

S E M I C O N D U T O R
S A T U R A D O

Orientador: Dr. R. Luzzi

S E M I C O N D U T O R S A T U R A D O

Fabio Gonçalves dos Reis

Tese de Doutorado
apresentada ao Instituto
de Física Gleb Wataghin
da Universidade de
Campinas

CAMPINAS
1979

AGRADECIMENTOS

Ao Prof. Dr. Roberto Luzzi pela orientação deste Trabalho

A Dr. Hilda A.G. Cerdeira que me ajudou a realizar alguns cálculos deste trabalho

Ao Instituto de Física -Departamento de Estado Sólido -por ter criado condições à realização deste Trabalho

A Fundação de Amparo a Pesquisa do Estado de São Paulo por parte do apoio financeiro no primeiro período deste trabalho

A Todos Amigos

ÍNDICE

CAPÍTULO 1

1.1 Excitações em Semicondutores	3
1.2 Fase Saturada em Semicondutores	10
1.3 Efeito Coulombiano no espectro da Fase Saturada	- 16
1.4 GAP e o Estado Fundamental	24
1.5 Potencial Termodinâmico	33

CAPÍTULO 2

2.1 Resposta Dielétrica	38
2.2 Constante Dielétrica: Fase Saturada	43
2.3 Função de Correlação Densidade-Densidade	57

CAPÍTULO 3

3.1 Corrente de Tunelamento Efeito Josephson	61
3.2 Efeito Josephson por Generalização de Transfor- mação de Bogoliubov	69
3.3 Possível Tunelamento numa Junção de Semicondutores Saturados	75

APÊNDICES	80
---------------------	----

BIBLIOGRAFIA	100
------------------------	-----

RESUMO

Este trabalho visa fundamentalmente o estudo da fase saturada em semicondutores em termos de um formalismo de quasi-partículas. Para isto, começamos apresentando no parágrafo 1.1 a evolução dos fenômenos relacionados à excitação em semicondutores, no qual situamos a fase em estudo. A seguir, nos parágrafos (1.2) e (1.3) fazemos uma exposição teórica da formação dessa fase e introduzimos nesse formalismo a interação Coulombiana, tendo por objetivo analisar excitações de caráter coletivo no sistema, o que é feito no Cap. 2. É mostrado que a característica fundamental do estado saturado está relacionado com o aparecimento de um gap em torno dos quasi-níveis de energia, que dependem da direção da luz incidente e do momento dos elétrons.

O formalismo em termos de quasi-partículas é então montado e mostramos com isto que a fase saturada é uma fase estável.

Com o intuito de entender os fenômenos termodinâmicos relacionados à fase saturada propomos no parágrafo (1.5) um cálculo de seu potencial termodinâmico.

No Capítulo 2, levando em conta os efeitos de excitação coletiva, encontramos com a aproximação RPA a constante dielétrica da fase saturada. Como existe uma relação entre a parte imaginária da constante dielétrica com a secção eficaz de espalhamento, pudemos obter uma confirmação da existência do gap, pois só haverá espalhamento quando a frequência é duas vezes o valor desse gap.

No Capítulo 3 fazemos inicialmente uma revisão do efeito Josephson em supercondutores pelo método de pseudo-

-spin dado por Anderson e propomos uma generalização simples e direta para reobter os resultados dados por Josephson, quando mostrou a existência de uma super corrente numa função supercondutora.

Estes resultados são adaptados em continuação para estudar a possibilidade de tunelamento em junções entre semi-condutores saturados.

1.1 Excitação em Semicondutores

Num semicondutor, a absorção de ftons com energia maior do que a energia de seu gap, leva ao aparecimento de pares ligados de elétrons-buracos. Os elétrons e buracos produzidos desta forma são livres e podem se mover dentro do semicondutor. A interação Coulombiana existente entre eles é o responsável pela formação do estado ligado dessas duas partículas. Por analogia ao átomo de hidrogênio, mostra-se que a energia de formação desse par é menor do que a energia do gap do semicondutor. A esse par elétron-buraco ligado, num semicondutor, dá-se o nome de exciton de Wannier-Mott (W-M) [K-1].

Nos envolveremos neste trabalho só com este tipo de exciton W-M, por estarmos interessados em analisar o comportamento eletrônico de um semicondutor em regime de alta densidade de excitons.

Neste ponto voltamos a atenção para um sistema de excitons, e verificamos que se a concentração de excitons for aumentada, eles começam a se perceber e as propriedades do sistema a se transformar.

A seguir faremos um resumo do comportamento do sistema de excitons levando em conta sua variação na concentração.

Em baixas concentrações, as propriedades eletrônicas dos semicondutores estão relacionadas com a formação de um gás de excitons. Neste caso a excitação é fraca e a distância média entre dois excitons ($d = n^{-1/3}$), é bem maior do que o raio de Bohr do exciton. Por conveniência define-se

um parâmetro adimensional r_s , interpretado como sendo o raio da esfera, cujo volume é igual a n^{-1} medidos em unidades do raio de Bohr excitônico a_0 , isto é:

$$r_s = \left(\frac{4}{3} \pi a_0^3 n \right)^{-1/3}$$

$$a_0 = \left(\frac{\epsilon_0 \hbar^2}{e^2} \right) \left(\frac{1}{m_e^*} + \frac{1}{m_h^*} \right)$$

n - densidade dos elétrons

$m_{e,h}^*$ - massa efetiva

e - carga dos elétrons

ϵ_0 - constante dielétrica estática

Em termos desse parâmetro, podemos caracterizar o gás de excitons por $r_s \gg 1$. Neste limite os operadores de excitons obedecem a relação de comutação de Bose, isto é, os excitons podem ser considerados como perfeitos Bosons. Neste caso a interação entre os excitons é desprezível se comparadas às interações excitons-fonons e excitons-fotons.

Com o aumento da concentração dos excitons no sistema acima, sem ainda sair do limite $r_s \gg 1$ começam aparecer efeitos coletivos que não são explicados pela teoria do gás de excitons. Pela possibilidade de existir uma condensação de Bose no sistema [B-2] [M-1], tentou-se explicar o que ocorria supondo que esta condensação provinha do fato de serem os excitons vistos como estados excitados não localizados, como estados hidrogeniônicos de pares ligados de elétrons e buracos pela interação coulombiana efetiva no cristal.

Recentes desenvolvimentos teóricos e experimentais [P-1] mostram que essa condensação não é válida para semicon

dutores em regime de excitação.

Se for ressaltada a importância da interação efetiva existente entre os hipotéticos bosons ideais, espera-se, por analogia ao gás de hidrogênio, a formação de moléculas pela ligação de dois excitons (bi-excitons) [H-1].

Este tipo de "molécula" foi observado experimentalmente em vários semicondutores [H-1]. Nesta situação, a forma mais conveniente para análise ao sistema em regime $r_s \gg 1$ é por comparação à teoria do gás de hidrogênio.

O comportamento dos bi-excitons diferem daqueles das moléculas de hidrogênio em dois pontos:

a) A separação entre os excitons na molécula são consideravelmente maiores e por consequência as forças atrativas são mais fracas.

b) A massa total da molécula é pequena, e portanto as forças atrativas são insuficientes para causar uma transição do tipo gás-líquido.

Note-se que as forças atrativas entre excitons são importantes somente quando usadas em sistemas de baixas densidades.

É de se supor que com o aumento da concentração, há um ponto em que as forças atrativas são superadas pelas repulsivas e o gás de moléculas se desmancha. Determina-se a forma deste potencial repulsivo usando um desenvolvimento teórico análogo ao deBoer [J-1], que determina o potencial repulsivo entre duas moléculas de H_2 . Em conclusão, é mostrado que a descrição do estado molecular, em termos de um gás de moléculas interagindo fracamente, se quebra em torno de $(n a_0^3 \approx 1)$ $r_s \approx 1$. Isto significa que a energia necessária

para a formação das moléculas é superada pelas interações re pulsivas em torno de $r_s \approx 7$. A partir deste ponto a energia do estado fundamental começa a crescer, e se este crescimento for suficientemente rápido, são satisfeitas as condições que possibilitam uma transição de primeira ordem, passando o sistema para um estado metálico. Esta transição será semelhante a transição proposta para o H_2 de isolante para metal.

Certos tipos de matérias, em vez de haver formação desse estado metálico, tendem a passar por uma sequência de estados excitônicos. O problema foi investigado por Halpern-Rice [H-2]. Usando a aproximação Hartree-Fock, estes autores demonstraram que um estado excitônico será encontrado, em cristais com bandas de elétrons e buracos aproximadamente isotrópicas, e com a razão das massas dos elétrons e buracos praticamente igual a um.

Portanto se as bandas de energia foram fracamente anisotrópicas e não degeneradas, a fase excitônica pode ser estável, quando o potencial químico crescer e as correlações entre as moléculas de exciton tornarem-se sem importância.

Paralelamente o estado metálico, foi previsto por Keldysh [K-2], e descrito como um líquido de elétrons-buracos correspondente a condensação de excitons livres em gotas metálicas.

A evidência de tais gotas apareceu no trabalho de Asnin-Rogachev [A-1]. A partir daí, uma quantidade considerável de trabalhos experimentais e teóricos surgiram confirmando tal efeito [C-1];[B-1].

A fase líquida metálica se caracteriza por estar na região $1 \leq r_s \leq 5$. Nesta situação o termo que passa a do-

minar é o da energia cinética dos elétrons e buracos. Dada por: ($\kappa = 1$ e K_F é o raio de Fermi a concentração n)

$$E_R = \frac{3}{5} \left(\frac{\kappa_F^2}{2m_e} + \frac{\kappa_F^2}{2m_h} \right) = \frac{2.21}{r_s^2}$$

Considera-se ainda a contribuição dada pela energia de troca

$$E_{ex} = - \frac{3 e^2 k_F}{2\pi\epsilon} = - \frac{1.832}{r_s}$$

A partir daí a contribuição mais importante é dada pela parte da energia de correlação, que é introduzida como uma perturbação. O cálculo da energia de correlação é feita sob várias aproximações, e uma delas é dada por Brinkmann-Rice [B-1] que baseia-se nos cálculos feitos por Hubbard para o gás de elétrons. A energia total do sistema é então determinada e vem a ressaltar a importância da razão das massas efetivas dos elétrons e buracos. Mostrando que quando essa razão é igual a um, o estado metálico não é formado, isto é, o valor da energia mínima num gráfico $E_g \times r_s$, está substancialmente acima do valor de energia livre dos excitons. Mas verifica-se que a energia do estado fundamental decresce quando a razão m_e/m_h também decresce.

Por comparação aos cálculos da energia do estado fundamental do hidrogênio metálico, conclue-se que existe uma razão m_e/m_h ($\sim 0,1$) na qual uma transição de 1ª ordem ocorre, levando o sistema para um estado metálico. (Este método falha, quando tendemos para o limite de baixas concentrações, não é recuperada a energia dos elétrons livres).

As propriedades deste líquido de Fermi degenerado

tem sido extensivamente estudado em Ge e Si. Nestes materiais onde a fase metálica é favorecida por uma estrutura de banda especial, são observadas a formação de gotas. A cinemática da formação e o decaimento dessas gotas tem sido investigadas, em analogia a formação de gotas de fluidos normais.

Vimos então que em regime de densidade intermediária $na_0^3 \sim 1$, o sistema se torna instável, os bi-excitons se quebram e dependendo da estrutura do material, um estado excitônico ou uma fase metálica é formada.

Vamos analisar agora o sistema em altas densidades, isto é, quando temos a condição $(na_0^3 \gg 1) r_s \ll 1$.

GergeI [G-1] analisou as propriedades óticas de um semicondutor neste regime, encontrando um estado ligado de elétrons e buracos, quando as respectivas bandas dessas partículas forem suficientemente isotrópicas. De fato isto ocorre em semicondutores do tipo III-V (GaAs, GaSb, InP, InAs, InSb). Note que esses semicondutores possuem gap diretos, que fortalecem a interação Coulombiana entre os elétrons e buracos. Os cálculos mostram o aparecimento de um gap (Δ) no espectro dos elétrons e buracos, igual em valor, ao da energia de ligação do par.

Pode-se então dizer que se a densidade de excitons é baixa, todos os elétrons e buracos estão acoplados entre si. Em altas densidades, somente aqueles que estão numa estreita faixa da ordem de $\Delta(\text{gap})$ em torno da superfície de Fermi é que formarão um par ligado, enquanto que a fração restante permanece não ligada. (plasma)

Para densidades mais altas, teremos que aumentar ainda mais a intensidade da luz excitadora. Nestas condições, esta radiação por ser muito intensa, terá papel preponderan

te nos processos internos. Nos próximos capítulos faremos uma análise desse processo em termos de quasi-partículas, mostrando como a radiação luminosa leva à formação de uma nova fase (fase saturada), de estados ligados de elétrons e buracos.

Podemos antecipar que esta nova fase é descrita em regime de altas densidades do par exh, e está situada numa região Δ da energia de Fermi (análogo aos supercondutores) onde todo o plasma de exh se transforma em pares ligados (tipo saturado).

1.2 Fase Saturada em Semicondutores

O interesse em se estudar o comportamento de elétrons na presença de um campo eletromagnético intenso, iniciou-se com o desenvolvimento de geradores quânticos excitados ópticamente [K-3].

Como vimos no capítulo anterior, a presença de uma luz intensa acarreta num semicondutor de especial tipo de estrutura, a formação de um estado ligado de elétron-buraco. Neste processo pares de elétrons-buracos são produzidos.

Se o campo for suficientemente forte para que a probabilidade de excitação dos elétrons seja maior que a probabilidade de recombinação, a condição de auto excitação será satisfeita e o sistema chega a um estado estacionário. Sendo o campo intenso, é mostrado [K-6] que este estado estacionário é um estado de saturação, pois o coeficiente de absorção é nulo.

A análise deste estado saturado é muito complexa, pois é necessário considerar transições entre estados de espectro contínuo (bc e bv) e levar em conta diversos processos de relaxação, como tempo de relaxação da interação elétron x elétron (10^{-12} seg), da interação elétron x fonon (10^{-9} seg) e processos de recombinação (10^{-9} seg).

Para contornar estes problemas usa-se a seguinte aproximação [G-2], [E-1]:

É suposto que o sistema tenha dois níveis [L-1] pois, de fato, o elemento de matriz da transição conecta somente dois estados (bv e bc) ainda que o semicondutor tenha bandas isotrópicas, e gap direto.

A seguir, coloca-se este semicondutor num campo

eletromagnético intenso dado por

$$\vec{A}(t) = \vec{A}_0 \cos(\Omega T - \vec{q} \cdot \vec{r})$$

$$\vec{A} \cdot \vec{q} = 0 \quad (1.2-1)$$

É imposto ainda que a frequência $\underline{\Omega}$ da onda, satisfaça a condição

$$0 < \hbar\Omega - E_g \ll E_g \quad (1.2-2)$$

onde E_g é a energia do gap do semiconductor.

Esta condição confina o sistema a uma transição ressonante, e facilita a equalização da população nas bandas de condução e valência, tal que a diferença dos quasi-níveis de Fermi dos elétrons e buracos será igualada a da frequência da luz

$$\mu_e - \mu_h = \hbar\Omega \quad (1.2-3)$$

O sistema pode então ser representado, em primeira aproximação pela hamiltoniana

$$H_0(t) = \sum_p \{E(p)(c_p^\dagger c_p + h_{-p}^\dagger h_{-p}) + \lambda(p)(c_p^\dagger h_{-p}^\dagger e^{-i\Omega t} + h_{-p} c_p e^{i\Omega t})\} \quad (1.2-4)$$

sendo

$$E(p) = \frac{E_g}{2} + \frac{p^2}{2m} \quad (1.2-5)$$

e consideraremos as massas efetivas iguais; $C_p^+(h_{-p}^+)$ operador de criação de um elétron (buraco) na banda de condução (valência).

A segunda parte da hamiltoniana (1.2-4) representa a interação ressonante com o campo eletromagnético onde

$$\lambda(p) = \frac{1}{2} e \vec{A}_0 \vec{v}_{cp}(p)$$

$$\vec{v}_{cp}(p) = \frac{1}{m} \int \mu_{cp}^* \vec{p} \mu_{vp} d^3r \quad (1.2-6)$$

e $\mu_{ep}|r\rangle$ são funções de onda de Bloch.

Para eliminarmos a dependência temporal do hamiltoniano (1.2-4), recorreremos a seguinte transformação

$$H_0 = U^\dagger(t) H_0(t) U(t) - U^\dagger(t) \frac{\partial}{\partial t} U(t) \quad (1.2-7)$$

onde operador $U(t)$ é definido por:

$$U(t) = \exp\left\{-\frac{\omega t}{2} \sum_p C_p^+ C_p + h_{-p}^+ h_{-p}\right\} \quad (1.2-8)$$

Sob esta transformação $H_0(t)$ toma a forma

$$H_0 = \sum_p [\xi(p) (C_p^+ C_p + h_{-p}^+ h_{-p}) + \lambda(p) (C_p^+ h_{-p}^+ + h_{-p} C_p)] \quad (1.2-9)$$

com

$$\xi(p) = \frac{p^2 - p_0^2}{2m}$$

$$\frac{p_0^2}{2m} = \frac{\Omega - E_g}{2}$$

Por ser a interação externa muito forte, perdemos a possibilidade de utilizar a teoria de perturbação nestes cálculos. Então recorreremos a uma transformação canônica conveniente para obter o espectro de energia.

Essa transformação é dada pela combinação linear dos operadores dos elétrons e buracos, isto é,

$$\begin{aligned} \beta_{-p} &= v_{-p} c_p^+ + u_p h_{-p} \\ \alpha_p &= u_p c_p - v_{-p} h_{-p}^+ \end{aligned} \quad (1.2-10)$$

mais as condições para u_p e v_p

$$u_p^2 + v_p^2 = 1$$

Aplicando (1.2-10) no hamiltoniano (1.2-9) e impondo a condição de diagonalização dada por

$$2 \xi(p) u_p v_{-p} + \lambda(p) (u_p^2 - v_{-p}^2) = 0 \quad (1.2-11)$$

obtemos a nova hamiltoniana na forma diagonal

$$H_0 = \sum_p \epsilon(p) (\alpha_p^+ \alpha_p + \beta_{-p}^+ \beta_{-p}) \quad (1.2-12)$$

Sob as condições (1.2-11) encontramos que

$$u_p^2 = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\xi(p)}{\varepsilon(p)} \right) \quad ; \quad v_p^2 = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\xi(p)}{\varepsilon(p)} \right)$$

(1.2-13)

$$u_p v_{-p} = \frac{-\lambda(p)}{2\varepsilon(p)}$$

$$\varepsilon(p) = [\xi^2(p) + \lambda^2(p)]^{1/2} \quad (1.2-14)$$

A transformação (1.2-12) nos leva a um novo sistema de quasi-partículas cujos operadores de criação e aniquilação satisfazem as relações de anticomutação $\{\alpha_p^+, \alpha_p\} = \{\beta_{-p}^+, \beta_{-p}\} = 1$, $\{\alpha_p, \beta_{-p}\} = \{\alpha_p^+, \beta_{-p}^+\} = 0$, e que possui agora um novo espectro de energia $\varepsilon(p)$.

