

Tese apresentada ao Instituto de Física "Gleb Wataghin" da Universidade Estadual de Campinas, como parte dos requisitos para a obtenção do Grau de Doutor em Ciências.

RESSONÂNCIA E INTERFERÊNCIA NO ESPALHAMENTO RAMAN
EM SEMICONDUTORES

Carlos Alberto Ferrari

Banca Examinadora

Prof. Dr. Roberto Luzzi (orientador)

Prof. Dr. Sérgio Pereira da Silva Porto (UNICAMP)

Prof. Dr. Guilherme Fontes Leal Ferreira (I.F.Q. - USP - S.C.)

Prof. Dr. Antonio Rubens Brito de Castro (UNICAMP)

Prof. Dr. Silvio Goulart Rosa (I.F.Q. - USP - S.C.)

Suplentes

Prof. Dr. Almir Massambani (I.F.Q. - USP - S.C.)

Prof. Dr. José Bernardo Salzberg (UNICAMP)

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
INSTITUTO DE FÍSICA
BIBLIOTECA

Maio de 1977

AGRADECIMENTOS

Ao Luzzi, mestre com quem pude conhecer um pouco mais a natureza e orientador competente e amigo,

Ao Parada, por minha vinda para a Unicamp e apoio nos primeiros passos aqui,

À todos os meus colegas, em particular à Áurea, pelas discussões aclaradoras,

Ao Salzberg e ao Assis, pela realização de programas que deram cobertura aos cálculos deste trabalho,

Ao Rubens pelo alento, por se interessar em aplicar a teoria, ainda no prelo, em seus resultados experimentais,

À Marly, pelo trabalho de datilografia;

A esta gente amiga, e aqueles que também deveriam ser anunciados e não o foram, o meu muito obrigado.

Finalmente, aos meus entes queridos: aos meus pais, Annita e Alberto, que mostraram sempre incomparável abnegação em ajudar-me e incentivar-me no avanço de meus estudos. À Elenice, pelo apoio e entusiasmo transmitido. A esta gente querida e a minha "patota", da qual fazem parte o Thiago e o Leonardo também dedico este trabalho.

RESUMO

Neste trabalho, estuda-se o mecanismo pelo qual se dá o espalhamento Raman de luz em semicondutores. Inicialmente faz-se este estudo na região de ressonância ($\hbar\omega_L \sim E_g$) em semicondutores com banda de condução não populada ($T \sim 0$), usando-se a técnica de propagadores. Como estado intermediário para o processo considera-se o polaron. Para a interação elétron-fonon toma-se o hamiltoniano na forma do hamiltoniano de Fröhlich. Obtem-se resultados numéricos que estão em bom acordo com experiências em CdS e GaP. Posteriormente, aplica-se o mesmo formalismo ao caso de semicondutores com a banda de condução densamente populada e com $\hbar\omega_L$ longe da região de ressonância. Devido a interação coulombiana entre as partículas, há a formação de excitações longitudinais (plasmon) que poderão hibridizar-se com os fonons LO do semicondutor. A fim de se conseguir resultados mais realísticos, desenvolve-se uma teoria na qual se associa a cada um dos sistemas envolvidos, eletrônico e iônico, uma temperatura efetiva. Isto requer uma adaptação do Teorema da Flutuação-dissipação. A interação entre elétrons e fonons é considerada na forma do hamiltoniano de Fröhlich, e é usada a aproximação de fase aleatória (R.P.A.) para o cálculo da secção de choque para espalhamento. Apresentam-se gráficos ilustrando a sensibilidade da teoria à concentração eletrônica, às temperaturas dos sistemas envolvidos, ao tempo de relaxação devido a colisão entre partículas, à largura do fonon LO, todos os quais repercutem na largura de linha e intensidade dos modos híbridos. Finalmente estudam-se estes modos na região de ressonância.

ÍNDICE

| | |
|---|-----------|
| INTRODUÇÃO GERAL. | 1 |
| CAPÍTULO I: ESPALHAMENTO RAMAN RESSONANTE EM ISOLANTES | |
| 1. Introdução | 8 |
| 2. Polaron como Estado Intermediário Virtual no Espalhamento Raman Ressonante | 15 |
| 3. Comentários e Figuras | 22 |
| 4. Bibliografia | 24 |
| CAPÍTULO II: ESPALHAMENTO DE LUZ EM SEMICONDUTORES POLAR COM BANDA DE CONDUÇÃO DENSAMENTE POPULADA | |
| 1. Introdução | 26 |
| 2. Tratamento da Interferência para Sistema em Quase-Equilíbrio Térmico. Expressão para a Secção de Choque para Espalha- mento de Luz | 34 |
| 3. Cálculo das Funções de Green | 39 |
| 4. Comentários e Figuras | 46 |
| 5. Bibliografia | 49 |
| CAPÍTULO III: ESTUDO DO SISTEMA EM QUASE EQUILÍBRIO TÉRMICO NA REGIÃO DE RESSONÂNCIA | |
| 1. Expressão para a Secção de Choque para o Espalhamento de Luz | 51 |
| 2. Comentários e Figuras | 60 |
| 3. Bibliografia | 61 |
| TABELA | 62 |
| APÊNDICES | |
| A. Cálculos dos Operadores de Espalhamento através dos Gráficos de Feynmann dos Processos Considerados | 63 |
| B. Cálculo da Expressão Geral da Vida Média dos Estados Intermediá- rios do Processo de Espalhamento de Luz | 69 |

| | |
|--|----|
| C. Teorema Generalizado da Flutuação-dissipação, para Sistema em Quase-Equilíbrio Térmico | 75 |
| D. Cálculo Pormenorizado das Funções de Green | 78 |
| E. Cálculo das Partes Real e Imaginária da Função de Green eletrônica Não Perturbado $L(\vec{q},\omega)$ | 86 |
| Bibliografia | 89 |

INTRODUÇÃO

A importância do espalhamento inelástico de luz, referido usualmente como espalhamento Raman, para o estudo de excitações elementares e hibridização de excitações elementares na matéria, pode ser avaliado por seu uso nos últimos anos.⁽¹⁾

Basicamente, o efeito descoberto por Raman⁽²⁾ em 1928 e que leva seu nome, predito por Smekal⁽³⁾ em 1923, é exibido no espectro da luz espalhada pela matéria. Este espectro mostra uma banda de frequência menor que a incidente, conhecida como componente Stokes, e uma banda de frequência maior, conhecida como componente anti-Stokes. A detecção deste efeito, bastante fraco em comparação, por exemplo, com a Luminescência, tornou-se favorável com o aparecimento do laser, na década de 60, que fornecia um poderoso feixe de radiação monocromático, coerente e de polarização bem definida.

A técnica do espalhamento Raman, será usada neste trabalho, inicialmente para estudar o comportamento de um isolante quando excitado por uma radiação, com energia da ordem de sua energia de excitação eletrônica. Para esta energia de excitação o espalhamento inelástico de luz é chamado Raman ressonante (R.R.S). O interesse no problema se traduz pela grande atividade, teórica⁽⁴⁻⁸⁾ e experimental⁽⁹⁾, na área, nos últimos anos.

Especificamente, o que se faz no Capítulo I, é estudar o R.R.S. para o CdS e GaAs assumindo que este espalhamento se dá através do polaron como estado intermediário virtual. A importância dos estados intermediários no processo, foi evidenciada por Loudon⁽⁵⁾. O excíton foi usado por Ganguly e Birman⁶, como esta

do intermediário, para o isolante excitado com radiação de energia menor que a energia de excitação eletrônica do cristal. O poláriton foi tratado como estado intermediário por Zeyher, Ting e Birman⁽⁸⁾, para o estudo do espalhamento no Fosfeto de Gálio (GaP), e o resultado conseguido discorda de um fator¹⁰ com a experiência, para energia de excitação, $\hbar\omega_L$, maior que a da banda de energia proibida E_g do cristal. Para esta mesma região de energia, o presente trabalho propõe o polaron como estado intermediário para o estudo do R.R.S., para os semicondutores CdS e GaAs. Isto se justifica, dado que a excitação de um elétron pela radiação incidente, uma nuvem polarizante o envolve, originando o polaron. É ainda esperado que apareçam efeitos de polaron desde que para energia incidente $\hbar\omega_L > E_g$, permite-se a produção de fonons reais devido a interação elétron-fonon. Esta interação elétron-fonon tomada na forma do hamiltoniano de Fröhlich tem para a constante de acoplamento α , valores significativos. A importância deste acoplamento fica aparente confrontando-se os resultados do CdS e GaAs, atentando-se para o fato que α do primeiro é dez vezes maior que o do segundo.

Para um tratamento mais apurado do R.R.S., no contexto da Teoria de Perturbação, introduziu-se a vida média dos estados intermediários. Isto foi possível renormalizando-se os propagadores dos elétrons de Bloch dos estados intermediários virtuais da teoria de Loudon.

Como resultado do modelo, conseguiu-se um aumento nos valores da secção de choque do espalhamento, aproximando-a significativamente dos resultados experimentais. Ficou evidente que a mistura de estados de elétrons e fonons produz considerável efeito sobre o espectro de Raman ressonante e pode servir como meio

importante para o estudo de efeitos de polaron em semicondutores.

Como extensão da análise anterior, considerou-se um se micondutor dopado tipo-n, isto é, o sistema agora tem a banda de condução densamente populada. Antes de se estudar o espalhamento Raman ressonante neste sistema, fêz-se necessário estudar inicialmente as excitações originadas dentro do semicondutor, devido a presença do gás eletrônico e iônico, bem como a possível inter ferência entre elas. Isto é feito no Capítulo II, pela técnica de espalhamento Raman, com energia de excitação do sistema longe da região ressonante.

No estudo do fenômeno de interferência, acima mencionado, foram associados condições de não equilíbrio térmico ao sub sistema eletrônico bem como ao sistema iônico. Para o gás eletrônico, foi considerada a interação coulombiana entre as partí culas, originando-se daí uma excitação coletiva de modos de vibra ção longitudinal bem definidos¹⁰. Foi assumido o efeito de Fröhlich entre os subsistemas iônico e eletrônico e da mistura das excitações elementares destes sistemas, originou-se os modos híbridos de vi bração chamados ω_+ e ω_- . Esta hibridização ocorre devido a natureza longitudinal das excitações em cada sistema.

Mooradian e Wright⁽¹¹⁾ foram os primeiros a observar a hibridização plasmon-fonon, evidenciada pela transformação ocorri da na forma e largura do espectro do espalhamento Raman do fonon. Discutiram os resultados em termos do formalismo da função respos ta dielétrica⁽¹²⁾. Scott, Damen, Ruvalds e Zawadowski⁽¹³⁾ apresen taram também um modelo para o espalhamento inelástico da luz para o CdS dopado tipo-n, usando formalismo de funções de Green. Efeitos assimétricos semelhantes também foram observados em Silício (Si) degenerado tipo-p por Cerdeira, Fjeldly e Cardona⁽¹⁴⁾ e in -

terpretado em termos do mecanismo de acoplamento de Breit-Wigner⁽¹⁵⁾ como descrito por Fano. Mais recentemente Balkanski, Jain, Beserman e Jouanne⁽¹⁶⁾ desenvolveram um formalismo de funções de Green que engloba ambos os casos. Incorporaram também efeitos de temperaturas. Mostraram que a forma assimétrica da linha do espalhamento inelástico da luz é devido a presença de um estado composto - no qual é possível separar as características de fonon e de elétron do espalhamento.

No Capítulo II, então, desenvolveu-se um modelo para estudar as assimetrias das linhas do espalhamento inelástico da luz por um semiconductor dopado tipo-n. Neste se considerou o plasma e vibrações da rede cristalina como subsistemas em condições de equilíbrio interno caracterizado cada um por uma temperatura efetiva uniforme. A participação de excitações nestas condições é observada em uma variedade de resultados experimentais.^(1,19) Para calcular a flutuação da densidade de carga, usou-se o formalismo de funções de Green de tempo duplo dependente da temperatura, atribuído a Zubarev⁽¹⁷⁾. E para obter a secção de espalhamento de luz usou-se o formalismo de Van Hove⁽¹⁸⁾. Fêz-se necessário uma generalização do Teorema da Flutuação-Dissipação apropriando-o para aplicá-lo às condições de não equilíbrio térmico dos subsistemas. A interação entre os elétrons foi tratada na aproximação de fases aleatórias (R.P.A). Resultados para o Arseneto de Gálio (GaAs) não degenerado, são comparados com recentes medidas nos laboratórios do Instituto de Física "Gleb Wataghin"⁽¹⁹⁾, para várias concentrações eletrônicas e temperaturas dos sistemas eletrônico e iônico. Foi possível analisar o tempo da relaxação do plasma.

Finalmente no Capítulo III estuda-se o espalhamento Raman da hibridização na região de ressonância. Incluiu-se o tempo

de vida dos estados intermediários excitados nos diagramas relevantes, à maneira do Capítulo I. Antecipa-se aos experimentais alguns resultados nesta região.

Referencias:

1. Ver por exemplo "Light Scattering in Solids I", G.B.Wright Editor. (Springer, New York 1969); "Light Scattering in Solids II", M.Balkanski, Editor. (Flammarion Press, Paris 1971); "Light Scattering in Solids III", M.Balkanski, R.C.C. Leite and S.P.S.Porto, Editors (Flammarion Press, Paris 1975).
2. C.V. Raman: Indian J.Phys.2, 387, 1928; C.V. Raman and K.S. Krishnan: Nature 121, 501, 1928. G.Landsberg and L.Mandelstam: Naturwiss 16, 57, 1928.
3. A. Smekal: Naturwiss 11, 873, 1923.
4. L.N.Ovander, Fiz.Tverd. Tela 3, 2394 (1961) English Transl.: Soviet Phys. - Solid State 3, 1737 (1962) . Grechko, L.G. and Ovander, L.N. Soviet Phys. Solid State 4, 112 (1962).
5. R. Loudon, J.Phys. (Paris) 26, 677 (1965); Advan. Phys. 13, 423 (1964).
6. A.K.Ganguly and J.L.Birman, Phys.Rev. 162, 806 (1967).
7. B.Bendow and J.L.Birman, Phys.Rev.B, vol.4, n^o2, 569 (1971).
B.Bendow and J.L.Birman, Phys.Rev.B, vol.1, n^o4, 1678(1970).
B.Bendow, Phys.Rev.B, vol.2, n^o2, 5051 (1970).
8. R.Zeyher, C.S.Ting, J.L.Birman, Phys.Rev.B, vol.10, n^o4, 1725 (1974).
9. B.Bendow, J.L.Birman, A.K.Ganguly, T.C.Damen, R.C.C.Leite and J.F.Scott. Optics Communications, Vol.1, n^o6, 267 (1970).
10. D.Pines and D.Bohm, Phys. Rev. 85, n^o2, 338 (1951). D.Bohm and D.Pines, Phys.Rev. 82, 625 (1951).
11. A.Mooradian and G.B.Wright, Phys.Rev.Letter 16, 999 (1966).
12. B.B.Varga, Phys.Rev. A 137, 1896 (1965).
13. J.F.Scott, T.C.Damen, J.Ruvalds and A.Zawadowski, Phys.Rev.B, vol.3, n^o4, 1295 (1971).
14. F.Cerdeira, T.A.Fjeldly and M.Cadorna, Phys.Rev.B, vol.8, n^o10, 4734 (1973).
15. G.Breit and E.Wigner, Phys.Rev. 49, 519 (1936).

16. M.Balkanski, K.P.Jain, R.Beserman and M.Jouanne, Phys.Rev.B, vol.12, n^o10, 4328 (1975).
17. D.N.Zubarev, Soviet Physics. USPEKHI, vol.3, n^o3, 320 (1960).
18. L.Van Hore, Phys.Rev.95, 249 (1954).
19. R.Turtelli, A.R.B.de Castro, and R.C.C.Leite, Solid State Comm. Vol.16, p.p 969-971 (1975). A.R.B.de Castro de R.Turtelli, a ser publicado.

ESPALHAMENTO RAMAN RESSONANTE (R.R.S)

I.1. INTRODUÇÃO

O estudo do espalhamento de luz em semicondutores, no qual a energia do laser excitante está próxima da transição eletrônica permitida, tem sido alvo de recentes publicações teóricas¹⁻³, antecipando parcialmente resultados experimentais⁴⁻⁹.

Em 1962, Grechko e Ovander¹ haviam proposto um modelo para o espalhamento Raman Ressonante em cristais polares, no qual o sólido era visto como uma coleção de moléculas e o arranjo dos níveis de energia dos elétrons na banda não era considerado. Mas, a teoria sobre R.R.S somente veio ter algum êxito com a hipótese de Loudon² dos estados eletrônicos intermediários. Após os trabalhos dele, ficou evidente a importância do papel dos estados intermediários neste processo.

Estimulado inicialmente pela possibilidade de se determinar as frequências de vibração da rede em semicondutores, Loudon² usou o efeito Raman. Embora este fosse um efeito fraco, o aparecimento recente do laser tornava experimentalmente possível a sua detecção. A teoria foi desenvolvida para dois tipos de semicondutores: o grupo IV, homopolar, tendo a estrutura da rede do diamante e o grupo III-V, polar, tendo a estrutura da rede do Sulfeto de Zinco cúbico. Os cálculos para Efeito Raman de primeira ordem envolvem um quantum de vibração da rede (fonon) que é criado ou destruído no processo de espalhamento de fótons. Loudon mostrou que, em ambos os tipos de semicondutores, a mais importante interação Raman entre fótons e fonons se dá através de estados eletrônicos de Bloch como intermediários. Então, a estrutura eletrônica de banda do cristal deve ser levada em conta. Os semi-

condutores considerados tem dois átomos na célula unitária, o que dá origem a três ramos acústicos e três ópticos no espectro de vibração da rede. Ambos os tipos de fonons contribuem para o espalhamento Raman de primeira ordem, mas a contribuição do óptico é mais fácil de se medir e tem recebido maior atenção. Para luz incidente com comprimento de onda de 10^{-4} cm no espaço livre, com um vetor de onda da ordem de 10^5 cm⁻¹ no cristal (vetor de onda = $2\pi \times$ Índice de refração/comprimento de onda), a conservação do vetor de onda para espalhamento de fóton em ângulo reto requer que o fonon envolvido tenha também um vetor de onda da ordem de 10^5 cm⁻¹. Esta quantidade é pequena comparada com a largura da Zona de Brillouin ($\sim 10^8$ cm⁻¹), e, assim os fonons do Efeito Raman estão juntos ao centro da Zona.

Para semicondutores homopolares, o ramo de fonons ópticos, para comprimento de onda longo, é triplamente degenerado. O espectro Raman de primeira ordem apresenta dois picos igualmente espaçados acima e abaixo da frequência de excitação, correspondendo à destruição e à criação de fonons, respectivamente. A excitação de um fonon produz um deslocamento dos átomos da rede, e isto perturba a periodicidade do potencial que atua sobre os elétrons, originando uma energia de interação entre elétrons e rede. Esta única fonte de interação entre elétrons e rede de um cristal homopolar, é chamada interação Potencial de deformação.

Para semicondutores III-V o espectro do fonon óptico, de comprimento de onda longo, é dividido em dois ramos devido ao campo elétrico de longo alcance na rede. O ramo transversal é duplamente degenerado e tem frequência menor que o ramo longitudinal não degenerado. Ambos os ramos contribuem para o espalhamento de primeira ordem¹⁰. Devido ao campo elétrico de longo alcance na rede, tem-se o aparecimento de um mecanismo de espalhamento para o ramo longitudinal¹¹ que não existe em cristais homopolares.

Este espalhamento está relacionado ao efeito eletro-óptico.

