_z como fizemos anteriormente, temos $k_{zF}^{(n)} > |k_z| > k_{zF}^{(n')}$ (Essencialmente isso obriga $n' > n$).

$$\begin{aligned} \text{ii) } n' \leq n_0 \quad |k_z| < k_{zF}^{(n')} \quad \bar{n}_k = 1 \\ n > n' \quad |k_z - q_z| > k_{zF}^{(n)} \quad \bar{n}_{k-q} = 0 \end{aligned}$$

Analogamente, temos a condição a ser satisfeita por k_z nesse caso, para que a integral IV.5.1 seja não nula ; $k_{zF}^{(n')} < |k_z| < k_{zF}^{(n)}$.

Assim, escrevendo apenas os termos não nulos da soma IV.5.1 e substituindo o valor dado em IV.2.3 para $T_{k_z}^{(n)}$, obtemos:

$$P_q(\omega) = \sum_{n' > n} \sum_{n=0}^{n_0} \frac{v |V_q I_{nn'}|^2}{2\hbar^2 \pi^2 \lambda^2} \left\{ P \int_{-k_{zF}^{(n)}}^{-k_{zF}^{(n')}} \frac{dk_z}{\omega - (n' - n)\omega_c - \frac{k_z q_z \hbar}{m^*}} + \right. \\ \left. + P \int_{k_{zF}^{(n')}}^{k_{zF}^{(n)}} \frac{dk_z}{\omega - (n' - n)\omega_c - \frac{k_z q_z \hbar}{m^*}} \right\} - \sum_{n > n'} \sum_{n'=0} \frac{v |V_q I_{nn'}|^2}{2\hbar^2 \pi^2 \lambda^2} \cdot \\ \cdot \left\{ P \int_{-k_{zF}^{(n')}}^{-k_{zF}^{(n)}} \frac{dk_z}{\omega + (n - n')\omega_c - \frac{k_z q_z \hbar}{m^*}} + P \int_{k_{zF}^{(n)}}^{k_{zF}^{(n')}} \frac{dk_z}{\omega + (n - n')\omega_c - \frac{k_z q_z \hbar}{m^*}} \right\} \quad (IV.5.2)$$

Trocando n em n' no segundo termo, e definindo $\ell = n' - n$, obtemos após efetuar as integrações:

$$P_q(\omega) = \sum_{\ell=1}^{\infty} \sum_{n=0}^{n_0} \frac{v |V_q I_{n,n+\ell}|^2 m^*}{2\hbar^3 \pi^2 \lambda^2 q_z} \left\{ \ln |\omega - (\ell\omega_c + \beta)^{(n)}| - \ln |\omega - \ell\omega_c + \beta^{(n+\ell)}| + \right. \\ \left. + \ln |\omega - \ell\omega_c - \beta^{(n+\ell)}| - \ln |\omega - \ell\omega_c - \beta^{(n)}| - \ln |\omega + \ell\omega_c + \beta^{(n)}| + \right. \\ \left. + \ln |\omega + \ell\omega_c + \beta^{(n+\ell)}| - \ln |\omega + \ell\omega_c - \beta^{(n+\ell)}| + \ln |\omega + \ell\omega_c - \beta^{(n)}| \right\}$$

Usando propriedades do logaritmo, podemos reescrever como:

$$P_q(\omega) = \sum_{\ell'=1}^{\infty} \sum_{n=0}^{n_0} \frac{v |V_{q1} I_{n,n+\ell'}|^2 m^*}{2\hbar^3 \pi^2 \lambda^2 q_z} \left\{ \ell n \left| \frac{\omega^2 - (\ell' \omega_c - \beta^{(n)})^2}{\omega^2 - (\ell' \omega_c + \beta^{(n)})^2} \right| + \right. \\ \left. + \ell n \left| \frac{\omega^2 - (\ell' \omega_c + \beta^{(n+\ell')})^2}{\omega^2 - (\ell' \omega_c - \beta^{(n+\ell')})^2} \right| \right\} \quad (IV.5.4)$$

Usando os mesmos argumentos da secção IV.4, temos para o caso usual onde $\rho \ll 1$:

$$P_q(\omega) = \sum_{\ell'=1}^{\infty} \sum_{n=0}^{n_0} \theta_{q1} \frac{\rho^{\ell'-1}}{\pi (\ell'!)^2} \frac{(n+\ell')!}{n!} \left\{ \ell n \left| \frac{\omega^2 - (\ell' \omega_c - \beta^{(n)})^2}{\omega^2 - (\ell' \omega_c + \beta^{(n)})^2} \right| + \right. \\ \left. + \ell n \left| \frac{\omega^2 - (\ell' \omega_c + \beta^{(n+\ell')})^2}{\omega^2 - (\ell' \omega_c - \beta^{(n+\ell')})^2} \right| \right\} \quad (IV.5.5)$$

Normalmente estamos interessados numa dada região de frequência e nesse caso podemos simplificar ainda mais a expressão acima, tomando na soma apenas os termos dominantes na região de interesse. Fixando $\omega \approx \ell \omega_c$ e chamando $P_q^{(\ell)}(\omega)$, o valor de $P_q(\omega)$ nessa região, temos:

$$P_q^{(\ell)}(\omega) = \sum_{\ell'=1}^{\ell} \sum_{n=0}^{n_0} \theta_{q1} \frac{(n+\ell')!}{n!} \frac{\rho^{\ell'-1}}{\pi (\ell'!)^2} \left\{ \ell n \left| \frac{\omega^2 - (\ell' \omega_c - \beta^{(n)})^2}{\omega^2 - (\ell' \omega_c + \beta^{(n)})^2} \right| + \right. \\ \left. + \ell n \left| \frac{\omega^2 - (\ell' \omega_c + \beta^{(n+\ell')})^2}{\omega^2 - (\ell' \omega_c - \beta^{(n+\ell')})^2} \right| \right\} \quad (IV.5.6)$$

Aqui mantemos o termo $\ell' = \ell$ por ser ressonante em ω , e os

termos $\ell < \ell'$ porque o fator que multiplica os logaritmos pode ser bastante grande ($\rho \ll 1$), mesmo fora da ressonância.

Como exemplo e adiantando para a aplicação que será feita na secção VI, tomamos a região $\omega \approx 2\omega_c$ para uma concentração de portadores tal que $n_0 = 1$ para esses valores dos campos.

Nesse caso temos, lembrando que $\beta^{(n)} = 0$ se $n > n_0$:

$$\begin{aligned}
 P_q^{(2)}(\omega) \approx & \frac{0 q_{\perp} q_z}{\pi} \left\{ \ell n \left| \frac{\omega^2 - (\omega_c - \beta^{(0)})^2}{\omega^2 - (\omega_c + \beta^{(0)})^2} \right| + \ell n \left| \frac{\omega^2 - (\omega_c + \beta^{(1)})^2}{\omega^2 - (\omega_c - \beta^{(1)})^2} \right| \right\} + \\
 & + \frac{20 q_{\perp} q_z}{\pi} \left\{ \ell n \left| \frac{\omega^2 - (\omega_c - \beta^{(1)})^2}{\omega^2 - (\omega_c + \beta^{(1)})^2} \right| \right\} + \frac{0 q_{\perp} q_z}{\pi} \frac{\rho}{2} \left\{ \ell n \left| \frac{\omega^2 - (2\omega_c - \beta^{(0)})^2}{\omega^2 - (2\omega_c + \beta^{(0)})^2} \right| \right\} + \\
 & + \frac{30 q_{\perp} q_z}{\pi} \frac{\rho}{2} \left\{ \ell n \left| \frac{\omega^2 - (2\omega_c - \beta^{(1)})^2}{\omega^2 - (2\omega_c + \beta^{(1)})^2} \right| \right\}. \quad (IV.5.7)
 \end{aligned}$$

Ou seja:

$$\begin{aligned}
 P_q^{(2)}(\omega) \approx & \frac{0 q_{\perp} q_z}{\pi} \left\{ \ell n \left| \frac{\omega^2 - (\omega_c - \beta^{(0)})^2}{\omega^2 - (\omega_c + \beta^{(0)})^2} \right| + \ell n \left| \frac{\omega^2 - (\omega_c - \beta^{(1)})^2}{\omega^2 - (\omega_c + \beta^{(1)})^2} \right| \right\} + \\
 & + \frac{0 q_{\perp} q_z}{\pi} \frac{\rho}{2} \left\{ \ell n \left| \frac{\omega^2 - (2\omega_c - \beta^{(0)})^2}{\omega^2 - (2\omega_c + \beta^{(0)})^2} \right| + 3 \ell n \left| \frac{\omega^2 - (2\omega_c - \beta^{(1)})^2}{\omega^2 - (2\omega_c + \beta^{(1)})^2} \right| \right\} \quad (IV.5.8)
 \end{aligned}$$

Concluimos esta secção IV, notando que com auxílio das expressões (IV.3.9), (IV.4.11) e (IV.5.5), temos todos os elementos necessários para um cálculo específico da "forma de linha" $L(\omega)$, na região de interesse $\omega \approx \omega_0 \approx \ell \omega_c$, como função do campo magnético.

Na secção VI usaremos os resultados aqui obtidos juntamente com os obtidos na secção V, para, usando parâmetros apropriados ao GaAs, estimar a forma de linha Raman nesse material, para a região de campos $\omega_0 \approx \omega \approx 2\omega_c$, onde ω_0 é a frequência do fonon-LO no material.

V - CÁLCULO DA "INTENSIDADE"

A "intensidade" que queremos calcular aqui é essencialmente definida pela expressão III.3.10 como sendo:

$$I(\omega) = C_q \left| \sum_{n' > n} \sum_{n=0}^{n_0} |I_{q_{\perp}}|_{n, n'}^2 \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} dk_z \frac{\theta(|k_z| - k_{zF}^{(n')}) \theta(k_{zF}^{(n)} - |k_z|)}{(\omega - (n' - n)\omega_c - \frac{k_z q_z \hbar}{m^*} + i \frac{\Gamma + \Gamma'}{2})} - \int_{-\infty}^{\infty} dk_z \frac{\theta(|k_z| - k_{zF}^{(n')}) \theta(k_{zF}^{(n)} - |k_z|)}{(\omega + (n' - n)\omega_c - \frac{k_z q_z \hbar}{m^*} - i \frac{\Gamma + \Gamma'}{2})} \right\} \right|^2 \quad (V.1)$$

A expressão (V.1) envolve o módulo quadrado de uma quantidade complexa e é conveniente para efeito de cálculo, expressar $I(\omega)$ em termos das partes real e imaginária dessa quantidade. Para efeito de cálculo da "intensidade" o amortecimento sobre a parte eletrônica devido à interação eletrôn-fonon não é importante, e aqui Γ e Γ' são constantes provenientes essencialmente da interação com o "background". Nas expressões que se seguem definimos $\Gamma_{n, n+l} = \frac{\Gamma + \Gamma'}{2}$.

$$I(\omega) = C_q (|R(\omega)|^2 + |S(\omega)|^2)$$

$$R(\omega) = \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{n=0}^{n_0} |I_{q_{\perp}}|_{n, n+l}^2 \cdot \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} dk_z \frac{\theta(|k_z| - k_{zF}^{(n+l)}) \theta(k_{zF}^{(n)} - |k_z|) (\omega - l\omega_c - \frac{k_z q_z \hbar}{m^*})}{(\omega - l\omega_c - \frac{k_z q_z \hbar}{m^*})^2 + \Gamma_{n, n+l}^2} - \int_{-\infty}^{\infty} dk_z \frac{\theta(|k_z| - k_{zF}^{(n+l)}) \theta(k_{zF}^{(n)} - |k_z|) (\omega + l\omega_c - \frac{k_z q_z \hbar}{m^*})}{(\omega + l\omega_c - \frac{k_z q_z \hbar}{m^*})^2 + \Gamma_{n, n+l}^2} \right\}$$

$$S(\omega) = \sum_{\ell=1}^{\infty} \sum_{n=0}^{n_0} |I_{q_{\perp}}|_{n,n+\ell}^2 \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\theta(|k_z| - k_{zF}^{(n+\ell)}) \theta(k_{zF}^{(n)} - |k_z|) (-\Gamma_{n,n+\ell})}{(\omega - \ell\omega_c - \frac{k_z q_{zF}}{m^*})^2 + \Gamma_{n,n+\ell}^2} + \right. \\ \left. + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\theta(|k_z| - k_{zF}^{(n+\ell)}) \theta(k_{zF}^{(n)} - |k_z|) (-\Gamma_{n,n+\ell})}{(\omega + \ell\omega_c - \frac{k_z q_{zF}}{m^*})^2 + \Gamma_{n,n+\ell}^2} \right\} \quad (V.2)$$