A característica principal do novo espectro é o aparecimento de um gap perto do quasi-nível de Fermi, pois a fórmula (1.2-14) mostra claramente que o valor mínimo da energia é alcançado quando $|P| \equiv P_0$, isto é, $\xi(p) = 0$ (fig. 1) então

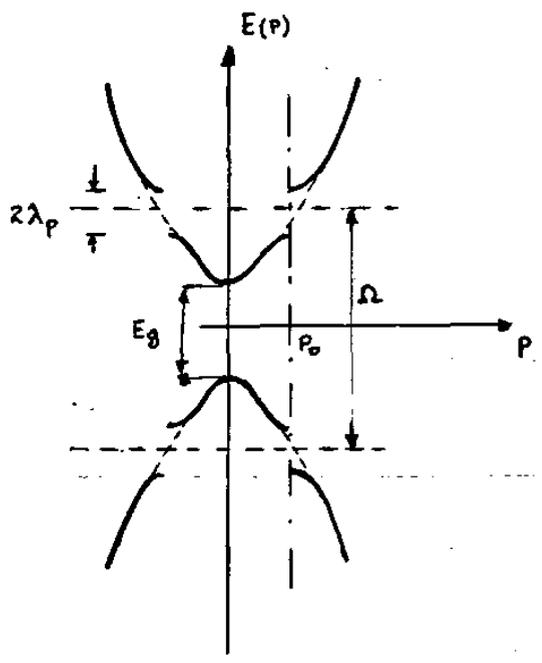
$$\varepsilon_{\text{mínimo}}^{(p)} = |\lambda(p)|$$

A definição de $\lambda(p)$ (1.2-6) revela que o valor do gap depende do ângulo entre a direção do momento do elétron com a direção do campo elétrico da onda.

Deve-se esperar então, que em determinadas direções o gap não aparecerá.

O gap no espectro, induziu a se estudar as propriedades eletromagnéticas deste estado, por meio dos métodos usados na Teoria da Supercondutividade. Em capítulos poste-

riores mostraremos que o estado fundamental do estado saturado em semicondutores é formalmente similar ao dos supercondutores, pois existe uma analogia entre o par de Cooper e o par elétron-buraco ligado via radiação. A função de onda deste sistema também será construída por superposições de estados de elétrons e buracos



da mesma forma que é feita em supercondutores.

1.3 Efeito Coulombiano no Espectro da Fase Saturada

As propriedades dos sólidos, de um modo geral são afetadas substancialmente pela interação coulombiana [A-2], [K-5].

Nos semicondutores saturados, a atração coulombiana aparece formando uma ligação forte entre os elétrons e e buracos, situados nos seus respectivos níveis de Fermi [E-2].

Baseados nesses argumentos, introduzimos no sistema a contribuição das interações (e x e), (h x h) e (h x e). [k-5]

A hamiltoniana total será então acrescentado dos seguintes termos:

$$H(t) = H_o(t) + H_{exh}$$

e

$$H_o(t) = \sum_p \{ (E_p^e - \mu_e) c_p^+ c_p + (E_p^h - \mu_h) h_{-p}^+ h_{-p} + \lambda(p) (c_p^+ h_{-p}^+ e^{i\Omega t} + h_{-p} c_p e^{-i\Omega t}) \} \quad (1.3-1)$$

$$H_{exp} = \frac{1}{2} \sum_{pp'q} V(q) (c_p^+ c_{p'}^+ c_{p'+q} c_{p-q} + h_p^+ h_{p'}^+ h_{p'+q} h_{p-q} - 2 c_p^+ h_{p'}^+ h_{p'+q} c_{p-q}) \quad (1.3-2)$$

onde c_p e h_p são os operadores de Fermi para aniquilação de elétrons e buracos, E_p^e e E_p^h são as energias e μ_e e μ_h são os potenciais químicos.

O potencial de interação é dado por

$$V(q) = \frac{4\pi e^2 \hbar^2}{\epsilon q^2}, \quad \epsilon - \text{constante dielétrica}$$

Novamente temos que eliminar a parte temporal da hamiltoniana. Desta vez usaremos outro tipo de formalismo que o introduzido no capítulo (1.3).

Aplicamos na hamiltoniana (1.3-2) a usual transformação de Bogoliubov, dado por:

$$\begin{aligned} \alpha_k &= \bar{u}_k c_k + \bar{v}_k h_{-k}^+ \\ \beta_{-k}^+ &= -\bar{v}_k^* c_k + \bar{u}_k^* h_{-k} \end{aligned} \quad (1.3-3)$$

onde os coeficientes \bar{u}_k e \bar{v}_k sejam dados por

$$\begin{aligned} \bar{u}_k &= e^{i\left(\frac{\Psi+\psi}{2}\right)} \cos \frac{\theta k}{2} = e^{i\left(\frac{\Psi+\psi}{2}\right)} u_k \\ \bar{v}_k &= e^{-i\left(\frac{\Psi+\psi}{2}\right)} \sin \frac{\theta k}{2} = e^{-i\left(\frac{\Psi+\psi}{2}\right)} v_k \end{aligned} \quad (1.3-4)$$

valendo a condição $|\bar{u}_k|^2 + |\bar{v}_k|^2 = 1$. (1.3-5)

Resultará que a hamiltoniana total transformada terá a forma

$$\begin{aligned} \bar{H}(t) &= \sum_p \{ (E_p^e - \mu_e) (|\bar{u}_p|^2 \alpha_p \alpha_p^+ - |\bar{v}_p|^2 \beta_{-p} \beta_{-p}^+ - \bar{u}_p^* \bar{v}_p^* \beta_{-p} \alpha_p - \\ &\quad - \bar{u}_p \bar{v}_p \alpha_p^+ \beta_{-p}) + (E_p^h - \mu_h) (|\bar{u}_p|^2 \beta_{-p}^+ \beta_{-p} - |\bar{v}_p|^2 \alpha_p \alpha_p^+ \\ &\quad - \bar{v}_p^* \bar{u}_p^* \beta_{-p} \alpha_p - \bar{u}_p \bar{v}_p \alpha_p^+ \beta_{-p}^+) \} + \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & + \lambda(p) \left(e^{-i\Omega t} (\bar{u}_p \bar{v}_p^* \alpha_p^+ \alpha_p - \bar{v}_p^* \bar{u}_p \beta_{-p} \beta_{-p}^+ - \right. \\
 & \left. - \bar{v}_p^* \bar{v}_p \beta_{-p} \alpha_p + \bar{u}_p \bar{u}_p \alpha_p^+ \beta_{-p}^+) + (\text{C.C.}) + \bar{H}_{\text{exh}} \right) \quad (1.3-6)
 \end{aligned}$$

A parte coulombiana \bar{H}_{exh} na nova representação não é modificada por esta transformação.

Se impormos agora, que nas fórmulas (1.3-4) ϕ seja igual a zero e $\psi = \Omega t$, e substituirmos na hamiltoniana transformada, vamos encontrar que a dependência temporal é eliminada, pois ela só aparece na parte da interação com a luz. Os produtos restantes dois a dois de \bar{u}_p e \bar{v}_p vão eliminando as partes de $e^{i\psi}$, como por exemplo

$$\bar{u}_p \bar{u}_p = |\bar{u}_p|^2 = e^{i\psi} e^{-i\psi} u_p u_p = u_p^2$$

$$\bar{v}_p^* \bar{u}_p^* = e^{i\psi} v_p^* e^{-i\psi} u_p^* = v_p^* u_p^* = v_p u_p$$

O mesmo acontece quando esta transformação é aplicada ao termo coulombiano, \bar{H}_{exh} , só que neste caso vão aparecer produtos de quatro termos de \bar{u}_p e \bar{v}_p , de tal modo que o produtos das $e^{i\psi}$ sempre desaparecerá.

O hamiltoniano \bar{H}_{exh} pode ser escrito então por:

$$\bar{H}_{\text{exh}} = W + H_2 + H_4 \quad (1.3-7)$$

isto é, uma parte escalar

$$W = - \sum_{pq} V(q) (u_p v_p u_{p-q} v_{p-q} - v_p^2 v_{p-q}^2) \quad (1.3-8)$$

os termos bilineares

$$H_2 = \left[(u_p^2 - v_p^2) \left(- \sum_q V(q) v_{p-q}^2 \right) - 2u_p v_p \sum_q V(q) u_{p-q} v_{p-q} \right] \cdot (\alpha_p^+ \alpha_p + \beta_{-p}^+ \beta_p) \quad (1.3-9)$$

e os termos de quatro produtos

$$H_4 = \sum_{pp'q} V(q) \left\{ \frac{1}{2} \gamma_{p,p-q} \gamma_{p',p'+q} (\alpha_p^+ \alpha_{p'}^+ \alpha_{p'+q} \alpha_{p-q} + \beta_{-p}^+ \beta_{-p'}^+ \beta_{-p'-q} \beta_{p-q} - 2 \alpha_p^+ \beta_{-p'}^+ \beta_{-p'-q} \alpha_{p-q}) + \gamma_{p,p-q} \rho_{p',p'+q} (\alpha_p^+ \alpha_{p'}^+ \beta_{-p'}^+ \alpha_{p-q} - \alpha_{p'}^+ \beta_{-p-q}^+ \beta_p \beta_{p-q} + \alpha_{p-q}^+ \beta_{-p'-q} \alpha_{p'} \alpha_p - \beta_{-p-q}^+ \beta_p^+ \beta_{-p-q} \alpha_{p'}^+) + \frac{1}{2} \rho_{p,p-q} \rho_{p',p'+q} (\alpha_p^+ \alpha_{p'}^+ \beta_{-p-q}^+ \beta_{-p+q}^+ + \alpha_{p'}^+ \beta_{-p+q}^+ \beta_{p'+q} \alpha_{-p'}^+ + \beta_{-p+k} \beta_{-p-q} \alpha_{p'} \alpha_p + \alpha_{-p'}^+ \beta_{p'+q}^+ \beta_{-p+q} \alpha_p) \right\} \quad (1.3-10)$$

onde

$$\gamma_{p,p-q} = u_p u_{p-q} + v_p v_{p-q}$$

$$\rho_{p,p-q} = u_p v_{p-q} - v_p u_{p-q}$$

Podemos para o nosso caso, desprezar os termos de ordem superior, pois estamos interessados em obter o espectro do sistema em primeira aproximação.

Rearranjando-se os termos da hamiltoniana total

transformada, podemos escrevê-la da seguinte forma:

$$H = \psi_0 + H_d + H_{nd} \quad (1.3-11)$$

sendo

$$\begin{aligned} \psi_0 = & \sum_p \left[(\epsilon_p^e - \mu_e) + (\epsilon_p^h - \mu_h) - 2 \sum_q V(q) v_{p-q}^2 \right] v_p^2 - \\ & - \sum_p \left[\lambda(p) - \sum_q V(q) u_{p-q} v_{p-q} \right] 2 u_p v_p \end{aligned} \quad (1.3-12)$$

$$\begin{aligned} H_d = & \sum_p \left\{ (\epsilon_p^e - \mu_e) - \sum_q V(q) v_{p-q}^2 \right\} u_p^2 - \\ & - \left[(\epsilon_p^e - \mu_e) - \sum_q V(q) v_{p-q}^2 \right] v_p^2 + \\ & + 2 u_p v_p \left[\lambda_p - \sum_q V(q) u_{p-q} v_{p-q} \right] \alpha_p^+ \alpha_p - \\ & - \sum_p \left\{ (\epsilon_p^h - \mu_h) - \sum_q V(q) v_{p-q}^2 \right\} u_p^2 - \\ & - \left[(\epsilon_p^e - \mu_e) - \sum_q V(q) v_{p-q}^2 \right] v_p^2 + \\ & + 2 u_p v_p \left[\lambda(p) - \sum_q V(q) u_{p-q} v_{p-q} \right] \beta_{-p}^+ \beta_p \end{aligned} \quad (1.3-13)$$

$$\begin{aligned} H_{nd} = & \sum_p \left\{ (u_p^2 - v_p^2) \left[\lambda(p) - \sum_q V(q) u_{p-q} v_{p-q} \right] + \right. \\ & \left. + \left[(\epsilon_p^e - \mu_e) + (\epsilon_p^h - \mu_h) - 2 \sum_q V(q) v_{p-q}^2 \right] u_p v_p \right\} \\ & (\alpha_p^+ \beta_{-p}^+ + \beta_{-p} \alpha_p) \end{aligned} \quad (1.3-14)$$

Desde que o ângulo θ é ainda arbitrário, escolhe-mos ele de tal forma a diagonalizar (1.3-11), i.e. anular H_{nd} assim

$$\begin{cases} (u_p^2 - v_p^2) \Delta_p + 2 \bar{\epsilon}_p u_p v_p = 0 \\ u_p^2 + v_p^2 = 1 \end{cases} \quad (1.3-15)$$

notado por

$$\begin{aligned} \Delta_p &= (\lambda(p) - \sum_q V(p-q) u_{p-q} v_{p-q}) \\ \bar{\epsilon}_p &= \left\{ \left(\frac{E_p^e - \mu_e}{2} \right) + \frac{(E_p^h - \mu_h)}{2} - \sum_q V(q) v_{p-q}^2 \right\} \end{aligned}$$

Por relações trigonométricas podemos identificar que

$$\begin{aligned} u_p^2 - v_p^2 &= \frac{\bar{\epsilon}_p}{(\bar{\epsilon}_p^2 + \Delta_p^2)^{1/2}} ; & 2u_p v_p &= \frac{\Delta_p}{(\bar{\epsilon}_p^2 + \Delta_p^2)^{1/2}} \\ u_p^2 &= \frac{1}{2} \left[1 + \frac{\bar{\epsilon}_p}{(\bar{\epsilon}_p^2 + \Delta_p^2)^{1/2}} \right] \\ v_p^2 &= \frac{1}{2} \left[1 - \frac{\bar{\epsilon}_p}{(\bar{\epsilon}_p^2 + \Delta_p^2)^{1/2}} \right] \end{aligned} \quad (1.3-15)$$

Podemos agora obter facilmente a forma do espectro de energia do sistema. Da fórmula (1.3-15) que impõe a diagonalização tiramos que

$$w_p = \bar{\epsilon}_p^e \mu_p^2 - \bar{\epsilon}_p^h v_p^2 + 2 u_p v_p \Delta_p$$

onde recorreremos a igualdade

$$\bar{E}_p^e + \bar{E}_p^h = 2 \bar{\epsilon}_p$$

$$\bar{E}_p^e - \bar{E}_p^h = (E_p^e - \mu_e) - (E_p^h - \mu_h)$$

Agora tomando as devidas fórmulas para u_p e v_p (1.3-15) obtenho o espectro na forma mais usual

$$w_p = \left\{ \frac{(E_p^e - \mu_e)}{2} - \frac{(E_p^h - \mu_h)}{2} \pm \sqrt{\epsilon_p^2 + \Delta_p^2} \right\}$$

Verificamos então que o novo espectro das quasi-partículas é formalmente igual ao do sistema sem interação coulombiana, exceto pela renormalização da energia de ligação do par elétron-buraco.

O novo gap formado, é definido por

$$\Delta_p = (\lambda(p) - \sum_q V(p-q) u_{p-q} v_{p-q})$$

Tem agora um termo de correção devido a interação coulombiana. Podemos, como consequência, dizer que essa interação desestimula a formação da fase saturada.

Nota-se também que quando $\lambda = 0$, isto é, o campo eletromagnético é desligado, o espectro de energia (1.3-16) cai para o espectro dos semicondutores normais, isto é, se $\lambda = 0$ as fórmulas (1.3-15) ficam

$$u_p^2 = 1$$

$$v_p^2 = 0$$

$$w_p = \frac{\tilde{E}_p^e}{2} - \frac{\tilde{E}_p^h}{2} \pm \left(\frac{\tilde{E}_p^e}{2} + \frac{\tilde{E}_p^h}{2} \right)$$

$$w_p^e = \tilde{E}_p^e \quad \text{para os el\u00e9trons}$$

$$w_p^h = -\tilde{E}_p^h \quad \text{para os buracos.}$$

1.4 Gap e o Estado Fundamental

Nos capítulos anteriores é citada a formação de uma fase saturada de quasi-partículas, devida a presença de uma radiação eletromagnética de alta intensidade.

Falta-nos então, montar a base do formalismo usado e estudar devidamente o estado saturado em termos de quasi-partículas.

Começaremos com a análise das consequências de existir um gap no espectro da fase saturada.

Sabemos que no caso de excitações de Fermi, a existência de um gap, sempre está relacionada a alguma energia de ligação, como nos isolantes, por exemplo: O gap de energia aparece devido a diferença entre as energias de ligação de dois estados atômicos, que são fortemente modificadas por um rearranjo periódico dos átomos na rede.

Este mecanismo é absolutamente geral e é aplicado igualmente para qualquer sistema de muitos fermions, com qualquer tipo de interação atrativa efetiva. [D-1]

Numa maneira similar, podemos esperar que o gap da fase saturada é devida a algum tipo de energia de ligação entre as partículas. Esta energia de ligação, requer uma interação atrativa efetiva entre as partículas. Se esta é essencialmente uma interação de emparelhamento, levará a formação do par ligado elétron-buraco. Em consequência, podemos então introduzir a suposição de que os elétrons ocupam o estado K e os buracos o estado $-K$ simultaneamente.

Supomos que desta forma os estados emparelhados são K e $-K$ e dizemos que o estado fundamental tentativa será uma

combinação desses estados, com duas possibilidades, ou estão ocupados ou desocupados.

Os operadores que criam ou destroem esses pares podem ser definidos por

$$b_k^+ = c_k^+ h_{-k}^+$$

$$b_k = h_{-k} c_k \tag{1.4-1}$$

Assumimos, então, que a amplitude de probabilidade com que aparece uma configuração específica do par, é expressa por um produto de probabilidades no qual cada estado do par individual está ocupado.

A função de onda com esta propriedade é dado por

$$|\Psi\rangle = \prod_k |u_k + v_k c_k^+ h_{-k}^+ |0\rangle \tag{1.4-2}$$

com a condição de normalização imposta por $u_k^2 + v_k^2 = 1$.

O termo $|0\rangle$ representa o estado de vácuo do sistema e v_k^2 e u_k^2 são as probabilidades de se ter respectivamente o par K ocupado ou desocupado.

Evidentemente $|\Psi\rangle$ descreve um estado no qual o número total de pares não é bem determinado, desde que ele mistura estados com qualquer número de partículas.

Contudo se u_k e v_k são apropriadamente escolhidos, a distribuição de probabilidades será altamente centrada na vizinhança do número real de partículas, e as flutuações que são pequenas, não causam dificuldades.

A forma da função de onda em termos de quasi-partí

culas pode ser escrito equivalentemente a função (1.4-2) usando a transformação já conhecida

$$\alpha_k = u_k c_k - v_k h_{-k}$$

$$\beta_k = v_k^* c_k + u_k^* h_k \quad (1.4-3)$$

Esta transformação significa [B-3] que dos operadores c_k, h_{-k} nós podemos formar novos operadores α_k, β_k que operam no estado fundamental como se fosse no vácuo.

Do cálculo direto mostra-se, que, para todo K, vale

$$\alpha_k |G\rangle = \beta_k |G\rangle = 0$$

sendo $|G\rangle$ proporcional a $\prod_k (u_k + v_k c_k^+ h_k^+) |0\rangle$ portanto os operadores α_k, β_k definem o estado fundamental completamente.