Loudon calculou a secção de choque de espalhamento de luz para as linhas Stokes por Teoria de Perturbação. Usou como hamiltoniano não perturbado a soma das energias dos elétrons de Bloch não interagindo entre si, do fóton e do fonon e os acoplamentos de elétrons-fonons e elétrons-fótons como perturbação. Perto da região de ressonância, quando a energia de excitação do laser está próxima da energia de excitação do cristal, tomou os elementos de matriz do momento e do potencial elétron-rede como independentes do vetor de onda e considerou bandas parabólicas simples. Além disso, converteu a soma sobre os estados de Bloch em uma integral e obteve a intensidade de espalhamento Stokes, $I(\omega_L)$, dependente da frequência incidente ω_L como:

$$(I.1) \quad I(\omega_L) = A |N_{\text{Bloch}}|^2$$

onde A é essencialmente uma constante e

$$(I.2) \quad N_{\text{Bloch}} = \int_0^{k_{\text{max}}} dk \left\{ \left[(E_g - \hbar\omega_s + \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu})(E_g - \hbar\omega_L + \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu}) \right]^{-1} + \left[(E_g + \hbar\omega_s + \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu})(E_g + \hbar\omega_L + \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu}) \right]^{-1} \right\}$$

com E_g a largura da banda proibida do cristal, $\hbar\omega_L$ e $\hbar\omega_s$ as energias da radiação incidente e espalhada, respectivamente. Manipulando algebricamente a equação acima, Loudon obteve o comportamento de N_{Bloch} na região de ressonância como:

$$(E_g - \hbar\omega_L)^{+1/2}$$

para $\hbar\omega_L < E_g$. O comportamento é o mesmo, tanto para cristais homopolares quanto polares. Este resultado obtido por Loudon difere substancialmente do de Grechko e Ovander¹, que previam para

N_{Bloch} , na região de ressonância, o comportamento $(E_g - \hbar\omega_L)^{-2}$.

Posteriormente, Ganguly e Birman³, reenfaturara a importância das quase partículas como estados intermediários virtuais no processo de espalhamento Raman na região de ressonância. Sugeriram que a excitação intermediária deve ter as características de um exciton, convencidos pelo fato da interação coulombiana entre elétrons e buraco ser de longo alcance e estar sempre presente. Assim, admitiram que no espalhamento Raman os processos reais de absorção de um fóton, emissão ou absorção de um fonon e finalmente emissão de um fóton, deve ser acompanhado pela transição virtual de excitons. Nesta, um exciton é criado e espalhado produzindo um fonon e finalmente destruído, retornando o sistema eletrônico a seu estado fundamental. As interações podem ocorrer em qualquer ordem no tempo. Os hamiltonianos envolvidos foram apresentados em termos de segunda quantização. Os elétrons foram configurados na representação de Wannier. Uma transformação canônica foi usada para eliminar as interações de ordem mais baixa no hamiltoniano, de modo que o hamiltoniano final foi então tomado como aquele que produziria transições entre os estados dos hamiltonianos livres. Esses autores consideraram que, para as bandas parabólicas, o espectro do exciton discreto é dado por:

$$(I.3) \quad E_{n\vec{k}}(c, \nu) = E_g + \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} - \frac{R}{n^2}$$

com o inteiro $n=1,2,3,\dots$, e do contínuo:

$$(I.4) \quad E_{\vec{K}, \vec{k}}(c, \nu) = E_g + \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} + \frac{\hbar^2 K^2}{2\mu^*}$$

onde, \vec{K} é o vetor de onda do exciton formado da banda de condução c e banda de valência ν , e $1/\mu^* = 1/m_e^* + 1/m_h^*$ onde m_e^* é a massa efetiva do elétron e m_h^* do buraco. E_g é valor da largura da banda proibida do cristal entre a banda de condução C e banda de valência ν . E, R é o Rydberg excitônico que é dado por

$R = \mu e^4 / 2 \hbar^2 \epsilon^2$ onde ϵ é a constante dielétrica. Para maior simplicidade consideraram que a transição eletrônica se dá entre a banda de valência mais alta e a banda de condução mais baixa. Assim, a interação do potencial de deformação contribue mais fortemente ao tensor de espalhamento do Raman R_{12}^i que a interação polar¹². Obtiveram que:

$$(1.5) \quad R_{12}^i \sim g_{\alpha\alpha}^{(2)} \tilde{g}_{\alpha\alpha}^{(1)} g_{\alpha 0}^{(1)} \left\{ \frac{1}{\pi a_0^3} \sum_{\eta} \frac{1}{\eta} \left[(E_g - \frac{R}{\hbar \eta^2} - \hbar \omega_s) \right. \right. \\ \left. \left. \times (E_g - \frac{R}{\hbar \eta^2} - \hbar \omega_L) \right]^{-1} + \frac{1}{4\pi \omega_0} \left(\frac{2\mu}{\hbar} \right)^{3/2} \left(\frac{4\pi^2 R}{\hbar} \right)^{1/2} \right. \\ \left. \times \left\{ \left[1 - \exp\left(\frac{-4\pi^2 R}{E_g - \hbar \omega_s} \right)^{1/2} \right]^{-1} - \left[1 - \exp\left(\frac{-4\pi^2 R}{E_g - \hbar \omega_L} \right)^{1/2} \right]^{-1} \right\} \right\}$$

onde a_0 é o raio do exciton de Bohr, $a_0 = \epsilon \hbar^2 / \mu e^2$, e $g_{\alpha\alpha}^{(2)}$, $\tilde{g}_{\alpha\alpha}^{(1)}$ e $g_{\alpha 0}^{(1)}$ são elementos de matriz escritos na notação de Loudon.²

O primeiro termo da equação acima representa a contribuição de todos estados discretos do exciton ao tensor Raman, e o segundo termo, a contribuição de todos os estados do contínuo. Próximo à frequência ressonante do exciton, i.e. $\omega_{ex} = \omega_g - R/\hbar$, o termo devido aos excitons discretos (mais particularmente $n=1$) contribue mais fortemente que o do contínuo, cuja contribuição é maior em outras regiões.

Bendow, Birman, Ganguly, Damen, Leite e Scott¹³ observaram que quando a energia da radiação incidente $\hbar \omega_L$ for da ordem da energia do exciton $\hbar \omega_{ex}$ um bom acordo existe entre teoria e experiência, para $\hbar \omega_L < E_g$. Exatamente para $\omega_L \equiv \omega_{ex}$ não existem dados experimentais e aparece forte ressonância na teoria. Para $\hbar \omega_L > E_g + 2\hbar \omega_0$ a intensidade de espalhamento obtida experimentalmente e a da teoria do exciton não apresentam bom ajuste. Porém esta teoria apresenta um espalhamento mais intenso

que a teoria do elétron de Bloch.

Algum tempo depois Bendow e Birman¹⁴, propuseram nova teoria do exciton como estado intermediário, onde incluem efeitos dispersivos, através da revisão da relação de dispersão $k = \omega/c$ pondo $k^2 = \epsilon(\vec{k}, \omega) \omega^2/c^2$, onde $\epsilon(\vec{k}, \omega)$ é a função dielétrica. E, para controlar a divergência em $\omega_L = \omega_{ex}$, incorporam amortecimentos aos estados excitados de exciton para isolantes¹⁵. A tal modelo Bendow e Birman denominaram de Teoria Generalizada dos excitons-livres e ao anterior de Teoria dos excitons-livres. A predição do posicionamento da energia na nova teoria é idêntica à anterior se substituir-se $E(\vec{k})$ da Teoria dos excitons-livres pela energia deslocada $E'(\vec{k})$ da Teoria Generalizada. Em relação à secção de choque, a predição é semelhante nas duas teorias para o caso de pequeno acoplamento exciton-radiação, desde que os resultados para a Teoria dos excitons-livres sejam modificados para incluir o efeito de amortecimento da excitação. Contudo, quando o acoplamento exciton-radiação é aumentado, os picos da Teoria Generalizada dos excitons-livres, devido a efeitos de dispersão, tornam-se mais assimétricos¹⁶ em flagrante contraste com a disposição simétrica dos picos da Teoria dos excitons-livres.

Concomitantemente ao estudo do exciton, Bendow e Birman¹⁷, desenvolveram estudos em R.R.S. com polariton, i.e., mistura de exciton discreto com radiação, como estado intermediário excitado virtual. O resultado apresentado¹³ é comparado à Teoria dos excitons-livres e à Teoria Generalizada dos excitons-livres. Desta comparação conclui-se que nada de novo se nos apresenta a Teoria do Polariton para $\hbar\omega_L < E_g$. Entretanto, o trabalho de Zeyher, Ting e Birman¹⁷, com polariton como estado intermediário, apresenta resultado satisfatório para Fosfeto de Galio (GaP). Para frequência incidente muito próxima ao contínuo

elétron-buraco, levaram em conta também a parte imaginária do tensor Raman . A secção de choque é então proporcional à soma do quadrado da parte real e do quadrado da parte imaginária do tensor Raman.

Deste modo, a situação apresentada pelas teorias para o espalhamento Raman na região ressonante, para energia de excitação maior que a largura da banda de energia proibida do cristal, i.e', $\hbar\omega_L > E_g$, enfatiza a necessidade de considerações detalhadas do mecanismo das interações microscópicas entre acoplamento de radiação, elétrons e vibrações da rede nos cristais. Neste sentido, o presente trabalho propõe, na segunda parte deste capítulo, um modelo no qual se desenvolve uma análise desse mecanismo.

I.2 POLARON COMO ESTADO INTERMEDIÁRIO VIRTUAL
NO ESPALHAMENTO RAMAN RESSONANTE

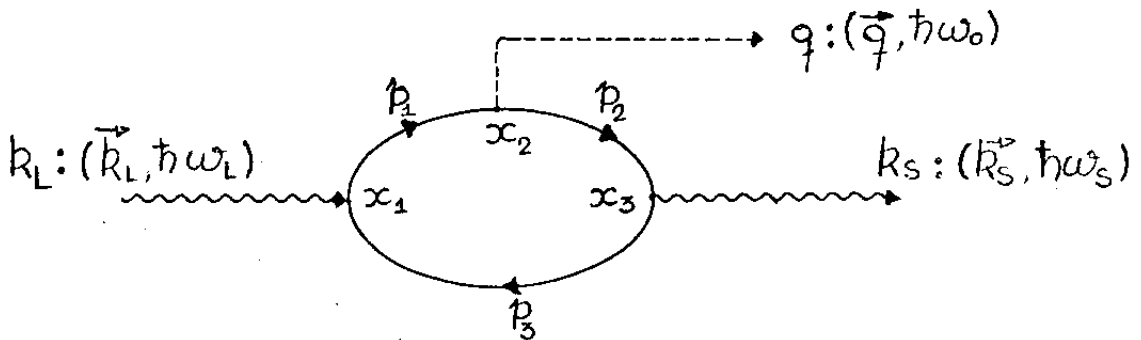
Todas as teorias apresentadas se mostram incapazes de explicar o comportamento da curva da intensidade da radiação espalhada pelo Efeito Raman na região de ressonância, para valores de energia de excitação $\hbar\omega_L$ maior que o intervalo da banda proibida, E_g , do cristal. É precisamente nesta região que se observou que os efeitos do polaron, i.e', quase partícula formada por um elétron envolto por uma nuvem de fonons, começam a aparecer, desde que este intervalo de frequência permite a produção de fonons reais devido à interação do elétron excitado com a rede. Também é esperado que estes efeitos tenham algum papel no processo devido ao valor elevado da constante de acoplamento \propto de Fröhlich. Entende-se, assim, que, para $\hbar\omega_L > E_g$, o espalhamento Raman Ressonante ocorra através de polarons como estados intermediários virtuais.¹⁸

Sob outro ponto de vista, pretende-se controlar a forte ressonância em $\hbar\omega_L \approx E_g$, que aparece na Teoria de Loudon do elétron de Bloch como estado intermediário excitado, introduzindo-se nos cálculos a vida média dos estados intermediários virtuais excitados. Isto será feito através do formalismo das Funções de Green. Especificamente, o propagador do elétron livre da Teoria de Loudon será substituído por propagador renormalizado devido à interação elétron-fonon de Fröhlich. É desta maneira que será introduzido o polaron como estado intermediário virtual.

Para efeito didático, inicialmente será mostrado como o resultado de Loudon pode ser obtido, de maneira mais simples, usando o formalismo de propagadores. Posteriormente este formalismo

será adaptado para o modelo do polaron.

O processo de Espalhamento Raman Ressonante em primeira ordem num cristal, tomando-se como estado intermediário excitado virtual os elétrons de Bloch, de acordo com o modelo teórico de Loudon², pode ser representado através do diagrama:



entendendo-se por k_L , k_S e q , respectivamente, quadrivetores momento e energia dos fótons incidentes, fótons espalhados e fonon criado. E x_i são pontos no espaço-tempo; as linhas que vão de x_1 a x_2 e de x_2 a x_3 representam elétrons excitados e virtuais na banda de condução, e a linha que vai de x_3 a x_1 representa o buraco na banda de valência. Momento e energia de cada um destes intervalos são representados por:

$$p_1: (\vec{p}_1, E_c(\vec{p}_1)) \quad , \quad p_2: (\vec{p}_2, E_c(\vec{p}_2)) \quad \text{e} \quad p_3: (\vec{p}_3, E_v(\vec{p}_3))$$

Nos pontos x_1 , x_2 e x_3 tem-se, respectivamente, interação elétron-fóton ($H_{ER}(x_1)$), elétron-fonon ($H_{EL}(x_2)$) e novamente elétron-fóton ($H_{ER}(x_3)$). Estes hamiltonianos de interação estão definidos no apêndice A.

Fisicamente, o diagrama acima deve ser entendido como uma excitação de um par elétron-buraco no ponto x_1 pelo fóton k_L do laser de excitação. O elétron excitado na banda de condução interagirá com a rede, produzindo um fonon q e se aniquilará com o buraco da banda de valência, emitindo um fóton k_S .

A matriz $\mathcal{U}_{if}^{(3)}$ calculada* do diagrama ressonante de terceira ordem acima, dará a amplitude de probabilidade de transição do sistema passar do estado inicial $|i\rangle$ ao estado final $|f\rangle$:

$$\mathcal{U}_{fi}^{(3)} = \langle f | \mathcal{U}_q^{(3)} | i \rangle = A \int d^3 \vec{p}_0 \langle f | \hat{\epsilon}_s \cdot \vec{p} | i \rangle a_q^\dagger \langle i | \hat{\epsilon}_L \cdot \vec{p} | i \rangle \\ \times [E_u(\vec{p}_u) - E_c(\vec{p}_u) + \hbar \omega_s]^{-1} [E_u(\vec{p}_0) - E_c(\vec{p}_0) + \hbar \omega_L]^{-1}$$

onde A é uma constante e a_q^\dagger é o operador criação de fonon de momento \vec{q} .

O estado inicial $|i\rangle$ do processo é dado pela função de onda do sistema,

$$|n_L, n_S=0; n_q; 0\rangle$$

onde n_L, n_S e n_q são, respectivamente, o número de fótons incidentes, fótons espalhados e fonons ópticos presentes. Como o cálculo refere-se a espalhamento Raman espontâneo e não estimulado, o número n_S de fótons espalhados, $\hbar \omega_s$, no estado inicial deve ser portanto zero. O zero à direita de n_q indica o estado fundamental eletrônico. O estado final $\langle f |$ para a linha Stokes do processo de espalhamento Raman em primeira ordem é:

$$\langle n_S-1; 1; n_q+1; 0 |$$

Como os subsistemas eletrônico, iônico e a radiação não se misturam, pode-se escrever:

$$\mathcal{G}_S = \langle n_S=1 | \hat{\epsilon}_s \cdot \vec{p} | n_S=0 \rangle ,$$

$$\mathcal{G}_L = \langle n_L-1 | \hat{\epsilon}_L \cdot \vec{p} | n_L \rangle ,$$

$$\tilde{z}_q = \langle n_q-1 | a_q^\dagger | n_q \rangle .$$

* Ver apêndice para detalhes de cálculo.

Assumindo a aproximação de bandas parabólicas e que G_S, G_L e Z_q independem do momento, obtêm-se para a eficiência S do processo de espalhamento Raman Ressonante,

$$(I.7) \quad S = A |I|^2$$

com A uma constante, e

$$(I.8) \quad I = \int_0^{k_{\max}} d^3k \left[(E_g - \hbar\omega_L + \hbar^2 k^2 / 2\mu)(E_g - \hbar\omega_S + \hbar^2 k^2 / 2\mu) \right]^{-1}$$

onde μ é a massa reduzida do elétron e do buraco. Obtem-se para a integral I acima, o resultado:

$$(I.9) \quad I = (4\pi/\hbar^4) (2\mu)^{3/2} / \omega_q \left[(E_g - \hbar\omega_S)^{1/2} \arctg(\hbar^2 k_{\max}^2 / 2\mu)^{1/2} / (E_g - \hbar\omega_S)^{1/2} - (\hbar\omega_S \rightarrow \hbar\omega_L) \right],$$

onde k_{\max} é tomado de acordo com referência 9. Próximo à ressonância, i.e., quando $\hbar\omega_L \sim E_g$, a integral I comporta-se como

$$(I.10) \quad I = (2\pi^2/\hbar^4) (2\mu)^{3/2} 1/\omega_q \left[(E_g - \hbar\omega_S)^{1/2} - (E_g - \hbar\omega_L)^{1/2} \right]$$

Note-se que S é finito, exatamente para $\hbar\omega_L = E_g$. A razão de aumento de I com o aumento de $\hbar\omega_L$ diverge como $(E_g - \hbar\omega_L)^{-1/2}$.

Apresentada a técnica de cálculo por propagadores para a obtenção dos resultados de Loudon, será feita agora a adaptação da mesma às proposições do modelo de polaron como estado intermediário excitado virtual. Inicialmente, o propagador do elétron livre será substituído por um propagador renormalizado (propagador do polaron) no qual se inclui o efeito do Fröhlich da interação elétron-fonon, i.e.,¹⁹

$$(I.11) \quad G_\alpha(E, \vec{k}) = i \left[E - E_\alpha(\vec{k}) + i \delta_\alpha \Gamma_\alpha(\vec{E}, \vec{k}) \right]^{-1}$$

onde α é e ou h correspondendo ao polaron de elétron ou buraco, respectivamente, e

$$\delta_e = 1, \quad \delta_h = -1$$

e ainda,

$$I.12^a) \quad E_e(\vec{k}) = \hbar^2 k^2 / 2m_e^* ,$$

$$I.12^b) \quad E_h(\vec{k}) = -E_g - \hbar^2 k^2 / 2m_h^* .$$

A quantidade $\Gamma_\alpha^{-1}(\vec{k}, \omega)$ é a vida média do polaron, e para um sistema à temperatura $T \sim 0^\circ$, obtém-se*

$$I.13) \quad \Gamma(\vec{k}, \omega) = \frac{\alpha}{2} (2m_e^*)^{1/2} \frac{\omega_0^{3/2}}{k} \ln \left| \left[\left(\frac{2m_e^*}{k} (\omega - \omega_0) \right)^{1/2} + 1 \right] \left[\left(\frac{2m_e^*}{k} (\omega - \omega_0) - 1 \right)^{-1/2} \right] \right|$$

A equação para a intensidade de espalhamento para o processo, fica agora:

$$I.14) \quad I \sim \left| \sum_{\vec{k}} \int dE [E - E_e(\vec{k}) - i\Gamma_h(\vec{k}, \omega)]^{-1} [E + \hbar\omega_s - E_c(\vec{k}) + i\Gamma_e(\vec{k}, E_e(\vec{k}) + \hbar\omega_s)]^{-1} \right. \\ \left. \times [E + \hbar\omega_L - E_c(\vec{k}) + i\Gamma_e(\vec{k}, E_e(\vec{k}) + \hbar\omega_L)]^{-1} \right|^2$$

Após alguma algebra, a equação acima pode ser reescrita como:

$$I.15) \quad I \sim \left| \int_0^{\chi_{\max}} d\chi \sqrt{\chi} [\chi - \Omega + 1 - i\bar{\Gamma}(\vec{k}, E_e + \hbar\omega_s)]^{-1} [\chi - \Omega - i\bar{\Gamma}(\vec{k}, E_e + \hbar\omega_L)]^{-1} \right|^2$$

onde

$$I.16) \quad \chi = (\hbar^2 k^2 / 2\mu) / \hbar\omega_0 ,$$

$$I.17) \quad \Omega = (\hbar\omega_L - E_g) / \hbar\omega_0 ,$$

e

$$\bar{\Gamma} = \Gamma / \hbar\omega_0 .$$

A fim de se considerar efeitos de relaxação de outras excitações do cristal, inclui-se em $\Gamma(\vec{k}, \omega)$ um fator γ , i.e., um amortecimento fenomenológico, e chama-se:

$$\Gamma' = \gamma + \bar{\Gamma}(\vec{k}, E_e + \hbar\omega_s)$$

e

$$\Gamma'' = \gamma + \bar{\Gamma}(\vec{k}, E_e + \hbar\omega_L)$$

* Ver apêndice B

Assim a intensidade I de espalhamento fica,

$$(I.18) \quad I = A |N|^2$$

onde A é uma constante, e

$$(I.19) \quad N = N' + i N''$$

com

$$(I.20) \quad N' = \int_0^{\chi_{\max}} d\chi \sqrt{\chi} [(\chi - \Omega + 1)(\chi - \Omega) - \Gamma' \Gamma''] / \mathbb{D}$$

e

$$(I.21) \quad N'' = \int_0^{\chi_{\max}} d\chi \sqrt{\chi} [(\chi - \Omega + 1) \Gamma'' + (\chi - \Omega) \Gamma'] / \mathbb{D}$$

onde

$$(I.22) \quad \mathbb{D} = [(\chi - \Omega + 1)^2 + \Gamma'^2][(\chi - \Omega)^2 + \Gamma''^2]$$

Uma comparação dos cálculos dos diferentes modelos com os dados experimentais para o Sulfeto de Cádmió (CdS) é mostrada na figura I.2 . Nota-se claramente, que o efeito do polaron como estado intermediário excitado virtual é produzir um drástico incremento nos valores da intensidade da radiação espalhada, para $\Omega > 1$. Este aumento é da ordem de uma centena quando comparada aos valores obtidos por Loudon. É interessante enfatizar que para $\Omega \geq 2$, a diferença entre valores experimentais e teóricos é de um fator de dois ou três. Uma imprecisão desta ordem pode ser esperada no posicionamento dos dados experimentais. Isto é devido a incertezas inerentes ao se efetuar a correção pela absorção sobre a intensidade de radiação espalhada, nesta região. Para valores de $\Omega < 1$ os valores de Loudon são replicados, quando se desprezam diferenças surgidas para valores razoáveis de γ . Incorporou-se nesta vida média finita γ , efeitos de interações com imperfeições e impurezas no cristal, da ordem do inverso do tempo de relaxação de transporte.