Usando as funções $\theta(x)$ para estabelecer os limites de integração, após simples substituições, resolvemos as integrais obtendo para $R(\omega)$:

$$R(\omega) = \sum_{\ell'=1}^{\infty} \sum_{n=0}^{n_0} \frac{1}{2} |I_{q_{\perp}}|_{n,n+\ell}^2 \frac{m^*}{q_{zF}} \left\{ \ln \left| \frac{(\omega - \ell'\omega_c + \beta^{(n)})^2 + \Gamma_{n,n+\ell'}^2}{(\omega - \ell'\omega_c - \beta^{(n)})^2 + \Gamma_{n,n+\ell'}^2} \right| \right. \\ \left. + \ell n \left| \frac{(\omega - \ell'\omega_c - \beta^{(n+\ell')})^2 + \Gamma_{n,n+\ell'}^2}{(\omega - \ell'\omega_c + \beta^{(n+\ell')})^2 + \Gamma_{n,n+\ell'}^2} \right| - \ell n \left| \frac{(\omega + \ell'\omega_c + \beta^{(n)})^2 + \Gamma_{n,n+\ell'}^2}{(\omega + \ell'\omega_c - \beta^{(n)})^2 + \Gamma_{n,n+\ell'}^2} \right| \right. \\ \left. - \ell n \left| \frac{(\omega + \ell'\omega_c - \beta^{(n+\ell')})^2 + \Gamma_{n,n+\ell'}^2}{(\omega + \ell'\omega_c + \beta^{(n+\ell')})^2 + \Gamma_{n,n+\ell'}^2} \right| \right\} \quad (V.3)$$

De forma análoga, obtemos para a parte imaginária:

$$S(\omega) = \sum_{\ell'=1}^{\infty} \sum_{n=0}^{n_0} |I_{q_{\perp}}|_{n,n+\ell}^2 \left| \frac{m^*}{q_{zF}} \arctg\left\{ \frac{\omega - \ell\omega_c - \beta^{(n)}}{\Gamma_{n,n+\ell}} \right\} - \arctg\left\{ \frac{\omega - \ell\omega_c + \beta^{(n)}}{\Gamma_{n,n+\ell}} \right\} \right. \\ \left. - \arctg\left\{ \frac{\omega - \ell\omega_c - \beta^{(n+\ell)}}{\Gamma_{n,n+\ell}} \right\} + \arctg\left\{ \frac{\omega - \ell\omega_c + \beta^{(n+\ell)}}{\Gamma_{n,n+\ell}} \right\} + \arctg\left\{ \frac{\omega + \ell\omega_c - \beta^{(n)}}{\Gamma_{n,n+\ell}} \right\} \right. \\ \left. - \arctg\left\{ \frac{\omega + \ell\omega_c + \beta^{(n)}}{\Gamma_{n,n+\ell}} \right\} - \arctg\left\{ \frac{\omega + \ell\omega_c - \beta^{(n+\ell)}}{\Gamma_{n,n+\ell}} \right\} \right. \\ \left. + \arctg\left\{ \frac{\omega + \ell\omega_c + \beta^{(n+\ell)}}{\Gamma_{n,n+\ell}} \right\} \right| \quad (V.4)$$

A expressão (V.4) pode ser simplificada fazendo uso das relações dadas por Gradstein e Ryzhik (13) em sua tabela. Obtemos para a parte imaginária:

$$S(\omega) = \sum_{\ell'=1}^{\infty} \sum_{n=0}^{n_0} |I_{q_{\ell',n+\ell'}}|^2 \frac{m^*}{q_z \hbar}.$$

$$\cdot \{ Z_{\ell',n}^{(-)}(\beta^{(n+\ell')}) - Z_{\ell',n}^{(-)}(\beta^{(n)}) + Z_{\ell',n}^{(+)}(\beta^{(n+\ell')}) - Z_{\ell',n}^{(+)}(\beta^{(n)}) \}.$$

onde

$$Z_{\ell',n}^{(-)}(\beta) = \begin{cases} \arctg \frac{2\Gamma_{n,n+\ell',\beta}}{\Gamma_{n,n+\ell'}^2 + (\omega - \ell' \omega_c)^2 - \beta^2} & \text{se } \beta^2 - (\omega - \ell' \omega_c)^2 < \Gamma_{n,n+\ell'}^2 \\ \pi + \arctg \frac{2\Gamma_{n,n+\ell',\beta}}{\Gamma_{n,n+\ell'}^2 + (\omega - \ell' \omega_c)^2 - \beta^2} & \text{se } \beta^2 - (\omega - \ell' \omega_c)^2 > \Gamma_{n,n+\ell'}^2 \end{cases}$$

$$Z_{\ell',n}^{(+)}(\beta) = \begin{cases} \arctg \frac{2\Gamma_{n,n+\ell',\beta}}{\Gamma_{n,n+\ell'}^2 + (\omega + \ell' \omega_c)^2 - \beta^2} & \text{se } \beta^2 - (\omega + \ell' \omega_c)^2 < \Gamma_{n,n+\ell'}^2 \\ \pi + \arctg \frac{2\Gamma_{n,n+\ell',\beta}}{\Gamma_{n,n+\ell'}^2 + (\omega + \ell' \omega_c)^2 - \beta^2} & \text{se } \beta^2 - (\omega + \ell' \omega_c)^2 > \Gamma_{n,n+\ell'}^2 \end{cases}$$

Onde, em termos de $\rho \ll 1$ podemos escrever:

$$|I_{q_i, n, n+l}|^2 \approx \rho^l \frac{(n+l)!}{(l!)^2 n!} \quad (V.6)$$

Fixando a região de frequência de interesse (como fizemos antes para obter (IV.5.6) usando argumentos análogos ao da secção IV.5, podemos destacar as contribuições relevantes na região considerada. Para $\omega \approx l\omega_c$ ficamos com:

$$I_{(l)}(\omega) = C_q (|R_{(l)}(\omega)|^2 + |S_{(l)}(\omega)|^2)$$

$$R_{(l)}(\omega) = \sum_{n=0}^{n_0} \sum_{l'=1}^l \frac{1}{2} \frac{\rho^{l'}(n+l')!}{(l')^2 n!} \frac{m^*}{q_z \hbar} \left\{ l n \left| \frac{(\omega - l'\omega_c + \beta(n))^2 + \Gamma_{n, n+l'}^2}{(\omega - l'\omega_c - \beta(n))^2 + \Gamma_{n, n+l'}^2} \right| \right. \\ + l n \left| \frac{(\omega - l'\omega_c - \beta(n+l'))^2 + \Gamma_{n, n+l'}^2}{(\omega - l'\omega_c + \beta(n+l'))^2 + \Gamma_{n, n+l'}^2} \right| - l n \left| \frac{(\omega + l'\omega_c + \beta(n))^2 + \Gamma_{n, n+l'}^2}{(\omega + l'\omega_c - \beta(n))^2 + \Gamma_{n, n+l'}^2} \right| \\ \left. - l n \left| \frac{(\omega + l'\omega_c - \beta(n+l'))^2 + \Gamma_{n, n+l'}^2}{(\omega + l'\omega_c + \beta(n+l'))^2 + \Gamma_{n, n+l'}^2} \right| \right\}$$

$$S_{(l)}(\omega) = \sum_{n=0}^{n_0} \frac{\rho^l (n+l)!}{(l!)^2 n!} \frac{m^*}{q_z \hbar} \left\{ Z_{l, n}^{(-)}(\beta(n+l)) - Z_{l, n}^{(-)}(\beta(n)) \right\} \quad (V.7)$$

Ressaltamos aqui que o termo não ressonante $l' = l$, não precisa ser incluído em $R_{(l)}(\omega)$ e que em situações excepcionais (Γ_l muito grande) pode ser necessário incluir termos $l' < l$ em $S_{(l)}(\omega)$. Notamos também que $Z_{l, n}(\beta(n)) = 0$ se $n > n_0$ e que em V.6 está implícito $\rho \ll 1$.

Como exemplo, tomamos o caso da secção VI, onde $l = 2$

e $n_0 = 1$. Nesse caso, obtemos, tomando $\Gamma_{\ell, n+\ell} = \Gamma$:

$$I_{(2)}(\omega) = C_q \{ |R_{(2)}(\omega)|^2 + |S_{(2)}(\omega)|^2 \}$$

$$R_{(2)}(\omega) = \frac{m^* \rho}{2q_z \hbar} \left\{ \ln \left| \frac{(\omega - \omega_c + \beta^{(0)})^2 + \Gamma^2}{(\omega - \omega_c - \beta^{(0)})^2 + \Gamma^2} \right| - \ln \left| \frac{(\omega + \omega_c + \beta^{(0)})^2 + \Gamma^2}{(\omega + \omega_c - \beta^{(0)})^2 + \Gamma^2} \right| \right. \\ \left. + \ln \left| \frac{(\omega - \omega_c + \beta^{(1)})^2 + \Gamma^2}{(\omega - \omega_c - \beta^{(1)})^2 + \Gamma^2} \right| - \ln \left| \frac{(\omega + \omega_c + \beta^{(1)})^2 + \Gamma^2}{(\omega + \omega_c - \beta^{(1)})^2 + \Gamma^2} \right| \right\} \\ + \frac{m^* \rho^2}{4q_z \hbar} \left\{ \ln \left| \frac{(\omega - 2\omega_c + \beta^{(0)})^2 + \Gamma^2}{(\omega - 2\omega_c - \beta^{(0)})^2 + \Gamma^2} \right| + 3 \ln \left| \frac{(\omega - 2\omega_c + \beta^{(1)})^2 + \Gamma^2}{(\omega - 2\omega_c - \beta^{(1)})^2 + \Gamma^2} \right| \right\}$$

$$S_{(2)}(\omega) = - \frac{m^* \rho^2}{2q_z \hbar} \{ Z_{2,0}^{(-)}(\beta^{(0)}) + 3Z_{2,1}^{(-)}(\beta^{(1)}) \}$$

(V.8)

No Apêndice 4 calculamos para essa mesma situação a intensidade Raman usando os resultados da secção II, onde não incluímos vida média ($\gamma(\omega) = 0$, $\Gamma = 0$). Notamos que, tomando o limite $\gamma(\omega) \rightarrow 0$ e $\Gamma \rightarrow 0$ nas expressões obtidas para $I(\omega)$ e $L(\omega)$ recuperamos os resultados do Apêndice 4, como era de se esperar.

As quantidades $I(\omega)$, $R(\omega)$ e $S(\omega)$ estão plotadas na secção VI, onde usamos parâmetros apropriados para o GaAs.

VI - APLICAÇÃO PARA GaAs E DISCUSSÃO DOS RESULTADOS

VI.1 - Aplicação para GaAs

Nesta secção VI, usaremos os resultados anteriores para estudar a "forma de linha", "intensidade" e secção de espalhamento, para algumas situações de interesse, usando parâmetros apropriados para o arseneto de gálio (GaAs). Esse material foi escolhido por ser bastante estudado e de fácil obtenção, além de satisfazer os requisitos citados na introdução, para que o processo aqui estudado possa ser dominante.

Concentramos nossa atenção na região $\omega_c \approx \frac{\omega_0}{2}$, ou seja $\ell = 2$. Isso porque, como já ressaltamos, os efeitos anômalos são mais pronunciados para ℓ pequeno. Para o GaAs temos os seguintes parâmetros, onde citamos a referência usada:

$$m^* = 0,068 m_0 \quad (14)$$

$$\omega_0 = 297 \text{ cm}^{-1} = 5,6 \times 10^{13} \text{ seg}^{-1} \quad (15)$$

$$\epsilon_0 = 12,9 \quad \epsilon_\infty = 10,9 \quad (15)$$

$$\epsilon_g = 1,52 \text{ ev} = 2,43 \times 10^{-12} \text{ ergs} \quad (14)$$

Escolhemos uma concentração de portadores $n_c = 5,7 \times 10^{17} / \text{cm}^3$, o que resulta numa energia de Fermi $\epsilon_F \approx 5,9 \times 10^{-14} \text{ ergs}$, e $n_0 = 1$, ou seja, os primeiro e segundo níveis de Landau possuem elétrons. Especificado o cristal, nos preocuparemos com a escolha do "laser" e da geometria mais favorável. Fixamos uma frequência para o "laser", $\omega_\ell = 1,857 \times 10^{15} \text{ seg}^{-1}$, que pode ser obtida usando um Y.A.G. e corresponde a um comprimento de onda $\lambda_\ell = 10.150 \text{ \AA}$. O momentum $\underline{q}$ do fonon é fixado pela geometria experimental, pois $\underline{q} = \underline{k}_\ell - \underline{k}_R$.