Podemos agora minimizar a energia total do sistema em relação a u_k e v_k e reobter as condições já achadas

$$u_k^2 = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\bar{\epsilon}_k}{\sqrt{\bar{\epsilon}_k^2 + \Delta_k^2}} \right)$$

$$v_k^2 = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\bar{\epsilon}_k}{\sqrt{\bar{\epsilon}_k^2 + \Delta_k^2}} \right) \quad (1.4-4)$$

sendo

$$\bar{\epsilon}_k = \left\{ \frac{(\epsilon_p^e - \mu_e)}{2} + \frac{(\epsilon_p^h - \mu_h)}{2} - \sum_q V(q) v_{k-q}^2 \right\}$$

$$\bar{\epsilon}_k = \sqrt{\bar{\epsilon}_k^2 + \Delta_k^2} \quad (1.4-5)$$

$$\Delta_k = (\lambda(k) - \sum_q V(k-q) u_{k-q} v_{k-q}) \quad (1.4-6)$$

Note então que o parâmetro Δ_k é o gap definido no capítulo anterior. O nosso próximo passo é estimar o valor desse parâmetro quando estamos nas condições da fase saturada.

Quando substituímos os valores de u_k e v_k dado por (1.4-4) em (1.4-6) obtemos a seguinte equação inhomogênea:

$$\Delta_k = \lambda(k) - \sum_q V(k-q) \frac{\Delta_{k-q}}{2\sqrt{\epsilon_{k-q}^2 + \Delta_{k-q}^2}} \quad (1.4-7)$$

Para obtermos a solução dessa equação, precisamos introduzir certas aproximações, estudando qual intervalo de energia, que é predominante a formação dessas quasi-partículas.

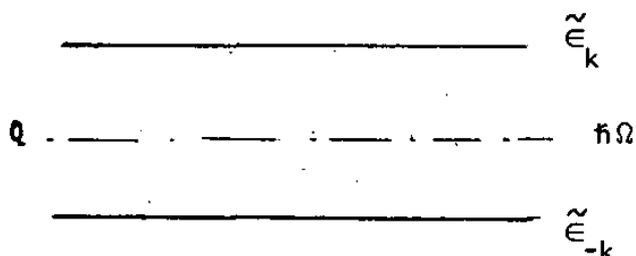
Portanto, uma análise é feita no [Ap. A] e mostramos que a fase saturada se situa num entorno da energia de fermi. Pelo método da transformação canônica eliminamos, os termos de 1a. ordem, e obtemos a região da saturação, isto é, quando

$$\left| \epsilon_c^p + \epsilon_h^p - V \sum_k (v_{p-k}^2 + u_{p-k}^2) \right| < \hbar \Omega \quad (1.4-8)$$

v_k^2 é a probabilidade do par estar ocupado no esta-

$V \sum_k (v_k^2 + u_k^2)$ é constante

$$\hbar\Omega > \left| \left(\frac{k^2}{2m_e} - \mu_e \right) + \left(\frac{k^2}{2m_h} - \mu_h \right) \right| \equiv \tilde{\epsilon}_k$$



Note que levamos em conta que a interação $V(k-q)$ permanece constante igual a V , neste intervalo, e igual a zero fora.

Em consequência segue de (1.4-7) que Δ_{k-q} é constante neste intervalo.

Em resumo

$$\left. \begin{aligned} V(k-q) &= V \\ \Delta_{k-q} &= \Delta \end{aligned} \right\} \text{ se } |\epsilon_k| < \hbar\Omega$$

$$\left. \begin{aligned} &= 0 \end{aligned} \right\} \text{ se } |\epsilon_k| > \hbar\Omega \quad (1.4-9)$$

Agora podemos por a equação (1.4-7) na forma integral, usando a transformação

$$\frac{1}{2\pi^3} \sum dk^3 \rightarrow \int \rho(\epsilon) d\epsilon$$

válida no intervalo (1.4-9).

Ficamos com:

$$\Delta = \lambda - V\Delta \int_0^{\hbar} \frac{\rho(\bar{\epsilon}) d\bar{\epsilon}}{\sqrt{\bar{\epsilon}^2 + \Delta^2}} \quad (1.4-10)$$

Se $\rho(\epsilon)$ é constante nesse intervalo, a integral (1.4-10) é trivial, resultando

$$\Delta = \lambda - \rho_F V\Delta \operatorname{arc} \operatorname{senh} \frac{\hbar\Omega}{\Delta}$$

ou

$$\Delta = \lambda - V\Delta\rho_F \ln \frac{\hbar\Omega + \sqrt{(\hbar\Omega)^2 + \Delta^2}}{\Delta}$$

sendo $\rho_F = \frac{m k_F}{2\pi^2}$ - densidade de estados na superfície de fermi

tiramos então que

$$\Delta = \frac{\lambda}{1 + V\rho_F \ln \frac{\hbar\Omega + \sqrt{(\hbar\Omega)^2 + \Delta^2}}{\Delta}}$$

Supondo a aproximação que $\Delta \ll \hbar\omega$

$$\Delta = \frac{\lambda}{(1 + V\rho_F \ln \frac{2\hbar\Omega}{\Delta})} \quad (1.4-11)$$

No caso que $\lambda = 0$, a equação (1.4-10) difere de sinal da equação do gap para supercondutores, portanto nenhuma solução da equação homogênea existe. Isto significa que os elétrons e buracos não podem formar pares ligados devido são

a interação coulombiana.

Considerando que a densidade de estados $\rho(\epsilon)$ fosse dado por

$$\rho(\tilde{\epsilon}) = k \sqrt{\tilde{\epsilon}} \quad ,$$

integrando (1.4-10) ficamos com

$$\Delta = \lambda - V\Delta k \sqrt{h\Omega} \left(8 - \ln \frac{2hw}{\Delta} \right)$$

quando $\frac{\epsilon}{\Delta} \gg 1$

ou

$$\Delta = \frac{\lambda}{1 + V k \sqrt{h\Omega} \left(8 - \ln \frac{2h\Omega}{\Delta} \right)} \quad (1.4-12)$$

que não difere muito da equação (1.4-11).

Sabemos que v_k^2 é a probabilidade que o par está ocupado e u_k^2 é a probabilidade de que ele não está ocupado e que o nível de Fermi não é mudado pela interação.

Da equação (1.4-4) pode-se tirar que $v^2(\epsilon) = u^2(-\epsilon)$, e mostra que a probabilidade de um par estar ocupado acima da superfície de Fermi é igual a probabilidade dele estar de ocupado abaixo da superfície de Fermi.

Verificamos que quando na equação (1.3-11) eliminamos os operadores de excitação, obtemos uma parte escalar. Ela corresponde a energia de um estado estável, dada por

$$\psi_0 = \sum_p \left[(\epsilon_p^h - \mu_h) - (\epsilon_p^e - \mu_e) - 2 \sum_q V(q) v_{p-q}^2 \right] v_p^2 -$$

$$- (\lambda_p - \sum_q V(q) u_{p-q} v_{p-q})^2 u_p v_p \quad (1.4-13)$$

quando substituídos os devidos valores de u_p e v_p , temos

$$\psi_0 = \sum_p \left\{ \bar{\epsilon}_p \left(1 - \frac{\bar{\epsilon}_p}{\sqrt{\bar{\epsilon}_p^2 + \Delta_p^2}} \right) - \frac{\Delta_p^2}{\sqrt{\bar{\epsilon}_p^2 + \Delta_p^2}} \right\} \quad (1.4-14)$$

Para relacionar esta energia com a energia $\bar{\epsilon}$ introduzimos na equação (1.4-14) o termo

$$\sum_p \bar{\epsilon}_p \left(1 - \frac{\bar{\epsilon}_p}{|\bar{\epsilon}_p|} \right) \quad (1.4-15)$$

Passamos para a forma integral e levamos em conta a mesma aproximação dada em (1.4-9) e obtemos:

$$\psi_0 = \int_0^{\hbar\Omega} \rho(\epsilon) \left\{ \epsilon \left[1 - \frac{\epsilon}{E} \right] - \frac{\Delta^2}{E} \right\} d\epsilon$$

sendo,

$$E = (\epsilon^2 + \Delta^2)^{1/2}$$

Se considerarmos que $\rho(\epsilon)$ seja aproximado para $\rho_F = \text{cte}$ podemos escrever:

$$\psi_0 = \rho_F \left\{ \frac{\hbar\Omega}{2} + \frac{\Delta^2}{2} \sinh^{-1} \left(\frac{\hbar\Omega}{\Delta} \right) - \frac{\hbar\Omega}{2} \sqrt{\hbar\Omega + \Delta^2} - \frac{\Delta^2}{2} \sinh^{-1} \left(\frac{\hbar\Omega}{\Delta} \right) \right\}$$

$$= -\rho_F (\hbar\Omega)^2 \left[\sqrt{1 - \left(\frac{\Delta}{\hbar\Omega}\right)^2} - 1 \right]$$

Se de novo uso que $\Delta \ll \Omega$ obtemos que

$$\psi_0 = -\frac{1}{2} \rho_F \lambda^2 \tag{1.4-16}$$

Com esta fórmula concluimos que o estado saturado com devidas aproximações terá sua energia do estado fundamental abaixo da energia do estado não perturbado do semicondutor.

1.5 Potencial Termodinâmico

Neste parágrafo nós obtemos o potencial termodinâmico básico de nova fase para o modelo de duas bandas dado pelo Hamiltoniano (1.3-11).

Adotamos para a aproximação do nosso problema a versão da temperatura finita do princípio variacional de Gibbs-Bogoliubov. [Z-1]

Em temperaturas finitas podemos descrever o par e x h por uma média térmica dada por

$$\langle \alpha_{p+q}^+ \beta_{-p}^+ \rangle \neq 0 \tag{1.5-1}$$

onde Q é o momento do par.

Por analogia à teoria da supercondutividade, impomos que somente emparelhamentos coerentes; (Q = cte) produzam efeitos macroscópicos. Portanto nós escolhemos um momento comum Q para todos os pares de e x h ligados, em particular Q = 0, pois é o de energia menor.

Escrevemos o potencial termodinâmico como um funcional da matriz densidade ρ [D-2].

$$\Phi = T_r \left[\rho(H - \mu N) + \frac{1}{\beta} \rho \ln \rho \right] \tag{1.5-2}$$

onde T_r representa o traço da matriz.

Minimizando Φ em relação a matriz ρ , isto é, usando a condição

$$\frac{\partial \phi}{\partial \rho} = 0 \quad \text{ou} \quad \delta \phi = 0 \quad (1.5-3)$$

$$\text{Tr } \rho = 1$$

obtemos a matriz densidade Gran-canônica da energia do estado fundamental dado por

$$\rho_0 = \frac{\exp [-\beta(H - \mu N)]}{\text{Tr } \exp [-\beta(H - \mu N)]} \quad (1.5-4)$$

Como o funcional (1.5-2) satisfaz a desigualdade

$$\phi(\rho) > \phi(\rho_0) \quad , \quad \rho \neq \rho_0 \quad ,$$

onde ρ é definida positiva com traço unitário, escolhemos um $\bar{\rho}$ dado por

$$\bar{\rho} = \frac{\exp (-\beta \bar{H})}{\text{Tr } \exp (-\beta \bar{H})} \quad (1.5-5)$$

onde \bar{H} é um hamiltoniano tentativa. A seguir obtemos por meio da fórmula de Gibbs-Bogoliubov

$$\phi = - \frac{1}{\beta} \ln \text{tr} [\exp(-\beta \bar{H})] + \langle H - \bar{H} \rangle \quad (1.5-6)$$

a limitação superior do potencial termodinâmico, quando introduzimos $\bar{\rho}$ na fórmula (1.5-2).

Vamos usar como o hamiltoniano H aquele dado no capítulo (1.3), isto é, o hamiltoniano total do sistema. Podemos reescrevê-lo da seguinte forma

$$H = \psi_0 + \sum_p \{M(p)\alpha_p^+ \alpha_p + G(p)\beta_{-p}^+ \beta_p + L(p)(\alpha_p^+ \beta_{-p}^+ + \beta_{-p} \alpha_p)\} \tag{1.5-7}$$

sendo

$$M(p) = \{[(E_p^e - \mu_e) - \sum_q V(q)v_{p-q}^2]u_p^2 - [(E_p^h - \mu_h) - \sum_q V(q)v_{p-q}^2]v_p^2 + 2u_p v_p [\lambda(p) - \sum_q V(q)u_{p-q}v_{p-q}]\}$$

$$G(p) = \{[(E_p^h - \mu_h) - \sum_q V(q)v_{p-q}^2]u_p^2 - [(E_p^e - \mu_e) - \sum_q V(q)v_{p-q}^2]v_p^2 + 2u_p v_p [\lambda(p) - \sum_q V(q)u_{p-q}v_{p-q}]\}$$

$$L(p) = \{(u_p^2 - v_p^2)(\lambda(p) - \sum_q V(q)u_{p-q}v_{p-q}) - [(E_p^h - \mu_h) + (E_p^e - \mu_e) - 2 \sum_{pq} V(q)v_{p-q}^2]u_p v_p\}$$

$$\psi_0 = \sum_p \{[(E_p^e - \mu_e) + (E_p^h - \mu_h) - 2 \sum_q V(q)v_{p-q}^2]v_p^2 - 2u_p v_p (\lambda(p) - \sum_q V(q)u_{p-q}v_{p-q})\}$$

Escolhemos, o hamiltoniano tentativa, como:

$$\bar{H} = \sum_p [(E_p^e - \mu_e) c_p^+ c_p + (E_p^h - \mu_h) h_p^+ h_p + \Delta(p)(c_p^+ h_{-p}^+ + h_{-p} c_p)] \tag{1.5-8}$$

sendo $\Delta(p)$ uma função paramétrica. Diagonalizado pela transformação de Bogoliubov.

$$\alpha_p = u_p c_p + v_p h_{-p}^+$$

$$\beta_p = u_p h_{-p} - v_p c_p^+$$

e toma a forma

$$\bar{H} = N_0 + \sum_p [W(p) \alpha_p^+ \alpha_p + k(p) \beta_{-p}^+ \beta_{-p}] \quad (1.5-9)$$

sendo

$$W(p) = [(E_p^e - \mu_e) u_p^2 - (E_p^h - \mu_h) v_p^2 + 2 \Delta(p) u_p v_p]$$

$$k(p) = [(E_p^h - \mu_h) v_p^2 - (E_p^e - \mu_e) u_p^2 + 2 \Delta(p) u_p v_p]$$

$$R(p) = \{ [(E_p^e - \mu_e) + (E_p^h - \mu_h)] u_p v_p + \Delta(p) (u_p^2 - v_p^2) \}$$

$$N_0 = \sum_p [(E_p^e - \mu_e) + (E_p^h - \mu_h)] v_p^2 - 2 \Delta_p v_p u_p$$

impostas pelas condições da eq. (1.2-13) e mais

$$(u_p^2 - v_p^2) = \frac{\xi}{\mathcal{E}} \quad ; \quad u_p v_p = \frac{\Delta}{2\mathcal{E}}$$

$$\eta = \frac{(E_p^e - \mu_e) + (E_p^h - \mu_h)}{2}$$

$$\mathcal{E} = \sqrt{\xi^2 + \Delta^2}$$

usando \bar{H} , equação (1.5-9) podemos calcular o potencial termodinâmico pela fórmula (1.5-6) [Ap. B].

$$\begin{aligned}
\phi &= - \frac{1}{\beta^*} \ln \text{Tr} \left| \exp (- \beta^* \bar{H}) \right| + \langle H - \bar{H} \rangle = \\
&= \sum_p \left[(\eta_p - \epsilon) + \frac{1}{\beta^*} \ln \{ (1 - \eta_\alpha^p)(1 - \eta_\beta^p) \} + \right. \\
&\quad \left. + \left(- \frac{\Delta_p \lambda_p}{\epsilon_p} + \frac{2 \Delta_p^2}{\epsilon_p} \right) (1 - \eta_\alpha^p - \eta_\beta^p) \right] \quad (1.5-10)
\end{aligned}$$

O objetivo deste parágrafo será de fundamental importância para o estudo das propriedades termodinâmicas do estado saturado.

A fórmula do potencial termodinâmico nos dá o caminho para o estudo da transição de fase deste estado. Mas como isto tornaria muito extenso este trabalho, nos detivemos até esse ponto.

2.1 Resposta Dielétrica

Muitas propriedades de um semicondutor sob um campo de radiação eletromagnética forte, podem ser entendidas em termos de que o sistema seja formado por quasi-partículas independentes. Contudo, a interação entre elétron e buraco, via radiação forte, que faz o sistema adquirir esse estado de quasi-partícula, sugere que o sistema possua certa excitação coletiva.

No estudo da interação desse sistema com campos elétricos e magnéticos fracos [G-4], estas excitações coletivas tornam-se de grande importância. Em via dos fatos, in introduzimos neste trabalho um aspecto coletivo neste sistema, adicionando à hamiltoniana (1.31), termos de interação coulombiana entre os pares $e \times e$, $h \times h$ e $h \times e$, levando em conta que as transições intra-bandas são desprezadas.

Neste capítulo, visando o estudo das excitações coletivas e propriedades ópticas da fase saturada, obtemos sua constante dielétrica. Adotamos o processo desenvolvido por Noziere-Pines. [N-1]

É sabido também que $1/\epsilon(Q, \Omega)$ nos fornece a medida direta da resposta dielétrica das quasi-partículas a um campo longitudinal externo fraco que varia em espaço e tempo.

Na seção seguinte nós fazemos a correção entre esta medida da resposta longitudinal do sistema com a função resposta densidade-densidade, para obter a seção eficaz de espalhamento.

Para calcular a constante dielétrica seguiremos o

formalismo dado por Noziere-Pines [N-1], que mostra uma generalização da constante dielétrica a sistemas de muitos corpos. Primeiramente, expomos este formalismo, para depois adaptar ao sistema em estudo.

Sabemos que se aplicarmos um campo elétrico $D(\vec{r}, t)$ num sistema eletrônico, ele vai satisfazer a equação de Poisson

$$\nabla \cdot \vec{D}(\vec{r}, t) = 4\pi \bar{\rho}(\vec{r}, t) \quad (2.1-2)$$

$\bar{\rho}$ é a densidade de "carga externa" introduzida no sistema no ponto \vec{r} .

Por outro lado, o campo externo induzirá uma polarização no sistema e as flutuações de cargas induzidas produzem um campo de cargas especiais dado por $\vec{e}_p(\vec{r}, t)$.

Podemos relacionar este campo com a densidade de carga de polarização por

$$\nabla \cdot \vec{e}_p(\vec{r}, t) = 4\pi \rho(\vec{r}, t) \quad (2.1-2)$$

Note que $\rho(\vec{r}, t)$ é a flutuação da densidade de carga média.

O campo elétrico dentro do sistema, terá então duas contribuições, dadas por

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = \vec{D}(\vec{r}, t) + \vec{e}_p(\vec{r}, t) \quad (2.1-3)$$

Combinando às equações (2.1-1;-2;-3) obtemos a relação que descreve o campo elétrico devido a um campo externo e as flutuações de cargas induzidas.

$$\nabla \cdot \vec{E}(\vec{r}, t) = 4\pi (\bar{\rho}(\vec{r}, t) + \rho(\vec{r}, t)) \quad (2.1-4)$$

Tomando agora as transformadas de Fourier das equações (2.1-1) e (2.1-4) obtemos

$$i\vec{Q} \cdot \vec{D}(Q, w) = 4\pi \bar{\rho}(Q, w) \quad (2.1-5)$$

$$i\vec{Q} \cdot \vec{E}(Q, w) = 4\pi (\bar{\rho}(Q, w) + \rho(Q, w)) \quad (2.1-6)$$

Para um campo macroscópico externo, estas equações expressam as leis usuais da eletrostática para um material dielétrico; fazemos, então, uma extensão para o nível microscópico, considerando que essas leis possam ser aplicadas qualquer vetor de onda \vec{Q} e frequência w .