Resumindo, pode-se interpretar que o presente modelo para semicondutores polares, no qual a interação elétron-fonon de Fröhlich tem papel preponderante, prediz que quando a energia de excitação do laser for maior que o intervalo da banda proibida do cristal, existirá energia suficiente para o elétron excitado produzir fonons reais e uma nuvem destes envolverem esse elétron para produzir um polaron. Este, então, participa no processo de espalhamento Raman na região de ressonância, como estado intermediário excitado virtual e induzirá um incremento drástico nos valores da intensidade de radiação espalhada. No caso de energia de excitação do laser ser menor que a energia de excitação do cristal, i.e', $\Omega < 0$ a nuvem de fonon não aparece e os resultados obtidos são os mesmos de Loudon.

Resultados para o Arseneto de Gálio (GaAs) também é apresentado na figura I.2. O abaixamento da curva de intensidade, em relação a do CdS, é esperado devido à constante de acoplamento \propto de Fröhlich para o GaAs ser um décimo do CdS. Neste caso, a vida média do estado intermediário excitado (Polaron) é muito maior e conseqüentemente é menor o incremento na intensidade de espalhamento.

É enfatizado a possibilidade do modelo para o estudo do polaron em semicondutores polares.

COMENTÁRIOS FINAIS

Neste capítulo, propõe-se um modelo para explicar o comportamento ressonante do espalhamento Raman em semicondutores polares com a banda de condução vazia. Como em semicondutores polares a interação elétron-fonon, na forma do hamiltoniano de Fröhlich, é significativa, sugere-se que o espalhamento se dê através de estados intermediários de polarons resultado da mistura de elétron com fonons. Nos cálculos isto é levado em conta pela renormalização dos propagadores dos estados intermediários, incluindo-se a vida média destes estados, obtida usando-se o hamiltoniano de interação de Fröhlich. A largura de linha, como função do momento e energia transferidos, correspondente a esta vida média é apresentada na figura I.1. Uma comparação de diferentes cálculos para a intensidade de espalhamento com dados experimentais para o CdS e GaP é mostrada na figura I.2. A tabela I dá os valores numéricos dos parâmetros.

Para energias de excitação, $\hbar\omega_L$, abaixo do valor da banda proibida, E_g , do semicondutor a teoria reobtem os resultados da teoria de Loudon, que usou elétrons de Bloch como estados intermediários. Não foi entretanto nosso intuito fazer uma teoria para esta região, pois a teoria do excíton de Ganguly e Birman³ satisfaz plenamente, como é vista na figura I.2, pela curva formada de linha traço-um-ponto. Para energia de excitação, $\hbar\omega_L$, acima da banda proibida, E_g , nenhuma teoria apresenta resultados compatíveis com as experiências. Nesta região a teoria desenvolvida neste capítulo, mostra que o processo de espalhamento ressonante pode se dar através do polaron. Mais particularmente, para $\hbar\omega_L > E_g + 2\hbar\omega_0$, onde $\hbar\omega_0$ é a energia do fonon TO, ou em outros termos, para $\Omega > 2$ ($\Omega = (\hbar\omega_L - E_g)/\hbar\omega_0$), tem-se para o CdS, um gran-

de incremento à curva da intensidade de espalhamento (linha contínua) com erro de um fator de 2 ou 3 em relação às experiências (círculo vazio). Uma imprecisão desta ordem pode ser esperada nos dados experimentais devido a incertezas inerentes ao se efetuar a correção pela absorção sobre a intensidade de radiação espalhada, nesta região.

Apresentamos ainda na figura I.2, resultados para o GaAs (traço-2-pontos), sem dados experimentais, e para o GaP. Para este último semiconductor a teoria consegue melhores resultados que para o CdS. Os resultados experimentais (Ref. 18) são os triângulos cheios com vértice para baixo e o resultado teórico é a linha pontilhada.

O gráfico da largura de linha do polaron, figura I.1, foi construído para $\Omega=4$, para o CdS a zero grau Kelvin. Esta largura de linha é relativa a excitação do polaron, antes de interagir com a rede para produzir fonon. A energia deste estado é $\hbar\omega = -E_g - (\hbar k)^2/2m$ + $\hbar\omega_L$, onde o segundo termo é a energia livre do buraco. Após interagir com a rede, o estado eletrônico ficaria com a energia $\hbar\omega = -E_g - (\hbar k)^2/2m_h^* + \hbar\omega_S$, onde $\hbar\omega_S$ é a energia da radiação espalhada. Os cálculos indicam que o estado do buraco, correspondendo a linha que vai de x_3 até x_1 no diagrama II b, tem largura de linha nula.

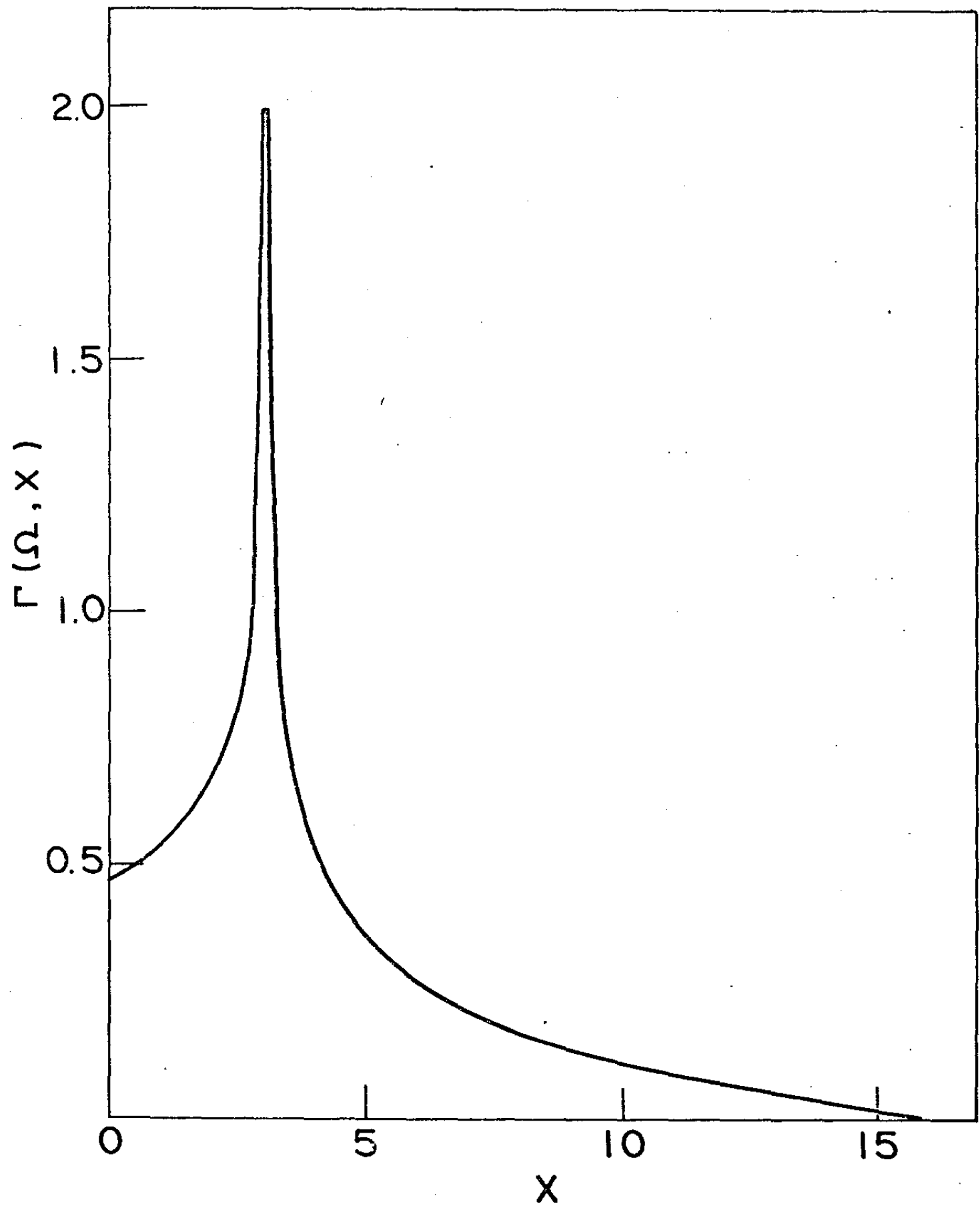


Fig. I.1

INTENSIDADE DE ESPALHAMENTO RAMAN (Uni. Arb)

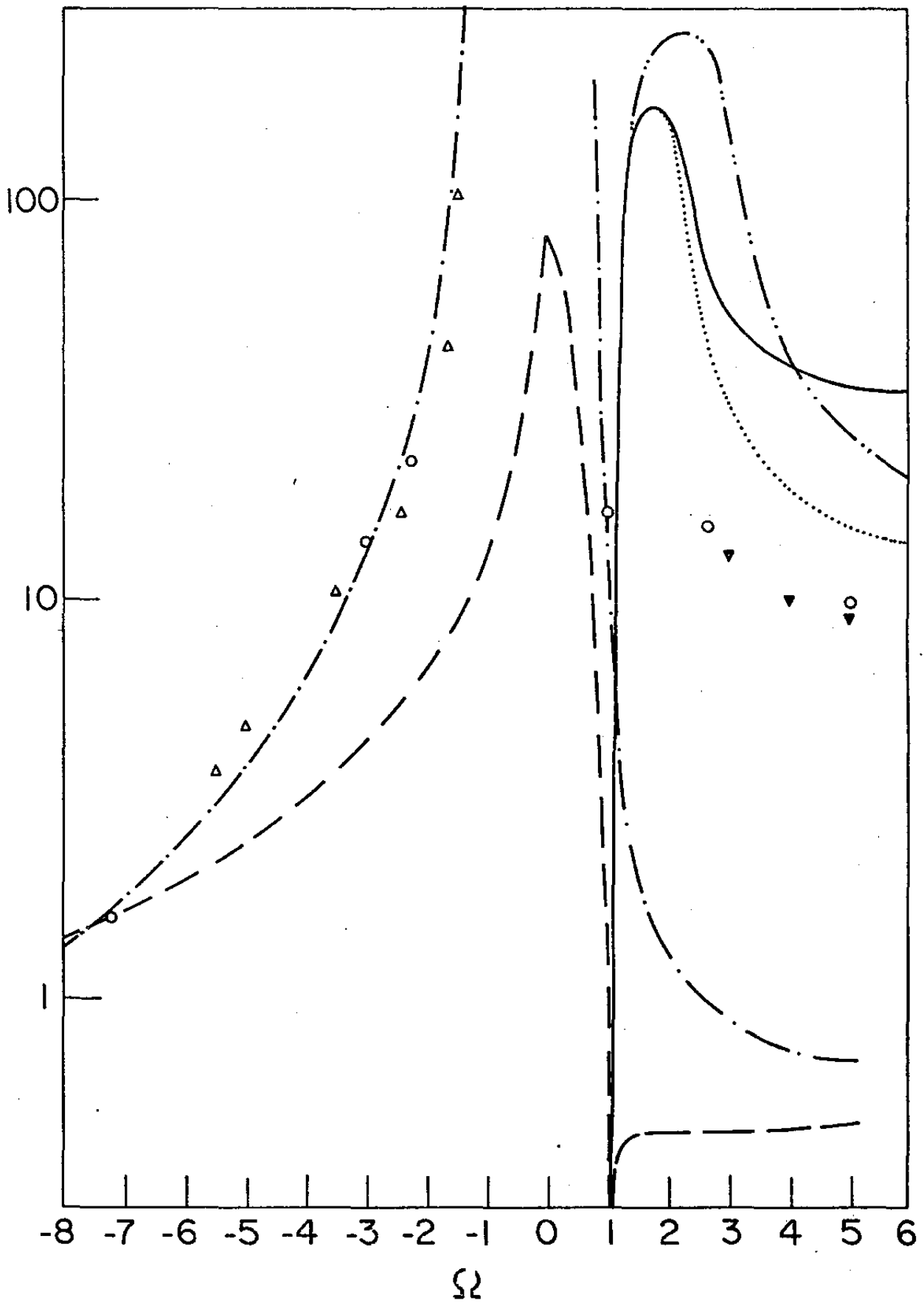


Fig. I.2

BIBLIOGRAFIA

1. L.N. Ovander, Fiz.Tverd. Tela 3, 2394 (1961) [English Transl.: Soviet Phys. - Solid State 3, 1737 (1962)]. Grechko, L.G. and Ovander, L.N. Soviet Phys. Solid State 4, 112 (1962).
2. R.Loudon, J.Phys. (Paris) 26, 677 (1965); Advan. Phys. 13, 423 (1964).
3. A.K.Ganguly and J.L.Birman, Phys.Rev. 162, 806 (1967)
4. R.C.C.Leite and S.P.S.Porto, Phys.Rev.Letters 17, 10 (1966).
5. R.C.C.Leite, T.C.Damen, and J.F.Scott, in Light Scattering in Solids, edited by G.B.Wright (Springer-Verlag), Inc., New York, (1969), p.p.359-368.
6. A.Pinczuk and E.Bustein, Phys.Rev.Letter 21, 1073 (1968).
7. R.C.C.Leite and J.F.Scott, Phys.Rev.Letter 22, 130 (1969).
8. R.C.C.Leite, J.F.Scott and T.C.Damen, Phys.Rev.Letter 22, 780 (1969); H.Klein and S.P.S.Porto, ibid 22, 782 (1969).
9. J.F.Scott, T.C.Damen, R.C.C.Leite, and W.T.Silfvast, Solid State Commun. 7, 953 (1969).
10. Poulet, H. Ann.Phys., Paris, 10, 908 (1955).
11. H.Fröhlich, Advances in Physics 3, 325 (1954).
12. Para esclarecimentos da contribuição da interação polar ao processo, a qual exige maior número de bandas, ver referência 3, secção III.
13. B.Bendow, J.L.Birman, A.K.Ganguly, T.C.Damen, R.C.C.Leite and J.F.Scott. Optics Communications, Vol.1, nº6, 267 (1970).
14. B.Bendow and J.L.Birman, Phys.Rev.B, vol.4, nº2, 569 (1971).
15. A principal origem do "damping" do exciton pode ser considerada vindo da interação com fonons acústicos. Y.Toyouzawa, Progr.Theoret. Phys.(Kyoto) 20, 53 (1958).

16. Ver fig.3 da ref.13.
17. B.Bendow and J.L. Birman, Phys.Rev.B,vol.1, n94, 1678 (1970). B.Bendow Phys. Rev.B, vol.2, n92, 5051 (1970)
18. R.Zeyher, C.S.Ting, J.J.Birman, Phys.Rev.B, vol.10, n94, 1725 (1974).
19. C.A.Ferrari, J.B.Salzberg and R.Luzzi, Solid State Communication, vol.15, 1081 (1974).
20. D.Pines: The many-Body Problem (A Lecture Note and Reprint Volume) W.A.Benjamin, Inc.New York (1962) pgs.31-33.

A. INTRODUÇÃO

Semicondutores tais como GaAs, CdS, InSb, InAs e outros, podem ser dopados de modo a ter uma concentração eletrônica na banda de condução entre 10^{15} a 10^{18} elétrons por centímetro cúbico. Os elétrons podem ser vistos como um gás denso no interior do cristal. Neste gás eletrônico as partículas interagem fortemente por causa do efeito de longo alcance da força de Coulomb, i.e., cada partícula interage simultaneamente com todas as outras. Como consequência as equações de movimento do sistema são de difícil solução. Soluções através da Teoria de Perturbação usual, baseada na hipótese de que a interação entre pares de partículas é pequena, não são possíveis. Bohm e Pines¹ propuseram o modelo do efeito coletivo dos elétrons do gás, em vez de considerá-los como partículas individuais. Este modelo torna possível um método simples para tratar a interação simultânea entre as várias partículas, ao contrário do tratamento de partículas individuais que considera a colisão entre pares.

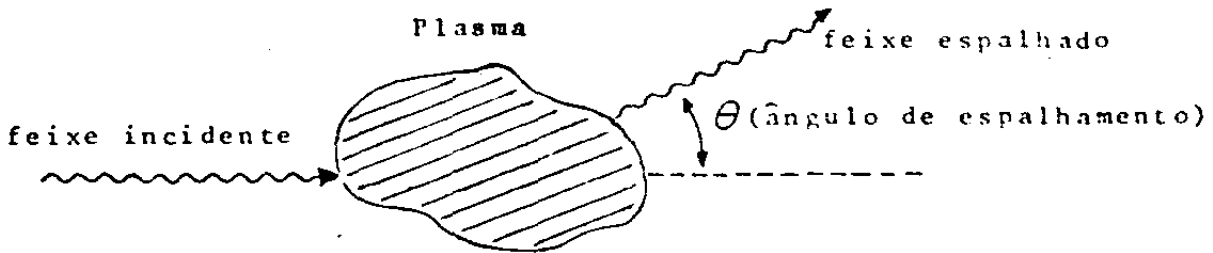
Em um trabalho posterior, Bohm e Pines² estudaram o comportamento dos elétrons componentes como pontos interagentes, para analisar a flutuação da densidade de um gás eletrônico denso. Em vez de seguirem o movimento das partículas individuais, descreveram o gás em termos de componentes de Fourier da densidade eletrônica em cada ponto no espaço. Verificaram que a flutuação da densidade pode ser dividida em duas partes. Uma parte representa uma oscilação organizada com frequência característica de plasma, e está claramente associada com o comportamento coletivo do sistema. A outra parte está associada com o movimento térmico aleatório das partículas individuais,

sem nenhum comportamento coletivo. Verificaram ainda que, para comprimento de onda maior que um comprimento crítico λ_D (comprimento de Debye), as flutuações estão associadas com o comportamento coletivo dos elétrons. Para comprimento de onda menor que λ_D , entretanto, as flutuações estão associadas com o movimento individual dos elétrons, e neste caso, o sistema é melhor descrito por um tratamento de partículas individuais.