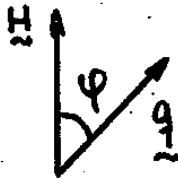
Notando que $|\underline{k}_\ell| \approx |\underline{k}_R|$ escolhemos arbitrariamente

um ângulo de 60° entre os dois, obtendo para módulo de q .

$$|q| \approx |k_\ell| = \frac{\omega_\ell \sqrt{\epsilon_\infty}}{c} \approx 2 \times 10^5 \text{ cm}^{-1}$$

O ângulo entre k_ℓ e k_R pode ser variado num intervalo considerável sem alterar de forma fundamental as curvas obtidas, mas devemos notar que a intensidade Raman é proporcional a $|\hat{e}_{k_\ell} \cdot \hat{e}_{k_R}|^2$, ou seja, depende na polarização da luz espalhada relativa à incidente.

A dependência angular mais importante para o problema vem da orientação do momentum do fonon com relação ao campo magnético. Esse ângulo, que chamaremos de ϕ , determina as grandezas q_z e $q_\perp$ e indiretamente várias outras.



$$q_z = q \cos \phi$$

$$q_\perp = q \sin \phi$$

Com os parâmetros escolhidos, a condição de ressonância $\ell\omega_c = \omega_0$ ocorre para valores do campo magnético tais que $H = \frac{217}{\ell}$ k gauss e $\ell = 2$ requer campos da ordem de 110 k gauss.

A seguir, apresentamos gráficos com os resultados obtidos para o caso do GaAs, e que serão discutidos na secção VI.2.