Desta forma a equação (2.1-6) serve como uma definição do campo elétrico numa escala para a qual não vale mais a definição usual macroscópica.

Usando a afirmação que o campo externo é suficientemente fraco, podemos supor que a resposta dielétrica dos elétrons $\langle \rho \rangle$ será proporcional ao campo aplicado. Assumimos então que no cálculo da resposta do sistema é desprezado termos de ordem superior.

Desta forma o campo \vec{E} será proporcional a \vec{D}

$$\vec{D}(Q, \Omega) = \epsilon(Q, w) \vec{E}(Q, w) \quad (2.1-7)$$

Ambos \vec{D} e \vec{E} são puramente longitudinais.

Esta equação como vemos, introduz uma generalização da constante dielétrica estática e homogênea da eletros

tática.

Temos que $\epsilon(Q, \omega)$ é a "constante dielétrica" dependente da frequência e do vetor de onda do campo aplicado. A nova constante dielétrica fornece uma medida direta da resposta dielétrica do sistema.

Usando as equações (2.1-7), (2.1-5) e (2.1-6) podemos tirar que

$$\frac{1}{\epsilon(Q, \omega)} = 1 + \frac{\rho(Q, \omega)}{\bar{\rho}(Q, \omega)} \quad (2.1-8)$$

ou

$$\epsilon(Q, \omega) - 1 = \frac{-\rho(Q, \omega)}{\rho(Q, \omega) + \bar{\rho}(Q, \omega)} \quad (2.1-9)$$

A partir da equação (2.1-8) pode-se obter a resposta de um sistema eletrônico sob a influência de uma densidade de carga externa. [P-2]

Em resumo, este formalismo nos dá uma maneira de calcular a constante dielétrica de um plasma, quando se sabe qual o valor da flutuação média da densidade de carga ($\rho(Q, \omega)$) e da densidade de "carga externa" $\bar{\rho}(Q, \omega)$.

Neste momento introduzo no sistema saturado um campo elétrico oscilante longitudinal fraco na forma de uma carga de teste oscilante de vetor de onda \vec{Q} e frequência Ω , cuja densidade de carga é dada por

$$e \{ r_Q e^{-i(\omega t - \vec{Q} \cdot \vec{r})} + CC \} \quad (2.1-10)$$

Portanto a hamiltoniana dessa interação é

$$H' = V(Q) \{ \rho(Q) r_Q e^{-i\omega t} + cc \} e^{-\eta|T|} \quad (2.1-11)$$

onde η é introduzido para assegurar a aplicação adiabática da carga de teste. Usamos a notação de que o operador $(\rho(Q))$ densidade de carga é igual a

$$\rho(Q) = -e \sum_k (c_{k+Q}^+ c_k + h_{-k}^+ h_{-k-Q}) = \rho_e(Q) + \rho_h(Q) \quad (2.1-12)$$

e portanto seguindo o raciocínio anterior nós podemos definir a constante dielétrica do nosso sistema por

$$\epsilon(Q, \omega) - 1 = \frac{-\rho(Q)}{\rho(Q) + r_Q e^{-i\omega t}} \quad (2.1-13)$$

Resta-nos então calcular a flutuação da densidade $\rho(Q)$, que é feita no próximo parágrafo.

2.2 Constante Dielétrica: Fase Saturada

Como a fase saturada é composta por dois tipos de partículas, elétrons e buracos, a densidade de carga desse sistema, pode ser escrito como uma soma das respectivas densidades individuais, isto é:

$$\rho(Q, \Omega) = \sum_k (\rho_{ke}^Q + \rho_{kh}^Q) \quad (2.2-1)$$

Se caracterizo por c_k^+ e h_k^+ os operadores de criação do elétron e do buraco de momento k , as densidades individuais podem ser escrita na forma usual

$$\rho_{ke}^Q = c_{k+Q}^+ c_k \quad (2.2-2)$$

$$\rho_{kh}^Q = h_{k+Q}^+ h_k \quad (2.2-3)$$

Utilizamos neste trabalho para o cálculo de $\rho(Q, \Omega)$ o método das equações de movimento [S-1], [A-2], [R-1] na aproximação RPA generalizada.

Este método requer que os operadores ρ_{ke}^Q e ρ_{kh}^Q satisfaçam as seguintes equações do movimento oscilatório

$$[H, \rho_{ke}^Q] = -i\hbar \Omega \rho_{ke}^Q \quad (2.2-4)$$

$$[H, \rho_{kh}^Q] = -i\hbar \Omega \rho_{kh}^Q \quad (2.2-5)$$

onde o operador ρ cria uma excitação de energia Ω aplicado a função de onda do estado fundamental.

Portanto se acharmos os comutadores dos operadores ρ_{ke}^Q e ρ_{kh}^Q com a hamiltoniana total do sistema saturado dada por (1.3-1)

$$\begin{aligned}
 H = & \sum_p E_p^e c_p^+ c_p + E_p^h h_{-p}^+ h_{-p} + \\
 & + \lambda(p) (c_p^+ h_{-p}^+ + h_{-p} c_p) + \\
 & + \frac{1}{2} \sum_{pp'q} V(q) (c_p^+ c_{p'}^+ c_{p'+q} c_{p-q} + h_{-p}^+ h_{-p'}^+ h_{-p'-q} h_{-p'+q} + \\
 & - 2 c_p^+ h_{-p'}^+ h_{-p'-q} c_{p-q})
 \end{aligned}$$

obtemos os valores de ρ_{ke}^Q e ρ_{kh}^Q e conseqüentemente o valor de $\rho(Q, \Omega)$.

Com o desenvolver dos cálculos, aparecem dois operadores bilineares acoplados as equações (2.2-4) e (2.2-5) dados por

$$b_k^Q = h_{-k-Q} c_k \quad (2.2-7)$$

$$\bar{b}_k^Q = c_{k+Q}^+ h_{-k}^+ \quad (2.2-8)$$

Para contornar isto, introduzimos a mais, duas equações de movimentos com os mencionados operadores

$$[H, b_k^Q] = -i\hbar b_k^Q \quad (2.2-9)$$

$$[H, \bar{b}_k^Q] = -i\hbar \bar{b}_k^Q \quad (2.2-10)$$

fechando assim o sistema de quatro equações com quatro incógnitas. O sistema de equações de movimento é calculado e linearizado no [Ap-D].

Usamos para a linearização a aproximação RPA.

O sistema toma a seguinte forma após várias operações

$$\begin{aligned} \underline{[H, \rho_{ke}^Q]} &= \{ \bar{E}_{k+Q}^e - \bar{E}_k^e \} \rho_{ke}^Q - V(Q) (\eta_{h+Q}^e - \eta_k^e) (\rho_e + \rho_h) + \\ &+ \Delta_{k+Q} b_k^Q + \Delta_k \bar{b}_{k+Q}^Q - \bar{a}_{k+Q} \sum_p V(p-k) b_p^Q + a_k \sum_p V(p-k) \bar{b}_p^Q \end{aligned} \quad (2.2-11)$$

$$\begin{aligned} \underline{[H, \rho_{kh}^Q]} &= \{ \bar{E}_k^h - \bar{E}_{k+Q}^h \} \rho_{kh}^Q + V(Q) (\eta_{k+Q}^h - \eta_k^h) (\rho_e + \rho_h) - \\ &- \Delta_k b_k^Q + \Delta_{k+Q} \bar{b}_{k+Q}^Q - \bar{a}_k \sum_p V(p-k) b_p^Q + a_{k+Q} \sum_p V(p-k) \bar{b}_p^Q \end{aligned} \quad (2.2-12)$$

$$\begin{aligned} \underline{[H, b_k^Q]} &= \{ - \bar{E}_k^e - \bar{E}_{k+Q}^h \} b_k^Q - V(Q) (a_{k+Q} + a_k) (\rho_e + \rho_h) - \\ &- \Delta_k \rho_{kh}^Q - \Delta_{k+Q} \rho_{ke}^Q - (1 - \eta_{k+Q}^h - \eta_k^e) \sum_p V(p-k) b_p^Q \end{aligned} \quad (2.2-13)$$

$$\begin{aligned} \underline{[H, \bar{b}_k^Q]} &= \{ \bar{E}_k^h - \bar{E}_{k+Q}^e \} \bar{b}_k^Q + V(Q) (\bar{a}_{k+Q} + \bar{a}_k) (\rho_e + \rho_h) + \\ &+ \Delta_k \rho_{ke}^Q + \Delta_{k+Q} \rho_{kh}^Q + (1 - \eta_{k+Q}^h - \eta_k^e) \sum_p V(p-k) \bar{b}_p^Q \end{aligned} \quad (2.2-14)$$

Sendo $\bar{E}_k^{e,h} = E_k^{e,h} - \sum_p V(p-k) \eta_k^{e,h}$

$$\eta_k^e = \langle c_k^+ c_k \rangle \quad ; \quad \eta_k^h = \langle h_{-k}^+ h_{-k} \rangle$$

$$a_k = \langle h_{-k} c_k \rangle \quad ; \quad \bar{a}_k = \langle c_k^+ h_{-k}^+ \rangle$$

$$\Delta\rho = \lambda_p - \sum_k V(p-k) a_k$$

Como estamos trabalhando num estado saturado, é mais fácil trabalhar na representação de quasi-partículas definidos por Bogoliubov e Valatin [B-3], [V-1], pois não há quasi-partículas no estado fundamental.

Desta forma, nós introduzimos a transformação canônica representada pela equação matricial:

$$\begin{pmatrix} c_k \\ h_{-k}^+ \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_k & v_k \\ -v_k & u_k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_k \\ \beta_{-k}^+ \end{pmatrix} \quad (2.2-15)$$

com as condições de que $v_k^2 + u_k^2 = 1$.

Esta condição impõe as regras de comutação dos fermions nestes novos operadores pois:

$$\begin{aligned} \{\alpha_k, \alpha_{k'}^+\} &= u_k u_{k'} \{c_k; c_{k'}^+\} + v_k v_{k'} \{h_{-k}^+; h_{-k'}\} \\ &= \delta_{kk'} (u_k^2 + v_k^2) \end{aligned}$$

Usando a nova representação podemos formar a equação matricial que nos permite relacionar os comutadores antigos com os novos, isto é,

$$\begin{vmatrix}
 u_{k+Q} u_k & -v_{k+Q} v_k & -v_{k+Q} u_k & -u_{k+Q} v_k \\
 -v_k v_{k+Q} & u_{k+Q} u_k & -u_{k+Q} v_k & -u_k v_{k+Q} \\
 u_{k+Q} v_k & u_k v_{k+Q} & -v_{k+Q} v_k & u_{k+Q} u_k \\
 v_{k+Q} u_k & v_k u_{k+Q} & u_{k+Q} u_k & -v_{k+Q} v_k
 \end{vmatrix}
 \begin{vmatrix}
 [H, \rho_{ke}^Q] \\
 [H, \rho_{kh}^Q] \\
 [H, b_k^Q] \\
 [H, \bar{b}_k^Q]
 \end{vmatrix}
 =
 \begin{vmatrix}
 [H, \alpha_{k+Q}^+ \alpha_k^+] \\
 [H, \beta_{k+Q}^+ \beta_k^+] \\
 [H, \alpha_{k+Q}^+ \beta_k^+] \\
 [H, \beta_{k+Q}^+ \alpha_k^+]
 \end{vmatrix}
 \quad (2.2-16)$$

Resolvendo o sistema de equações (2.2-16) obtemos o novo sistema de equações $|Ap-E|$ desejado

$$[H, \alpha_{k+Q}^+ \alpha_k^+] = (w_{k+Q}^- - w_k^-) \alpha_{k+Q}^+ \alpha_k^+ \quad (2.2-17)$$

$$[H, \beta_{k+Q}^+ \beta_k^+] = -(w_{k+Q}^- - w_k^-) \beta_{k+Q}^+ \beta_k^+ \quad (2.2-18)$$

$$\begin{aligned}
 [H, \alpha_{k+Q}^+ \beta_k^+] &= (w_{k+Q}^- + w_k^+) \alpha_{k+Q}^+ \beta_k^+ + m(k, Q) \rho(Q) V(Q) + \\
 &+ \frac{1}{2} n(k, Q) B(Q) - \frac{1}{2} \ell(k, Q) A(Q) \quad (2.2-19)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 [H, \beta_{k+Q}^+ \alpha_k^+] &= -(w_{k+Q}^+ + w_k^-) \beta_{k+Q}^+ \alpha_k^+ - m(k, Q) \rho(Q) V(Q) - \\
 &- \frac{1}{2} m(k, Q) B(Q) - \frac{1}{2} \ell(k, Q) A(Q) \quad (2.2-20)
 \end{aligned}$$

onde w^\pm são dados por

$$w_k^+ = \bar{E}_k^h u_k^2 - \bar{E}_k^e v_k^2 - 2 \Delta_k u_k v_k$$

$$w_k^- = \bar{E}_k^e u_k^2 - \bar{E}_k^h v_k^2 - 2 \Delta_k u_k v_k \quad (2.2-21)$$

e as novas densidades por

$$A(Q) = \sum_k V(k-Q) [\ell(k,Q) (\alpha_{k+Q}^+ \beta_k^+ + \beta_{k+Q} \alpha_k) + \\ + p(k,Q) (\alpha_{k+Q}^+ \alpha_k - \beta_k^+ \beta_{k+Q})] \quad (2.2-22)$$

$$B(Q) = \sum_k V(k-Q) [n(k,Q) (\alpha_{k+Q}^+ \beta_k^+ + \beta_{k+Q} \alpha_k) - \\ - m(k,Q) (\alpha_{k+Q}^+ \alpha_k + \beta_k^+ \beta_{k+Q})] \quad (2.2-23)$$

$$\rho(Q) = \sum_k [m(k,Q) (\alpha_{k+Q}^+ \beta_k^+ + \beta_{k+Q} \alpha_k) + \\ + n(k,Q) (\beta_k^+ \beta_{k+Q} + \alpha_{k+Q}^+ \alpha_k)] \quad (2.2-24)$$

com os fatores

$$m(k,Q) = u_k v_{k+Q} + v_k u_{k+Q} \quad (2.2-24A)$$

$$n(k,Q) = u_k u_{k+Q} - v_k v_{k+Q} \quad (2.2-24B)$$

$$\ell(k,Q) = u_k u_{k+Q} + v_k v_{k+Q} \quad (2.2-24C)$$

$$p(k,Q) = u_k v_{k+Q} - v_k u_{k+Q} \quad (2.2-24D)$$

A introdução do hamiltoniano (2.1-11) da carga de teste H'

no hamiltoniano total do sistema dá uma dependência na frequência w só nas duas últimas equações de movimento (2.2-19) e (2.2-20), pois somar H à hamiltoniana total é a mesma coisa que recolocar $\rho(Q)$ por $(\rho(Q) + e^{-iwt+\eta(t)} + c.c.)$.

Só as equações com esta dependência é que vão contribuir para o cálculo de $\rho(a)$.

Assumindo que uma flutuação na carga de teste causa uma flutuação na densidade de carga do sistema, escrevemos as equações de movimento para os novos operadores, com a usual forma

$$[H, \alpha_{k+Q}^+ \alpha_k] = -i\hbar w \alpha_{k+Q}^+ \alpha_k \quad (2.2-25)$$

$$[H, \beta_k^+ \beta_{k+Q}] = -i\hbar w \beta_k^+ \beta_{k+Q} \quad (2.2-26)$$

$$[H, \alpha_{k+Q}^+ \beta_k] = -i\hbar w \alpha_{k+Q}^+ \beta_k \quad (2.2-27)$$

$$[H, \beta_{k+Q} \alpha_k] = -i\hbar w \beta_{k+Q} \alpha_k \quad (2.2-28)$$

Igualando as equações (2.2-25 à 28) com as equações (2.2-17 à 20) tiramos os valores das flutuações dos novos operadores $\alpha_{k+Q}^+ \beta_k^+$ e $\beta_{k+Q} \alpha_k$. Substituindo esses valores nas expressões (2.2-22), (2.2-23) e (2.2-24) obtemos as desejadas equações para as variáveis coletivas $\rho(Q)$, $A(Q)$ e $B(Q)$:

$$\begin{aligned} \rho(Q) = & \sum_k \{ m(k, Q) S_w^-(k, Q) [V(Q) (\rho(Q) + r_Q e^{-iwt+\eta(t)})_{m(k, Q)} + \\ & + \frac{1}{2} n(k, Q) B(Q)] - \frac{1}{2} \ell(k, Q) S_w^+(k, Q) m(k, Q) A(Q) \} \end{aligned} \quad (2.2-29)$$

$$B(Q) = \sum_k \{ V(k-Q) n(k,Q) S_w^-(k,Q) [V(Q) (\rho(Q) + r_Q e^{-i\omega t + \eta |t|})_m(k,Q) + \\ + \frac{1}{2} n(k,Q) B(Q)] - \frac{1}{2} V(k-Q) \ell(k,Q) S_w^+(k,Q) n(k,Q) A(Q) \} \quad (2.2-30)$$

$$A(Q) = \sum_k \{ -V(k,Q) \ell(k,Q) S_w^+(k,Q) [V(Q) (\rho(Q) + r_Q e^{-i\omega t - \eta |t|})_m(k,Q) + \\ + \frac{1}{2} n(k,Q) B(Q)] - \frac{1}{2} V(k-Q) \ell(k,Q) S_w^-(k,Q) \ell(k,Q) A(Q) \} \quad (2.2-31)$$

onde usamos a notação

$$S_w = \{ (-i\omega - [w_{k+Q}^- + w_k^+] - i\eta)^{-1} \pm (-i\omega + [w_{k+Q}^+ + w_k^-] - i\eta)^{-1} \}$$

Pelo argumento de que as oscilações eletrônicas internas do sistema são proporcionais a oscilação da fonte fraca externa $r_Q e^{-i\omega t}$, as flutuações $A(Q)$ e $B(Q)$ podem ser escritas na forma

$$A(Q) = d(Q) V(Q) [\rho(Q) + r_Q e^{-i\omega t}] \quad (2.2-32)$$

$$B(Q) = j(Q) V(Q) [\rho(Q) + r_Q e^{-i\omega t}] \quad (2.2-33)$$

e $d(Q)$, $j(Q)$ são as constantes a determinar.

Para obter estas constantes, primeiramente substituímos estes valores de $A(Q)$ e $B(Q)$ na equação de $\rho(Q)$ (2.2-29) a qual toma a forma

$$\rho(Q) = (\rho(Q) + r_Q e^{-i\omega t}) [F(Q) + L(Q) d(Q) - D(Q) j(Q)] \quad (2.2-34)$$

onde

$$F(Q) = V(Q) \sum_k m^2(k, Q) S^-(k, Q) \quad (2.2-35)$$

$$L(Q) = \frac{1}{2} V(Q) \sum_k m(k, Q) n(k, Q) S_w^-(k, Q) \quad (2.2-36)$$

$$D(Q) = \frac{1}{2} V(Q) \sum_k \ell(k, Q) m(k, Q) S_w^+(k, Q) \quad (2.2-37)$$

Nas duas outras equações (2.2-30) (2.2-31) não podemos fazer o mesmo sem algumas considerações.