Microscopicamente podemos entender os comportamentos dos elétrons, descritos acima, através do efeito de blindagem de seu campo. Quando qualquer elétron se move através do conjunto, os outros elétrons são afastados dele pela repulsão Coulombiana. Cada partícula fica assim envolvida por uma nuvem de extensão λ_D . Esta nuvem tem uma deficiência de elétrons, e é responsável pela blindagem do campo da partícula em questão. Como consequência, a seção de choque da colisão entre partículas é assim grandemente reduzida, dado que o caminho livre médio de um elétron é consideravelmente maior que o espaçamento entre partículas. Assim, para muitos propósitos, um elétron e mais sua nuvem associada podem ser vistos como uma partícula livre efetiva.

A divisão da flutuação da densidade das partículas de um gás eletrônico, em componentes coletivo e individual, aproximadamente independentes, pode ser vista da seguinte maneira. O componente coletivo é produzido pelo efeito de longo alcance da força Coulombiana que leva às interações simultâneas entre as partículas. O componente individual representa a flutuação da densidade, originada do movimento caótico das partículas individuais envolvidas por suas nuvens. Inclui os efeitos da força Coulombiana blindada, agora de pequeno alcance, que leva somente à colisão entre dois corpos.

É de interesse estudar o efeito coletivo (plasma) usando a técnica de espalhamento de luz. Um diagrama esquemático de uma experiência típica de espalhamento de luz é o seguinte:



O processo ocorre sem a luz incidente ser espalhada fortemente nem absorvida. Em plasma de semicondutores esta condição é equivalente à restrição³:

$$\omega_p < \omega_L < E_g/\hbar$$

onde ω_p , ω_L e E_g são respectivamente, as frequências do plasmon (quantum da excitação coletiva no plasma), luz incidente e energia de excitação eletrônica da amostra.

Em muitos casos de espalhamento em que $|R_{\vec{q}}| \approx |R_{\vec{L}}|$, a transferência de momento dada pela conservação de momento do processo é:

$$q \approx 2k_L \sin \theta/2$$

A energia $\hbar\omega$ transferida ao sistema, é:

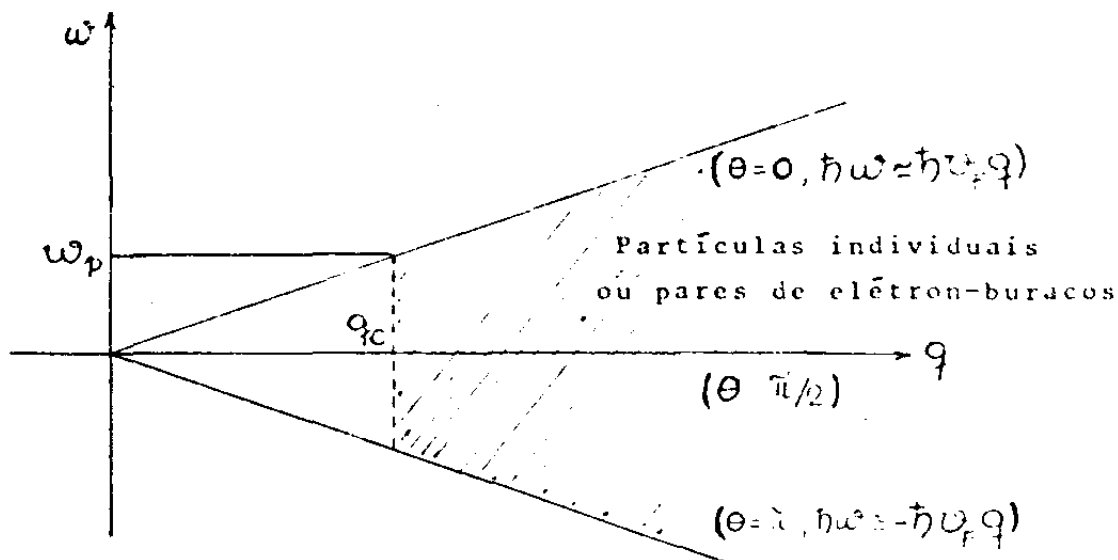
$$\hbar\omega = E_{R+\vec{q}} - E_{R^*} \approx \hbar^2 (k/m_e) q \cos \theta$$

A temperatura $T \sim 0$, somente uma pequena fração dos elétrons da banda ($\sim k_B T/E_F$) participam do processo. São, justamente, os elétrons que se encontram mais próximos do nível de Fermi. Assim a fórmula acima fica:

$$\hbar\omega \approx \hbar^2 (k_F/m_e) q \cos \theta = \hbar v_F q \cos \theta$$

onde v_F é a velocidade de Fermi. A relação entre energia $\hbar\omega$ e momento $\hbar q$, para alguns ângulos de espalhamento, é vista no

diagrama:



No diagrama acima, o ponto q_c indica a transferência de momento crítico. Num sistema degenerado, i.e., que se encontra a baixas temperaturas, q_c corresponde ao momento q_{TF} de Thomas-Fermi. Momentos abaixo de q_c , indicam no sistema plasma e partículas individuais. Acima de q_c , tem-se apenas pares de partículas, que correspondem à área hachurada do diagrama. Caso o sistema seja não degenerado, i.e., encontre-se a altas temperaturas, q_c corresponde ao comprimento da onda λ_D de Debye. Estes são os parâmetros mais importantes que caracterizam o plasma.

Mooradian e Wright⁴ foram os primeiros a fazerem experiências de espalhamento de luz envolvendo modos de vibração do plasma de um sólido. O plasma foi criado em uma amostra de GaAs dopando-o, tipo-n. A fonte de luz foi um laser Nd:YAG. Esta radiação tem energia bem abaixo da energia de excitação do GaAs, e é suficientemente alta para que a absorção por portadores livres seja desprezível ($\omega_p < \omega_L < E_g/\hbar$). Numa experiência de espalhamento Raman, puderam identificar perfeitamen

te os picos devidos ao espalhamento por fonon LO ($\Delta\omega = \omega_L - \omega_S = \omega_{LO}$) por fonon TO ($\Delta\omega = \omega_T$) e pelo plasmon ($\Delta\omega = \omega_p$), cujo deslocamento varia com a concentração eletrônica n_c da amostra ($\Delta\omega = \omega_p = [4\pi n_c e^2 / \epsilon_0 m_e^*]^{1/2}$)⁽²⁾. Estes picos assim aparecem quando $\omega_p \neq \omega_{LO}$. Entretanto, quando a concentração n_c é tal que ω_p se aproxima de ω_{LO} , estes dois modos se comportam de maneira mais complicada. Como ambos são modos longitudinais em natureza, uma hibridização pode ocorrer, resultante da interação entre o campo coulombiano de elétrons e íons.

Varga⁵ apresentou um modelo para explicar esta hibridização, para um semiconductor polar degenerado. Usou o formalismo da Função Dielétrica, onde considerou na constante dielétrica total do cristal termos devidos ao plasma e ao fonon. Foi suficiente analisar o comportamento desta função para $k \rightarrow 0$, desde que, quando $\omega_p \approx \omega_{LO}$, o vetor de onda crítico \vec{q}_c do gás de elétrons é grande comparado a k_L^* . Sob estas condições, e para o caso de um cristal cúbico tal como o GaAs, que tem somente dois átomos por célula unitária, a função dielétrica fica:

$$(II.1) \quad \epsilon(\omega) = \epsilon_\infty + (\epsilon_0 - \epsilon_\infty) \frac{\omega_T^2}{(\omega_T^2 - \omega^2)} - 4\pi n_c e^2 / (m^* \omega^2)$$

onde ϵ_∞ e ϵ_0 são as constantes dielétricas de alta e baixa frequência, respectivamente, e ω_T é a frequência do fonon transversal óptico.

As raízes de $\epsilon(\omega)$, são:

$$(II.2) \quad \omega_{\pm}^2 = \frac{1}{2} (\omega_{LO}^2 + \omega_p^2) \pm \frac{1}{2} [(\omega_{LO}^2 + \omega_p^2)^2 - 4\omega_p^2 \omega_T^2]^{1/2}$$

Este resultado de Varga está em excelente acordo com as experi-

ências de Moorodian e Wright⁴. A figura II.4 mostra o comportamento da expressão acima, Tem-se assim, pela Teoria de Varga, bons resultados para o posicionamento dos picos dos modos ω_+ e ω_- na relação de dispersão de frequência com a concentração eletrônica do semiconductor.

Posteriormente, Scott, Damen, Ruvalds e Zawadowski⁶, apresentaram para o Sulfeto de Cádmió (CdS) degenerado e dopado tipo n, um modelo para espalhamento Raman dos modos híbridos ω_+ e ω_- . Estes autores foram motivados pela forte semelhança entre a forma de linha do plasmon no CdS e o espectro do fonon de BaTiO₃^{7,8} e AlPO₄⁹. Nestes casos, dois diferentes fonons ópticos contribuem ao espectro Raman de primeira ordem e interagem via acoplamento a um estado intermediário de dois fonons acústicos^{8,9}. A interferência do tipo-Fano¹⁰ aparece no espectro como resultado da interação não harmônica de uma maneira semelhante ao resultado anterior de Barker e Hopfield¹¹, que se baseiam em um modelo clássico. Usaram a técnica das funções de Green¹² para calcular, na aproximação de fase aleatória (R.P.A), a função de correlação carga-carga da secção de espalhamento segundo formalismo de Van Hove¹³. Esta função de correlação é definida por uma densidade de carga efetiva dada pela soma da densidade de carga eletrônica (Plasmon) ρ_q^e e a densidade de carga iônica ρ_q^i multiplicada por parâmetro complexo λ_q . Este parâmetro determina a proporção de contribuição eletrônica e iônica no processo de espalhamento, e é ajustável através dos resultados experimentais. O caráter hibridizante do espectro Raman provém dos termos não diagonais da função de correlação, i.e., aqueles formados pela combinação das densidades de carga eletrônica e iônica. Os autores interpretaram a interação entre as excitações como puramente Coulombiana.

Este modelo de Scott et.al. reproduz a secção de espalhamento de luz, derivada com base na formulação da função dielétrica de Varga⁵, tomando-se como nula a parte imaginária do parâmetro λ_q e como unitária sua parte real. Experiências com silício, Si, de tipo-p, foram efetuadas por Cerdeira, Fjeldv e Cardona¹⁴. Observaram efeitos de interferência num espalhamento de luz inelástico, evidenciados pela forma de linha e alargamento da banda quando comparado com o espalhamento Raman de luz por um fonon do cristal. Estes efeitos foram interpretados em termos do mecanismo de acoplamento de Breit-Wigner¹⁵ como descrito por Fano¹⁶.

Mais recentemente Balkanski, Jain, Beserman e Jouanne¹⁷ divulgaram uma teoria, mais geral que a de seus predecessores, para interferência de excitações discretas e contínuas, com o sistema a uma determinada temperatura. Nesta, seria tratável o problema referente a um fonon excitado (estado discreto) justaposto a uma transição eletrônica entre as várias bandas (estados do contínuo) de um semicondutor. Formularam a teoria microscópica do espalhamento Raman do sistema no qual ambos os estados discreto e contínuo podem ser excitados simultaneamente de maneira análoga às das referências 6 e 18. Esta teoria é diferente da teoria de Breit-Wigner-Fano desde que seu tratamento é estatístico-quântico em caráter, enquanto mantém a natureza essencial da interferência. Incorporaram também efeitos de temperatura. A secção de choque do espalhamento de luz foi expressa em termos de um fator de forma dinâmico generalizado $\tilde{S}(\vec{q}, \omega)$. O $\tilde{S}(\vec{q}, \omega)$ é uma generalização do fator de forma dinâmico de Van Hove¹³, para a aproximação de segunda ordem de Born, a fim de incluir a ressonância da luz incidente e espalhada com estados intermediários do espalhador. Este fator foi relacionado a uma função

de Green composta, que inclui o acoplamento entre os estados discreto e contínuo devido à interação elétron-fonon. Os autores calcularam $\tilde{S}(\vec{q}, \omega)$ na aproximação das fases aleatórias (R.P.A) através de uma soma seletiva de diagramas. Assim, mostram que a forma assimétrica da linha do espalhamento é devido a presença de um estado composto no qual é impossível separar as características de fonon e de elétron do espalhamento. Como ilustração da teoria, apresentaram resultados para o Silício, Si, no qual aproximaram a interação elétron-fonon por uma constante, dado o pequeno alcance do potencial de deformação deste semiconductor.

B. TRATAMENTO DA INTERFERÊNCIA
PARA SISTEMA EM QUASI-EQUILÍBRIO TÉRMICO

Neste capítulo, será apresentado um estudo em que é sugerido um mecanismo pelo qual se dá o processo de espalhamento de radiação pela hibridização do plasmon com o fonon longitudinal óptico, LO. Será considerada uma situação na qual cada uma das excitações envolvidas se encontrem em não equilíbrio térmico*. A participação relevante de excitações elementares em semicondutores, em regime de não equilíbrio térmico, no processo de espalhamento de luz, é evidente pela variedade de resultados experimentais publicados^{20,21}. Por este modelo, plasmon-fonon LO resulta da interação entre o campo elétrico da densidade de carga do elétron e do fonon LO na forma do hamiltoniano de Fröhlich. Para a obtenção da secção de choque do espalhamento de luz, o formalismo de Van Hove¹³, é tornado adequado para o tratamento de sistemas em não equilíbrio térmico.

Fundamentalmente, a idéia é tratar o sistema formado por dois subsistemas, eletrônico e iônico, espalhando independentemente a radiação de excitação, usando-se para isto a teoria da Funções de Green¹². Obtem-se as amplitudes de probabilidade $(\mathcal{U}_a)_{if}$ e $(\mathcal{U}_b)_{if}$, dos subsistemas eletrônico e iônico, respectivamente, para passar do estado inicial i ao estado final f , com \mathcal{U}_a e \mathcal{U}_b os operadores espalhamento para cada um dos ditos subsistemas relativos aos processos especificados na figura .

*Mais adiante se dá uma explicação detalhada pelo que se entende por sistema em não equilíbrio térmico ou quasi-equilíbrio térmico.

A amplitude de probabilidade total, \mathcal{U}_{if} definida como

$$(II.3) \quad \mathcal{U}_{if} = \langle f | \mathcal{U} | i \rangle = (\mathcal{U}_a)_{if} + (\mathcal{U}_b)_{if}$$

com \mathcal{U} o operador espalhamento total, levará a mistura os dois subsistemas, dando origem assim ao processo de interferência.

A temperatura de cada subsistema, bem como a interação Coulombiana entre eles serão levadas em conta através do formalismo de Zubarev²².

A probabilidade total do sistema passar do estado inicial $|i\rangle$ para o estado final $|f\rangle$ é dado pela Regra de Fermi.

$$(II.4) \quad dW_{if} = (2\pi/\hbar) |\langle f | \tilde{\mathcal{U}} | i \rangle|^2 \delta(E_f - E_i)$$

com

$$(II.5) \quad \mathcal{U} = \tilde{\mathcal{U}} \delta(E_f - E_i),$$

$$(II.6) \quad E_i = \hbar\omega_L + E_i^{el} + E_i^{ph} \quad \text{e} \quad E_f = \hbar\omega_S + E_f^{el} + E_f^{ph},$$

e os estados inicial $|i\rangle$ e final $|f\rangle$,

$$(II.7) \quad \begin{aligned} |i\rangle &= |k_L\rangle |p_i\rangle |q\rangle, \\ |f\rangle &= |k_S\rangle |p_f\rangle |q'\rangle, \end{aligned}$$

onde p_i e p_f são, respectivamente, quadrivetor momento e energia do elétron inicial e final, q e q' são, respectivamente, quadrivetores momento e energia do fonon inicial e final.

Tomando a média estatística sobre os estados iniciais e somando sobre os estados finais tem-se:

$$(II.8) \quad dW_{if} = \left(\frac{2\pi}{\hbar} / Z_{ph} Z_{el} \right) \sum_{i,f} (n_S + 1) n_L \exp[-(E_i^{el}/(k_B T)^e + E_i^{ph}/(k_B T)^f)] \\ \times \langle i | \tilde{\mathcal{U}}^\dagger | f \rangle \langle f | \tilde{\mathcal{U}} | i \rangle \delta(E_f - E_i)$$

sendo Z_{ph} e Z_{el} as Funções de Partição do sistema iônico e eletrônico, respectivamente, dadas por:

$$(II.9^a) \quad Z_{ph} = T_n \exp(-H_{ph}^0 / (k_B T^*)) ,$$

e

$$(II.9^b) \quad Z_{el} = T_n \exp(-H_{el}^0 / (k_B T^e)) ,$$

onde H_{ph}^0 e H_{el}^0 são os hamiltonianos livres do sistema iônico e eletrônico, respectivamente, e sendo T^* e T^e as temperaturas dos subsistemas iônico e eletrônico, respectivamente. Substituindo em IIS a função δ de Dirac por sua representação integral, pode-se escrever:

$$dw_{if} = \left(\frac{2\pi}{\hbar} / (Z_{ph} Z_{el}) \right) \sum_{i,t} \exp \left[- \left(E_i^{el} / (k_B T^e) + E_i^{ph} / (k_B T^*) \right) \right]$$

(II.10)

$$\times \int_{-\infty}^{\infty} dt \exp[-i(\omega_i - \omega_s)t] (n_s + 1) n_L \langle i | \tilde{V}^{\dagger}(0) | f \rangle \langle f | \tilde{V}(t) | i \rangle$$

ou

$$(II.11) \quad dw_{if} = (2\pi/\hbar) (n_s + 1) n_L \int_{-\infty}^{\infty} dt \exp[-i(\omega_i - \omega_s)t] \langle \tilde{V}^{\dagger}(0) \tilde{V}(t) \rangle$$

Tem-se assim a probabilidade de passagem do sistema no estado inicial $|i\rangle$ ao estado final $|f\rangle$ em termos do valor estatístico médio do produto de \tilde{V} e \tilde{V}^{\dagger} definidos a tempos diferentes.

O espectro Raman completo contendo ambos espalhamentos pela excitação iônica e eletrônica, resulta do processo esquematizado na fig. 11.4. Eles são separados em dois conjuntos, em I envolvendo a contribuição em Λ^2 da interação elétron-radiação

e II envolvendo a contribuição $\vec{A} \cdot \vec{p}$ do hamiltoniano de interação eletrôn-radiação H_{ER} . As contribuições dos processos T_{bd} desaparecem identicamente na aproximação de dipolo, enquanto que II_a envolvendo transição intrabanda tendo como estado intermediário eletrôn da banda de valência, são desprezíveis²³ quando comparada com I_a . Entretanto, em condições de ressonância, assunto do próximo capítulo, a situação se inverte.

Então, a partir dos gráficos da fig.II.4, e usando as regras usuais da Teoria das Funções de Green vistas como propagadores*, tem-se de I_a ,

(II.12)
$$\mathcal{I}_{I_a} = A(q) \rho_q^e \delta(E_f + \hbar\omega_s - E_i - \hbar\omega_L)$$

onde

(II.13)
$$A(q) = -i 2 \frac{e^2}{2m_e^* c^2} \frac{(2\tilde{\hbar}^2 c^2 / \epsilon\omega)}{\sqrt{4\omega_L \omega_s}} (2\tilde{\hbar})^4 (\hat{E}_L \hat{E}_s)$$

(II.14)
$$\rho_q^e = 1/N \sum_{\vec{k}} C_{\vec{k}+\vec{q}}^\dagger C_{\vec{k}}$$

e de , tem-se,

(II.15)
$$\mathcal{I}_{II_b} = B(q) \rho_q^i \delta(E_f + \hbar\omega_s - E_i - \hbar\omega_L)$$

onde

(II.16)
$$B(q) = -i (2\tilde{\hbar})^3 (2\hbar e^4 / m_e^2) 1/(2\epsilon\omega_s \sqrt{4\omega_L \omega_s}) 1/q^2 (\hat{E}_s \vec{p}_L) (\hat{E}_L \vec{p}_s) \{I_+ + I_-\}$$

(II.17)
$$\rho_q^i = \alpha (a_{\vec{q}} + a_{-\vec{q}}^\dagger)$$

com I_+ e I_- definidos em A.22. E C_q^\dagger e C_q operadores de criação e aniquilação de elétrons de momento q e, a_q^\dagger e a_q de fonons, respectivamente.