AMORTECIMENTO

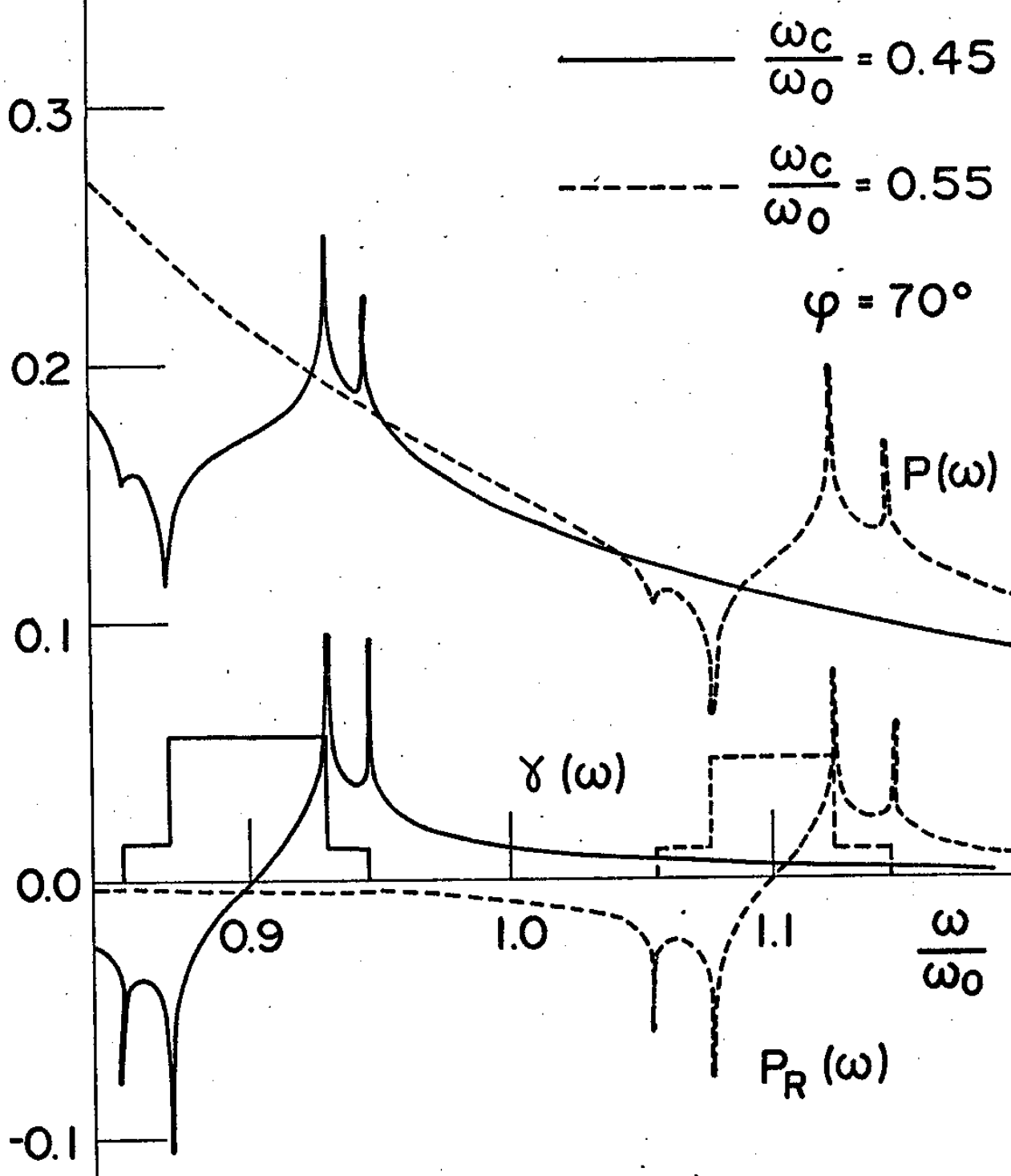


Figura 1

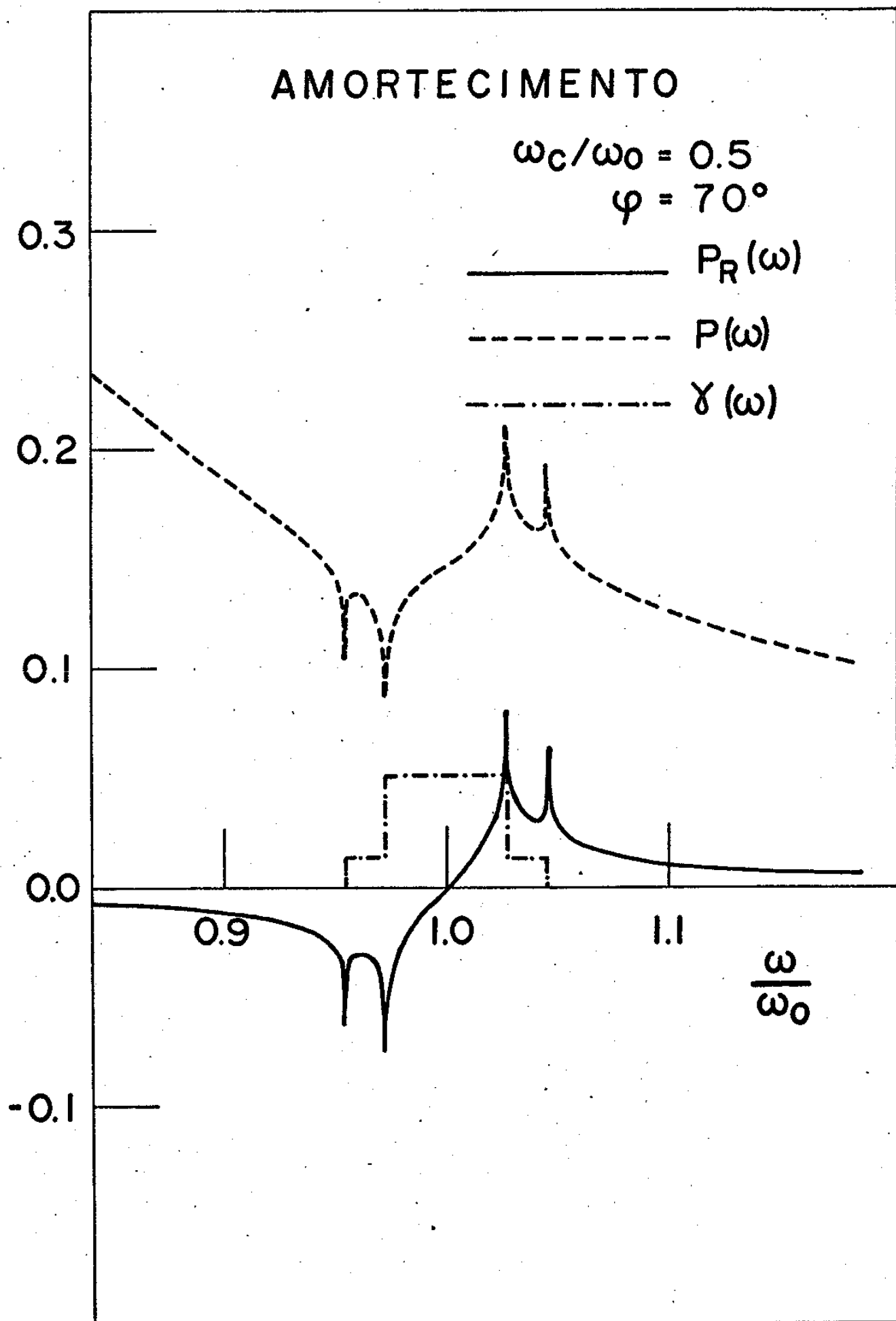


Figura 2

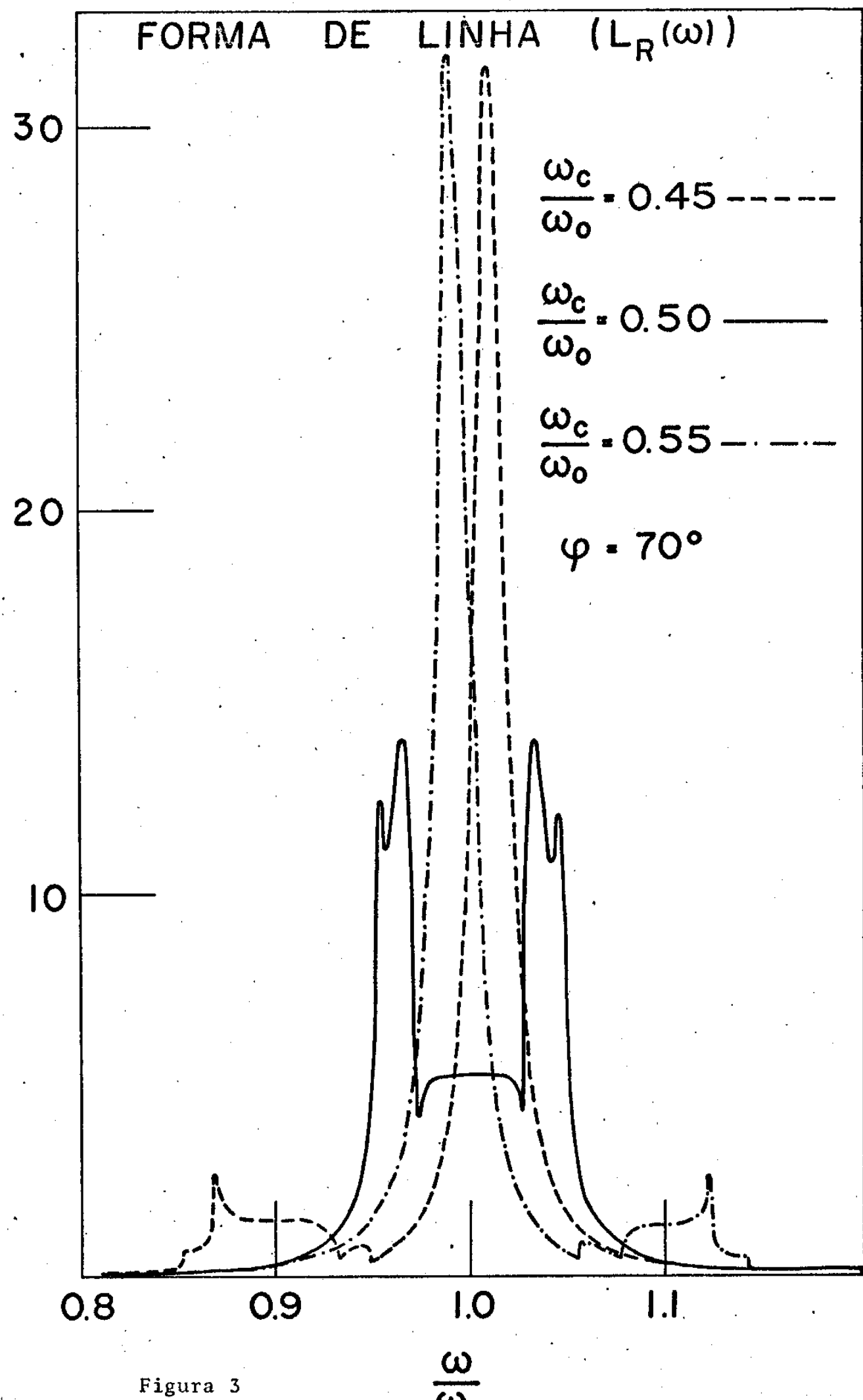


Figura 3

FORMA DE LINHA

$$\frac{\omega_c}{\omega_0} = 0.5$$

$$\varphi = 70^\circ$$

— $L(\omega)$

- - - $L_R(\omega)$

30

20

10

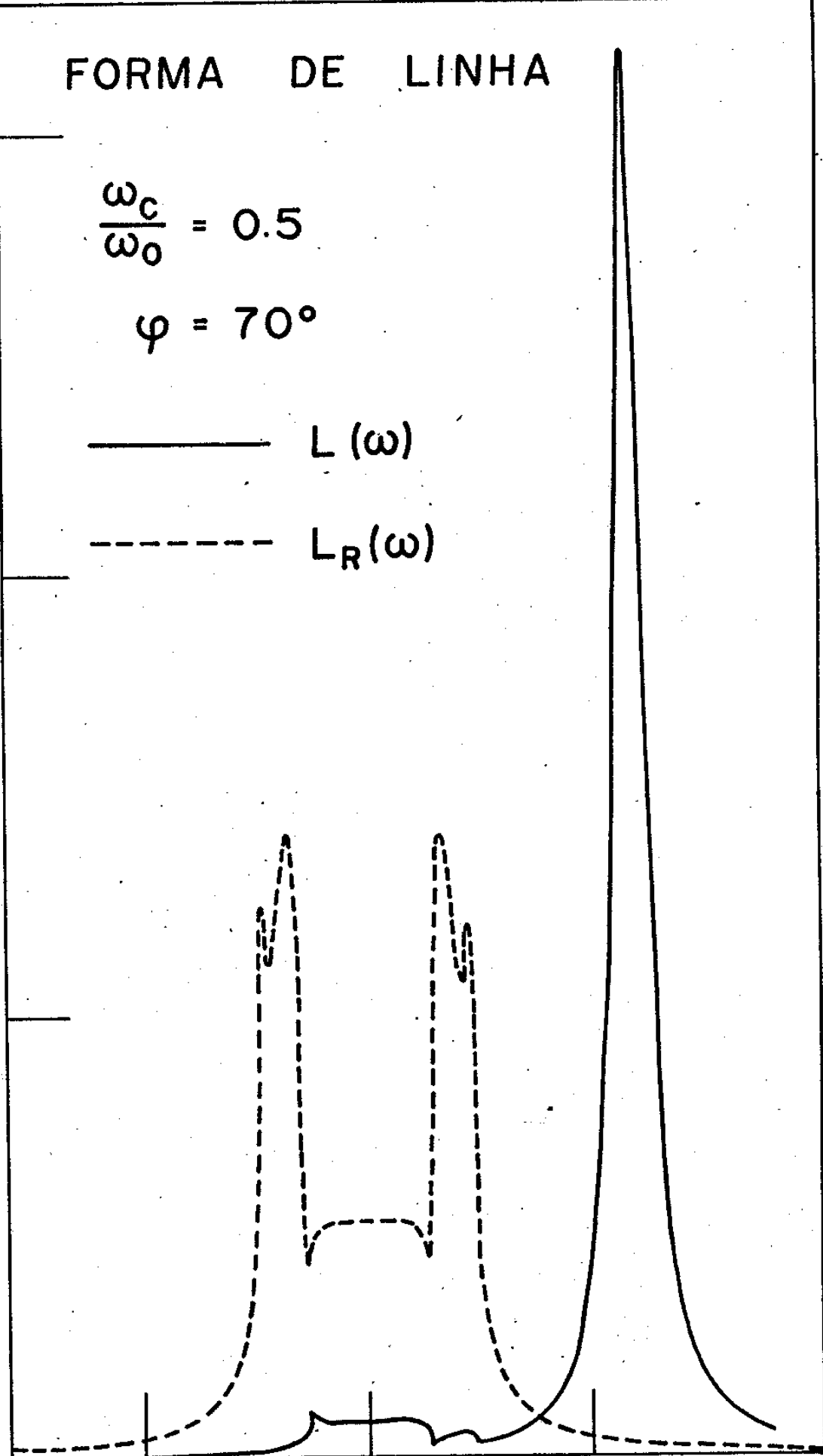
0.9

1.0

1.1

$\frac{\omega}{\omega_0}$

Figura 4



FORMA DE LINHA ($L(\omega)$)

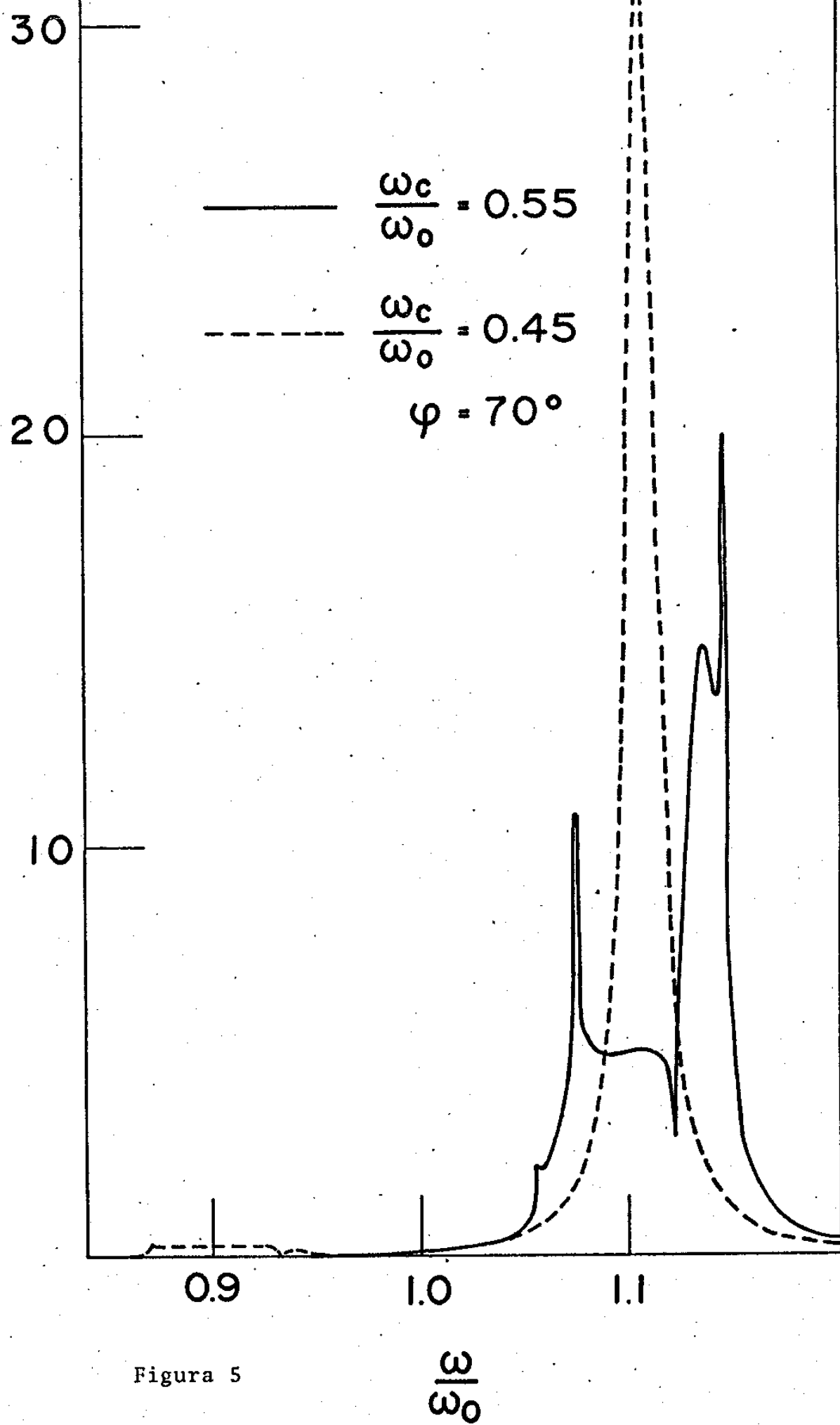


Figura 5

L (ω)-DEPENDÊNCIA ANGULAR

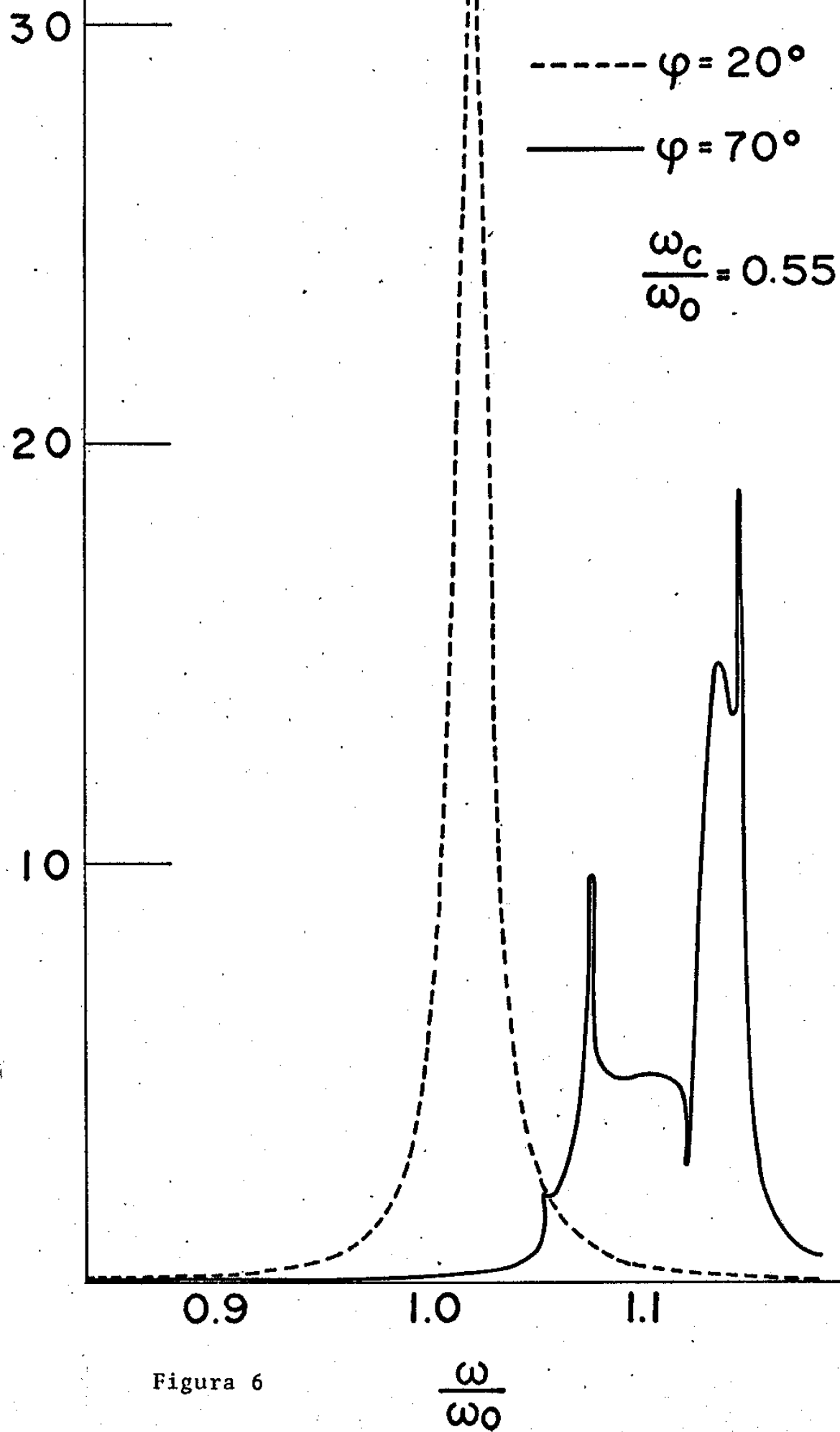


Figura 6

AMPLITUDE ($R(\omega)$ e $S(\omega)$)

$\Gamma_e = 0.001$
 $\Gamma_e = 0.01$
 $\Gamma_e = 0.05$

$R(\omega)$

$\omega_c/\omega_0 = 0.55$

$\varphi = 70^\circ$

$S(\omega)$

$\frac{\omega}{\omega_0}$

(UNIDADES ARBITRÁRIAS)