Podemos ver que além das equações para A e B serem auto consistentes e acopladas em \underline{d} e \underline{j} possuem o potencial com uma dependência em k devido ao elemento de matriz da interação entre os elétrons e buracos. Eliminamos esta dependência substituindo-o por um valor médio constante, isto é, supomos ser uma interação de curto alcance blindada estaticamente

$$\langle V(k-Q) \rangle = \frac{U}{N} = V$$

sendo N = número de partículas.

Esta aproximação leva o sistema de equações para uma forma simples, pois após substituir em (2.2-30) e (2.2-31) os valores (2.2-32) e (2.2-32) obtemos o seguinte sistema algébrico

$$j(Q) = \{ \bar{f}_n(Q) + \bar{G}(Q) j(Q) - \bar{P}(Q) d(Q) \} \quad (2.2-38)$$

$$d(Q) = \{ \bar{f}_d(Q) + \bar{R}(Q) j(Q) + \bar{T}(Q) d(Q) \} \quad (2.2-39)$$

sendo

$$\bar{f}_n(Q) = V \sum_k n(k, Q) m(k, Q) S_w^-(k, Q)$$

$$\bar{f}_\ell(Q) = V \sum_k \ell(k, Q) m(k, Q) S_w^-(k, Q)$$

$$\bar{P}(Q) = \frac{V}{2} \sum_k \ell(k, Q) n(k, Q) S_w^+(k, Q)$$

$$\bar{G}(Q) = V \sum_k n(k, Q) n(k, Q) S_w^-(k, Q)$$

$$\bar{R}(Q) = \frac{V}{2} \sum_k n(k, Q) \ell(k, Q) S_w^-(k, Q)$$

$$\bar{T}(Q) = \frac{V}{2} \sum_k \frac{1}{2} \ell(k, Q) \ell(k, Q) S_w^+(k, Q)$$

A solução desse sistema (2.1-38)-(2.1-39) é então

igual a

$$d(Q) = \frac{f_\ell(Q) + f_n(Q)R(Q)}{1 + P(Q)R(Q)} \quad (2.2-40)$$

$$j(Q) = \frac{f_n(Q) - f_\ell(Q)P(Q)}{1 + P(Q)R(Q)} \quad (2.2-41)$$

com a notação a mais

$$f_n(Q) = \frac{\bar{f}_n(Q)}{1 - \bar{G}(Q)} \quad ; \quad f_\ell(Q) = \frac{-\bar{f}_\ell(Q)}{1 - \bar{T}(Q)}$$

$$P(Q) = \frac{\bar{P}(Q)}{1 - \bar{G}(Q)} \quad ; \quad R(Q) = \frac{-\bar{R}(Q)}{1 - \bar{T}(Q)}$$

Com esta última relação obtivemos, todas as expres

sões necessárias para nos fornecer a constante dielétrica da fase saturada, pois a equação (2.1-13) toma a seguinte forma:

$$\begin{aligned} \epsilon - 1 &= \frac{\rho(Q)}{\rho(Q) + r_Q e^{-i\omega t}} = \\ &= \left\{ F(Q) + \frac{f_\eta(Q) [L(Q) + D(Q)R(Q)] - f_\rho(Q) [D(Q) + L(Q)P(Q)]}{1 - P(Q)R(Q)} \right\} \end{aligned} \quad (2.2-42)$$

Para estudar o comportamento assintótico de $\epsilon(Q)$ para valores grandes de ω , fazemos a aproximação $m_e = m_h$ (massas efetivas iguais).

Esta aproximação nos dá as simplificações, como:

$$\tilde{E}_e = \tilde{E}_h = E$$

e como consequência

$$w_{k+Q}^- + w_k^+ = w_{k+Q}^+ + w_k^- = v_k(Q) \quad (2.2-43)$$

e ainda

$$\Delta_{k+Q} = \Delta_k = \Delta$$

e

$$s_w^\pm(Q) = (-w - v_k(Q) - i\eta)^{-1} \pm (-w + v_k(Q) - i\eta)^{-1} \quad (2.2-44)$$

Nestas condições, analisando a parte real de S^\pm verifica-se que S^+ comporta-se como w^{-1} enquanto que S^- comporta-se como w^{-2} então temos

$$S_w^-(Q) = \frac{2 v_k(Q)}{w^2 - v_k^2(Q)}$$

$$S_w^+(Q) = \frac{-2 w}{w^2 - v_k^2(Q)}$$

e que quando $\Omega \rightarrow \infty$, isto é, o comportamento assintótico de $\epsilon(Q, \infty)$ tende para o valor $[N-1]$, $[R-1]$

$$\epsilon(Q, w) - 1 \rightarrow \frac{-w_p^2}{w^2} \quad (2.2-45)$$

w_p - frequência de plasma.

Podemos também nesta aproximação ($m_e = m_n$) escrever a fórmula para a constante dielétrica

$$\begin{aligned} \epsilon(Q, w) - 1 = & V \left\{ \sum_k [m^2(k, Q) S_w^-(Q, k) - \frac{1}{2} m(k, Q) n(k, Q) S_w^-(Q, k) j(Q) - \right. \\ & \left. - \frac{1}{2} \ell(k, Q) m(k, Q) S_w^+(k, Q) d(Q)] \right\} \quad (2.2-46) \end{aligned}$$

Para certos tipos de problemas $A(Q)$ e $B(Q)$ podem ser desprezados. No nosso caso, como estamos interessados em analisar sô as excitações das quasi-partículas independentes do estado fundamental, supomos que as flutuações $A(Q)$ e $B(Q)$ não trazem grande contribuição e podem ser desprezadas.

Nestas condições a nossa constante dielétrica se torna bem simples, e pode ser aproximada por

$$\epsilon^{-1} = \{V \sum_k [m(k,Q)]^2 s_w^-(k,Q)\} \quad (2.2-47)$$

ou explicitamente por

$$\begin{aligned} \epsilon^{-1} &= V \sum_k [m(k,Q)]^2 \left[\frac{1}{-w-v_k(Q)-i\eta} - \frac{1}{-w+v_k(Q)-i\eta} \right] \\ &= 4\pi \frac{V}{4\pi} \sum_k [m(k,Q)]^2 \frac{2v_k(Q)}{(-w+i\eta)^2 - v_k(Q)^2} \quad (2.2-48) \\ &= 4\pi \sigma(k,Q) \end{aligned}$$

Este resultado é uma consequência da aproximação RPA, pois é levada em conta a interação coulombiana desprezando-se correções de campo local. [N-1]

Podemos também obter o resultado (2.2-48) com um tratamento da interação coulombiana por aproximação; limitada aos diagramas que aparecem no RPA. A contribuição de 1ª ordem a $\frac{1}{\epsilon}$ é dado em (2.1-8) e as seguintes ordem formam uma série geométrica

$$\frac{1}{\epsilon} = 1 - 4\pi\sigma + (4\pi\sigma)^2 + \dots = \frac{1}{1+4\pi\sigma}$$

com a condição de convergência $4\pi\sigma < 1$.

Como estamos interessados em respostas lineares as excitações externas, usamos a suposição de que as quasi-partículas são livres (desprezando a interação entre elas) para poder escrever a constante dielétrica na forma desejada

$$\frac{1}{\epsilon(Q,w)} - 1 = V \sum_k [m(kQ)]^2 \frac{2v_k(Q)}{(-w+i\eta)^2 - v_k(Q)^2} \quad (2.2-49)$$

Para separar as partes imaginária e real de $\frac{1}{\epsilon}$ uso a propriedade que [Z-1]

$$\lim_{\eta \rightarrow 0} \frac{1}{w \pm i\eta} = P\left(\frac{1}{w}\right) \mp i\pi\delta(w) \quad (2.2-50)$$

sendo P parte principal e obtendo

$$\operatorname{Re}\left(\frac{1}{\epsilon}\right) = 1 + V \sum_k 2v_k(Q) [m(k,Q)]^2 P\left(\frac{1}{w^2 - v_k^2 Q^2}\right) \quad (2.2-51)$$

$$\operatorname{Im}\left(\frac{1}{\epsilon}\right) = V \sum_k [m(k,Q)]^2 [\delta(\hbar w - v_k(Q)) - \delta(\hbar w + v_k(Q))] \quad (2.2-52)$$

2.3 Função de Correlação Densidade-Densidade

O teorema da flutuação dissipação [k-1], [F-1] nos dá a possibilidade de relacionar a função de correlação densidade-densidade, com a parte imaginária do inverso da constante dielétrica. (Ap-F)

$$V(Q) \langle \rho(Q)^+ \rho(Q) \rangle_w = \frac{1}{\pi} \text{Im} [\epsilon(Q, \omega)]^{-1} \quad \rho / T = 0 \quad (2.3-1)$$

sendo $\epsilon(Q, \omega)$ e $\langle \rho(Q)^+ \rho(Q) \rangle_w$ as respectivas transformadas de Fourier da constante dielétrica e da função de correlação densidade densidade.

A função de correlação, contém praticamente toda a informação do espectro de espalhamento Raman e mostra uma importância inevitável para descrever medidas físicas.

Esta formulação é também muito conveniente pois permite uma conexão imediata com métodos da teoria de campos. Isto não é sempre necessário, mas muitas vezes útil, principalmente nos casos de um sistema de partículas interagindo fortemente, onde levam em conta efeitos de relaxação, excitações coletivas, etc.

No parágrafo anterior abrimos a possibilidade de obter esta função de correlação quando obtivemos a constante dielétrica. Cabe-nos então determinar $\text{Im}[\epsilon(Q, \omega)]^{-1}$.

Recorremos então a fórmula (2.2-52) já obtida, dando por:

$$\text{Im}(\epsilon(Q, \omega))^{-1} = V \sum_k [m(k, Q)]^2 [\delta(\hbar\omega - \nu_k(Q)) - \delta(\hbar\omega + \nu_k(Q))] \quad (2.3-2)$$

Ou ainda

$$\text{Im} [\epsilon(Q, \omega)]^{-1} = V \sum_k [m(k, Q)]^2 \delta(\hbar\omega - \nu_k(Q)) \quad (2.3-3)$$

Pois as energias $\nu_k(Q)$ no estado fundamental são positivas e a parte dada por $\delta(\hbar\omega + \nu_k(Q))$ é posta de lado na última fórmula.

Podemos ainda escrever explicitamente a fórmula

$$[m(k, Q)]^2 = (\mu_k \nu_{k+Q} + \nu_k \mu_{k+Q})^2 = \frac{1}{2} \left[1 - \frac{\tilde{\epsilon}_k \tilde{\epsilon}_{k+Q}^{-\Delta^2}}{\tilde{\epsilon}_k \tilde{\epsilon}_{k+Q}} \right] \quad (2.3-4)$$

usando as relações (1.4-4).

Reescrevemos então a fórmula da parte imaginária da constante dielétrica de uma forma simples e explícita

$$\text{Im} [\epsilon(Q, \omega)]^2 = \frac{V}{2} \sum_k \left[1 - \frac{\tilde{\epsilon}_k \tilde{\epsilon}_{k+Q}^{-\Delta^2}}{\tilde{\epsilon}_k \tilde{\epsilon}_{k+Q}} \right] \delta(\hbar\omega - \nu_k(Q)) \quad (2.3-5)$$

Para ser possível o cálculo dessa expressão faço a usual transformação

$$\sum_k \rightarrow \frac{1}{8\pi^3} \iiint d^3_k$$

com a devida transformação de variável

$$\begin{cases} k \\ \theta \\ \phi \end{cases} \rightarrow \begin{cases} \tilde{\epsilon}_k = E \\ \tilde{\epsilon}_{k+Q} = E' \\ \phi \end{cases}$$

sendo o jacobiano dado por $\frac{m^2}{k^2 Q}$. Obtenho assim a seguinte ex

pressão integral

$$\text{Im}[\epsilon(Q, w)]^{-1} = \frac{m^2 V}{2\pi Q} \int_{\Delta}^{w-\Delta} dE \frac{E(w-E) + \Delta^2}{(E^2 - \Delta^2)^{1/2} ((w-E)^2 - \Delta^2)^{1/2}} \quad (2.3-6)$$

cujos limites de integração são obtidos com imposição da função delta $\delta(\hbar w - v_k(Q))$.

A solução dessa integral tem como resultado

$$\text{Im} [\epsilon(Q, w)]^{-1} = \begin{cases} 0 & \text{para } w < 2\Delta \\ \frac{m^2 V}{2\pi^2 Q} \Delta F(\alpha) & \text{para } \Omega > 2\Delta \end{cases} \quad (2.3-7)$$

onde

$$F(\alpha) = (\alpha+4)E \frac{\alpha}{\alpha+4} - 4 \frac{\alpha+2}{\alpha+4} K \frac{\alpha}{\alpha+4} \quad (2.3-8)$$

com $\alpha = \frac{w-2\Delta}{\Delta}$ e E, K são funções elípticas de 1º e 2º grau.

Um gráfico de F(α) é mostrado na figura abaixo

Desta forma mostramos que função de correlação densidade-densidade da fase saturada obtida é:

$$\langle \rho^+(Q)\rho(Q) \rangle_w = \frac{1}{\pi} \left(\frac{m^2}{2\pi^2 Q} \right) \Delta F(\alpha) \quad \text{para } w > 2\Delta \quad (2.3-9)$$

Como um resultado imediato da equação (2.3-9) podemos obter a secção eficaz de espalhamento. Pois, baseado no fato de que a flutuação da densidade dos elétrons é o principal responsável pelo espalhamento de luz num sólido, Van Hove [Phys. Rev. 95, 249 (1954).] mostrou que a seção eficaz de espalhamento é proporcional a função de correlação densidade-densidade

$$\frac{d^2 \sigma}{d\Omega dw} \propto \langle \rho^+(Q)\rho(Q) \rangle_w$$

$d\Omega$ - elemento de ângulo sólido e frequência.

Adaptado para o nosso caso concluímos que o espalhamento se processará somente a frequências duas vezes o valor do gap. Como desprezamos a interação coulombiana entre os elétrons e buracos no cálculo da constante dielétrica, obtemos uma equação similar aquela da secção eficaz de espalhamento a menos de um termo $[\epsilon]^2$ no denominador. Este fator atua como uma blindagem na seção eficaz de espalhamento da partícula simples e introduz uma nova linha no espectro da luz espalhada em uma frequência w_p , dada por $\epsilon(Q, w_p) = 0$.

3.1 Corrente de Tunelamento

Efeito Josephson

Vamos inicialmente revisar o efeito de tunelamento em supercondutores.

A seguir (parágrafo [3.2]) propomos um método baseado nas transformações canônicas para obter o efeito de tunelamento, o qual introduziremos os resultados no sistema junção de semicondutores saturados.

Um supercondutor abaixo de sua temperatura de transição (crítica) possui muitas propriedades fascinantes, por exemplo, a habilidade de manter um fluxo de corrente com resistência zero. A teoria de Bardeen, Cooper e Schrieffer (BCS) [B-4] claramente demonstra que estas propriedades são o resultado da coerência entre pares de elétrons no supercondutor. Uma das mais importantes aplicações desta coerência, foi demonstrado por Josephson [J-2] que previu o seguinte fenômeno: Unindo dois pedaços de materiais supercondutores, aparecerá um fluxo de uma supercorrente através da junção. Ele foi capaz de mostrar, de condições puramente teóricas que de fato aparecia uma corrente numa junção deste tipo.

Esse efeito, chamado Josephson foi amplamente analisado e diferentes métodos [A-3], [F-2] nos dão a possibilidade de obter os mesmos resultados de Josephson. O mais simples é a feita em termos do formalismo pseudo spin de Anderson [A-4]. Um cálculo mais elaborado, na mesma linha é devido a Lee e Scully [L-2] exposta a seguir.

Inicialmente consideramos só as interações que envolvem pares de elétrons, cujos estados são dados por

$$|\psi\rangle = \prod_k |\psi_{\text{par}}\rangle_k \quad (3.1-1)$$

sendo $|\psi\rangle_k$ o estado do par com momento k .

Esta notação corresponde ao mar de Fermi completo

$$|\psi_{\text{par}}\rangle_k = \begin{cases} c_k^+ c_{-k} |0\rangle & \rightarrow |\text{cheio}\rangle \\ |0\rangle & \rightarrow |\text{vazio}\rangle \end{cases} \quad (3.1-2)$$

onde c_k^+ é o operador de criação para um elétron simples tendo momento k e spin up e c_{-k}^+ , com momento $-k$ e spin down.

No caso do supercondutor a interação atrativa efetiva leva o sistema a um estado de energia mais baixo e cada par é descrito por uma superposição coerente dos estados eletrônicos

$$|\psi_{\text{par}}\rangle_k = u_k |\text{vazio}\rangle_k + v_k |\text{cheio}\rangle_k \quad (3.1-3)$$

u_k e v_k - são probabilidades.

Com a notação de pseudo-spin de Anderson [A-4] podemos escrever

$$|\text{vazio}\rangle_k = |0\rangle_k = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_k \quad (3.1-4)$$

$$|\text{cheio}\rangle_k = c_k^+ c_{-k}^+ |0\rangle_k = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_k \quad (3.1-5)$$

sendo $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ e $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ correspondentes a pseudo-spins nas respectivas direções z e $-z$.

O estado, então, para todos os pares é dado por

$$|\psi\rangle = \prod_k |\psi_{\text{par}}\rangle_k = \prod_k \left\{ u_k \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_k + v_k \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_k \right\} \quad (3.1-6)$$

que corresponde ao estado BCS em notação iso-spin.

Podemos portanto montar os seguintes operadores em termos das matrizes de spin de Pauli

$$\sigma_k = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}_k = c_{-k} c_k \quad (3.1-7)$$

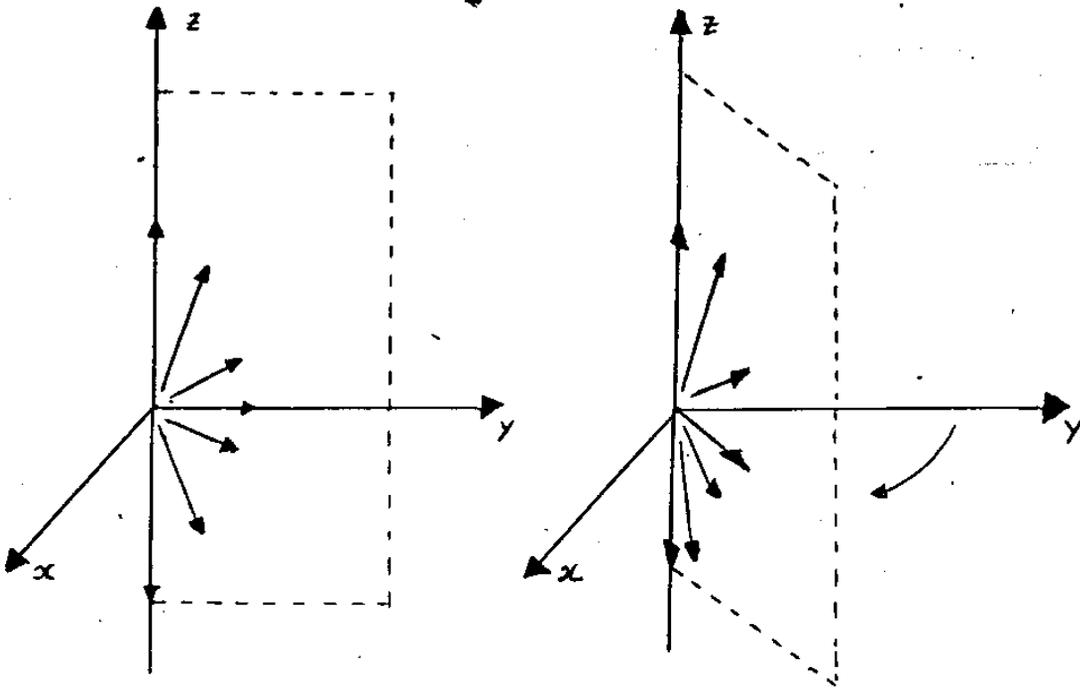
$$\sigma_k^+ = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}_k = c_k^+ c_{-k}^+ \quad (3.1-8)$$

$$\sigma_{zk} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}_k = \frac{1}{2} (c_k^+ c_k + c_{-k}^+ c_{-k} - 1) \quad (3.1-9)$$

onde

- σ_k é o operador aniquilação do par
- σ_k^+ é o operador criação do par
- $\sigma_{z,k}$ é como um operador do número, que a menos de uma constante aditiva nos diz quantos pares de elétrons estão no sub-espaco k.