O espectro Raman completo, contendo ambos espalhamento pela excitação iônica e eletrônica, resulta de

(II.18)
$$\mathcal{I} = \mathcal{I}_{I_a} + \mathcal{I}_{II_b}$$

*Ver apêndice A

Na regra de Fermi o valor estatístico do produto $\tilde{U}^\dagger(0) \tilde{U}(t)$ é:

$$\begin{aligned} \langle \tilde{U}^\dagger(0) \tilde{U}(t) \rangle &= \langle (A(q)^* \rho_q^\dagger(0) + B(q)^* \rho_q^i(0)) (A(q) \rho_q^e(t) + B(q) \rho_q^i(t)) \rangle \\ &= \langle |A(q)|^2 \rho_q^e(0) \rho_q^e(t) + A(q)^* B(q) \rho_q^e(0) \rho_q^i(t) \\ &\quad + B(q)^* A(q) \rho_q^i(0) \rho_q^e(t) + |B(q)|^2 \rho_q^i(0) \rho_q^i(t) \rangle \end{aligned}$$

ou

$$(II.19) \quad \langle \tilde{U}^\dagger(0) \tilde{U}(t) \rangle = |A(q)|^2 \left\{ \langle \rho_q^e(0) \rho_q^e(t) \rangle + \frac{A(q)B(q)^*}{|A(q)|^2} \langle \rho_q^e(0) \rho_q^i(t) \rangle \right. \\ \left. + \frac{A(q)^* B(q)}{|A(q)|^2} \langle \rho_q^i(0) \rho_q^e(t) \rangle + \frac{|B(q)|^2}{|A(q)|^2} \langle \rho_q^i(0) \rho_q^i(t) \rangle \right\}$$

De acordo com a generalização do formalismo de Van Hove*, adequando-o ao tratamento de nosso sistema, podemos escrever a seção de espalhamento por unidade de frequência e ângulo sólido como:

$$(II.20) \quad \frac{d\sigma}{d\omega d\Omega} \sim \frac{e^2}{\epsilon_\infty^2} \left\{ [1 - \exp(-\beta^e \omega)]^{-1} \text{Im} G(\vec{q}, \omega)^{ee} + [1 - \exp(-\beta^* \omega)]^{-1} \right. \\ \times \text{Im} \frac{|B(q)|^2}{|A(q)|^2} G(\vec{q}, \omega)^{ii} + [1 - \exp(-\beta^* \omega)]^{-1} \text{Im} \frac{A(q)B(q)^*}{|A(q)|^2} G(\vec{q}, \omega)^{ei} \\ \left. \times [1 - \exp(-\beta^e \omega)]^{-1} \text{Im} \frac{A(q)^* B(q)}{|A(q)|^2} G(\vec{q}, \omega)^{ie} \right\}$$

*Ver apêndice C

Considerando que,

$$\langle \rho_{(0)}^+ \rho_q^i(t) \rangle \equiv \langle \rho_q^i(0) \rho_q^e(t) \rangle ,$$

e conseqüentemente

$$\text{Im } G(\vec{q}, \omega) \equiv \text{Im } G(\vec{q}, \omega) ,$$

e ainda, que

$$A^*(q)B(q) \equiv A(q) \cdot B^*(q) ,$$

pois A e B são imaginários puros, obtemos para II.20 a seguinte expressão:

$$(II.21) \quad \frac{d^2 G}{d\omega d\Omega} \sim \frac{e^2}{\epsilon_0} \left\{ [1 - \exp(-\beta^e \omega)]^{-1} \text{Im } G(\vec{q}, \omega) + \frac{|B(q)|^2}{|A(q)|^2} [1 - \exp(-\beta^* \omega)]^{-1} \right. \\ \left. \times \text{Im } G(\vec{q}, \omega) + \frac{A(q)B^*(q)}{|A(q)|^2} \{ [1 - \exp(-\beta^e \omega)]^{-1} + [1 - \exp(-\beta^* \omega)]^{-1} \} \text{Im } G(\vec{q}, \omega) \right\}$$

Calcula-se agora cada um dos termos imaginários das Funções de Green que aparecem em II.21.

FUNÇÕES DE GREEN

Neste cálculo, inicialmente, usa-se a equação de movimento da Função de Green. Define-se esta função como:

$$(II.22) \quad G(t, t') = \langle\langle A(t) | B(t') \rangle\rangle = -i \langle T(A(t) B(t')) \rangle .$$

A presença do operador T , que ordena os operadores do produto no tempo, permite-nos pô-la na forma:

$$(II.23) \quad \langle\langle A(t) | B(t') \rangle\rangle = -i\theta(t-t') \langle A(t) B(t') \rangle - i\eta\theta(t'-t) \langle B(t) A(t) \rangle,$$

Sendo θ a Função de Heaviside e η fator de valor (+1) ou (-1) dependendo se A e B são operadores de bosons ou fermions.

A Transformada de Fourier da expressão II.23 é:

$$(II.24) \quad \langle\langle A(t) | B(t') \rangle\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \langle\langle A | B; \omega \rangle\rangle \exp[i\omega(t-t')] d\omega.$$

Diferenciando II.24 em relação ao tempo, e usando II.23

obtem-se que:

$$(II.25) \quad \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \omega \langle\langle A | B; \omega \rangle\rangle \exp[i\omega(t-t')] \\ = \delta(t-t') \langle [A(t), B(t')]_{\pm} \rangle + \langle\langle [A(t), H] | B(t') \rangle\rangle,$$

ou tomando a Transformada de Fourier do segundo membro, tira-se:

$$(II.26) \quad \omega \langle\langle A | B; \omega \rangle\rangle = \frac{1}{2\pi} \langle [A, B]_{\pm} \rangle + \langle\langle [A, H] | B; \omega \rangle\rangle$$

sendo H o Hamiltoniano de interação H_{int} mais o livre H_0 .

Os operadores A e B , no caso a se tratar, são as densidades de partículas, eletrônicas ρ_q^e ou iônicas ρ_q^i , definidas em II.14 e II.17, respectivamente. Para o Hamiltoniano de interação coulombiana, escreve-se:

$$(II.27) \quad H_{cov.} = \frac{1}{2} \sum_{\vec{q}} (4\pi e^2 / \epsilon_{\infty} q^2) \rho_{\vec{q}} \rho_{-\vec{q}},$$

com $\rho_{\vec{q}}$ tomando os valores $\rho_{\vec{q}}^e$ e $\rho_{\vec{q}}^i$.

Partindo da equação de movimento para $\langle\langle \rho_{\vec{q}}^e | \rho_{\vec{q}}^{\dagger e}; \omega \rangle\rangle$, após alguma álgebra*, obtemos, usando notação dada no apêndice D:

$$(II.28^a) \quad [1 + V_q L(\vec{q}, \omega)] G(\vec{q}, \omega)^{ee} - V_q L(\vec{q}, \omega) G(\vec{q}, \omega)^{ie} + \frac{1}{2\pi} L(\vec{q}, \omega) = 0$$

Analogamente, para os termos $\langle\langle \rho_{\vec{q}}^e | \rho_{\vec{q}}^i; \omega \rangle\rangle$, $\langle\langle \rho_{\vec{q}}^i | \rho_{\vec{q}}^e; \omega \rangle\rangle$ e $\langle\langle \rho_{\vec{q}}^i | \rho_{\vec{q}}^{\dagger i}; \omega \rangle\rangle$ obtemos as suas respectivas equações:

$$(II.28^b) \quad [1 + V_q L(\vec{q}, \omega)] G(\vec{q}, \omega)^{ei} - V_q L(\vec{q}, \omega) G(\vec{q}, \omega)^{ii} = 0$$

$$(II.28^c) \quad [\omega^2 - \omega_q^2 - \Omega_q^2] G(\vec{q}, \omega)^{ie} + \Omega_q^2 G(\vec{q}, \omega)^{ee} = 0$$

e

$$(II.28^d) \quad [\omega^2 - \omega_q^2 - \Omega_q^2] G(\vec{q}, \omega)^{ii} + \Omega_q^2 G(\vec{q}, \omega)^{ei} - \frac{1}{4\pi} \frac{\Omega_q^2}{V_q} = 0$$

sendo

$$(II.29) \quad L(\vec{q}, \omega) = \sum_{\vec{k}} (\eta_{\vec{k}} - \eta_{\vec{k}+\vec{q}}) / (i\omega - E_{\vec{k}} + E_{\vec{k}+\vec{q}})$$

onde $\eta_{\vec{k}}$ é o operador número de partícula, e

$$(II.30) \quad V_q = (2\pi e^2 / \epsilon_{\infty} q^2) V$$

e finalmente,

$$(II.31) \quad \Omega_q^2 = 4 V_q Q_q Q_q^* (\omega_q \hbar)$$

Do sistema de Equações II.28, podemos obter:

$$(II.32^a) \quad G(\vec{q}, \omega)^{ee} = \frac{1}{2\pi} M(\vec{q}, \omega) \left(1 - \Omega_q^2 V_q M(\vec{q}, \omega) / D_q^2 \right)$$

$$(II.32^b) \quad G(\vec{q}, \omega)^{ei} = G(\vec{q}, \omega)^{ie} = \frac{1}{2\pi} \Omega_q^2 M(\vec{q}, \omega) / D_q^2$$

$$(II.32^c) \quad G(\vec{q}, \omega)^{ii} = \frac{1}{2\pi} \left(\Omega_q^2 / V_q \right) / D_q^2$$

* Ver apêndice D

sendo,

$$(II.33) \quad M(\vec{q}, \omega) = L(\vec{q}, \omega) / (1 + v_q L(\vec{q}, \omega))$$

e,

$$(II.34) \quad D_q^2 = \omega^2 - \omega_q^2 - \Omega_q^2 / (1 + v_q L(\vec{q}, \omega))$$

Para o cálculo de $L(\vec{q}, \omega)$, considera-se no sistema situações de altas temperaturas T ($T \gg T_F$, T_F sendo a temperatura de Fermi), que conduz ao caso clássico e permitirá se usar a distribuição de Boltzmann para η , a distribuição de partículas. Assim*:

$$(II.35) \quad L(\vec{q}, \omega + i\epsilon) = n\beta^e \left[1 - \frac{2}{\sqrt{\pi}} A^3 I_q \right] + i 2\sqrt{\pi} n\beta^e A \exp(-A^2) = \int_{-1}^1 + i \int''$$

sendo

$$A = \omega / (q v_t)$$

onde v_t é a velocidade térmica (definida em $3/(2m_e^*) = 1/(m_e^* v_t^2)$),

e

$$(II.36) \quad I_q = \int_0^{\infty} dx x \exp(-A^2 x^2) \ln |(x+1)/(x-1)| \\ = (\sqrt{\pi} / A^2) D(|A|)$$

onde $D(|A|)$ é a chamada integral de Dawson,

$$(II.37) \quad D(x) = \exp(-x^2) \int_0^{|x|} \exp(u^2) du$$

tabelada em "Handbook of Mathematical Functions": Abramowitz and Stegun, página 318.

Do conjunto das equações II.32, substituindo a função complexa $L(\vec{q}, \omega)$, dado sua parte real (α') e imaginária (α'') em II.35, obtemos**

*Ver apêndice E

**Ver apêndice D

$$(II.38^a) \quad V_q \operatorname{Im} G(\vec{q}, \omega + i\Gamma_{ph}) = -(1/2\pi) \left\{ (V_q \alpha'')^2 (\omega_L^2 - \omega_0^2) \omega \Gamma_{ph} \right. \\ \left. + V_q \alpha'' (\omega^2 - \omega_L^2) [(\omega^2 - \omega_L^2) - \omega \Gamma_{ph} V_q \alpha''] \right. \\ \left. + V_q \alpha'' \omega \Gamma_{ph} [V_q \alpha'' (\omega^2 - \omega_0^2) + \omega \Gamma_{ph}] \right\} / D_q^2,$$

$$(II.38^b) \quad V_q \operatorname{Im} G(\vec{q}, \omega + i\Gamma_{ph}) \equiv V_q \operatorname{Im} G(\vec{q}, \omega + i\Gamma_{ph}) = (1/2\pi) \Omega_q^2 \\ \times \left\{ \alpha'' V_q [(\omega^2 - \omega_L^2) - \alpha'' V_q \omega \Gamma_{ph}] \right. \\ \left. - \alpha' V_q (1 + \alpha' V_q) \omega \Gamma_{ph} \right\} / D_q^2,$$

$$(II.38^c) \quad V_q \operatorname{Im} G(\vec{q}, \omega + i\Gamma_{ph}) = (1/2\pi) \Omega_q^2 \left\{ \alpha'' V_q (\omega_q^2 - \omega_L^2) \right. \\ \left. - \omega \Gamma_{ph} [(V_q \alpha'')^2 + (1 + V_q \alpha'')^2] \right\} / D_q^2,$$

onde Γ_{ph}^{-1} é a vida média do fonon e ω_0 frequência do fonon LO, e

$$(II.39) \quad D_q^2 = [(\omega^2 - \omega_L^2) + \alpha' V_q (\omega^2 - \omega_q^2) - \alpha'' V_q \omega \Gamma_{ph}]^2 \\ + [\alpha'' V_q (\omega^2 - \omega_q^2) + (\alpha' V_q + 1) \omega \Gamma_{ph}]^2.$$

Na obtenção das fórmulas II.38 usa-se o valor para o produto

$$(II.40) \quad Q_q^+ Q_q^- = 1/(4V_q) [(i\omega_L)^2 - (i\omega)^2] / (i\omega)$$

Para obter este valor, calcula-se Q_q - que aparece em II.17, na definição de β_q^+ - da expressão desenvolvida do hamiltoniano de

interação eletrôn-fonon II.27 usada por nós

$$(II.41) \quad H_{el-ph}^{int} = \sum_{\vec{q}} (2\tilde{u} e^2 / \epsilon_{\infty} q^2) \left(\frac{p_{\vec{q}}}{q} \right)^i \left(\frac{p_{-\vec{q}}}{-q} \right)^e$$

e compara-se com a expressão de Fröhlich para a interação eletrôn-fonon, dada por:

$$(II.42) \quad H_{Fröhlich}^{int} = \sum_{\vec{q}} \gamma_{\vec{q}} (b_{\vec{q}} + b_{-\vec{q}}^{\dagger}) \sum_{\vec{k}} C_{\vec{k}+\vec{q}}^{\dagger} C_{\vec{k}}$$

onde

$$(II.43) \quad \gamma_{\vec{q}} = i (e/q) \sqrt{(2\pi\hbar/v)} (\sqrt{\omega_{\vec{q}}}/\epsilon_{\infty}) \times (\epsilon_c - \epsilon_{cc})^{1/2}$$

Temos assim especificado todos os termos para o cálculo dos imaginários das Funções de Green do problema para obter-se a secção de espalhamento dada por II.20.

Deve-se observar nos cálculos acima, que o único mecanismo de relaxação presente é o amortecimento de Landau ("Landau damping") da excitação eletrônica. Efeitos adicionais de amortecimento são introduzido de maneira fenomenológica, substituindo-se em , a frequência ω^2 por $\omega^2 + i\omega\Gamma_{ph}$, onde Γ_{ph} é a vida média do fonon. O amortecimento da excitação do plasma, também entra no formalismo de maneira fenomenológica adicionando-se no amortecimento de Landau o termo (ver Apêndice E):

$$(\omega_p^2 \tau_{pe}) [\omega (1 + \omega^2 \tau_{pe}^2)]^{-1}$$

onde τ_{pe} é o tempo de vida do plasma.

Os resultados de Scott et.al.⁶ à temperatura zero, são recuperados, e conseqüentemente a função dielétrica de Varga⁵, se se anula na presente teoria o termo de interação

Usando os dados numéricos da tabela I e os valores da concentração e temperaturas dos subsistemas indicadas nas figuras mostra-se nas figuras seguintes o espectro Raman para o GaAs derivado de II.20.

COMENTÁRIOS FINAIS

Após ter-se tratado, no capítulo I, o problema do espalhamento Raman na região de ressonância (R.R.S) em semicondutores polares isolantes, de banda proibida direta, interessou-nos este mesmo problema com a banda de condução densamente populada. Relegamos o estudo da situação ressonante para o capítulo III e nos ocupamos no capítulo II com o problema não ressonante. Para isso precisou-se estudar a formação de excitações (plasmons) produzidas pelos elétrons de condução devido à interação coulombiana atuante entre eles. A natureza longitudinal desta excitação e sua interação com os fonons LO, tomada na forma do hamiltoniano de Fröhlich, resulta na formação de modos híbridos. Usando-se a técnica das Funções de Green de Zubarev²² e a técnica de propagadores, calculou-se a secção de espalhamento deste sistema, na aproximação de fases aleatórias (R.P.A). Para uma descrição mais realística, tratou-se o sistema em quase equilíbrio térmico, associando-se a cada subsistema uma temperatura definida, T^e para o subsistema eletrônico e T^* para o subsistema iônico. Essa maneira de encarar o sistema exigiu uma generalização do Teorema de Flutuação-dissipação.

Como resultados, apresenta-se na figura II.1, o comportamento da secção de espalhamento, como função do deslocamento de frequência, para diversas concentrações. A aplicação da teoria foi feita para o GaAs com o subsistema eletrônico não degenerado, i.é., $T^e \gg T_F$, onde T_F é a temperatura de Fermi. Nota-se pela figura, que para baixa concentração (por exemplo, $n = 2.0 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$) tem-se a intensidade de espalhamento apenas por partículas individuais, por parte do subsistema eletrônico. Certamente existem manifestações coletivas, mas não são detectáveis. Da parte do subsiste

ma iônico, tem-se um pico na região do fonon LO (-300 cm^{-1}). À medida que a concentração aumenta (por exemplo, $n = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$, $n = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$), para ω por volta de 150 cm^{-1} a 200 cm^{-1} começa aparecer uma elevação, à qual associa-se um plasmon. Aumentando-se ainda mais a concentração, este pico começa a perder seu caráter de plasmon puro. Isto também acontece com o pico identificado como fonon LO. Associamos este fato à interação entre estas duas excitações. Há a formação dos chamados modos híbridos L_+ e L_- . As energias destes modos como função da concentração são aproximadamente dadas na figura II.3. Discussão mais detalhada desta figura será feita mais adiante.

Para ilustrar a sensibilidade da teoria à variação dos parâmetros T^e , T^* , Γ_{ph} e τ_p , o tempo de relaxação devido a interação coulombiana entre os elétrons, apresenta-se a figura II.2. Escolheu-se a concentração $n = 1,7 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ para a qual $T_F = 184 \text{ }^\circ\text{K}$, já que amostras com esta concentração de portadores vem sendo estudadas em nosso laboratório, além de haver sobre elas dados já publicados²⁴. Nos dois gráficos de cima da figura (a) e (b), compara-se a secção de espalhamento para $\tau_p = 0$ e $\tau_p \neq 0$. Nota-se um alargamento das linhas quando se aumenta o tempo de relaxação, o que é esperado fisicamente. Com os gráficos (b) e (c), pode-se verificar que a mais baixas temperaturas dos subsistemas os modos ficam mais definidos, e isto é, mais aparente no modo L_- . Comparando-se (a) com (c), nota-se que o alargamento da linha LO é refletido em L_+ e L_- . Uma comparação detalhada entre dados experimentais concretos e a teoria não foi feita ainda, mas há bom acordo qualitativo.