25

20

15

10

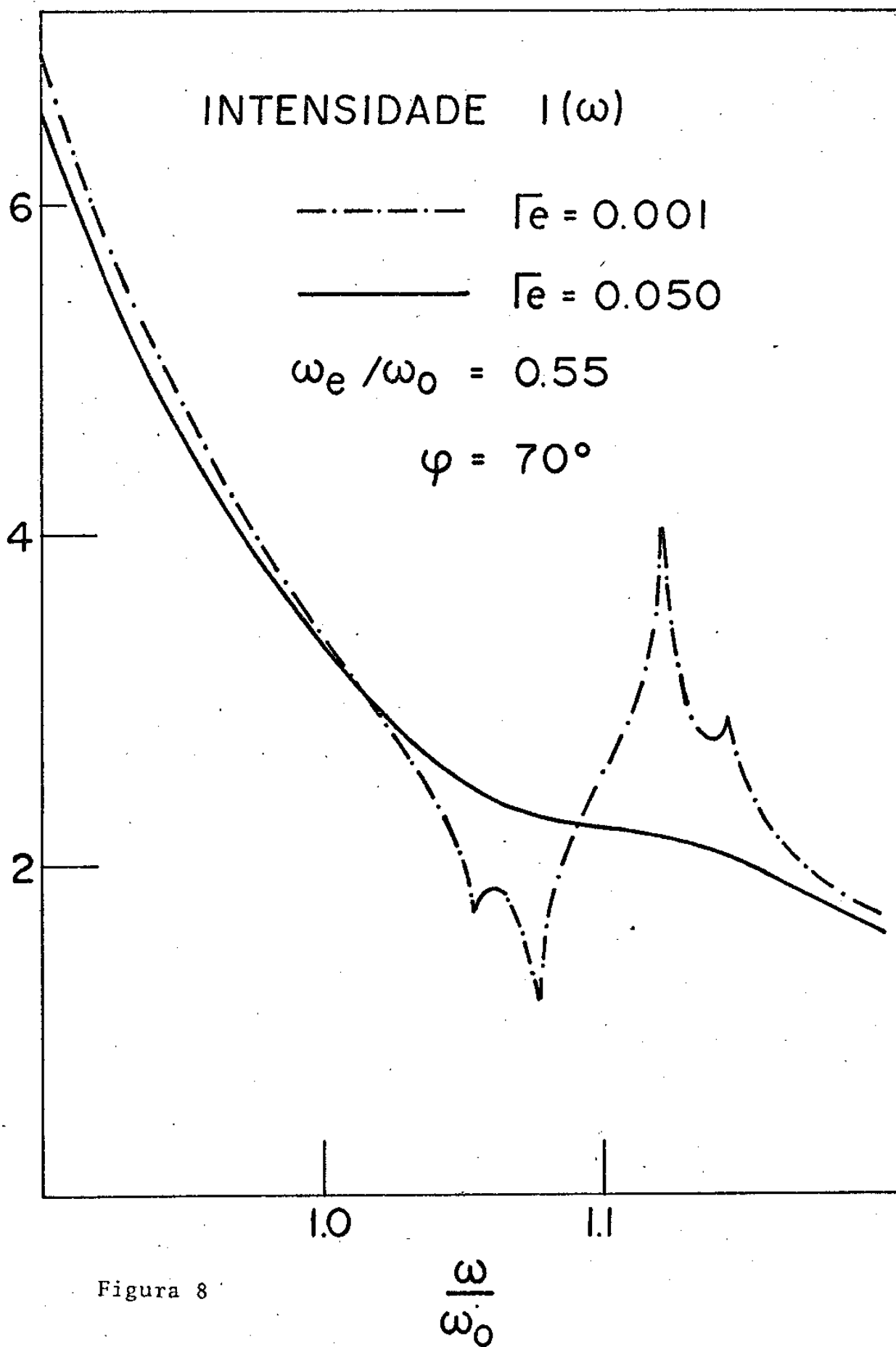
5

0

-5

1.0

1.1



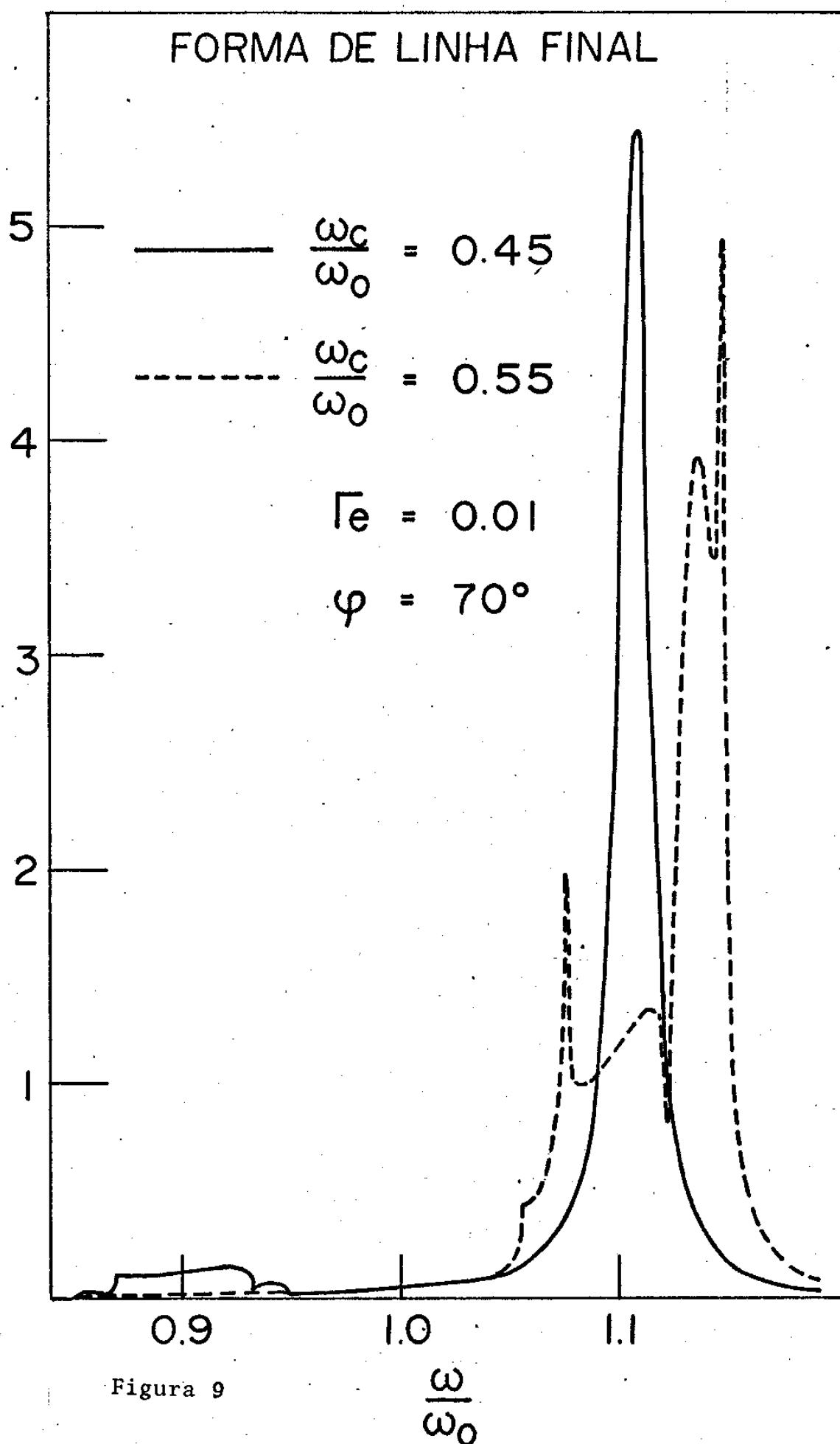


Figura 9

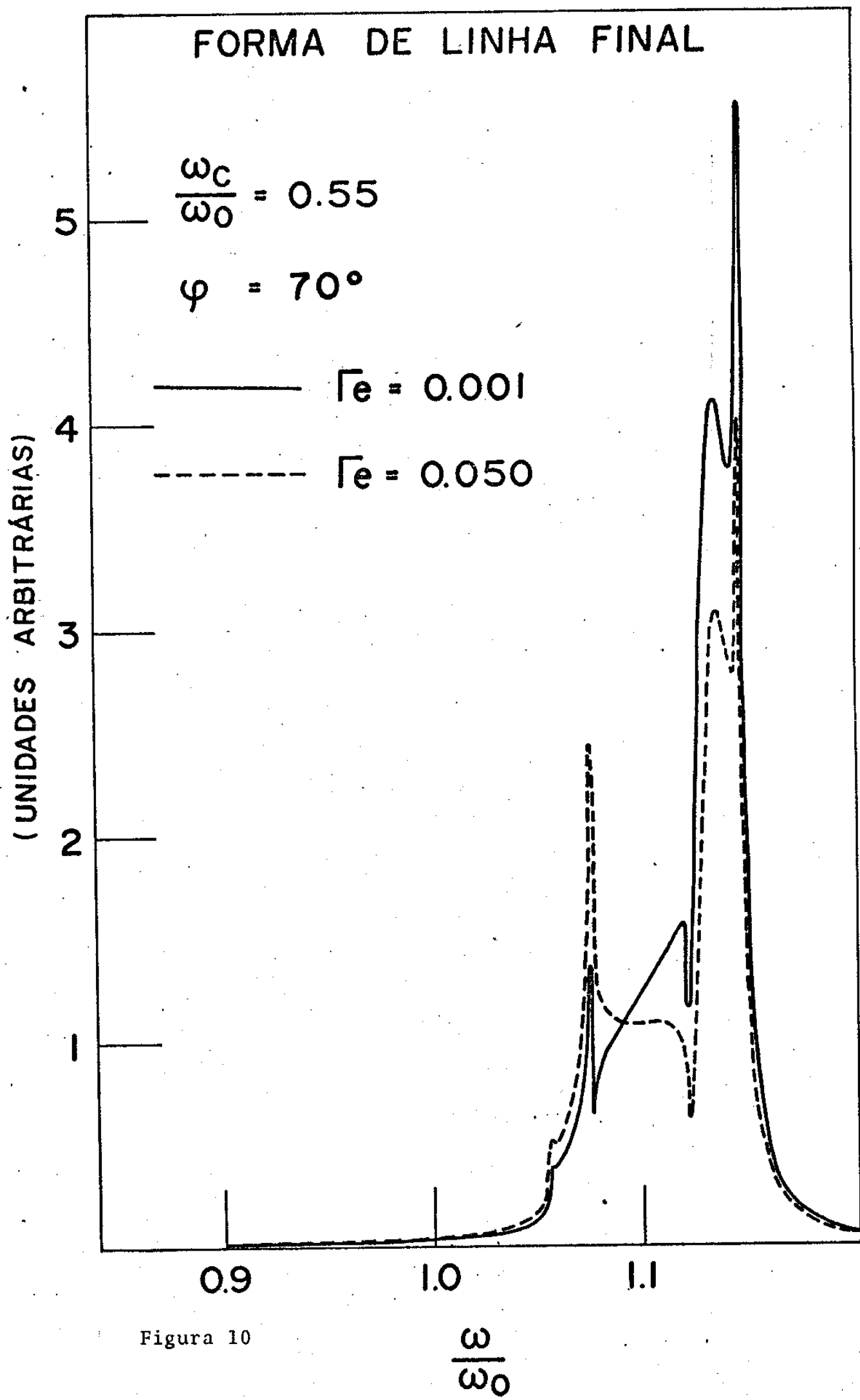


Figura 10

VI.2 - Comentários Finais

Neste trabalho consideramos o caso da interferência entre fonons longitudinais óticos e modos ciclotrônicos em semi-condutores dopados e mergulhados em campo magnético constante. Apresentamos um estudo do espalhamento inelásticos de luz pelo sistema elétron-fonon-LO com ênfase na situação de ressonância quando a frequência do fonon-LO iguala um múltiplo inteiro da frequência ciclotrônica. Nessas condições, como vimos, é de grande importância considerar efeitos de vida média das quase-partículas envolvidas, principalmente a contribuição que vem da interação elétron-fonon (através da hamiltoniana de Fröhlich) e que produz efeitos significativos essencialmente devidos a quantificação dos estados eletrônicos num campo magnético.

A fim de incluir essas vidas médias, foi desenvolvido um tratamento teórico que é equivalente a uma generalização do método que van Hove ⁽¹⁶⁾ sugeriu para tratar estados estacionários. Utilizamos o formalismo de matriz $\hat{S}$ para escrever a secção de espalhamento e finalmente relacioná-la com a função de Green a tempo duplo, permitindo o uso do método descrito no já clássico artigo de D.N. Zubarev. ⁽¹¹⁾

A função de Green a tempo duplo para fonons nas condições por nós especificadas foi calculada na secção IV, onde obtivemos uma expressão para o amortecimento dependente de frequência para os fonons, resultante da interação de Fröhlich. As partes real e imaginária desse amortecimento, tomando como base o GaAs, estão plotadas nas Figuras 1 e 2 para vários valores de ω_c/ω_0 .