Em conclusão a análise do estado fundamental dos supercondutores, nós reparamos que $|\psi\rangle$ é degenerado, de maneira que podemos rodar toda configuração spin em torno do eixo z, através de um ângulo ψ , isto é,



O que acontece aqui, é que aplico uma matriz de rotação no estado fundamental do supercondutor dado por

$$U_\psi = \exp \left\{ -i\psi \sum_k \sigma_{z,k} \right\} \quad (3.1-10)$$

O efeito que U_ψ provoca, é de introduzir uma exponencial $e^{-i\psi}$ na função de onda quando v_k é diferente de zero, isto é

$$|\psi\rangle = U_\psi |\psi\rangle = \prod_k \left\{ u_k \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_k + v_k e^{-i\psi} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_k \right\} \quad (3.1-11)$$

Neste instante temos que olhar para a geometria do sistema e definir as duas partes de junção,

Sabemos que, a teoria BCS [B-1] descreve muito bem as propriedades de um supercondutor associando a ela a hamiltoniana:

$$H_{BCS} = \sum_k \epsilon(k) (n_{k\uparrow} + n_{-k\downarrow}) + \sum_{kk'} V(k, k') c_{k\uparrow}^\dagger c_{k'\downarrow}^\dagger c_{-k\downarrow} c_{k'\uparrow} \quad (3.1-12)$$

onde $\epsilon(k)$ é a energia cinética dos elétrons no estado de Bloch $|k\sigma\rangle$ e $V(k,k')$ o elemento de matriz da interação atrativa elétron-elétron responsável pela ocorrência da supercondutividade.

Como a junção é formada por dois supercondutores separados por uma camada de óxido, vamos designar H_L e H_R suas respectivas hamiltonianas BCS (3.1-12).

A seguir escrevemos a hamiltoniana de acoplamento $H_{L,R}$, que tem a propriedade de transferir pares de Cooper de um lado para outro da barreira. [C-2]

$$H_{LR} = -T \sum_{kq} (\sigma_{KL}^+ \sigma_{qR} + CC) \quad (3.1-13)$$

T é a integral de transferência, que supomos ser independente de K e σ são os operadores definidos anteriormente.

Podemos então calcular a corrente de tunelamento desde que J é o operador representando o fluxo de corrente do lado L para o lado R através da barreira isolante, dado por

$$J = -e \frac{dN_L}{dT} \quad (3.1-14)$$

Sendo que N_L representa o número de pares de elétrons do supercondutor do lado esquerdo da junção, isto é,

$$N_L = \frac{1}{2} \sum_k (C_k^+ C_k + C_{-k}^+ C_{-k}) \quad (3.1-15)$$

Recorremos, então, a relação

$$\dot{N}_L = \frac{i}{\hbar} [H, N_L] \quad (3.1-16)$$

e lembrando que H é dado por

$$H = H_L + H_R + H_{LR} \quad (3.1-17)$$

encontramos facilmente que

$$J = -\frac{ie}{\hbar} \sum_{kq} T(\sigma_{kL}^+ \sigma_{qR} - \sigma_{qL}^+ \sigma_{kR}) \quad (3.1-18)$$

Para calcular a corrente em primeira ordem em T, achamos o valor médio de J usando a função de onda $|\psi_0\rangle$ representando, uma parte do supercondutor com fase ψ_L à esquerda e, a outra com fase ψ_R à direita, ou melhor,

$$|\psi_0\rangle = |\psi_L\rangle \otimes |\psi_R\rangle \quad (3.1-19)$$

A corrente média então é dada por:

$$\begin{aligned} \langle \psi_0 | J | \psi_0 \rangle &= -\frac{ie}{\hbar} T \sum_{kq} \{ \langle \psi_L | \sigma_{kL}^+ | \psi_L \rangle \langle \psi_R | \sigma_{q-R} | \psi_R \rangle + CC \} \\ &= -\frac{ie}{\hbar} T \sum_{kq} \{ u_k v_k u_q v_q e^{i(\psi_L - \psi_R)} - CC \} \\ &= J_0 \text{sen}(\psi_L - \psi_R) \end{aligned} \quad (3.1-20)$$

onde

$$J_0 = \frac{2e}{\hbar} T \sum_{kq} (u_k v_k u_q v_q)$$

Obtemos uma corrente com o valor diferente de zero que é mantida entre os supercondutores, cujo máximo está em I_0 . Este é o famoso efeito DC. - Josephson.

Se a esta junção aplicarmos uma diferença de potencial, a área da junção comporta-se como um capacitor. O hamiltoniano associado a esta voltagem será

$$H_V = e V_0 (\sum_k \sigma_{zk} - \sum_q \sigma_{zq}) \tag{3.1-21}$$

sendo V_0 a voltagem e $\sum_k \sigma_{zk}$ o número de pares em excesso no lado esquerdo, e $\sum_q \sigma_{zq}$ para o lado direito. H_V nos dá a voltagem vezes o número de cargas em excesso no capacitor.

Quando levamos H_V para a representação de interação ela torna-se uma hamiltoniana não perturbada e afeta o estado inicial $|\psi_0\rangle$ de

$$\begin{aligned} \{ \exp(i H_V t / \hbar) \} |\psi_0\rangle &= \\ &= \exp\{ (ie V_0 t / \hbar) \sum_k \sigma_{zk} \} |\psi_L(0)\rangle \end{aligned} \tag{3.1-22}$$

O efeito do operador $\exp\{ (ie V_0 t / \hbar) \sum_k \sigma_{zk} \}$ é simplesmente introduzir $\exp(i e V_0 t / \hbar)$ se v_k ocorrer.

Podemos então recolocar $\psi_L(0)$ e $\psi_R(0)$ por $\psi_L(t)$ e $\psi_R(t)$ sendo

$$\psi_L(t) = \psi_L(0) - (e V_0 / \hbar) t$$

$$\psi_R(t) = \psi_R(0) - (e V_0 / \hbar) t$$

$$\psi_L(t) - \psi_R(t) = \psi_L(0) - \psi_R(0) - (2 e V_0 / \hbar) t \quad (3.1-23)$$

e chegar ao resultado de que $\langle J(t) \rangle$ é proporcional a $\sin(\psi_L(t) - \psi_R(t))$.

Pela equação (3.1-23) verificamos o aparecimento de uma corrente alternada com frequência $\omega = 2 e V_0 / \hbar$, este é o efeito AC-Josephson.

Portanto do fato de termos uma corrente alternada na junção, uma radiação com a mesma frequência é esperada.

(fig.)

3.2 Efeito Josephson por Generalização da Transformação de Bogoliubov

A representação da supercondutividade em termos das quasi-partículas de Bogoliubov-Valatin [B-3] [V-1] na sua forma original, não permite uma descrição do efeito Josephson como no parágrafo anterior, pois os estados das quasi-partículas não apresentam fatores de fase bem definido.

Como pudemos ver, o aparecimento da supercorrente se deve essencialmente à uma diferença de fase nas funções de onda dos supercondutores nos diferentes lados da junção Eq. (3.1-11).

Esta consideração nos leva a propor uma generalização simples e direta das Transformações de Bogoliubov-Valatin para obter os resultados da corrente de Josephson, sem recorrer a álgebra do pseudo-spin. No apêndice G apresentamos uma equivalência entre as duas representações.

Partindo da hamiltoniana efetiva total dada pela fórmula (3.1-17)

$$H = H_L + H_R + H_{RL} \quad (3.2-1)$$

e mais a Eq. (3.1-14)

$$J = -e \dot{N}_L \quad (3.2-2)$$

obtemos, da mesma forma, o valor explícito da corrente de tunelamento, isto é,

$$J = \frac{1}{i\hbar} T \sum_{kp} (b_{kL}^+ b_{pR} - b_{pR}^+ b_{kL}) \quad (3.2-3)$$

onde passamos a usar uma notação diferente dada por

$$b_{k\xi}^+ = c_{k+\xi}^+ c_{-k+\xi}^+ \quad (3.2-4)$$

$$b_{k\xi} = c_{-k+\xi} c_{k+\xi} \quad (3.2-5)$$

($\xi = R; L$)

que nos será mais conveniente.

Neste ponto nós introduzimos os operadores de quasi-partícula usuais de Bogoliubov dado por:

$$\begin{pmatrix} \alpha_k \\ \beta_k^+ \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_k & v_k \\ -v_k^* & u_k^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{k\uparrow} \\ c_{-k\uparrow}^+ \end{pmatrix}$$

com a condição

$$|u_k|^2 + |v_k|^2 = 1$$

$$u_k = \cos \theta_k$$

$$v_k = \text{sen } \theta_k$$

e verificamos que o efeito Josephson não aparece, desde que estes operadores não somam um fator de fase aos estados da quasi-partícula.

Para evitar esta objeção nos identificamos a matriz de transformação (2x2) de Bogoliubov (3.2-6) com a ma-

trix complexa (2x2) associada a rotação no espaço $R(3)$, isto é, nos identificamos u e v como sendo os coeficientes de Cayley-Klein [H-3] [G-3]

$$u_k = \exp\left(\frac{1}{2}i\psi_k\right) \cos\left(\frac{1}{2}\theta_k\right) \exp\left(\frac{1}{2}i\gamma_k\right)$$

$$v_k = \exp\left(-\frac{1}{2}i\psi_k\right) \sin\left(\frac{1}{2}\theta_k\right) \exp\left(-\frac{1}{2}i\gamma_k\right) \quad (3.2-7)$$

Nós encontramos que esta nova matriz de transformação satisfaz todas as condições de ortonormalização da antiga.

Quando substituímos $\psi = \gamma = 0$ para todo k , recuperamos a transformação usada para estudar os estados supercondutores. (Eq. 3.2-6)

Para tratar com tunelamento Josephson, nós propomos, então uma generalização simples dos operadores α e β , escolhendo nas Equações (3.2-7) $\gamma_k = 0$ e $\psi_k = \psi$ para todo k . Justamente como no formalismo do pseudo-spin, aparece no estado fundamental uma degenerescência por causa que nós obtemos estados fundamentais degenerados linearmente independente para diferentes valores de ψ .

A transformação é gerada pela matriz:

$$\begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} \cdot \exp\left(\frac{1}{2}i\psi\right) & \sin \frac{\theta}{2} \cdot \exp\left(\frac{1}{2}i\psi\right) \\ -\sin \frac{\theta}{2} \cdot \exp\left(\frac{1}{2}i\psi\right) & \cos \frac{\theta}{2} \cdot \exp\left(\frac{1}{2}i\psi\right) \end{pmatrix} \quad (3.2-8)$$

Aplicando esta nova transformação a equação (3.2-3)

da corrente, obtemos

$$\begin{aligned}
 J = \frac{4e}{i\hbar} T \sum_{kq} \{ & (u_{kL} \alpha_{kL}^+ - v_{kL}^* \beta_{kL}) \\
 & \cdot (u_{kL} \beta_{kL}^+ + v_{kL}^* \alpha_{kL}) \\
 & \cdot (u_{qR}^* \beta_{qR} + v_{qR} \alpha_{qR}^+) \\
 & \cdot (u_{qR}^* \alpha_{qR} - v_{qR} \beta_{qR}^*) \\
 & - c c) \} \quad (3.2-9)
 \end{aligned}$$

Para calcular o valor médio de J , usamos a função de onda do estado fundamental do sistema supercondutor dada por

$$\prod_k \alpha_k \beta_k |0\rangle = \prod_k (-u_k v_k - v_k^2 c_{-k}^+ c_k^+) |0\rangle$$

ou normalizada

$$|\psi_0\rangle = \prod_k (u_k + v_k c_k^+ c_{-k}^+) |0\rangle \quad (3.2-10)$$

com as propriedades

$$\alpha_k |\psi_0\rangle = 0$$

$$\beta_k |\psi_0\rangle = 0$$

obtemos então

$$\begin{aligned}
J = & \frac{4e}{i\hbar} T \sum_{kq} \left[v_{kL}^* u_{kL} u_{qR}^* v_{qR} \langle \psi_0^{R,L} | \beta_{kL} \beta_{kL}^+ \beta_{qR} \beta_{qR}^+ | \psi_0^{R,L} \rangle \right. \\
& \left. - v_{qR}^* u_{qR} u_{kL}^* v_{kL} \langle \psi_0^{R,L} | \beta_{qR} \beta_{qR}^+ \beta_{kL} \beta_{kL}^* | \psi_0^{R,L} \rangle \right]
\end{aligned}
\tag{3.2-11}$$

pois os termos restantes não contribuem para o valor da corrente.

Neste caso os valores médios dos produtos de operadores da equação acima são iguais a

$$\langle \psi_0^{R,L} | \beta_{kL} \beta_{kL}^+ \beta_{qR} \beta_{qR}^+ | \psi_0^{R,L} \rangle = 1$$

e conseqüentemente obtenho que

$$\begin{aligned}
\langle J \rangle = & \frac{4eT}{i\hbar} \sum_{kq} (v_{kL}^* u_{kL} u_{qR}^* v_{qR} - v_{qR}^* u_{qR} u_{kL}^* v_{kL}) = \\
= & \frac{4eT}{i\hbar} \sum_{kq} \sin \frac{1}{2} \theta_{kL} \cos \frac{1}{2} \theta_{kL} \sin \frac{1}{2} \theta_{qR} \cos \frac{1}{2} \theta_{qR} \left[e^{i(\psi_L - \psi_R)} - e^{-i(\psi_L - \psi_R)} \right]
\end{aligned}$$

rearranjando

$$\langle J \rangle = \frac{2eT}{\hbar} \sum_{kq} \sin \theta_{kL} \sin \theta_{qR} \sin (\psi_L - \psi_R)
\tag{3.2-12}$$

Esta é a bem conhecida fórmula do efeito DC-Josephson; na mesma linha podemos derivar o efeito AC-Josephson.

Em conclusão nós mostramos que estes efeitos e que

tões correlatas podem ser estudadas dentro do esquema da des
crição das quasi-partículas de Bogoliubov dos estados super-
condutores.

3.3 Possível Tunelamento numa Junção de Semicondutores Saturados

Galitskii [G-2] mostrou a possibilidade de existir uma corrente de tunelamento através de uma junção semicondutor-semicondutor saturado. A corrente através de tal junção é dada de acordo com a teoria fenomenológica para tunelamento em junções. [D-1]

Inspirado nestas afirmações, mostramos que se há uma analogia do nosso sistema com o dos supercondutores, há então a possibilidade do aparecimento de uma corrente numa junção semicondutor saturado-saturado, tipo efeito Josephson (visto nos parágrafos anteriores).

Além disso, para reforçar nossa motivação vimos no cap. 1-2, que esta fase saturada é estável e apresenta um gap. A maneira mais adequada de estudar este gap, como dado por Falicov [D-1], é utilizando experimentos que envolvem tunelamento.

Inicialmente lembramos que a forma da quasi-partícula quando estamos na fase saturada, isto é, com a condição de que $0 < \omega - E_g \ll E_g$ sendo a frequência da luz cuja intensidade é muito forte, é definido usando o modelo de dois níveis, e dada por analogia aos pares de Cooper na supercondutividade, isto é: o par supercondutor é ligado por uma interação via fonon, e no nosso sistema admitimos que o par elétron-buraco é ligado via radiação forte. A diferença com os supercondutores é que no nosso caso o agente é externo.

Utilizando a formação dessa quasi-partícula podemos supor que exista dois estados possíveis, vide (3.1-4)

e (3.1-5), notação pseudo-spin

$$|\text{vazio}\rangle_k = |0\rangle_k$$

$$|\text{cheio}\rangle_k = c_k^+ h_{-k}^+ |0\rangle_k \quad (3.3-1)$$

isto é, um estado que tenha os pares elétrons-buracos ligados e o outro a ausência desse par.

Com a definição desses estados podemos introduzir no nosso sistema saturado todo o formalismo utilizado no parágrafo anterior.

Como estamos querendo obter o efeito de tunelamento do par numa junção de semicondutores saturados, vamos agora formalizar esta experiência, definindo a situação experimental.

Uma junção de semicondutores é iluminada por um laser intenso, isto levará os semicondutores ao estado saturado e a este sistema chamaremos de junção de semicondutores saturados.

Neste sistema podemos supor que apareça um tunelamento mas essencialmente de transferência do par, isto é, a destruição de um par no lado esquerdo da junção, induz a formação de outro no lado direito da barreira.

Vamos então estudar esta transferência de par sob a forma de tunelamento, usando o mesmo artifício usado no 3.3-2, isto é, calcular a valor médio da razão de mudança do número dos pares de elétron x buraco.

A hamiltoniana do sistema saturado é dada na forma mais simples por [G-1]:

$$H_0 = \sum_p \{ \xi(p) (c_p^+ c_p + h_{-p}^+ h_{-p}) + \lambda(p) (c_p^+ h_{-p}^+ + h_{-p} c_p) \} \quad (3.3-2)$$

sendo

$$\xi(p) = \frac{p^2 - p_0^2}{2m} \quad ; \quad \frac{p_0^2}{2m} = \frac{\omega - \Delta}{2}$$

A hamiltoniana que representa a transferência do par de um lado para outro é dada por

$$H_t = \sum_{kq\sigma} \{ T_{kq} (c_{kL}^+ h_{-kL}^+ h_{-qR} c_{qR} + h_{-kL} c_{kL} c_{qR}^+ h_{-qR}^+) \} \quad (3.3-3)$$

onde L e R representam o semiconductor a esquerda e a direita respectivamente.

Lembre que T_{kq} relaciona os estados $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ com estado $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, como em supercondutores.

Seguindo o método apresentado no parágrafo anterior calculamos a transferência de pares pela fórmula.

$$i \hbar \dot{N}_L = [N_L, H] \quad (3.3-4)$$

sendo

$$N_L = \sum_p (c_{pL}^+ c_{pL} + h_{-pL}^+ h_{-pL})$$

Esta equação nos dá a variação dos elétrons e buracos do lado L.