A figura II.3, mostra as energias dos modos L_+ e L_- como função da concentração. Esta relação de dispersão mostra o caráter de formação de cada um dos modos L_+ e L_- . É de se notar que a medida que a concentração aumenta, acima de $7,7 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, con

centração para a qual a interação entre plasmon e fonon LO é máxima, o ramo L_- tende ao fonon TO e não ao fonon LO. Associa-se isto ao fato da concentração eletrônica elevada blindar o fonon LO.

Na fig.II.3 mostra-se a posição do pico das linhas L_+ e L_- como função da concentração de portadores. Observa-se um deslocamento em relação aos valores que são obtidos da teoria de Varga (os quais são exibidos na Fig.II.5). A diferença deve ser atribuída a introdução dos efeitos de interferência e inclusão de vidas médias na nossa teoria.

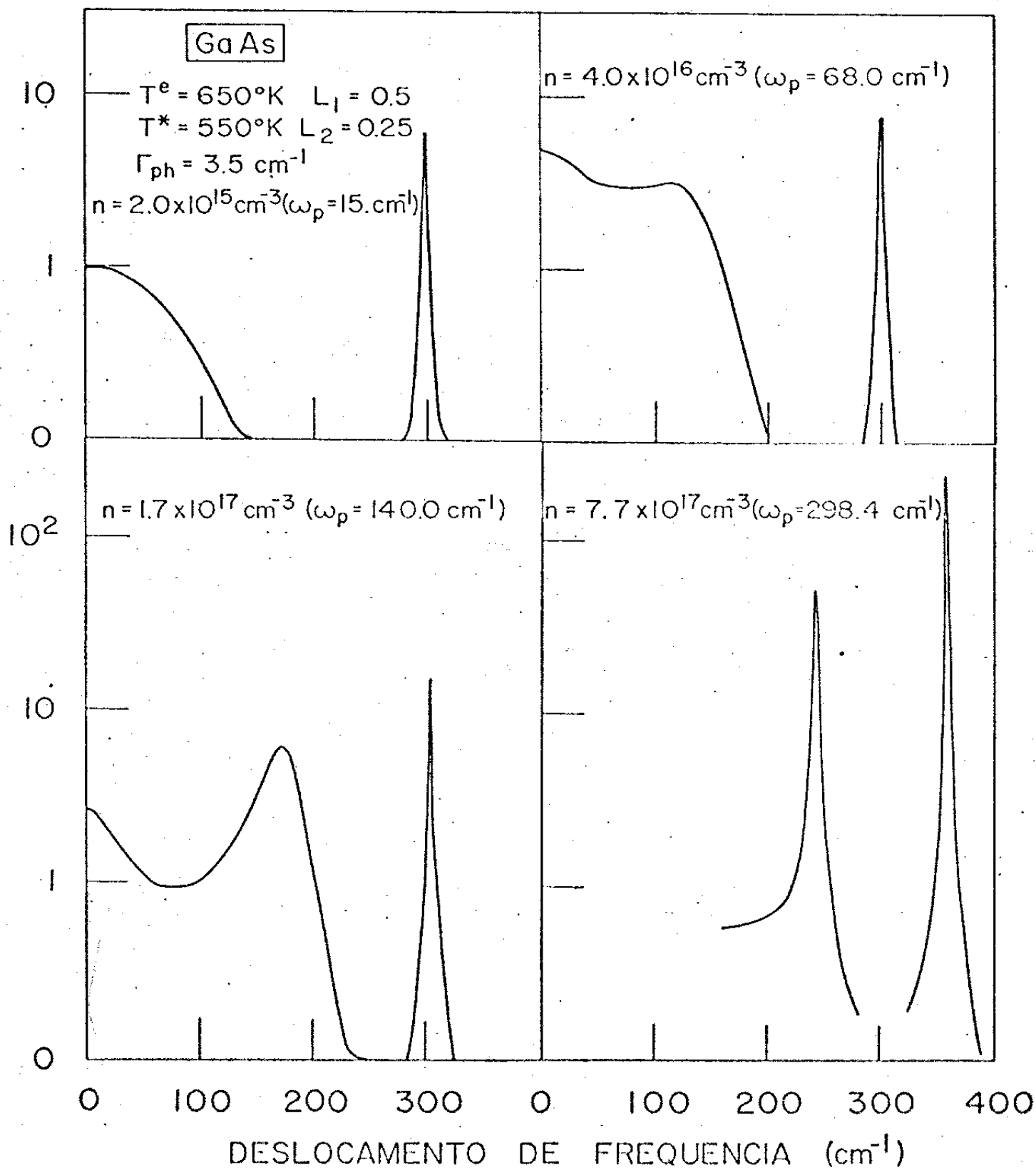


Fig. II - I

SECÇÃO DE ESPALHAMENTO (Unid. Arbit.)

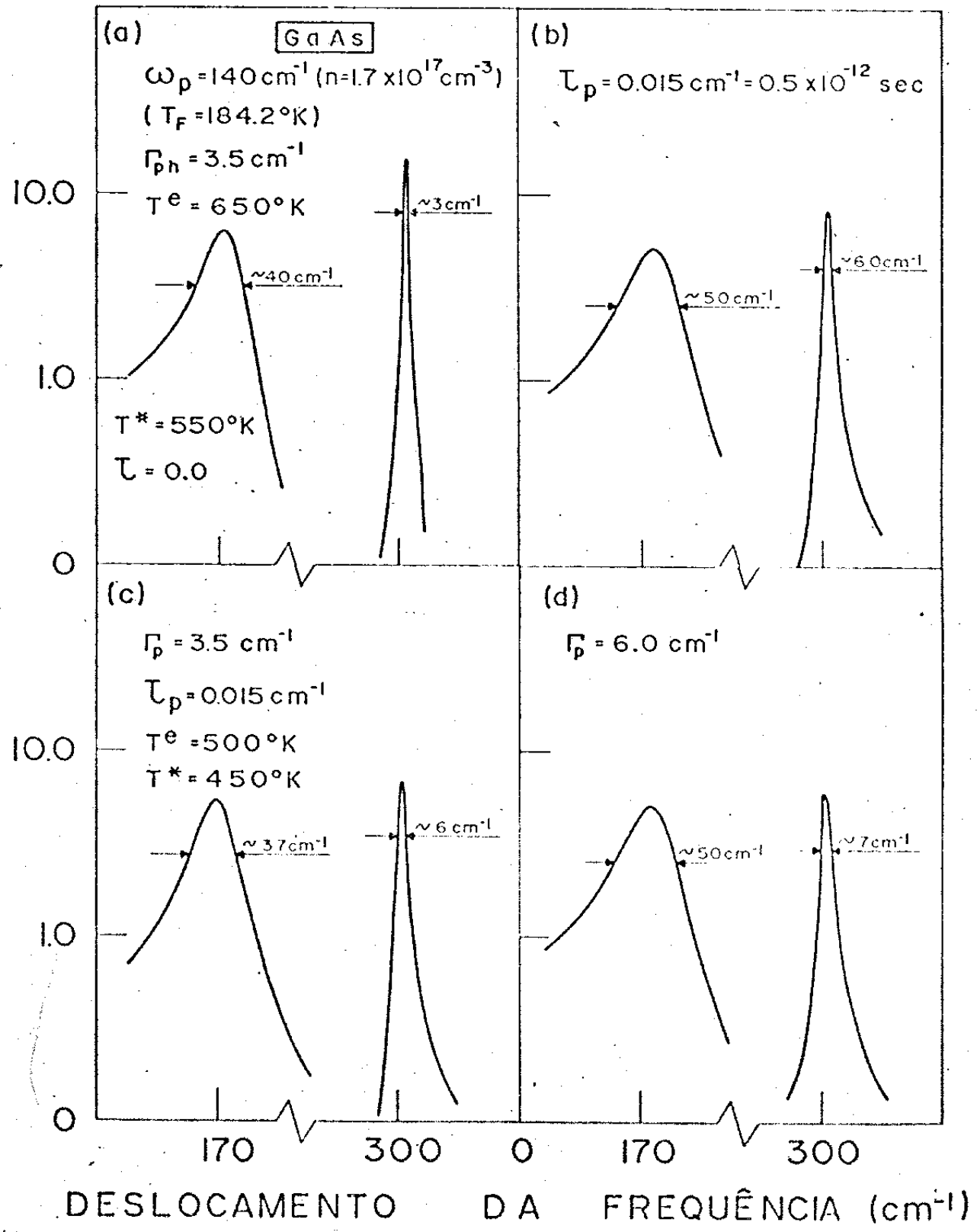


Fig. II - 2

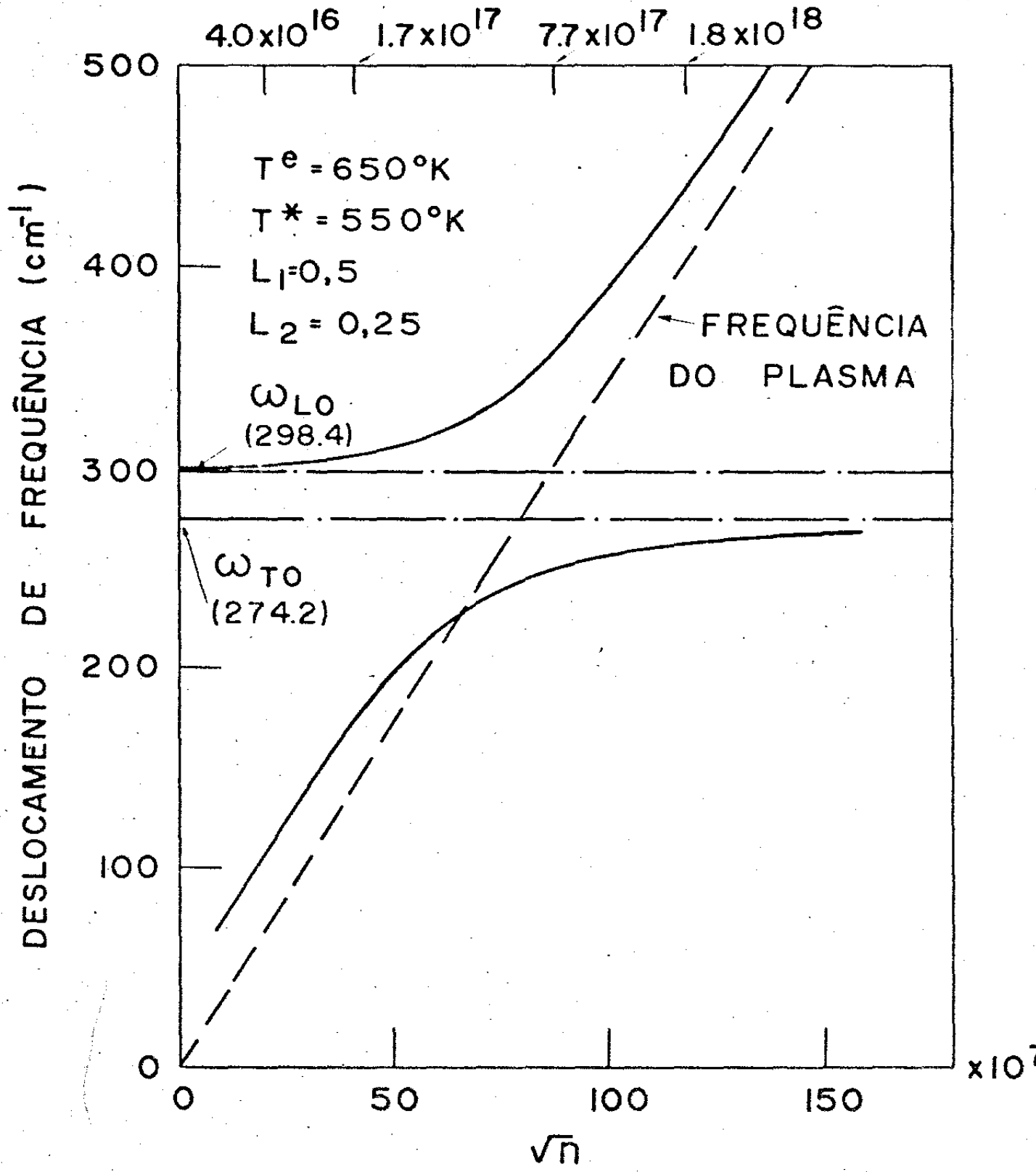
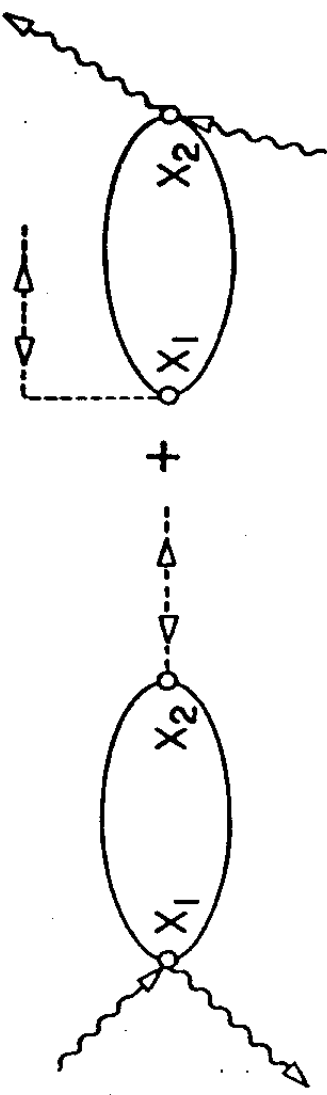


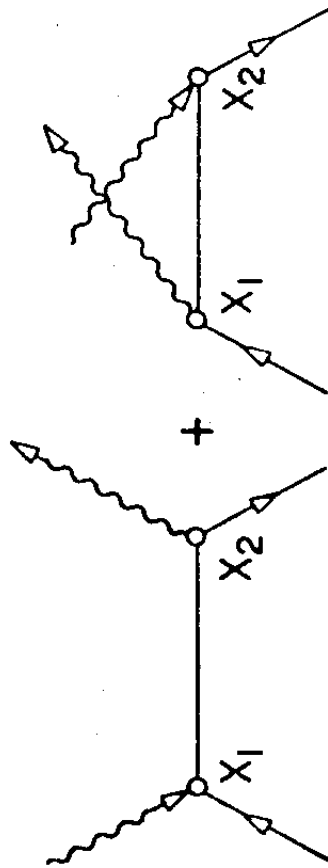
Fig.II.3

DIAGRAMAS DE FEYNMANN



I b

I a

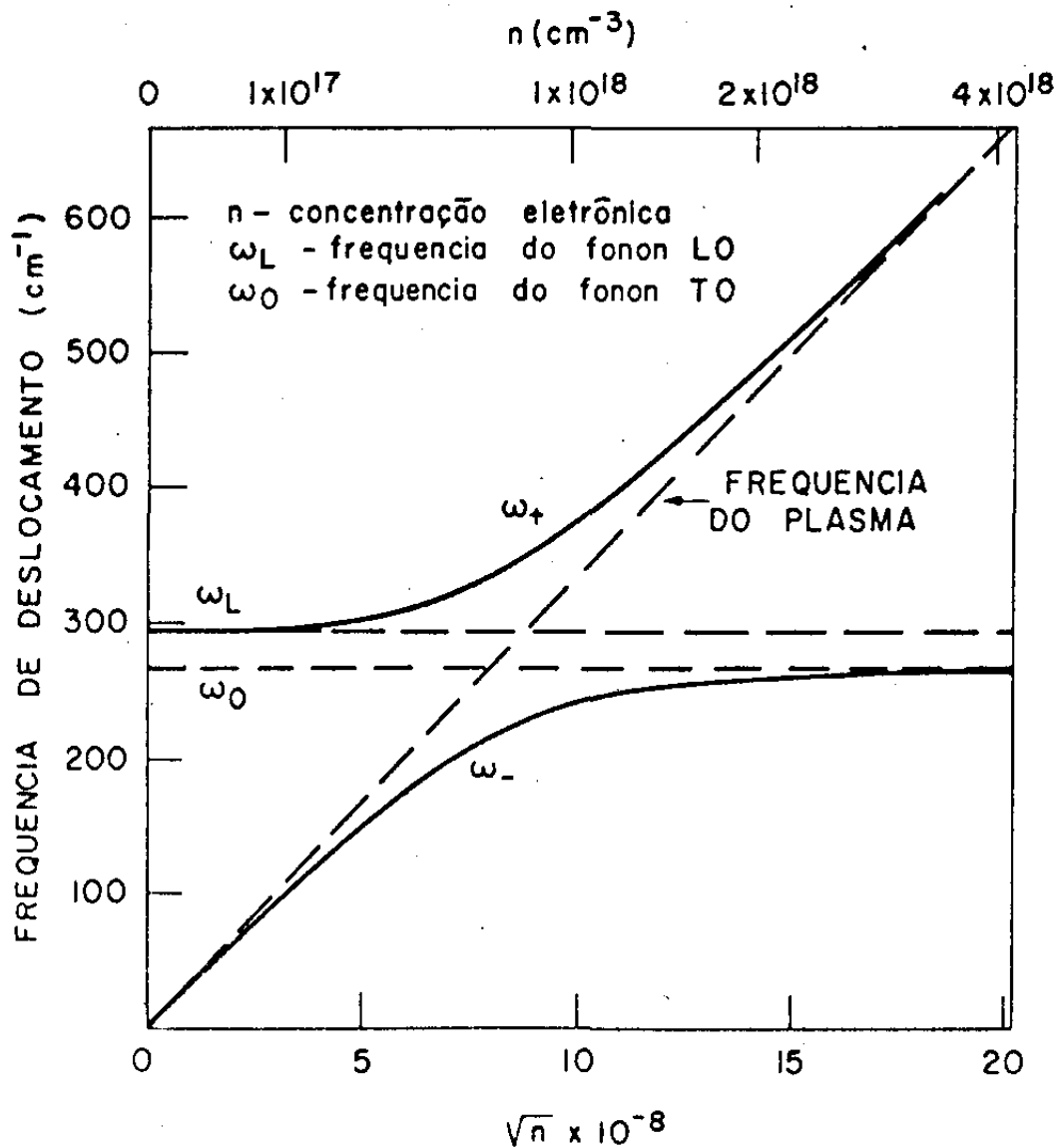


II a

II b

Fig. II - 4

Fig. II - 5



REFERÊNCIAS:

1. D.Bohm and D.Pines, Phys.Rev.82, 625 (1951)
2. D.Pines and D.Bohm, Phys.Rev.85, nº2, 338 (1951)
- 3.P.M.Platzman and P.A.Wolff: Waves and Interactions in Solids State Plasmas, Academic Press (1973), Cap.1.
4. A. Mooradian and G.B.Wright, Phys, Rev.Letter 16 999 (1966).
5. B.B.Varga, Phys.Rev.A 137, 1896 (1965).
6. J.F. Scott, T.C.Damen, J.Ruvalds and A.Zawadowski, Phys.Rev. B, vol.3, nº4, 1295 (1971).
7. D.L.Rousseau and S.P.S.Porto, Phys.Rev.Letter 20, 1354 (1968).
8. A.Pinczuk, E.Burstein and S.Ushioda, Solid State Commun.7, 139 (1969).
9. J.F.Scott, Phys.Rev.Letter 24, 1107 (1970), A.Zawa Dowshv and J.Ruvalds, Phys.Rev.Letters, 24, 1111 (1970).
10. U.Fano, Phys.Rev. 124, 1866 (1970).
11. A.S.Barker and J.J.Hopfield, Phys.Rev. 135, A 1732 (1964).
12. A.A.Abrikosov, L.P.Gorkov and I.E.Dzyaloshinski, Methods of Quantum Field Theory in Stastiscal Physics, editado por R.Silverman (Prentice-Hall, Englewood Cliffs, N.J.1963).
13. L.Van Hove, Phys.Rev.95, 249 (1954).
14. F.Cerdeira, T.A.Fjeldly and M.Cardona; Phys.Rev.B, vol.8, nº10, 4734 (1973).
15. G.Breit and E.Wigner, Phys.Rev.49, 519 (1936).
16. U.Fano, Phys.Rev.124, 1866 (1961).
17. M.Balkanski, K.P.Jain, R.Beserman and M.Jouanne, Phys.Rev.B, vol.12, nº10, 4328 (1975).
18. A.Zawadowski and J.Ruvalds, Phys.Rev.Lett.24, 1111 (1970); J.Ruvalds and A.Zawadowski, Phys.Rev.B, 2, 1172 (1970).
19. G.L.Bir and G.E.Pikus, Fiz.Tverd.Tela 2, 2287 (1960) [Sov.Phys. - Solid State 2, 2039 (1961)].