Expressões para o amortecimento de fonons acústicos interagindo com modos ciclotrônicos em metais foram dadas por Blank e Kanner. ⁽¹⁷⁾ Embora as características específicas do

problema citado acima difiram bastante das do nosso trabalho, é interessante notar que, para $q \approx 0$, em ambos os casos se obtém para o amortecimento uma estrutura tipo degrau para $\gamma_q(\omega)$ e singularidades logarítmicas na parte imaginária $P_q(\omega)$.

Para melhor visualizar as implicações do nosso cálculo, fizemos na secção VI.1 uma aplicação para o caso específico do GaAs para campos tais que $\omega_0 \approx 2\omega_c$. Nas Figuras 1 e 2 apresentamos as partes real $\gamma(\omega)$ e imaginária $P(\omega)$ do amortecimento para fonons tais que q faz com o campo magnético um ângulo de 70° . Como vemos de IV.5.6 e IV.5.8 que por termos $\rho \ll 1$ o termo $\ell' = 1$, embora não ressonante nessa região de campos magnéticos é a contribuição dominante para $P_q(\omega)$. Plotamos no mesmo gráfico (Figura 1 e 2) $P_R(\omega)$, que seria responsável pela parte real do amortecimento no caso hipotético de termos a primeira ressonância ($\omega_0 = \omega_c$) distante o suficiente para dar contribuição nula na região de frequência $\omega \approx 2\omega_c$.

Para simplificar o entendimento dos resultados, plotamos primeiramente, na Figura 3, a "forma de linha" hipotética $L_R(\omega)$ supondo uma ressonância isolada, isto é, tomando $P_R(\omega)$ como responsável pela renormalização de frequência. Como era de se esperar, obtemos para $\frac{\omega_c}{\omega_0} = 0.45$ e $\frac{\omega_c}{\omega_0} = 0.55$ resultados simétricos, com a linha apresentando um pico aproximadamente na frequência de fonons e uma estrutura na região $\omega = 2\omega_c$. Isso caracteriza o modo espalhador como um modo misto fonons-LO-níveis de Landau proveniente da interação do fonon com um contínuum de modos ciclotrônicos, na região de ressonância. Para $\omega_c/\omega_0 = 0.5$ temos também uma estrutura característica desse tipo de situação. Na verdade porém, devemos usar $P(\omega)$, e não $P_R(\omega)$ para calcular a "forma de linha". Como está ilustrado na Figura 4, a inclusão do termo $\ell' = 1$ em $P(\omega)$ provoca uma variação drástica na forma de linha. Para entender a "forma de

linha" real devemos considerar qual o efeito do termo $\ell = 1$ na região de frequências considerada. É fácil verificar que esse termo considerado separadamente causa simplesmente um deslocamento da frequência do fonon para regiões mais altas, ou seja, a grosso modo, simplesmente renormaliza ω_0 .

Na Figura 5, onde apresentamos a "forma de linha" considerando todos os efeitos isto fica claro. Vemos que perdemos a simetria existente na Figura 3. Como a frequência do fonon foi renormalizada a distorção da linha (afastando-se de uma Lorentziana) que caracteriza a presença de um modo misto é muito mais pronunciada para $\omega = 1.1 \omega_0$ que para $\omega = 0.9 \omega_0$. A Figura 6 mostra essencialmente a forte dependência angular do efeito, que some completamente se tomarmos $\phi = 20^\circ$. Isso se deve ao fato de que o amortecimento $\gamma_q(\omega)$ depende essencialmente de $q_\perp$ e é absorvido pelo amortecimento devido ao "background" no caso de $q_\perp$ muito pequeno.

Finalmente, nas Figuras 7 e 8 apresentamos a parte real e imaginária da amplitude e a "intensidade" obtida, como função da frequência, para vários valores de Γ_e eletrônico. Aqui notamos que como o material contém impurezas esperamos que Γ_e seja relativamente grande mesmo perto de ZERO graus.

Finalmente, nas Figuras 9 e 10 plotamos a linha final esperada, como função da vida média eletrônica e para dois valores do campo magnético.

Ressaltamos aqui que na elaboração desse trabalho procuramos sempre que possível apresentar a par do tratamento puramente formal, argumentos de significado físico mais transparente. Essa preocupação fica patente no tratamento da seção III e no Apêndice 3.

Enfim, esse trabalho cumpre em parte uma finalidade teórica, sugerindo uma maneira de incluir e tratar os efeitos de vida média de estados quase-estacionários e uma finalidade

mais prática, mostrando que o processo estudado pode introduzir efeitos importantes que devemos ter em mente ao analisar o espectro Raman em presença de campo magnético.

APÊNDICE 1

a) Gás de Elétrons em Presença de Campo Magnético

Consideramos aqui um gás de elétrons livres em presença de campo magnético constante. Usamos a "gauge" de Landau e tomamos o potencial vetor $\underline{A}_0$ na forma $\underline{A}_0 = (-yH_0, 0, 0)$, o que implica num campo magnético H_0 na direção z . A equação de Schrödinger para um elétron nessas condições fica:

$$H_e \phi = E \phi \quad (A.1.1)$$

$$H_e = \frac{1}{2m} \left(\underline{p} + \frac{e}{c} \underline{A}_0 \right)^2$$

Resolvendo a equação acima obtemos as auto-funções e auto-valores da hamiltoniana H_e . Tomando um volume $v = L_x L_y L_z$ temos:

$$\phi_{n^x k_x k_z}(\underline{r}) = \frac{(2^n \lambda \sqrt{\pi} n!)^{-1/2}}{\sqrt{L_x L_y}} h_n \left(\frac{y}{\lambda} - \lambda k_x \right) e^{-1/2 \left(\frac{y}{\lambda} - \lambda k_x \right)^2} e^{i(k_x x + k_z z)}$$

$$E_{n, k_z} = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_c + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}$$

$$\lambda = \left(\frac{\hbar c}{e H_0} \right)^{1/2} \quad \omega_c = \frac{e H_0}{mc} \quad (A.1.2)$$

Usamos $\underline{r} = (x, y, z)$ e $h_n(x)$ são polinômios de Hermite de ordem n . As funções de onda estão normalizadas. Temos como números quânticos, o número n que indica o nível de Landau ocupado pelo elétron e as componentes k_x e k_z do momentum. Notemos que os auto-valores E_{n, k_z} são degenerados pois

independem de k_x . Impondo condições de contorno periódicas temos:

$$\begin{aligned} k_x &= \frac{2\pi r_x}{L_x} & r_x &= 0, \pm 1, \pm 2, \dots \\ k_z &= \frac{2\pi r_z}{L_z} & r_z &= 0, \pm 1, \pm 2, \dots \end{aligned} \quad (A.1.3)$$

A condição de que o centro da órbita fica dentro do volume considerado leva a uma restrição em r_x . (18)

$$\begin{aligned} 0 < \lambda^2 k_x < L_y \\ 0 < r_x < \frac{L_y L_x}{2\pi \lambda^2} \end{aligned} \quad (A.1.4)$$

Portanto, incluindo spin temos $\frac{L_x L_y}{\pi \lambda^2}$ valores de k_x para cada valor da energia E_{k_z} .

Tendo obtido as funções de onda para uma partícula, passamos ao formalismo de segunda quantização escrevendo os operadores de campo $\hat{\psi}(\underline{r})$ e $\hat{\psi}^+(\underline{r})$ como:

$$\hat{\psi}(\underline{r}) = \sum_{\underline{k}\underline{n}} \phi_{\underline{k}}(\underline{r}) a_{\underline{k}\underline{n}} \quad (A.1.5)$$

$$\hat{\psi}^+(\underline{r}) = \sum_{\underline{k}\underline{n}} \phi_{\underline{k}}^*(\underline{r}) a_{\underline{k}\underline{n}}^+$$

Ao escrever (A.1.5) usamos a notação simplificadora que passaremos a adotar $\underline{k} \equiv k_x, k_z, \sigma$ e incluímos em $\phi_{\underline{k}}(\underline{r})$ a dependência em spin. No mais, a notação é usual sendo $a_{\underline{k}\underline{n}}^+$ e $a_{\underline{k}\underline{n}}$ respectivamente operadores de criação e aniquilação para um

elêtron no estado (n, k_x, k_z, σ) , onde σ é o índice de spin. Portanto, em segunda quantização obtemos para a hamiltoniana de elétrons H_e a expressão dada em II.1.2, onde tomamos $v \rightarrow \infty$

$$H_e = \int_{-\infty}^{\infty} d^3r \hat{\psi}^\dagger(\underline{r}) H_e \hat{\psi}(\underline{r}) = \sum_{\underline{k}n} E_{n, k_z} a_{\underline{k}n}^\dagger a_{\underline{k}n}$$

$$E_{n, k_z} = (n + 1/2) \hbar \omega_c + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} \quad (A.1.6)$$

b) Hamiltoniana Eletron-Foton

Na secção A.1 parte (a), consideramos um gás de elétrons em presença de um campo magnético constante. Queremos agora adicionar ao problema um campo de radiação representado pelo potencial vetor $\underline{A}$. A hamiltoniana para um elétron no no vo problema em primeira aproximação fica da forma:

$$H = H_R + \frac{1}{2m} \left(\underline{p} + \frac{e}{c} (\underline{A}_0 + \underline{A}) \right)^2 \quad (A.1.7)$$

Aqui, H_R é a hamiltoniana do campo livre de radiação e o segundo termo nos dá a hamiltoniana para o elétron em presença do campo de radiação adicional. Desenvolvendo (A.1.7) temos:

$$\begin{aligned} H &= H_R + \frac{1}{2m} \left(\underline{p} + \frac{e}{c} \underline{A}_0 \right)^2 + \frac{e}{mc} \left(\underline{p} + \frac{e}{c} \underline{A}_0 \right) \cdot \underline{A} + \frac{e^2}{2mc^2} A^2 = \\ &= H_R + H_e + H_{eR} \end{aligned} \quad (A.1.8)$$

onde H_e é dada por (A.1).

Finalmente, escrevendo $H_{eR} = W_1 + W_2$ e passando para o formalismo de segunda quantização, obtemos:

$$\hat{W}_1(\underline{r}, t) = \frac{e}{mc} \sum_{\substack{\underline{k}n \\ \underline{k}'n' \\ \underline{k}_\mu}} \sqrt{\frac{2\pi\hbar c}{v_{\underline{k}_\mu} \epsilon_\infty^{1/2}}} \int_V d^3r \phi_{\underline{k}, \underline{n}}^*(\underline{r}) (\hat{\underline{e}}_\mu \cdot \{ \underline{p} - \frac{e}{c} \underline{A}_0 \}) \phi_{\underline{k}, \underline{n}}(\underline{r})$$

$$\cdot (c_{\underline{k}_\mu}^+(t) e^{-i\mathbf{k}_\mu \cdot \underline{r}} + c_{\underline{k}_\mu}(t) e^{i\mathbf{k}_\mu \cdot \underline{r}}) a_{\underline{k}, \underline{n}}^+(t) a_{\underline{k}, \underline{n}}(t)$$

$$\hat{W}_2(\underline{r}, t) = \sum_{\substack{\underline{k}n \\ \underline{k}'n' \\ \underline{k}_\mu \underline{k}_\lambda}} \frac{\pi \hbar e^2 (\hat{\underline{e}}_\lambda \hat{\underline{e}}_\mu)}{v_{cm} \epsilon_\infty^{1/2} \sqrt{k_\lambda k_\mu}} \int_V d^3r \phi_{\underline{k}, \underline{n}}^*(\underline{r}) \{ c_{\underline{k}_\lambda}^+(t) e^{-i\mathbf{k}_\lambda \cdot \underline{r}} + c_{\underline{k}_\lambda}(t) e^{i\mathbf{k}_\lambda \cdot \underline{r}} \}$$

$$\cdot \{ c_{\underline{k}_\mu}^+(t) e^{-i\mathbf{k}_\mu \cdot \underline{r}} + c_{\underline{k}_\mu}(t) e^{i\mathbf{k}_\mu \cdot \underline{r}} \} \phi_{\underline{k}, \underline{n}}(\underline{r}) a_{\underline{k}, \underline{n}}^+(t) a_{\underline{k}, \underline{n}}(t)$$

$$c_{\underline{k}_\mu}(t) = c_{\underline{k}_\mu} e^{-i\omega_{\underline{k}_\mu} t}$$

$$\hat{H}_{eR}(t) = \hat{W}_1(\underline{r}, t) + \hat{W}_2(\underline{r}, t)$$

$$a_{\underline{k}, \underline{n}}(t) = a_{\underline{k}, \underline{n}} e^{-i\omega_{\underline{k}, \underline{n}} t}$$

(A.1.13)

Esses resultados são dados na representação de interação, apropriada ao formalismo usado na secção II.

c) Hamiltoniana Elétron-Fonon

A hamiltoniana de Fröhlich H_{ef} é bem conhecida (20,11) na ausência de campo magnético e nesse caso é dada por (representação de interação).