Resolvendo o comutador da equação (3.3-4)

$$\begin{aligned}
 [N_L, H] &= [N_L, H_0 + H_t] = \\
 &= \sum_k 2\lambda (c_{kL}^+ h_{-kL}^+ - h_{-k} \epsilon_k) + \\
 &+ \sum_{kq} 2T (c_{qR}^+ h_{-qR}^+ h_{-kL} c_{kL} - c_{kL}^+ h_{kL}^+ h_{-qR} c_{qR})
 \end{aligned}$$

e aplicando a transformação (3.2-6) onde

$$\begin{pmatrix} \alpha_k \\ \beta_{-k}^+ \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_k & v_k \\ -v_k^* & u_k^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_k \\ h_{-k}^+ \end{pmatrix}$$

$$e \quad u_k = \exp\left(\frac{i}{2} \phi\right) \cos \frac{\theta}{2}_k$$

$$v_k = \exp\left(-\frac{i}{2} \phi\right) \sin \frac{\theta}{2}_k$$

obtemos a corrente J dada por

$$\begin{aligned}
 \langle J \rangle &= -\frac{4e}{i\hbar} T \sum_{kq} \{ (v_k^* u_{kL} u_{qR}^* v_{qR}) \langle \psi_{OS}^{LR} | \beta_{LK}^+ \beta_{LK}^+ \beta_{Rq}^+ \beta_{Rq}^+ | \psi_{OS}^{LR} \rangle - \\
 &- v_{Rq}^* u_{Rq} u_{kL}^* v_{kL} \langle \psi_{OS}^{LR} | \beta_{Rq}^+ \beta_{Rq}^+ \beta_{LK}^+ \beta_{LK}^+ | \psi_{OS}^{LR} \rangle
 \end{aligned}$$

onde identificamos (pela equação (3.2-10) a função de onda da fase saturada por

$$|\psi_{OS}^\xi\rangle = \prod_{k\xi} [u_{k\xi} + v_{k\xi} c_{k\xi}^+ h_{-k\xi}^+] |0\rangle$$

$$\xi = R; L$$

Com isto obtemos os valores médios de J que nos dá a expressão

$$\langle J \rangle = \frac{2eT}{\hbar} \sum_{kq} \text{sen}\theta_{kL} \text{sen}\theta_{qR} \text{sen}(\psi_L - \psi_R)$$

Verificamos que este formalismo nos permite a formação de uma corrente de tunelamento na junção saturada análoga aquela dada por Josephson.

O processo que pode aparecer nesta junção é diferente, pois a destruição de um par ($e \times h$) acarreta o tunelamento de energia de um lado para o outro, e consequentemente a transferência dos pares.

APÊNDICE A

Neste apêndice mostramos que a partir do hamiltoniano da interação elétron-buraco x foton obtemos o da interação elétron-buraco x elétron-buraco por eliminação das variáveis de ftons.

Para tal, consideramos o hamiltoniano elétron-buraco x foton em termos dos operadores de criação e destruição, isto é

$$H_2 = \sum_{p\lambda} \Gamma_{\lambda p} (a_{\lambda} c_p^+ h_{-p}^+ + a_{-\lambda}^+ h_{-p} c_p) \tag{A-1}$$

onde

$\Gamma_{\lambda p}$ - elemento de matriz da interação

e a e a^+ são os operadores de ftons.

O hamiltoniano total dos elétrons, buracos e ftons é dada por

$$H_0 = \sum_p (\epsilon_p^e - \mu_e) c_p^+ c_p + (\epsilon_p^h - \mu_h) h_{-p}^+ h_{-p} + \sum_{\lambda} \hbar \Omega_{\lambda} a_{\lambda}^+ a_{\lambda} \tag{A-2}$$

$$H_1 = \frac{1}{2} \sum_{pp'k} V(k) [(c_p^+ c_{p'}^+ c_{p'+k} c_{p-k} + h_{-p}^+ h_{p'}^+ h_{p'-k} h_{p-k})] - 2 \sum_{pp'k} c_p^+ h_{-p'}^+ h_{-p'+k} c_{p-k} \tag{A-3}$$

Agora fazemos a transformação canônica

$$\tilde{H} = e^{-S} H e^S = H + [H, S] + \frac{1}{2} [[H, S]; S] + \dots \tag{A-4}$$

$$H = H_0 + H_1 + H_2$$

e imponho a condição

$$|H_0, S| + |H_1, S| + H_2 = 0 \tag{A-5}$$

e supondo que

$$S = \sum_{q\lambda} D_{q\lambda} (A a_{\lambda} C_q^{+h+} - B a_{\lambda}^{+h-} C_q) \tag{A-6}$$

onde A e B são coeficientes a determinar de modo a satisfazer (A-5).

Obtemos para A e B os valores

$$A = \frac{-\Gamma_{\lambda p}}{D_{p\lambda} \{[(\epsilon_e^p - \mu_e) + (\epsilon_h^f - \mu_h)] - h\Omega\}} \tag{A-7}$$

$$B = \frac{-\Gamma_{\lambda p}}{D_{p\lambda} \{[(\epsilon_e^p - \mu_e) + (\epsilon_h^f - \mu_h)] + h\Omega\}}$$

então

$$S = \sum_{p\lambda} \Gamma_{\lambda p} \left[\left\{ \frac{\alpha_{\lambda} C_p^{+h+}}{(\epsilon_e^p - \mu_e) + (\epsilon_h^D - \mu_h) - h\Omega} \right\} - \left\{ \frac{\alpha_{\lambda}^{+h-} C_p}{(\epsilon_e^p - \mu_e) + (\epsilon_h^D - \mu_h) + h\Omega} \right\} \right] \tag{A-9}$$

Voltando a fórmula (A-4) e examinando particularmente o conjunto que aparece da comutação dos operadores de fo-

$$\tilde{H} = H_0 + H_1 + \frac{1}{2} \sum_{\lambda} \frac{\Gamma_{(p-k)\lambda} \Gamma_{\lambda p}}{R_{\lambda}^k [(\epsilon_e^p - \mu_e) + (\epsilon_h^p - \mu_h)]^2 - [\hbar\Omega]^2} C_{p-h}^{+} C_{h-p+k} C_{p+k} \quad (A-10)$$

Da expressão acima (A-10) vemos que a interação entre os elétrons e buracos será atrativo quando

$$[(\epsilon_e^p - \mu_e) + (\epsilon_h^p - \mu_h)] < \hbar\Omega$$

a menos de termos de probabilidade como (1.4-8).

APENDICE B

a) Cálculo do $\text{Tr} [\exp (-\beta \bar{H})]$

$$\begin{aligned} \text{Tr}(e^{-\beta \bar{H}}) &= e^{-\beta N_0} \text{tr}_p e^{-\beta \sum_p (W(p) c_p^+ c_p + K(p) h_{-p}^+ h_{-p})} \\ &= e^{-\beta N_0} \sum_{n_1 \dots n_\infty} \langle n_1 \dots n_\infty | e^{-\beta \sum_p (W(p) \langle c_p^+ c_p \rangle + K(p) \langle h_{-p}^+ h_{-p} \rangle)} | n_1 \dots n_\infty \rangle \end{aligned}$$

isto é igual ao produto dos traços

$$= e^{-\beta N_0} \prod_p \{ \text{Tr} \exp [-\beta W(p) \langle c_p^+ c_p \rangle] \cdot \text{Tr} \exp [-\beta K(p) \langle h_{-p}^+ h_{-p} \rangle] \}$$

$$= e^{-\beta N_0} \prod_p (1 + e^{-\beta W(p)}) (1 + e^{-\beta K(p)}) \quad (1-B)$$

b) Cálculo de $\ln [\text{Tr} \exp(-\beta \bar{H})]$

$$\ln [\text{Tr} \exp(-\beta \bar{H})] = \ln \left\{ e^{-\beta N_0} \prod_p (1 + e^{-\beta W(p)}) (1 + e^{-\beta K(p)}) \right\} =$$

$$= \ln e^{-\beta N_0} + \sum_p \ln(1 + e^{-\beta W(p)}) + \ln(1 + e^{-\beta K(p)}) =$$

$$= \beta N_0 - \sum_p \{ \ln(1 - \eta_w)(1 - \eta_k) \} \quad (2-B)$$

onde identifico por (Apêndice C)

$$\eta_v = \frac{1}{e^{\beta E_v} + 1} \quad ; \quad 1 - \eta_v = \frac{1}{e^{-\beta E_v} + 1}$$

valendo a relação

$$e^{\beta E_v} = \frac{L - \eta_v}{\eta_v} \quad (3-B)$$

Explicitando βN_0

$$\begin{aligned}
 \beta N_0 &= \left\{ 2 \left[\frac{(\epsilon_p^e - \mu_e) + (\epsilon_p^h - \mu_h)}{2} \right] v_p^2 - 2 \Delta_p v_p u_p \right\} \beta \\
 &= \left\{ 2 \eta \left[\frac{1}{2} \left(1 - \frac{\xi}{\epsilon} \right) \right] - 2 \Delta \frac{1}{2} \frac{\Delta}{\epsilon} \right\} \\
 &= \eta \left[\frac{\epsilon - \xi}{\epsilon} \right] - \frac{\Delta^2}{\epsilon} = \eta - \frac{\eta \xi}{\epsilon} - \frac{\Delta^2}{\epsilon} \\
 &= \eta - \frac{\xi^2 - \Delta^2}{\epsilon} = (\eta - \epsilon) \tag{4-B}
 \end{aligned}$$

portanto obtenho que

$$\ln [\text{Tr exp}(-\beta \bar{H})] = (\eta - \epsilon) - \sum_p \ln (1 - \eta_w)(1 - \eta_k) \tag{5-B}$$

c) Cálculo $\langle H - \bar{H} \rangle$

$$\begin{aligned}
 \langle H - \bar{H} \rangle &= \sum_p \langle (M(p) - W(p)) \alpha_p^+ \alpha_p \rangle + \\
 &\quad + \langle (G(p) - K(p)) \beta_{-p}^+ \beta_{-p} \rangle + (\psi_0 - N_0)
 \end{aligned}$$

i) $(M(p) - W(p)) =$

$$\begin{aligned}
 &= - \sum_q V(q) v_{p-q}^2 (u_p^2 - v_p^2) + 2 u_p v_p \left[\lambda(p) - \sum_q V(q) u_{p-q} v_{p-q}^{-\Delta_p} \right] \\
 &= - \sum_q V(q) v_{p-q}^2 (u_p^2 - v_p^2) + \left\{ \frac{\Delta(p)}{\epsilon} \lambda(p) - \sum_q V(q) \frac{\Delta_{p-q}}{2\epsilon_{p-q}} \cdot \frac{\Delta_p}{\epsilon_p} - \frac{\Delta_p^2}{\epsilon_p} \right\}
 \end{aligned}$$

ii) $(G(p) - K(p)) = (M(p) - W(p))$

$$\text{iii) } (\psi_0 - N_0) =$$

$$= -2 \sum_q V(q) v_{p-q}^2 v_p^2 + 2u_p v_p (\lambda(p) - \sum_q V(q) u_{p-q} v_{p-q} - \Delta_p)$$

$$= -2 \sum_q V(q) v_{p-q}^2 v_p^2 + \left\{ \frac{\Delta_p}{\epsilon_p} \lambda_p - \sum_q V(q) \frac{\Delta_{p-q}}{2\epsilon_{p-q}} \cdot \frac{\Delta_p}{\epsilon_p} - \frac{\Delta_p^2}{\epsilon_p} \right\}$$

portanto

$$= \left\{ -\frac{\Delta_p}{\epsilon_p} \lambda_p + \sum_q V(q) \frac{\Delta_{p-q}}{2\epsilon_{p-q}} \cdot \frac{\Delta_p}{\epsilon_p} + \frac{\Delta_p^2}{\epsilon_p} \right\} (1 - \langle \alpha_p^+ \alpha_p \rangle - \langle \beta_{-p}^+ \beta_p \rangle)$$

$$- \sum_q V(q) v_{p-q}^2 (u_p^2 - v_p^2) \{ \langle \alpha_p^+ \alpha_p \rangle + \langle \beta_{-p}^+ \beta_p \rangle \} -$$

$$- 2 \sum_q V(q) v_{p-q}^2 v_p^2$$

ou

$$= \left\{ -\frac{\Delta_p \lambda_p}{\epsilon_p} + \sum_q V(q) \frac{\Delta_{p-q}}{2\epsilon_{p-q}} \cdot \frac{\Delta_p}{\epsilon_p} + \frac{\Delta_p^2}{\epsilon_p} \right\} (1 - \eta_\alpha - \eta_\beta) -$$

$$- \frac{1}{4} \sum_q V(q) \left[1 - \frac{\epsilon_{p-q}}{\epsilon_{p-q}} \right] \left[1 - \frac{\epsilon_p}{\epsilon_p} \right] (1 - \eta_\alpha - \eta_\beta) +$$

$$+ \frac{1}{4} \sum_q V(q) \left[1 - \frac{\epsilon_{p-q}}{\epsilon_{p-q}} \right] \left[1 + \frac{\epsilon_p}{\epsilon_p} \right] (\eta_\alpha + \eta_\beta)$$

$$\left\{ -\frac{\Delta_p \lambda_p}{\epsilon_p} + \frac{2\Delta_p^2}{\epsilon_p} \right\} (1 - \eta_\alpha^p - \eta_\beta^p)$$

desprezamos os dois últimos termos pois eles envolvem quadradinhos de v^2 e u^2 que são nada mais que probabilidades.

APÊNDICE C

a) Cálculo da função distribuição η_α e η_β

Podemos obter a função distribuição a partir da minimização da energia livre do sistema dada por

$$F = E - TS \quad (1-C)$$

sendo

$$E = \psi_0 + \sum_p \{M(p) \langle \alpha_p^+ \alpha_p \rangle + G(p) \langle \beta_{-p}^+ \beta_{-p} \rangle\}$$

T - temperatura

S - entropia

Vamos introduzir primeiramente o modelo de partícula livres e identificar a entropia desse sistema como (dada pela fórmula (5-B) após manipulações algébricas)

$$TS = -K_B T \sum_p \{n_\alpha^p \ln n_\alpha^p + (1-n_\alpha^p) \ln (1-n_\alpha^p) + n_\beta^p \ln n_\beta^p + (1-n_\beta^p) \ln (1-n_\beta^p)\}$$

e conseqüentemente

$$F = \psi_0 + \sum_p \{M(p) n_\alpha^p + G(p) n_\beta^p\} - TS$$

Posso então derivar F em relação a η_α^p e η_β^p e obter

$$\frac{\partial F}{\partial \eta_{\alpha}^p} = M(p) - K_B T \{ \ln \eta_{\alpha}^p - \ln (1 - \eta_{\alpha}^p) \}$$

$$\frac{\partial F}{\partial \eta_{\beta}^p} = G(p) - K_B T \{ \ln \eta_{\beta}^p - \ln (1 - \eta_{\beta}^p) \}$$

igualando a zero as duas expressões anteriores, obtenho

$$M(p) = K_B T \ln \left(\frac{\eta_{\alpha}^p}{1 - \eta_{\alpha}^p} \right)$$

$$G(p) = K_B T \ln \left(\frac{\eta_{\beta}^p}{1 - \eta_{\beta}^p} \right)$$

usando que

$$\frac{\eta_E}{1 - \eta_E} = e^{E\beta}$$

obtenho

$$\eta_E = \frac{1}{1 + e^{E\beta}}$$

ou

$$\eta_{\alpha}^p = \frac{1}{1 + e^{M(p)\beta}} \quad ; \quad \eta_{\beta}^p = \frac{1}{1 + e^{G(p)\beta}}$$

APÊNDICE D

LINEARIZAÇÃO DAS EQUAÇÕES DE MOVIMENTO

A equação de movimento completa de ρ_{ke}^Q é dada por

$$\begin{aligned}
 [H, \rho_{ke}^Q] &= [H, c_{k+Q}^+ c_k] = \\
 &= \{E_e(k+Q) - E_e(k)\} c_{k+Q}^+ c_k + \lambda(k+Q) h_{-k-Q} c_k - \lambda(k) c_{k+Q}^+ h_{-k}^+ + \\
 &+ \sum_{pq} V(q) \{c_{k+Q+q}^+ c_p^+ c_{p+q} c_k - c_{k+Q}^+ c_p^+ c_{p-q} c_{k+q} + \\
 &+ c_{k+Q+q}^+ h_p^+ h_{p+q} c_k - c_{k+Q}^+ h_p^+ h_{p-q} c_{k+q}\} \quad (D-1)
 \end{aligned}$$

Podemos identificar nesta equação após a linearização os seguintes termos:

$$[H, \rho_{ke}^Q] = \underline{\text{cinético}} + \underline{\text{direto}} + \underline{\text{auto energia de exchange}} + \underline{\text{espalhamento de exchange}} + \underline{\text{estado saturado}}$$

O termo da energia cinética é simplesmente dado por

$$[H_c, \rho_{ke}^Q] = \{E_e(k-Q) - E_e(k)\} \rho_{ke}^Q \quad (D-2)$$

Os termos diretos, são aqueles que resultam diretamente da interação com as componentes da flutuação da densidade de elétron de momento Q.

Impondo que $Q = q$ nos quatro últimos termos da equação D-1 obtemos

$$[H_D, \rho_{ke}^Q] = V(Q) (\eta_{k+Q}^e - \eta_k^e) (\rho_e - \rho_h)$$

onde

$$\rho_e = \sum_Q c_{k+Q}^+ c_k \quad ; \quad \rho_h = \sum_Q h_{k+Q}^+ h_k$$

$$\eta_k^e = \langle c_k^+ c_k \rangle$$

O termo de auto energia de exchange vem do termo co
mum de exchange

$$[H_{\text{auto}}, \rho_{ke}^Q] = - \rho_{ke}^Q \left(\sum_p V(p-k) \eta_{p+Q}^e + \sum_p V(p-k) \eta_p^e \right)$$

Os termos de espalhamento de exchange são dados por

$$[H_{\text{exc}}, \rho_{ke}^Q] = - (\eta_k^e - \eta_{k+Q}^e) \left(\sum_p V(p-k) \rho_{pe}^Q \right)$$

e finalmente os termos das quasi-partículas do estado satura-
do

$$\begin{aligned} [H_S, \rho_{ke}^Q] &= (\lambda(k+Q) - \sum_p V(p-k) \bar{b}_{p+Q}^Q) b_k^Q - \\ &\quad - (\lambda(k) - \sum_p V(p-k) b_p) \bar{b}_k^Q \\ &\quad + a_k \left(\sum_p V(p-k) \bar{b}_p^Q \right) - \bar{\lambda}_{k+Q} \left(\sum_p V(p-k) b_p^Q \right) \end{aligned}$$

sendo

$$a_k \equiv \langle h_{-k} c_k \rangle$$

$$b_k^Q = h_{-k-Q} c_{k+Q}$$

As demais equações, são escritas diretamente no texto sem maiores explicações, pois, a forma de linearização é idêntica a esta exposta.

APÊNDICE E

RESOLUÇÃO DA EQUAÇÃO MATRICIAL (2.2-16)

Para não estendermos demais os cálculos apresentamos aqui, as passagens básicas para o entendimento da transformação.