20. Ver por exemplo "Light Scattering in Solids I", G.B. Wright Editor. (Springer, N.Y.1969); "Light Scattering in Solids II"; M.Balkanski Editor. (Flammarion Press, Paris 1971); "Light Scattering in Solids III", M.Balkanski, R.C.C.Leite and S.P.S. Porto, Editors. (Flammarion Press, Paris 1975).
21. R.S.Turtelli, A.R.B.de Castro and R.C.C.Leite, Solid State Communication, vol.16, p.p.969 - 971 (1975).
22. D.N.Zubarev, Soviet Physics Uspekhi, Vol.3, nº3, 320 (1960).
23. Ver referênciã 3, pãgina 28.
24. Mooradian A. Light Scattering Spectra of Solids I. 285. (Edited by G.B. Wright, Springer Verlag, N.Y. (1969).

Neste capítulo estuda-se a interferência plasma-fonon LO sob condição de ressonância, i.e', quando a energia de excitação $\hbar\omega_L$ do Laser aproxima-se do valor E_g do intervalo da banda proibida do semiconductor.

Considerando-se o bom resultado obtido no capítulo I para espalhamento Raman na região de ressonância, particularmente para energia de excitação $\hbar\omega_L$ maior que a energia de excitação eletrônica do cristal, pretende-se estudar, nesta região, a interferência tratada no capítulo II. Utilizar-se-ã do mecanismo pelo qual o espalhamento se processa, como sugerido no capítulo I. Fundamentalmente, no cálculo, renormaliza-se os propagadores dos estados eletrônicos intermediários excitados, nos quais introduz-se a vida média destes estados. Estados eletrônicos intermediários excitados aparecem nos dois gráficos, e seus cruzados, que serão relevantes ao processo. Um dos ditos gráficos e seu cruzado é o relativo ao processo intrabanda, que no tratamento do capítulo I não contribui, mas neste processo com a banda de condução populada deve contribuir. A saber, os gráficos Π_a e Π_b da figura II.4.

Usando-se as regras normais de construção do operador de espalhamento através da Teoria de Propagadores¹, obtem-se para o gráfico Π_a , Π_b a expressão:

$$III.1) \mathcal{V}_{\Pi_a}^1 = (-i)^2 \int d^4x_1 \int d^4x_2 \mathcal{T}^\dagger(x_2) H_{ER}(x_2) G(x_2, x_1) H_{ER}(x_1) \mathcal{T}(x_1),$$

com as funções de onda eletrônica \mathcal{T}^\dagger e \mathcal{T} e o hamiltoniano

de interação HER definidos no apêndice A. Assim tem-se

$$(III.2) \quad \mathcal{U}_{IIa} = (-i)^2 \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} \int d^4x_1 \int d^4x_2 \frac{1}{\sqrt{V}} \langle \vec{k}'c | \exp(it_2 E_c(\vec{k}')) C_{\vec{k}'}^+ \\ \times (-e/(m_e c)) (2\pi\hbar c^2)^{1/2} \hat{E}_s \exp(ik_s x_2) / (2\omega_s \sqrt{\epsilon_\omega})^{1/2} \cdot \frac{\vec{\nabla}_2}{i}(i) \\ \times \int \frac{d^4q}{(2\pi)^4} \exp[iE_c(\vec{q})(t_2 - t_1)] / (q^0 - E_c(\vec{q}) - i\epsilon) |q^0\rangle \langle q^0| (-e/(m_e c)) \\ \times (2\pi c^2)^{1/2} \hat{E}_L \exp(ik_L x_1) / (2\omega_L \sqrt{\epsilon_\omega})^{1/2} \frac{\vec{\nabla}_1}{i} \frac{1}{\sqrt{V}} |kc\rangle \exp(-it_1 E_c(\vec{k})) C_{\vec{k}}.$$

Efetando as duas integrações nos quadrivetores x_1 e x_2 , da parte temporal, obtém-se uma função δ de Dirac, que dará a conservação de energia em cada vértice e a parte espacial a conservação de momentum. Obtem-se:

$$\mathcal{U}_{IIa} = (-i)^2 (i) (-e/m_e c)^2 (2\pi\hbar c)^2 [\epsilon_\omega \sqrt{(4\omega_L \omega_s)^{1/2}}]^{-1/2} \\ \times \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} \int \frac{d^4q}{(2\pi)^4} (2\pi) \delta(E_c(\vec{k}') + \hbar\omega_s - E_c(\vec{q})) (2\pi) \delta(E_c(\vec{q}) - \hbar\omega_L - E_c(\vec{k}')) \\ \times (2\pi)^3 \delta(\vec{k}' + \vec{k}_s - \vec{q}) (2\pi)^3 \delta(\vec{q} - \vec{k}_L - \vec{k}) \\ \times (\hat{E}_s \cdot \langle \vec{k}'c | \vec{p} | q^0 \rangle) (\hat{E}_L \cdot \langle q^0 | \vec{p} | \vec{k}c \rangle) / [E_c(\vec{k}') + \hbar\omega_L - E_c(\vec{q})] C_{\vec{k}'}^+ C_{\vec{k}}.$$

Agora, integrando no quadrivetor q , obtém-se devido as funções δ s:

$$\mathcal{U}_{IIa} = -i e^2 / m_e^2 (2\pi)^5 \hbar / [\epsilon_\omega \sqrt{(4\omega_L \omega_s)^{1/2}}] \\ \times \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} \delta(E_c(\vec{k}') + \hbar\omega_s - \hbar\omega_L - E_c(\vec{k})) \delta(\vec{k}' + \vec{k}_L - \vec{k}_s - \vec{k}) \\ \times (\hat{E}_s \cdot \langle \vec{k}'c | \vec{p} | \vec{k}' + \vec{k}_s, \vartheta \rangle) (\hat{E}_L \cdot \langle \vec{k} + \vec{k}_L, \vartheta | \vec{p} | \vec{k}c \rangle) \\ \times [E_c(\vec{k}') + \hbar\omega_L - E_c(\vec{k} + \vec{k}_L)]^{-1} C_{\vec{k}'}^+ C_{\vec{k}}.$$

Desprezamos os momentos dos fótons em relação aos momentos dos elétrons.

O δ de conservação de momento permite que se elimine o somatório em \vec{k}' , e assim:

$$(III.3) \quad \mathcal{U}_{IIa}^1 = -i e^2/m_e^2 (2\pi)^5 \hbar / [\epsilon_\infty \sqrt{(4\omega_L\omega_S)^{1/2}}] (\hat{E}_S \cdot \vec{p}_{cS}) (\hat{E}_L \cdot \vec{p}_{cL}) \\ \times \sum_{\vec{k}} [E_c(\vec{k}) - E_v(\vec{k}) + \hbar\omega_L]^{-1} C_{\vec{k}+\vec{q}}^\dagger C_{\vec{k}} \delta(E_f - E_i - \hbar\omega),$$

onde \vec{q} é o momento transferido ao sistema, dado por

$$\vec{q} = \vec{k}_L - \vec{k}_S,$$

e $\hbar\omega$ é a transferência de energia no processo, dada por:

$$\hbar\omega = \hbar\omega_L - \hbar\omega_S > 0.$$

Na aproximação de bandas parabólicas, tem-se que

$$(III.4^a) \quad E_c(\vec{k}) = \hbar^2 k^2 / 2m_e^* ,$$

e

$$(III.4^b) \quad E_v(\vec{k}) = -E_g - \hbar^2 k^2 / 2m_h^* ,$$

donde obtem-se,

$$E_c(\vec{k}) - E_v(\vec{k}) = E_g + \hbar^2 k^2 / 2\mu ,$$

com

$$1/\mu^* = 1/m_e^* + 1/m_h^* .$$

Portanto a expressão III.3 fica:

$$(III.5) \quad \mathcal{U}_{IIa}^1 = -i e^2/2m_e^2 (2\pi)^5 \hbar / [\epsilon_\infty \sqrt{(4\omega_L\omega_S)^{1/2}}] (\hat{E}_S \cdot \vec{p}_{cS}) (\hat{E}_L \cdot \vec{p}_{cL}) \\ \times \sum_{\vec{k}} [E_g + \hbar^2 k^2 / 2\mu + \hbar\omega_L + i\epsilon]^{-1} C_{\vec{k}+\vec{q}}^\dagger C_{\vec{k}} \delta(E_f - E_i - \hbar\omega).$$

A fim de recuperar formas anteriores do formalismo de espalhamento de luz por eletrons individuais, em termos da den-

idade eletrônica definida por:

$$\rho_q^e = \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}} C_{\vec{k}+\vec{q}}^\dagger C_{\vec{k}}$$

faz-se o denominador de energia independente de \vec{k} , substituindo $(\hbar^2 k^2/2\mu)$ por uma constante. Considerando-se que, para altas temperaturas, $T \gg T_F$, i.e., num sistema não degenerado, o valor estatístico médio de $(\hbar^2 k^2/2\mu)$ é dado por:

$$\langle \hbar^2 k^2/2\mu \rangle \simeq \frac{1}{2} \mu v_{th}^2 \simeq k_B T_e$$

onde v_{th} é a velocidade térmica, k_B a constante de Boltzmann e T_e a temperatura do sistema eletrônica, substitui-se este valor em III.5 e obtém-se assim uma expressão aproximada para \mathcal{U}_{IIa}^1 , a saber:

$$(III.6) \quad \mathcal{U}_{IIa}^1 = -i (e/m_e)^2 (2\pi)^5 \hbar / [E_\infty v (4\omega_L \omega_S)^{1/2}] (\hat{E}_S \cdot \vec{p}_{CS}) (\hat{E}_L \cdot \vec{p}_{CS}) \\ \times [E_g + k_B T_e + \hbar \omega_L + i\epsilon]^{-1} \rho_q^e \delta(E_f - E_i - \hbar \omega) ..$$

A expressão que dá a probabilidade de transição para o segundo gráfico II.a da fig. II.4, é obtida substituindo-se no cálculo do primeiro gráfico,

$$e \quad \hat{E}_L \longleftrightarrow \hat{E}_S \\ \omega_L \longleftrightarrow -\omega_S$$

Assim o operador espalhamento total \mathcal{U}_{IIa} , será dado por:

$$(III.7) \quad \mathcal{U}_{IIa} = \mathcal{U}_{IIa}^1 + \mathcal{U}_{IIa}^2 \\ = -i e^2/m_e^2 (2\pi)^5 \hbar / [E_\infty v (4\omega_L \omega_S)^{1/2}] (\hat{E}_S \cdot \vec{p}_{CS}) (\hat{E}_L \cdot \vec{p}_{CS}) \\ \times \{ [E_g + k_B T_e + \hbar \omega_L]^{-1} + [E_g + k_B T_e - \hbar \omega_S]^{-1} \} \rho_q^e \delta(E_f - E_i - \hbar \omega)$$

Como se sabe do capítulo I, o gráfico II.b da fig.II.4 contribui fortemente na região de ressonância quando o processo produz um fonon de energia $\hbar\omega_0$. No apêndice A calcula-se o operador espalhamento \mathcal{U}_{IIb} do gráfico II b, e obtem-se:

$$(III.8) \quad \mathcal{U}_{IIb} = -i(2\pi)^3 (2\hbar e^4)/m_c^2 [2\epsilon_\infty^2 v(4\omega_s\omega_L)^{1/2}] q^{-2} \\ \times (\hat{E}_s \cdot \vec{p}_{oc}) (\hat{E}_L \cdot \vec{p}_{cu}) \{I_- + I_+\} \rho_q^i \delta(E_f^{ph} - E_i^{ph} - \hbar\omega),$$

onde, como calculado no apêndice A,

$$(III.9^a) \quad I_- = 4\pi(2\mu)^{3/2}/\hbar^4 \omega_q^{-1} (a'^{1/2} \arctg x_{max}/a'^{1/2} - b'^{1/2} \arctg x_{max}/b'^{1/2}),$$

$$(III.9^b) \quad I_+ = 4\pi(2\mu)^{3/2}/\hbar^4 \omega_q^{-1} (a'^{1/2} \arctg x_{max}/a'^{1/2} - b'^{1/2} \arctg x_{max}/b'^{1/2}),$$

com

$$a = E_g - \hbar\omega_s, \quad b = E_g - \hbar\omega_L,$$

$$a' = E_g + \hbar\omega_s, \quad b' = E_g + \hbar\omega_L$$

$$x_{max} = E_g^{1/2}.$$

Para energia de excitação $\hbar\omega_L$ próxima a energia de excitação E_g do semiconductor, dos termos dentro da chave em (III.8) o que mais contribui é I_- , e para este termo neste limite obtem-se:

$$(III.10) \quad I_+ = 4\pi(2\mu)^{3/2}/\hbar^4 \omega_q^{-1} [(E_g - \hbar\omega_L + \hbar\omega_0)^{1/2} - (E_g - \hbar\omega_L)^{1/2}]$$

donde,

$$(III.11) \quad I_+ \approx \hbar\omega_0/2 (E_g - \hbar\omega_L)^{-1/2}$$

e substituindo III.11 em III.8 obtemos:

$$(III.12) \quad \mathcal{U}_{IIb} = -ig e^2/\epsilon_\infty q^2 (\hbar\omega_0/2) (E_g - \hbar\omega_L)^{-1/2} \rho_q^i \delta(E_f^{ph} - E_i^{ph} - \hbar\omega),$$

onde

$$(III.13) \quad g = (2\pi)^3 (e/m_e)^2 (\hbar/[2\epsilon_\infty v(4\omega_L\omega_s)^{1/2}]) (\hat{E}_s \cdot \vec{p}_{oc}) (\hat{E}_L \cdot \vec{p}_{cu}).$$

De acordo com o cálculo do capítulo I, para o tratamento de espalhamento Raman nas regiões de ressonância, o que se faz é substituir nos gráficos IIa e IIb da fig II4 o propagador de elétron de Bloch do estado intermediário, por propagador renormalizado devido a interação elétron-fonon de Fröhlich, i.e., polarons são introduzidos como estados intermediários. Assim, deve-se entender que o presente sistema para o estudo da interferência, não é mais o do capítulo II formado pelos subsistemas eletrônico e iônico, mas um sistema formado de um subsistema de polarons que dará origem ao plasmon, mais o subsistema iônico que produzirá o fonon-LO que se acoplará ao plasmon originando os modos híbridos.

Ao se introduzir as vidas médias nos estados intermediários excitados no gráfico IIb da fig II4, de maneira como se fez no capítulo I, de ressonância, a integral I_- de III8, que maior contribuição dá na região de ressonância, tomará a forma:

$$(III.14) \quad I_- = 4\tilde{\pi} \left[(2\mu)^{3/2} / \hbar^3 (\hbar\omega_0)^{1/2} \right] (N' + i N'') ,$$

onde N' e N'' estão definidas no capítulo I, fórmula I20 e I21. Então*, \mathcal{U}_{IIb} , fórmula III8, será reescrita como:

$$(III.15) \quad \mathcal{U}_{IIb} = B(q) \rho_q^i \delta(E_f^{ph} - E_i^{ph} - \hbar\omega) ,$$

com

$$(III.16) \quad B(q) = B'_q + i B''_q ,$$

onde

$$(III.17a) \quad B'_q = g(e^2/\epsilon_\infty q^2) \left[4\tilde{\pi} (2\mu)^{3/2} / (\hbar^3 \sqrt{\hbar\omega_0}) \right] N'' ,$$

$$(III.17b) \quad B''_q = -g(e^2/\epsilon_\infty q^2) \left[4\tilde{\pi} (2\mu)^{3/2} / (\hbar^3 \sqrt{\hbar\omega_0}) \right] N' ,$$

onde g está dado em III.13

* Observe-se que tem-se aproximado estas expressões, substituindo-se a transferência de energia $\hbar\omega$ por $\hbar\omega_0$, o que não trará maiores diferenças na região $\Omega > 1$. A região $0 \leq \Omega \leq 1$ é excluída das análises.

Para o gráfico IIa da figII4 do qual obtem-se a expressão III7, redefine-se o propagador do eletrôn livre de Bloch por um renormalizado, devido a interação eletrôn-fonon de Fröhlich, no qual introduz-se no denominador de energia a vida média do estado intermediário excitado (polaron) definido no apêndice B. Assim, o termo mais ressonante em III7 torna-se:

$$(III.18) \quad \mathcal{V}_{IIa} = -i (2\pi)^2 g [E_g - \hbar\omega_s + k_B T^e + i\Gamma_e]^{-1} \\ \times \rho_q^e \delta(E_f^{el} - E_i^{el} - \hbar\omega),$$

que reescreveremos como:

$$(III.19) \quad \mathcal{V}_{IIa} = A(q) \rho_q^e \delta(E_f^{el} - E_i^{el} - \hbar\omega),$$

onde

$$(III.20) \quad A(q) = (A' + iA''),$$

com

$$(III.21^a) \quad A' = -(2\pi)^2 g \Gamma_e / [(E_g - \hbar\omega_s + k_B T^e)^2 + \Gamma_e^2],$$

$$(III.21^b) \quad A'' = -(2\pi)^2 g [E_g - \hbar\omega_s + k_B T^e] / [(E_g - \hbar\omega_s + k_B T^e)^2 + \Gamma_e^2],$$

com definido em III.13

Tem-se que a secção de choque por unidade de frequência e ângulo sólido é dada por²:

$$(III.22) \quad \frac{d^2\sigma}{d\omega d\Omega} = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{V}{C} \rho(\omega_s) |k+1 \mathcal{V}(i)|^2,$$

onde $\rho(\omega_s)$ é a densidade de estado da radiação espalhada, V é o volume do cristal e C é a velocidade da luz, no estudo de interferência do subsistema eletrônico e iônico, o operador \mathcal{V} é definido como:

$$(III.23) \quad \mathcal{V} = \mathcal{V}_{IIa} + \mathcal{V}_{IIb} \\ = A(q) \rho_q^e \delta(E_f^{el} - E_i^{el} - \hbar\omega) + B(q) \rho_q^i \delta(E_f^{ph} - E_i^{ph} - \hbar\omega).$$

Tem-se portanto que,

(III.24)

$$\begin{aligned}
 |\langle f | \psi | i \rangle|^2 &= \langle f | \psi | i \rangle \langle i | \psi | f \rangle^* \\
 &= |A(q)|^2 \langle f | \rho_q^e | i \rangle \langle i | \rho_q^{*e} | f \rangle \delta^2(E_f^{el} - E_i^{el} - \hbar\omega) + |B(q)|^2 \langle f | \rho_q^i | i \rangle \langle i | \rho_q^{*i} | f \rangle \delta^2(E_f^{ph} - E_i^{ph} - \hbar\omega) \\
 &\quad + A(q) B(q) \langle f | \rho_q^e | i \rangle \langle i | \rho_q^{*i} | f \rangle \delta(E_f^{el} - E_i^{el} - \hbar\omega) \delta(E_f^{ph} - E_i^{ph} - \hbar\omega) \\
 &\quad + A(q) B(q) \langle f | \rho_q^i | i \rangle \langle i | \rho_q^{*e} | f \rangle \delta(E_f^{el} - E_i^{el} - \hbar\omega) \delta(E_f^{ph} - E_i^{ph} - \hbar\omega).
 \end{aligned}$$

Para o desenvolvimento dos termos acima usa-se o artificio:

$$\delta^2(x) = \delta(x) \delta(0) = \delta(x) \frac{1}{2\pi} \lim_{T \rightarrow \infty} \int_{-T/2}^{T/2} dt$$

isto é,

$$(III.25) \quad \delta^2(x) = \frac{T}{2\pi} \delta(x) \quad p/ \quad T \rightarrow \infty.$$