$$H_{ef}(\underline{r}, t) = \sum_{\substack{\underline{k}, q \\ \sigma}} V_q a_{\underline{k}\sigma}^+(t) a_{\underline{k}-q}^-(t) (b_q(t) + b_{-q}^+(t))$$

$$V_q = i \frac{e}{q} \sqrt{\frac{2\pi\hbar\omega_q}{v}} \left(\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_0} \right)^{1/2}$$

(A.1.14)

Em presença de campo magnético a função de onda eletrônica não é mais uma onda plana assumindo a forma mais complexa dada por A.1.1. Para ter indicação de como modificar a expressão para o caso de termos campo magnético, reescrevemos A.1.14 em termos da função de onda $\phi_{\underline{k}} = \frac{e^{i\underline{k} \cdot \underline{r}}}{\sqrt{v}}$, para o elétron livre na ausência de campo.

$$H_{ef} = \sum_{\substack{\underline{k}_1, \underline{k}_2 \\ q\sigma}} V_q \left\{ \int_V \phi_{\underline{k}_1}(\underline{r}) e^{-i\underline{q} \cdot \underline{r}} \phi_{\underline{k}_2}(\underline{r}) d^3r \right\} a_{\underline{k}_1\sigma}^+(t) a_{\underline{k}_2\sigma}(t) (b_q(t) + b_{-q}^+(t))$$

(A.1.15)

Notem que, realmente, substituindo o valor de $\phi_{\underline{k}}$ em A.1.15 reobtemos A.1.14. Em presença de campo magnético $\phi_{\underline{k}}(\underline{r}) \longrightarrow \phi_{\underline{k}}(\underline{r})$ e obtemos para esse caso:

$$H_{ef}(\underline{r}, t) = \sum_{\substack{\underline{k}_1, \underline{k}_2 \\ \underline{n}_1, \underline{n}_2 \\ q}} V_q \left\{ \int_V \phi_{\underline{k}_1}^*(\underline{r}) e^{-i\underline{q} \cdot \underline{r}} \phi_{\underline{k}_2}(\underline{r}) d^3r \right\} a_{\underline{k}_1 n_1}^+(t) a_{\underline{k}_2 n_2}(t) (b_q(t) + b_{-q}^+(t))$$

$$V_q = i \frac{e}{|q|} \sqrt{\frac{2\pi\hbar\omega_q^{1/2}}{v}} \left(\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon} \right)^{1/2}$$

$$b_q(t) = b_q e^{-i\omega_q t}$$

(A.1.16)

Trocando $\underline{q}$ em $-\underline{q}$ e notando que $V_{\underline{q}} = V_{-\underline{q}}$ e $\omega_{\underline{q}} = \omega_{-\underline{q}}$ obtemos a expressão na forma usada na secção II (equação II.2.6).

APÊNDICE 2

Cálculo da Função de Green $G^0(\underline{r}t, \underline{r}'t')$ para o caso de um gás de elétrons, em presença de campo magnético constante.

Nesse Apêndice, seguimos a mesma linha de raciocínio usada por Fetter e Walecka (9b) para calcular $G^0(\underline{r}t, \underline{r}'t')$ na ausência de campo magnético, mas introduzimos campo e fazemos as modificações cabíveis.

Em presença de campo magnético, os operadores de campo para os elétrons tem a forma dada no Apêndice 1:

$$\hat{\psi}_I(\underline{r}, t) = \sum_{\underline{k}n} \phi_{\underline{k}n}(\underline{r}) a_{\underline{k}n} e^{-i\omega_{\underline{k}n} t} \quad (\text{A.2.1})$$

$$\omega_{\underline{k}n} = (n + 1/2) \omega_c + \frac{\hbar k_z^2}{2m^*}$$

Em analogia com a referência citada, redefinimos o operador $a_{\underline{k}n}$ como:

$$a_{\underline{k}n} = \begin{cases} a_{(+)\underline{k}n} & k_z > k_{zF}^{(n)} \\ a_{(-)\underline{k}n}^+ & k_z < k_{zF}^{(n)} \end{cases}$$

$$k_{zF}^{(n)} = \left[(\epsilon_F - \hbar\omega_c (n + 1/2)) \frac{2m^*}{\hbar^2} \right]^{1/2} \quad (\text{A.2.2})$$

Em termos de A.2.2., o operador de campo A.2.1 pode ser escrito como:

$$\hat{\psi}_I(\underline{r}, t) = \sum_{\substack{\underline{k}, n \\ k_z > k_{zF}^{(n)}}} \phi_{\underline{k}n}(\underline{r}) a_{(+)\underline{k}n} e^{-i\omega_{\underline{k}n} t} + \sum_{\substack{\underline{k}, n \\ k_z < k_{zF}^{(n)}}} \phi_{\underline{k}n}(\underline{r}) a_{(-)\underline{k}n}^+ e^{-i\omega_{\underline{k}n} t} \quad (\text{A.2.3})$$

Usando a definição de $G^0(\underline{r}t, \underline{r}'t')$, (ver pág.) e lembrando que $a_{(-)}|\phi_0\rangle = a_{(+)}|\phi_0\rangle = 0$, uma vez que não temos excitações a serem destruídas no estado fundamental, obtemos:

$$\begin{aligned} iG^0(\underline{r}t, \underline{r}'t') &= \{\theta(t-t') \sum_{\substack{\underline{k}n \\ k_z > k_{zF}^{(n)}}} \phi_{\underline{k}n}(\underline{r}) \phi_{\underline{k}n}^*(\underline{r}') e^{-i\omega_{\underline{k}n}(t-t')} \\ &\quad - \theta(t-t') \sum_{\substack{\underline{k}n \\ k_z < k_{zF}^{(n)}}} \phi_{\underline{k}n}(\underline{r}) \phi_{\underline{k}n}^*(\underline{r}') e^{-i\omega_{\underline{k}n}(t-t')} \} \quad (\text{A.2.4}) \end{aligned}$$

Essa expressão pode ser reescrita como:

$$\begin{aligned} iG^0(\underline{r}t, \underline{r}'t') &= \sum_{\underline{k}n} \phi_{\underline{k}n}(\underline{r}) \phi_{\underline{k}n}^*(\underline{r}') e^{-i\omega_{\underline{k}n}(t-t')} \\ &\quad \cdot \{ \theta(t-t')\theta(|k_z| - k_{zF}^{(n)}) - \theta(t'-t)\theta(k_{zF}^{(n)} - |k_z|) \} \quad (\text{A.2.5}) \end{aligned}$$

Uma forma mais apropriada pode ser obtida lembrando que no limite $\eta \rightarrow 0$ temos:

$$\theta(t-t') = - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi i} \frac{e^{-i\omega(t-t')}}{\omega + i\eta} \quad (\text{A.2.6})$$

Usando A.2.6, a expressão A.2.5 toma a forma:

$$\begin{aligned}
 G^0(\underline{r}t, \underline{r}'t') &= \sum_{\underline{k}n} \phi_{\underline{k}}(\underline{r}) \phi_{\underline{k}}^*(\underline{r}') \cdot \\
 &\cdot \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{e^{-i(\omega_{\underline{k}z} + \omega)(t-t')}}{\omega + i\eta} \theta(|k_z| - k_{zF}^{(n)}) \right. \\
 &- \left. \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{e^{-i(\omega_{\underline{k}z} - \omega)(t-t')}}{\omega + i\eta} \theta(k_{zF}^{(n)} - |k_z|) \right\}
 \end{aligned}
 \tag{A.2.7}$$

Finalmente, substituindo variáveis na integração acima, obtemos:

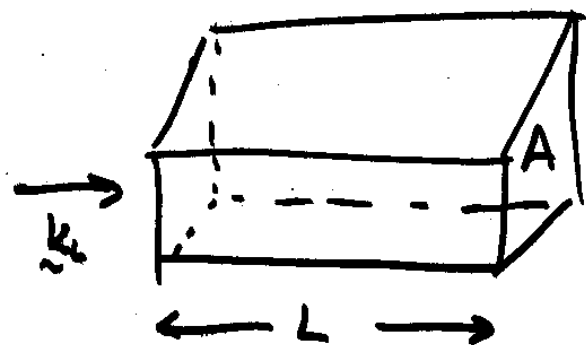
$$\begin{aligned}
 G^0(\underline{r}t, \underline{r}'t') &= \sum_{\underline{k}n} \phi_{\underline{k}}(\underline{r}) \phi_{\underline{k}}^*(\underline{r}') \cdot \\
 &\cdot \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} e^{i\omega(t-t')} \left\{ \frac{\theta(|k_z| - k_{zF}^{(n)})}{\omega - \omega_{\underline{k}z} + i\eta} + \frac{\theta(k_{zF}^{(n)} - |k_z|)}{\omega - \omega_{\underline{k}z} - i\eta} \right\}
 \end{aligned}
 \tag{A.2.8}$$

APÊNDICE 3

Eficiência Raman e Secção de Espalhamento Raman

Nesse Apêndice definimos a eficiência Raman em termos de idéias físicas bastante simples e usamos a definição clássica de secção de espalhamento para, de forma análoga, chegar à secção de espalhamento Raman.

Tomamos como ponto de partida a probabilidade por unidade de tempo $P_{fi}(d\Omega)$ de termos um foton espalhado no ângulo sólido $d\Omega$ (no detetor) quando temos n_{k_ℓ} fotons passando pelo volume v do cristal (no sentido de volume efetivo). Essa quantidade é dada por II.3.3 e II.3.4. Supomos que o volume efetivo v tenha forma de um paralelepípedo de secção reta A perpendicular à direção de incidência dos fotons e espessura L (ver figura abaixo).



O que pretendemos mostrar é que no caso simples em que desprezamos a atenuação do feixe e a possibilidade de termos processos de ordem superior, a eficiência Raman S , pode ser definida como sendo: "a probabilidade de um

foton ser espalhado num ângulo sólido $d\Omega$ ao passar pelo cristal".

Como nessas condições temos um problema homogêneo, a probabilidade por unidade de tempo de termos qualquer um dos fotons contidos no volume v espalhado no detetor é a mesma. Assim, a probabilidade por unidade de tempo de um foton em v ser espalhado no ângulo sólido $d\Omega$ é dada por $\frac{P_{fi}(d\Omega)}{n_{k_\ell}}$.

Notamos que S , a probabilidade de um foton ser espalhado no detetor ao atravessar o cristal, é dada pela probabilidade por unidade de tempo dele ser espalhado em $d\Omega$ estando em v , vezes o tempo que ele permanece nesse volume. Se a velocidade da luz no meio é $c\epsilon_{\infty}^{-1/2}$ e a espessura do cristal é L , o foton permanece no cristal um tempo $\frac{L}{c\epsilon_{\infty}^{-1/2}}$ e podemos escrever para a eficiência Raman

$$S = \frac{P_{fi}(d\Omega)L}{c\epsilon_{\infty}^{-1/2} n_{k_l}} \quad (A.3.1)$$

Essa expressão coincide com a citada usualmente na literatura, (5) mas aqui fica bastante claro seu significado físico.

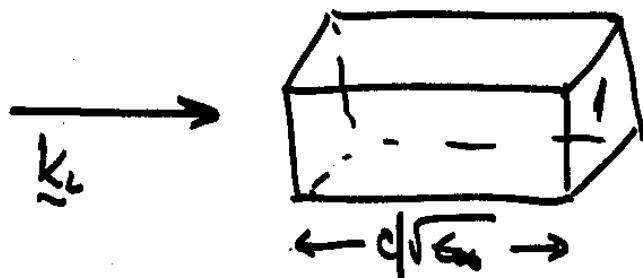
Usando a própria definição de eficiência Raman, podemos sugerir a forma da secção de espalhamento. Notando que para uma secção de espalhamento igual à própria área da secção reta teríamos todo o foton incidente espalhado no detetor, escrevemos:

$$\begin{aligned} S &\rightarrow 1 \\ \text{ou seja} \quad d &= SA = \frac{P_{fi}(d\Omega) v}{n_{k_l} c\epsilon_{\infty}^{-1/2}} \quad (A.3.2) \\ d\sigma &\rightarrow A \end{aligned}$$

Podemos alternativamente usar a própria definição clássica de secção de espalhamento (19) para definir a secção de espalhamento Raman de forma análoga (Notem que $d\sigma = \sigma(\Omega)d\Omega$ na notação da referência).

$$d\sigma = \frac{\text{nº de partículas espalhadas em } d\Omega \text{ por unidade de tempo}}{\text{Intensidade do feixe incidente}} \quad (A.3.3)$$

Essa intensidade $\tilde{\epsilon}$ é definida como o número de partículas (no nosso caso, ftons) cruzando uma secção reta de área unitária por unidade de tempo. Se a velocidade da luz no meio é $c\epsilon_{\infty}^{-1/2}$, em uma unidade de tempo todas as partículas contidas no volume da figura abaixo atravessam a secção reta unitária.