Inicialmente fazemos o produto da primeira linha da matriz de transformação com a matriz coluna dos comutadores dos operadores antigos.

$$\begin{aligned}
& u_{k+Q} u_k [H, \rho_{ke}^Q] - v_{k+Q} u_k [H, \rho_{kh}^Q] - v_{k+Q} u_k [H, b_k^Q] - \\
& - u_{k+Q} v_k [H, \bar{b}_k^Q] = \text{Termo } A_{11} \text{ do Produto} \quad (E-1)
\end{aligned}$$

Abrindo esse produto e agrupando os termos de variáveis iguais, obtemos:

$$\begin{aligned}
& \{ u_{k+Q} u_k (\bar{E}_{k+Q}^e - \bar{E}_k^e) + v_{k+Q} u_k \Delta_{k+Q} - u_{k+Q} v_k \Delta_k \} \rho_{ke}^Q + \\
& \{ -v_{k+Q} v_k (\bar{E}_k^h - \bar{E}_{k+Q}^h) + v_{k+Q} u_k \Delta_k - u_{k+Q} v_k \Delta_{k+Q} \} \rho_{kh}^Q + \\
& \{ -u_{k+Q} u_k \Delta_{k+Q} + v_{k+Q} v_k \Delta_k + v_{k+Q} u_k (\bar{E}_k^e + \bar{E}_{k+Q}^h) \} b_k^Q + \\
& \{ u_{k+Q} u_k \Delta_k - v_{k+Q} v_k \Delta_{k+Q} - u_{k+Q} v_k (\bar{E}_k^h + \bar{E}_{k+Q}^e) \} \bar{b}_k^Q + \\
& + v_D(Q) \rho(Q) \{ -u_{k+Q} u_k (\eta_{k+Q} - \eta_k) - v_{k+Q} v_k (\eta_{k+Q} - \eta_k) + \\
& + v_{k+Q} u_k (a_k + a_{k+Q}) - u_{k+Q} v_k (a_k - a_{k+Q}) \} +
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & + \{u_{k+Q} u_k a_k - v_{k+Q} v_k a_{k+Q} - u_{k+Q} v_k (1 - \eta_k - \eta_{k+Q})\} \sum_p V(p-k) b_k^{-Q} + \\
 & + \{-u_{k+Q} u_k b_{k+Q} + v_{k+Q} v_k b_k + v_{k+Q} u_k (1 - \eta_k - \eta_{k+Q})\} \sum_p V(p-k) b_k^Q = A_{11}
 \end{aligned}$$

Vamos a seguir mostrar que os três últimos termos dessa soma são iguais a zero.

Em primeiro posso reescrever o quinto termo como

$$\begin{aligned}
 & \{-u_{k+Q} u_k (v_{k+Q}^2 - v_k^2) - v_{k+Q} v_k (v_{k+Q}^2 - v_k^2) - \\
 & - v_{k+Q} u_k (u_k v_k + u_{k+Q} v_{k+Q}) + u_{k+Q} v_k (u_k v_k + u_{k+Q} v_{k+Q})\} V(Q) \rho(Q)
 \end{aligned}$$

usando o fato de que o estado fundamental das quasi-partículas é tal que

$$a_k = a_k^* = u_k v_k > 0$$

$$\eta_k = v_k^2 \quad (E-4)$$

Desenvolvendo (E-3) encontramos que

$$\begin{aligned}
 & (-v_{k+Q}^3 v_k + v_{k+Q} v_k^3 + v_{k+Q} v_k u_k^2 - u_{k+Q}^2 v_k v_{k+Q}) V(Q) \rho(Q) = \\
 & = v_{k+Q} v_k \{-(v_{k+Q}^2 + u_{k+Q}^2) + (v_k^2 + u_k^2)\} = \\
 & = v_{k+Q} v_k \{-1+1\} = 0
 \end{aligned}$$

Do mesmo modo usando as fórmulas (E-4) escrevo os dois últimos termos da equação (E-2) como

$$u_k v_k u_{k+Q} u_k^{-v_{k+Q} v_k u_{k+Q} v_{k+Q}^{-u_{k+Q} v_k (1-v_k^2 - v_{k+Q}^2)} = 0$$

e

$$-u_{k+Q} u_k u_{k+Q} v_{k+Q} + v_{k+Q} v_k u_k v_k + (1-v_k^2 - v_{k+Q}^2) v_{k+Q} u_k = 0$$

A seguir fazemos a transformação dos operadores ρ_k^Q , ρ_{ke}^Q , ρ_{kh}^Q , b_k^Q e \bar{b}_k^Q para a nova representação (2.2-15) e substituímos em (E-3). Esta operação resulta no aparecimento dos novos operadores $\alpha_{k+Q}^+ \alpha_k$, $\beta_{k+Q} \beta_k^+$, $\alpha_{k+Q}^+ \beta_k^+$ e $\beta_{k+Q} \alpha_k$ tendo cada um quatro coeficientes.

Por simplicidade, vamos mostrar os coeficientes de $\alpha_{k+Q}^+ \alpha_k$

$$\begin{aligned} & \{ u_{k+Q}^2 u_k^2 (\bar{E}_{k+Q}^e - \bar{E}_k^e) + v_{k+Q}^2 u_k u_{k+Q} \Delta_{k+Q} - u_{k+Q}^2 v_k u_k \Delta_k + \\ & + v_{k+Q}^2 v_k^2 (\bar{E}_k^h - \bar{E}_{k+Q}^h) - v_{k+Q}^2 u_k v_k \Delta_k + u_{k+Q}^2 v_k^2 v_{k+Q} \Delta_{k+Q} - \\ & - u_{k+Q}^2 u_k^2 v_{k+Q} \Delta_{k+Q} - v_{k+Q}^2 v_k u_k \Delta_k - v_{k+Q}^2 u_k^2 (\bar{E}_k^e + \bar{E}_{k+Q}^h) + \\ & + u_{k+Q}^2 u_k v_k \Delta_k + v_{k+Q}^2 v_k u_{k+Q} \Delta_{k+Q} + u_{k+Q}^2 v_k^2 (\bar{E}_k^h + \bar{E}_{k+Q}^e) \} \alpha_{k+Q}^+ \alpha_k \end{aligned}$$

trabalhando um pouco com estes coeficientes chegamos a

$$\begin{aligned} & \{-2 v_k u_k \Delta_k + 2 v_{k+Q} u_{k+Q} \Delta_{k+Q} + u_{k+Q}^2 u_k^2 (\bar{E}_k^e + \bar{E}_{k+Q}^h) + \\ & + v_{k+Q}^2 v_k^2 (\bar{E}_k^h - \bar{E}_{k+Q}^h) - v_{k+Q}^2 u_k^2 (\bar{E}_k^e + \bar{E}_{k+Q}^h) + \\ & + u_{k+Q}^2 v_k^2 (\bar{E}_k^h + \bar{E}_{k+Q}^e) \} \alpha_{k+Q}^+ \alpha_k \end{aligned}$$

Isto nos leva a um resultado simples dado por

$$\begin{aligned} & \left\{ (u_{k+Q}^2 \bar{E}_{k+Q}^e - v_{k+Q}^2 \bar{E}_{k+Q}^h + 2 u_{k+Q} v_{k+Q} \Delta_{k+Q}) - \right. \\ & \left. - (u_k^2 \bar{E}_k^e - v_k^2 \bar{E}_k^h + 2 u_k v_k \Delta_k) \right\} \alpha_{k+Q}^+ \alpha_k \end{aligned}$$

ou

$$(w_{k+Q}^- - w_k^-) \alpha_{k+Q}^+ \alpha_k$$

Portanto recuperamos o resultado

$$[H, \alpha_{k+Q}^+ \alpha_k] = (w_{k+Q}^- - w_k^-) \alpha_{k+Q}^+ \alpha_k$$

dado em (2.2-17).

Os outros resultados (2.2-18) (2.2-19) (2.2-20) são obtidos nesta mesma linha de cálculo.

APÊNDICE F

Demonstração da fórmula (2.3-1)

$$\text{Im} [\epsilon(Q, \Omega)]^{-1} = \frac{1}{\pi} V(Q) \langle \rho(Q)^+, \rho(Q) \rangle_w$$

Vamos demonstrar a fórmula (2.3-1) para sistema de elétrons e generalizar para o problema de N-corpos.

A hamiltoniana eletrônica com interação coulombiana com uma carga de teste ($e r_q$) $[e^{-i(\Omega t + \vec{q} \cdot \vec{r})} + \text{cc}]$ é dada por

$$H = \sum_i \frac{p_i^2}{2m} + \sum_q V(q) (\rho_q^+ \rho_q - \text{cc}) + \\ + V(q) \rho_{-q} r_q e^{-i\Omega t + i\vec{q} \cdot \vec{r}}$$

Usando o método de Nozière-Pines introduzido no cap. 2 tiramos que a constante dielétrica deste sistema é dada por

$$\frac{1}{\epsilon(Q, \Omega)} = 1 - V(Q) \sum_n |\langle n | \rho_Q | 0 \rangle|^2 \left\{ \frac{1}{\Omega + w_{n0} + i\eta} + \frac{1}{-\Omega + w_{n0} - i\eta} \right\}$$

Usando a relação

$$\lim_{\eta \rightarrow 0} \frac{1}{x \pm i\eta} = P \frac{1}{x} \mp i\pi \delta(x)$$

obtemos que a parte imaginária da constante dielétrica é dada por:

$$\text{Im} \left(\frac{1}{\epsilon(Q, \Omega)} \right) = V(Q) \sum_n |\langle n | \rho_Q | 0 \rangle|^2 (\delta(\Omega + w_{n0}) - \delta(\Omega - w_{n0}))$$

Integramos sobre todas as frequências ,

$$\int_0^{\infty} d\Omega \operatorname{Im} \left(\frac{1}{\epsilon(\Omega, Q)} \right) = -V(Q) \sum_n |\langle n | \rho_q | 0 \rangle|^2 =$$

$$= -V(Q) \langle 0 | \rho_q^+ \rho_q | 0 \rangle$$

e fazemos a transformada de Fourier obtemos

$$\operatorname{Im} |\epsilon(\Omega, Q)|^{-1} = \frac{1}{\pi} V(Q) \langle \rho(Q)^+ \rho(Q) \rangle_w$$

que é válida para qualquer problema de N-corpos [K-1].

APÊNDICE G

EQUIVALÊNCIA DO FORMALISMO DO PSEUDO-SPIN
E DA QUASI-PARTÍCULA

Consideremos os dois estados mecânicos quânticos $|k\uparrow\rangle$ e $| -k\downarrow\rangle$ e os operadores,

$$c_{k\uparrow}; c_{-k\downarrow}; c_{k\uparrow}^+; c_{-k\downarrow}^+ \quad (1-D)$$

de aniquilação e criação de um elétron naqueles estados.

Costumamos então definir os operadores do pseudo-spin

$$S_k^+ = c_{k\uparrow}^+ c_{-k\downarrow}$$

$$S_{\vec{k}}^- = c_{-\vec{k}\downarrow} c_{\vec{k}\uparrow} \quad (2-D)$$

$$S_{o\vec{k}} = \frac{1}{2} (c_{\vec{k}\uparrow}^+ c_{\vec{k}\uparrow} - c_{-\vec{k}\downarrow} c_{-\vec{k}\downarrow}^+)$$

Coms estes operadores Anderson [A-5] mostrou que a hamiltoniana é equivalente a aquela do sistema de spins na presença de um campo magnético mais um termo anisotrópico de exchange.

Para resolver esta versão magnética do problema ele usou a aproximação do campo molecular, e então roda cada pseudo-spin K por um ângulo θ entorno do eixo y (tal que o novo operador $S_{o\vec{k}}$ permanece no plano xz e faz um ângulo θ_k com o velho $S_{o\vec{k}}$). As três componentes do pseudo-spin rodado

S_k pode ser expresso em termos dos operadores de Bogoliubov α_k , α_k^+ , β_{-k} e β_{-k}^+ na mesma linha que as componentes iniciais do pseudo-spin S_k são expressas em termos dos operadores (2-D).

Em particular, a hamiltoniana transformada é a soma dos termos proporcionais a \tilde{S}_{ok} .

Aqui, nós provaremos que a mesma relação vale para os operadores de Bogoliubov mais gerais α e β definidos por (3.2-6). Em vez da simples rotação discutida acima (3.2-8) gera uma rotação descrita por: primeiro roda ψ entorno de z e então θ entorno do novo eixo y . Os componentes do pseudo-spin rodado são então

$$\begin{aligned}\tilde{S}_{ok} &= \cos\theta_k S_{ok} + \text{sen}\theta_k \cos\psi_k S_x + \text{sen}\theta_k \text{sen}\psi_k S_y \\ \tilde{S}_{xk} &= -\text{sen}\theta_k S_{ok} + \cos\theta_k \cos\psi_k S_x + \cos\theta_k \text{sen}\psi_k S_y \\ \tilde{S}_{yk} &= -\text{sen}\psi_k S_x + \cos\psi_k S_y\end{aligned}\quad (3-D)$$

onde é usado que

$$\begin{aligned}\tilde{S}_x &= \frac{1}{2} (\tilde{S}^+ + \tilde{S}^-) \\ \tilde{S}_y &= \frac{i}{2} (\tilde{S}^- - \tilde{S}^+)\end{aligned}\quad (4-D)$$

para que a rotação tenha uma forma mais usual.

Mudando para \tilde{S}^+ e \tilde{S}^- , nós facilmente provamos com (3.2-6) e (3.2-8) e pequeno cálculo algébrico que

$$\tilde{S}_k^+ = \alpha_k^+ \beta_{-k}^+$$

$$\tilde{S}_k^- = \beta_{-k} \alpha_k$$

$$\tilde{S}_{ok} = \frac{1}{2} (\alpha_k^+ \alpha_k - \beta_{-k}^+ \beta_{-k}) \quad (5-D)$$

Os operadores de pseudo-spin (2-D) atuam num espaço vetorial gerado por dois estados:

Em um deles, ambos $|k \uparrow\rangle$ e $|-k \uparrow\rangle$ estão ocupados e outros, ambos estados estão vazios.

É sempre possível encontrar uma transformação unitária P_k nestes espaços bi-dimensional tal que [w-1]

$$\tilde{S}_{ok}^- = P_k S_{ok} P_k^+$$

$$\tilde{S}_k^+ = P_k S_k^+ P_k$$

$$S_k^- = P_k S_k^- P_k^+ \quad (6-D)$$

Este argumento completa a demonstração da equivalência entre as duas descrições: uma com pseudo-spin e a outra com operadores de Bogoliubov.

Podemos lembrar que (2-D) e (6-D) geram uma álgebra de Lie do grupo SU(2). Este grupo é homomórfico com o grupo de rotação O(3).

Este homomorfismo nos permite a conexão entre a rotação do pseudo-spin e a transformação unitária no espaço dos vetores do estado.

BIBLIOGRAFIA

- |A-1| Asnin, V.M. and Rogachev, A.A.
Soviet Physics. JETP Letter 9, 248 (1969).
- |A-2| Anderson, P.W.
Phys. Rev. 112, 1900 (1958).
- |A-3| Ambegoakar, V. and Baratoff, A.
Phys. Rev. Lett. 10, 486 (1963).
- |A-4| Anderson, P.W.
Phys. Rev. 110, 827 (1958).
- |A-5| Anderson, P.W.
Rev. Mod. Phys. 38, 298 (1969).
- |B-1| Brikman, W.F. and Rice, T.M.
Phys. Rev. B 7, 1508 (1973).
- |B-2| Blatt, J.M., Böer, K.W. and Brandt, W.
Phys. Rev. 126, 1691 (1962).
- |B-3| Bogoliubov, N.N.
Nuovo Cimento 7, 794 (1958).
- |B-4| Bardeen, J., Cooper, L.N. and Shieffer
Phys. Rev. 108, 1175 (1957).

- [C-1] Combescot, M. and Nozières, P.
Journ. Phys. C5, 2369 (1972).
- [C-2] Cohen, M.H., Falicov, L.M. and Phillips, J.C.
Phys. Rev. Letter 8, 316 (1962).
- [D-1] Douglass, D.H. and Falicov, L.M.
Prog. in Low Temp. Physics 4, 97 (1964).
- [D-2] David, N.
Phys. Rev. 5A 137, 1441 (1965).
- [E-1] Elesin, V.F.
Soviet Phys. Semiconductor 4, 1305 (1971).
- [E-2] Elesin, L.V. and Kopaev, Yu. V.
Soviet Phys. Solid State 14, 570 (1972).
- [F-1] Reis, F.G. and Luzzi, R.
Rev. Brasil. Fis. 3, 337 (1972).
- [F-2] Ferrel, R.A. and Prange, R.E.
Phys. Rev. Lett. 10, 230 (1963).
- [G-1] Gergev, V.A.
Soviet Phys. Solid State 11, 2962 (1970).
- [G-2] Galitskii, V.M., Goreslarskii, S.P. and Elesin, V.F.
Soviet Phys. JETP 30, 117 (1970).

- [G-3] Goldstein, H., Classical Mechanics
Addison-Wesley (1959) pg. 107.
- [G-4] Goreslavskii, S.P. and Elesin, V.F.
Zh ETF Pis E.D. 10, 491 (1969).
- [H-1] Hanamura, E. and Haug, H.
Condensations Effects of Excitons
Phys. Report 33, 4 (1977).
- [H-2] Halpern, B.J. and Rice, T.M.
Solid State Phys. 21, 115 (1968).
- [H-3] Hamermexh, M.
Group Theory
Addison-Wesley (1964) pg. 439.-
- [J-1] DeBoer, J.
Physica (UTr) 9, 363 (1942).
- [J-2] Josephson, B.D.
Phys. Letter 1, 251 (1962)-
- [K-1] Kittel, C.
Quantum Theory of Solids
John Wiley & Sons (1963).
- [K-2] Keldysh, L.V.
Physics of Semiconductors, Moscow (1968).
Proc. of IXth Intern. Conf. on the

- [K-3] Karplus, R. and Schwinger, T.
Phys. Rev. 73, 1020 (1948).
- [K-4] Krokhin, O.N.
Soviet Phys. Solid State 7, 2114 (1966).
- [K-5] Keldysh, L.V. and Kopaev, Yu. V.
Soviet Phys. - Solid State 6, 2219 (1965).
- [K-6] Keldysh, L.V. and Koslov, A.M.
Soviet Phys. - JETP 27, 521 (1968).
- [L-1] Landau, L.D. and Lifshitz, E.M.
Quantum Mechanics Addison-Wesley (1965).
- [L-2] Lee, P.A. and Scully, M.O.
Phys. Rev. Letter 22, 23 (1969).
- [M-1] Moskalenko, S.A.
Soviet Phys. - Solid State 4, 199 (1962).
Soviet Phys. - JETP 18, 799 (1964).
- [N-1] Noziere, P. and Pines, D.
Il Nuovo Cimento [x] 9, 470 (1958).
- [P-1] Proceeding of the Twelfth International Conference on
the Physics of Semiconductors
1974 - Stuttgart

- [P-2] Pines, D. and Nozières, P.
The Theory of Quantum Liquid
W.A. Benjamin Inc. (1966) pg. 204.
- [R-1] Rickayzen, G.R.
Phys. Rev. 115, 795 (1959).
- [S-1] Sawada, K.; Bruecker, K.A.; Fukuda, N. and Brout, R.
Phys. Rev. 108, 507 (1957).
- [V-1] Valatin, J.G.
Nuovo Cimento 7, 843 (1958).
- [W-1] Wigner, E.P.
Group Theory
Academic Press (1959) pg. 332.
- [Z-1] Zittars, J.
Phys. Rev. 162, 752 (1967).