Portanto, sendo $\frac{n_{k_\ell}}{v}$ o número de ftons por unidade de volume, a intensidade é dada por $\frac{n_{k_\ell}}{v} c\epsilon_{\infty}^{-1/2}$. Notando que o numerador de A.3.3 é o próprio $P_{fi}(d\Omega)$ obtemos novamente:

$$d\sigma = \frac{P_{fi}(d\Omega) v}{n_{k_\ell} c\epsilon_{\infty}^{-1/2}} \quad (\text{A.3.4})$$

APÊNDICE 4

Cálculo da Intensidade Raman na Ausência de Amortecimento

Como ilustração e para completar o tratamento da secção II, calculamos a intensidade $I(\omega)$ para o caso de amortecimento nulo. Nesse caso, como já foi mencionado, a "forma de linha" se reduz à delta de conservação de energia. Na notação da secção III, temos:

$$\frac{d^2\sigma}{d\omega d\Omega} = I(\omega) L(\omega)$$

$$L(\omega) = \delta(\omega - \omega_0) \quad (A.4.1)$$

$$I(\omega) = I(\omega_0)$$

Aqui, $\omega = \omega_{k_L} - \omega_{k_R}$ e comparando A.4.1 e II.3.10, temos:

$$I(\omega_0) = c_q \left| \sum_{n' > n} \sum_{n=0}^{n_0} \left| I_{q_{\perp}} \right|_{nn'}^2 \int_{-\infty}^{\infty} dk_z \frac{2(n'-n)\omega_c \theta(|k_z| - k_{zF}^{(n')}) \theta(k_{zF}^{(n)} - |k_z|)}{\left(\omega_0 - \frac{k_z q_z \hbar}{m^*} \right)^2 - ((n'-n)\omega_c)^2} \right|^2 \quad (A.4.2)$$

De passagem, notamos que usando para a secção de espalhamento diferencial a expressão II.3.10 obtemos para a intensidade Raman:

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\omega_R \frac{d^2\sigma}{d\Omega d\omega_R} = I(\omega_0) \quad (A.4.3)$$

Vemos de (A.4.1) e (A.4.3), que se o amortecimento é nulo, a "intensidade" $I(\omega)$ é efetivamente igual a $I(\omega_0)$, uma constante e recupera o significado físico como intensidade Ra-

man no sentido usual. Feita essa observação, passamos ao cálculo de $I(\omega_0)$ dado por A.4.2. Chegaremos à expressão final para $I(\omega_0)$ no caso específico do exemplo da secção V onde $\rho \ll 1$, $n_0 = 1$ e temos campos magnéticos tais que $\omega_0 \approx 2\omega_c$. É conveniente notar que a integral na expressão (A.4.2) pode ser reescrita como:

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{\infty} dk_z \frac{2(n'-n)\omega_c \theta(|k_z| - k_{zF}^{(n')}) \theta(k_{zF}^{(n)} - |k_z|)}{(\omega_0 - \frac{k_z q_z \hbar}{m^*})^2 - ((n'-n)\omega_c)^2} = \\ & \equiv \int_{-\infty}^{\infty} dk_z \frac{\theta(|k_z| - k_{zF}^{(n')}) \theta(k_{zF}^{(n)} - |k_z|)}{\omega_0 - (n'-n)\omega_c - \frac{k_z q_z \hbar}{m^*}} - \int_{-\infty}^{\infty} dk_z \frac{\theta(|k_z| - k_{zF}^{(n')}) \theta(k_{zF}^{(n)} - |k_z|)}{\omega_0 + (n'-n)\omega_c - \frac{k_z q_z \hbar}{m^*}} \end{aligned} \quad (A.4.4)$$

Para obter $I(\omega)$ devemos, portanto, resolver integrais da forma:

$$\begin{aligned} & \int_{-k_{zF}^{(n)}}^{-k_{zF}^{(n')}} \frac{dk_z}{\omega_0 \pm (n'-n)\omega_c - \frac{k_z q_z \hbar}{m^*}} + \int_{k_{zF}^{(n')}}^{k_{zF}^{(n)}} \frac{dk_z}{\omega_0 \pm (n'-n)\omega_c - \frac{k_z q_z \hbar}{m^*}} = \\ & = \int_{-k_{zF}^{(n)}}^{k_{zF}^{(n)}} \frac{dk_z}{\omega_0 \pm (n'-n)\omega_c - \frac{k_z q_z \hbar}{m^*}} - \int_{-k_{zF}^{(n')}}^{k_{zF}^{(n')}} \frac{dk_z}{\omega_0 \pm (n'-n)\omega_c - \frac{k_z q_z \hbar}{m^*}} \end{aligned} \quad (A.4.5)$$

Aqui chamamos a atenção para o fato de que na expressão acima (A.4.5) as integrações não estão bem definidas. Um erro comum seria supor que se tem essencialmente uma integral em valor principal. Um descuido dessa natureza é encontrado na literatura num artigo básico para o caso análogo de Raman ressonante, (21)

tendo sido posteriormente corrigido. Usando nosso tratamento, não temos dificuldades em deixar bem estabelecidas as integrais A.4.5. Recorrendo à expressão (V.1) e fazendo $\Gamma \rightarrow 0$, vemos imediatamente que as integrais são da forma:

$$\begin{aligned} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_a^b \frac{dk_z}{\omega_0 \pm (n' - n)\omega_c - \frac{k_z q_z \hbar}{m^*} \mp i\epsilon} &= \\ = P \int_a^b \frac{dk_z}{\omega_0 \pm (n' - n)\omega_c - \frac{k_z q_z \hbar}{m^*}} \pm i\pi \int_a^b dk_z \delta\left(\omega_0 \pm (n' - n)\omega_c - \frac{k_z q_z \hbar}{m^*}\right) \end{aligned} \quad (A.4.6)$$

Para uma ressonância isolada, a parte imaginária tem papel preponderante para $\omega_0 = (n' - n)\omega_c$ e ignorá-la pode modificar significativamente a intensidade Raman. Efetuando as integrações obtemos:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk_z \theta(|k_z| - k_{ZF}^{(n')}) \theta(k_{ZF}^{(n)} - |k_z|)}{\omega_0 \pm (n' - n)\omega_c - \frac{k_z q_z \hbar}{m^*}} &= \\ = \frac{m^*}{q_z \hbar} \left\{ \ln \left| \frac{\omega_0 \pm (n' - n)\omega_c + \beta^{(n)}}{\omega_0 \pm (n' - n)\omega_c - \beta^{(n)}} \right| + \ln \left| \frac{\omega_0 \pm (n' - n)\omega_c - \beta^{(n')}}{\omega_0 \pm (n' - n)\omega_c + \beta^{(n')}} \right| \right\} \\ \pm \frac{im^*}{q_z \hbar} \left\{ \int_{-\beta^{(n)}}^{\beta^{(n)}} du (\omega_0 \pm (n' - n)\omega_c - u) - \int_{-\beta^{(n')}}^{\beta^{(n')}} du \delta(\omega_0 \pm (n' - n)\omega_c - u) \right\} \end{aligned} \quad (A.4.7)$$

Devemos notar que para $n' > n, (\beta^{(n)} > \beta^{(n')})$, a parte imaginária da expressão acima é não nula se $|\omega_0 \pm (n' - n)\omega_c| < \beta^{(n)}$. Substituímos

tituindo os resultados A.4.7 em A.4.2 e usando V.6, obtemos para $n_0 = 1$ e $\omega_0 \approx 2\omega_c$, usando argumentos análogos aos da secção (IV.5) e V :

$$I_{(2)}(\omega_0) = C_q (|R_{(2)}(\omega_0)|^2 + |S_{(2)}(\omega_0)|^2)$$

$$\begin{aligned} R_{(2)}(\omega_0) = & \frac{m^*}{q_z \hbar} \left\{ \ln \left| \frac{\omega_0 - \omega_c + \beta^{(0)}}{\omega_0 - \omega_c - \beta^{(0)}} \right| - \ln \left| \frac{\omega_0 + \omega_c + \beta^{(0)}}{\omega_0 + \omega_c - \beta^{(0)}} \right| + \ln \left| \frac{\omega_0 - \omega_c + \beta^{(1)}}{\omega_0 - \omega_c - \beta^{(1)}} \right| \right. \\ & - \ln \left| \frac{\omega_0 + \omega_c + \beta^{(1)}}{\omega_0 + \omega_c - \beta^{(1)}} \right| \left. \right\} + \frac{m^* \rho^2}{2q_z \hbar} \left\{ \ln \left| \frac{\omega_0 - 2\omega_c + \beta^{(0)}}{\omega_0 - 2\omega_c - \beta^{(0)}} \right| \right. \\ & + 3 \ln \left| \frac{\omega_0 - 2\omega_c + \beta^{(1)}}{\omega_0 - 2\omega_c - \beta^{(1)}} \right| \left. \right\} \end{aligned}$$

$$S_{(2)}(\omega) = - \frac{m^* \rho^2 \pi}{2q_z \hbar} \left\{ \int_{-\beta^{(0)}}^{\beta^{(0)}} du \delta(\omega_0 - 2\omega_c - u) + 3 \int_{-\beta^{(1)}}^{\beta^{(0)}} du \delta(\omega_0 - 2\omega_c - u) \right\}$$

(A.4.8)

Note que como $\beta^{(n)}$ é pequeno, a única contribuição para a parte imaginária vem de $(n' - n) = 2$ na região $\omega_0 \approx 2\omega_c$. Mas explicitamente $S_{(2)}(\omega)$ é uma função degrau em ω_0 .

$$S(\omega_0) = \begin{cases} 0 & \text{se } |\omega_0 - 2\omega_c| > \beta^{(0)} \\ - \frac{\pi m^* \rho^2}{2q_z \hbar} & \text{se } \beta^{(0)} > |\omega_0 - 2\omega_c| > \beta^{(1)} \\ - \frac{3}{2} \frac{\pi m^* \rho^2}{q_z \hbar} & \text{se } |\omega_0 - 2\omega_c| < \beta^{(1)} \end{cases}$$

(A.4.9)

Como era de se esperar, no $\lim \gamma(\omega) \rightarrow 0$, $\Gamma \rightarrow 0$, as expressões III.3.10 e V.8 levam a A.4.8 e A.4.9 . Em particular, vemos claramente da figura 7 , que $S(\omega)$ tende a uma função tipo degrau quando $\Gamma \rightarrow 0$.

REFERÊNCIAS

- (1) R. Luzzi, Progr. Theor. Phys. 47 (1972), 13.
- (2) P.A. Wolff, Phys. Rev. Letters 16 (1966), 225.
- (3) C.K.N. Patel e R.E. Slusher, Phys. Rev. 167 (1968), 413.
- (4) R.E. Slusher, C.K.N. Patel e P.A. Fleury, Phys. Rev. Letters 18 (1967), 77.
- (5) R. Loudon, Proc. Roy. Soc. A275 (1963), 218.
- (6) G.M. Genkin e V.V. Zil'berberg, Sou. Phys. - Sol. Stat. 11 (1970), 1465.
- (7) M.S. Dresselhaus e G. Dresselhaus, Phys. Rev. 125 (1962), 499.
- (8) A.S. Davidov, Quantum Mechanics, Addison-Wesley (1964)
 - a) pg. 643
 - b) pg. 333
 - c) pg. 309
- (9) A.L. Fetter e J.D. Walecka, Mc Graw-Hill (1971)
 - a) pg. 83
 - b) pg. 70
- (10) P.C. Martin, Measurements and Correlation Functions, Gordon and Breach (1968).
- (11) D.N. Zubarev, Sov. Phys. - Uspekhi 3 (1960), 320.
- (12) P.C. Martin e J. Schwinger, Bull. Am. Phys. Soc. 3, (1958), 202.
- (13) I.S. Gradshteyn e I.M. Ryzhik, Table of Integral Series and Products, Academic Press (1965).
- (14) S.M. Sze, Physics of Semiconductor Devices, Wiley-Interscience (1969) - pg. 20.
- (15) E. Burnstein, Phonons and Phon Interactions, T. BAK - pg. 277.
- (16) L. van Hove, Phys. Rev. 95 (1954), 249.

- (17) A.Y. Blank e E.A. Kaner, Sov. Phys. - Jept 23 (1966), 673.
- (18) J.M. Ziman, Principles of Theory of Solids, Cambridge University Press (1964) - pg. 271.
- (19) H. Goldstein, Classical Mechanics, Addison-Wesley (1950) - pg. 81.
- (20) C. Kittel, Quantum Theory of Solids, Wiley and Sons (1963) pg. 140.
- (21) R. Loudon, J. Phys. (Paris) 26 (1965), 677.