Usando-se este resultado, obtem-se para o primeiro termo do último membro de III.24.

$$\begin{aligned}
 (III.26^a) \quad &\langle f | \rho_q^e | i \rangle \langle i | \rho_q^{*e} | f \rangle \delta^2(E_f^{el} - E_i^{el} - \hbar\omega) \\
 &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt \langle f | \rho_q^e | i \rangle \langle i | \rho_q^{*e} | f \rangle \exp[i(E_f^{el} - E_i^{el} - \hbar\omega)t/\hbar] \\
 &= \frac{T}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{\infty} dt \exp(i\omega t) \langle f | \rho_q^e(0) | i \rangle \langle i | \rho_q^{*e}(t) | f \rangle, \quad p/ \quad T \rightarrow \infty
 \end{aligned}$$

Analogamente, para os seguintes termos, obtem-se,

(III.26^b)

$$\begin{aligned}
 &\langle f | \rho_q^i | i \rangle \langle i | \rho_q^{*i} | f \rangle \delta^2(E_f^{ph} - E_i^{ph} - \hbar\omega) \\
 &= \frac{T}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{\infty} dt \exp(i\omega t) \langle f | \rho_q^i(0) | i \rangle \langle i | \rho_q^{*i}(t) | f \rangle, \quad p/ \quad T \rightarrow \infty
 \end{aligned}$$

(III.26^c)

$$\begin{aligned}
 &\langle f | \rho_q^e | i \rangle \langle i | \rho_q^{*i} | f \rangle \delta(E_f^{ph} - E_i^{ph} - \hbar\omega) \delta(E_f^{el} - E_i^{el} - \hbar\omega) \\
 &= \frac{T}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{\infty} dt \exp(i\omega t) \langle f | \rho_q^e(0) | i \rangle \langle i | \rho_q^{*i}(t) | f \rangle, \quad p/ \quad T \rightarrow \infty.
 \end{aligned}$$

e. ainda,

$$(III.26^d) \quad \langle f | \rho_q^i | i \rangle \langle i | \rho_q^{e*} | f \rangle = \delta(E_f^{ph} - E_i^{ph} - \hbar\omega) \delta(E_f^{el} - E_i^{el} - \hbar\omega) \\ = \frac{T}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{\infty} dt \exp(i\omega t) \langle f | \rho_q^i(0) | i \rangle \langle i | \rho_q^{e*}(t) | f \rangle, \quad p/T \rightarrow \infty$$

Tem-se assim do Teorema de Flutuação-Dissipação, apêndice C, que a secção de choque total por unidade de frequência e ângulo sólido é:

$$(III.27) \quad \frac{d^2\sigma}{d\omega d\Omega} \sim |\tilde{A}(q)|^2 [1 - \exp(-\beta\hbar\omega)]^{-1} \text{Im} G(q, \omega)^{ee} + |\tilde{B}(q)|^2 [1 - \exp(-\beta\hbar\omega)]^{-1} \text{Im} G(q, \omega)^{ii} \\ + [1 - \exp(\beta\hbar\omega)]^{-1} \text{Im} (\tilde{A}(q) \tilde{B}(q)^* G(q, \omega)^{ie}) + [1 - \exp(\beta\hbar\omega)]^{-1} \text{Im} (\tilde{A}(q)^* \tilde{B}(q) G(q, \omega)^{ei})$$

onde

$$(III.28^a) \quad \text{Im} (\tilde{A}(q) \tilde{B}(q)^* G(q, \omega)^{ie}) = (A'B'_q + A''B''_q) \text{Im} G(q, \omega)^{ie} + (A''B'_q - A'B''_q) \text{Re} G(q, \omega)^{ie}$$

$$(III.28^b) \quad \text{Im} (\tilde{A}(q)^* \tilde{B}(q) G(q, \omega)^{ei}) = (A'B'_q + A''B''_q) \text{Im} G(q, \omega)^{ei} + (A''B'_q - A'B''_q) \text{Re} G(q, \omega)^{ei}$$

com

$$\tilde{A}(q) = A/g = (1/g)(A' + iA'')$$

$$\tilde{B}(q) = B(q)/g = (1/g)(B'_q + iB''_q)$$

estando A e $B(q)$ definidos em II.13 e II.16, respectivamente, e as partes real e imaginária das Funções de Green no apêndice C.

A fórmula acima, para a secção de choque por unidade de frequência e ângulo sólido, para espalhamento Raman de Interferência na região de ressonância é válida quando os sub-sistemas que se interferem, e se encontrem em regime de quasi-equilíbrio térmico.

COMENTÁRIOS FINAIS

Neste capítulo, apresenta-se um tratamento para o espalhamento Raman na região de ressonância para semicondutores polares, de banda proibida direta, com a banda de condução densamente populada. Considera-se a aproximação de banda parabólica e de massa efetiva. Verifica-se que os gráficos de maior contribuição ao processo são: II_a e II_b , da figura II.4. Como no capítulo I, renormaliza-se os propagadores de elétrons de Bloch, introduzindo-se a vida média dos estados intermediários, calculadas a partir de resultados de Zubarev.³ A figura III.1, mostra o perfil de uma destas vidas médias.

As dificuldades matemáticas envolvidas nos cálculos, obrigaram a um tratamento menos geral. Considera-se que a energia transferida $\hbar\omega_L$ seja a energia de um fonon TO e toma-se uma média na fórmula III.5, para que se possa reaver a definição da densidade de partículas eletrônicas. A figura III.2 serve para algumas especulações da intensidade de espalhamento Raman, para valores de $\Omega = (\hbar\omega_L - E_g)/\hbar\omega_0$.

A interpretação física do sistema, torna-se agora bem mais complexa em relação ao sistema do capítulo I. Para $\hbar\omega > E_g + \hbar\omega_0$, temos uma nuvem de fonon LO envolvendo um plasmon, dando origem ao estado intermediário do processo.

A ausência de experiências e qualquer teoria neste sentido, impossibilita uma análise mais criteriosa da teoria apresentada.

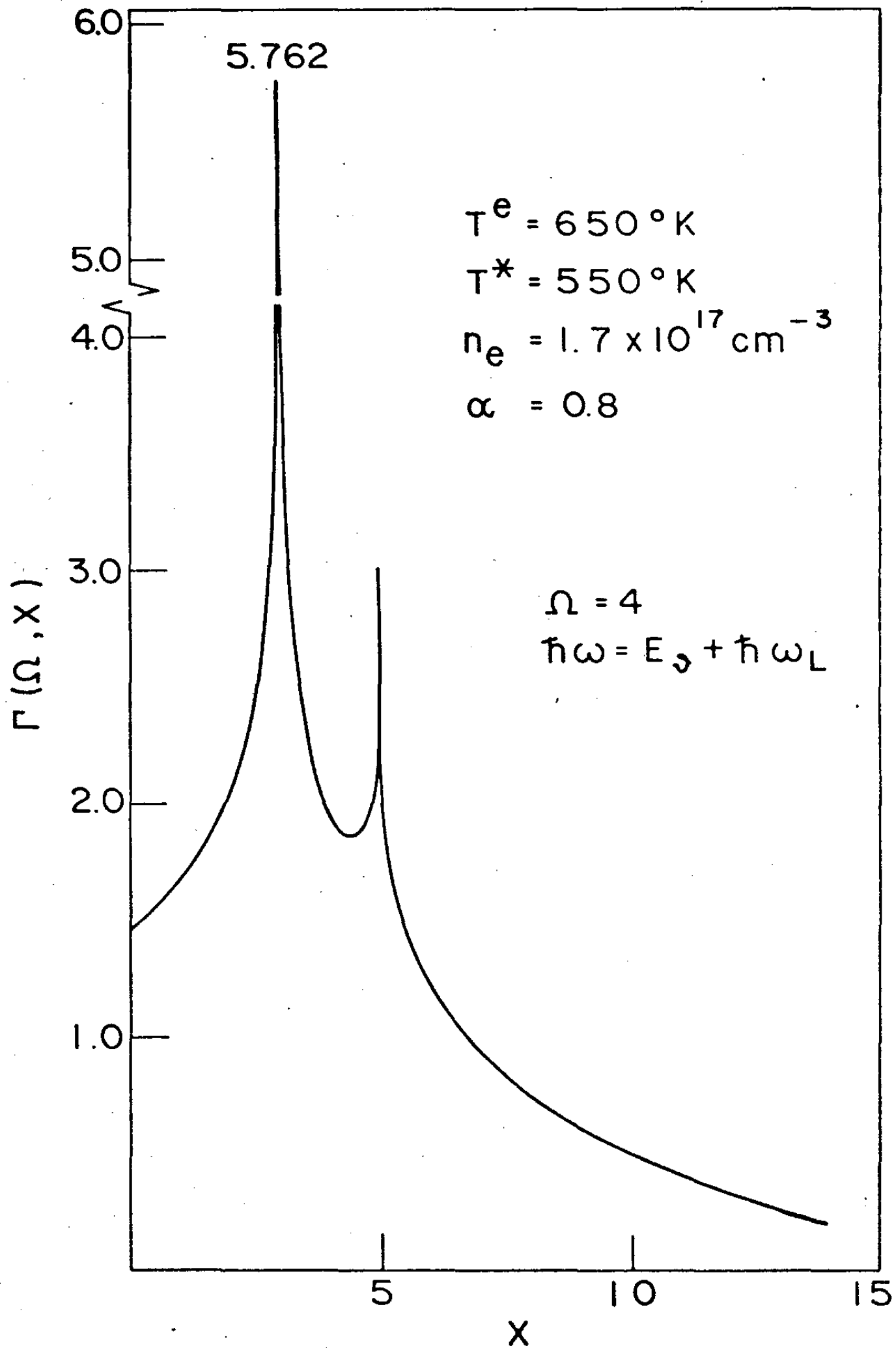


Fig. III.1

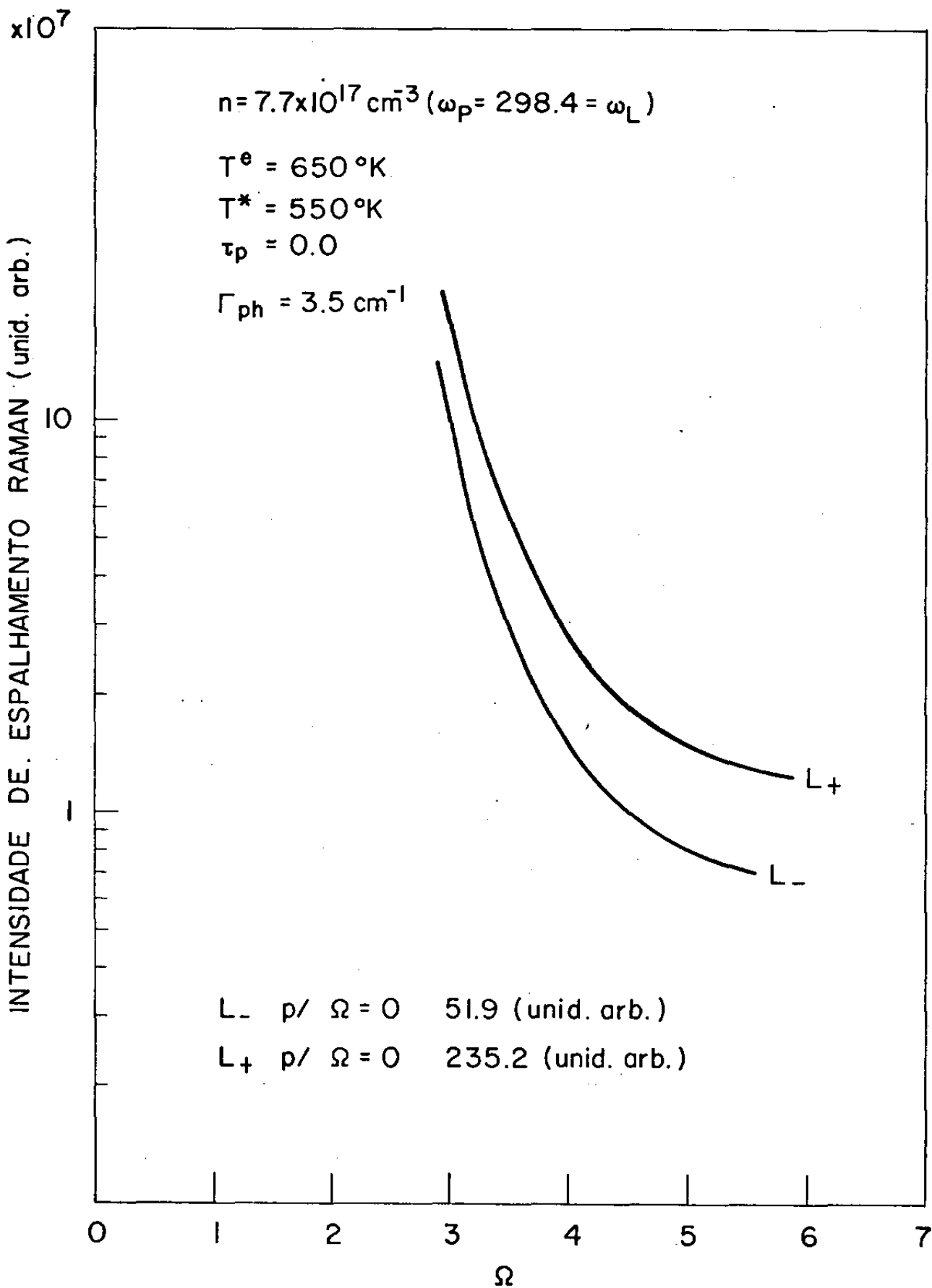


Fig. III - 2

BIBLIOGRAFIA:

1. A.A. Abrikosov, L.P. Gar'kov and I.Ye Dzyaloshinskii, Quantum Field Theoretical Methods in Statistical Physics. Pergamon Press (1965).
2. A.S. Davidov, Quantum Mechanics, Ch. IX. Addison - Wesley Inc. 1965.
3. D.N. Zubarev, Soviet Physics Uspekhi, vol.3, n^o3, 320 (1960).

TABELA

| | E_g (ev) | ω_0 (mev) | m_e/m_0 | m_h/m_0 | μ/m_0 | α^* | ϵ_0 | ϵ_∞ | |
|------|------------|------------------|-----------|-----------|-----------|------------|--------------|-------------------|-------|
| CdS | 2.572 | 37.8 | 0.17 | 0.7 | 0.155 | 0.8 | 8.9 | 5.2 | II-VI |
| GaAs | 1.43 | 36.48 | 0.07 | 0.5 | 0.061 | 0.07 | 12.9 | 10.9 | III-V |
| GaP | 2.25 | 46.87 | 0.13 | 0.8 | 0.104 | 0.1 | 10.2 | 8.5 | III-V |

* E.Kartheuser, Dielectric Properties of Polar Crystals.
Polarons in Ionic Crystal and Polar Semiconductors; edited: J.T.
Devreese (1977).
North-Holland Publishing Company-Amsterdam- London (pg.726).

APÊNDICE A:

Cálculos dos operadores de espalhamento através dos Gráficos de Feynman dos processos.

O cálculo dos diversos operadores de espalhamento é feito através dos respectivos diagramas de Feynman dos processos, usando-se as regras usuais da Teoria dos Propagadores.

1. Hamiltonianos de Interação:

O espalhamento de luz por isolante ou semicondutor dopado tipo-n, para o estudo do Efeito Raman assistido por fonon, requer a determinação dos hamiltonianos de interação H_{ER} , de elétron com a radiação e de H_{EL} , do elétron com a rede cristalina. Para H_{ER} , tem-se:

$$A.1 \quad H_{ER} = ie/m_e c \vec{A}(\vec{x}) \cdot \vec{\nabla} + (e^2/2m_e c^2) \vec{A}(\vec{x})^2,$$

onde e , m_e e c são respectivamente carga eletrônica, massa eletrônica e velocidade da luz. \vec{A} é o vetor campo da radiação dado por:

$$A.2 \quad \vec{A}_{\vec{k}_{L,S}} = (2\pi\hbar c^2/\epsilon_\infty)^{1/2} \hat{E}_{L,S}/(2\omega_{L,S}\nu)^{1/2} \exp(\mp i\vec{k}_{L,S} \cdot \vec{x}),$$

os índices L e S denotam a radiação incidente e espalhada respectivamente.

Para a interação elétron-rede H_{EL} , tem-se o hamiltoniano de Fröhlich para um cristal polar:

$$A.3 \quad H_{EL} = i|e| (2\pi\hbar/\nu)^{1/2} (\omega_{LO}/q) (1/\epsilon_\infty - 1/\epsilon_0) \exp(i\vec{q} \cdot \vec{x}) b_q^\dagger$$

onde $b_{\vec{q}}^{\dagger}$ é o operador criação de fonon de momento \vec{q} , ω_{lo} é a frequência do fonon longitudinal óptico, V é o volume da amostra, ϵ_0 e ϵ_{∞} são respectivamente as constantes dielétrica estática e de alta frequência.

Aos estados eletrônicos livres, associa-se as funções de onda,

$$(A.4) \quad \psi(\vec{x}) = \frac{1}{\sqrt{V/2}} \sum_{\vec{k}} \left\{ |kc\rangle \exp(-iE_c(\vec{k})t) C_{\vec{k}} + |kv\rangle \exp(-iE_v(\vec{k})t) U_{\vec{k}} \right\},$$

onde $C_{\vec{k}}$ e $U_{\vec{k}}$ são respectivamente operadores aniquilação de um fermion de momento \vec{k} na banda de condução e valência, e

$$(A.5) \quad \psi(\vec{x}) = \frac{1}{\sqrt{V/2}} \sum_{\vec{k}} \left\{ \langle ck| \exp(iE_c(\vec{k})t) C_{\vec{k}}^{\dagger} + \langle vk| \exp(iE_v(\vec{k})t) U_{\vec{k}}^{\dagger} \right\}$$

onde $C_{\vec{k}}^{\dagger}$ e $U_{\vec{k}}^{\dagger}$ são respectivamente operadores de criação de um fermion de momento na banda de condução e valência. $E_c(\vec{k})$ e $E_v(\vec{k})$, são respectivamente as energias dos eletrons de Bloch de momento \vec{k} da banda de condução e dos buracos na banda de valência.

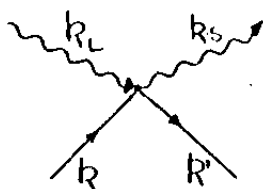
O propagador de um eletron de um ponto \vec{x}_1 num instante t_1 até um ponto \vec{x}_2 depois de transcorrer um certo tempo $\Delta t = t_2 - t_1 > 0$ é dado por:

$$(A.6) \quad G_c(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = i/(2\pi i)^4 \int d^4k \left(\exp[iE_c(\vec{k})(t_2 - t_1)] / [k^0 - E_c(\vec{k}) - i\epsilon] \right) |kc\rangle \langle ck|,$$

onde $k: (\vec{k}, \omega)$ e $X: (\vec{x}, t)$. O propagador de um buraco entre estes dois pontos no intervalo $\Delta t = t_2 - t_1 < 0$, escreve-se como:

$$(A.7) \quad G_v(\vec{x}_2, \vec{x}_1) = -i/(2\pi i)^4 \int d^4k \left(\exp[iE_v(\vec{k})(t_2 - t_1)] / [k^0 - E_v(\vec{k}) + i\epsilon] \right) |kv\rangle \langle vk|$$

2. Cálculo dos operadores de espalhamento dos seguintes gráficos de Feynman:



$$\begin{aligned} x &: (\vec{x}, t) \\ k &: (\vec{k}, E) \\ k_{L,S} &: (\vec{k}_{L,S}, \omega_{L,S}) \end{aligned}$$

Tem-se,

$$(A.8) \quad \mathcal{U}_{Ia} = (-i) \int d^4x \psi^\dagger(x) H_{ER}(x) \psi(x) ,$$

como é um processo que envolve a criação e aniquilação de um fóton no ponto x , considera-se apenas o segundo termo de (A.1), e ainda das expressões (A.4) e (A.5) para as funções de onda, obtem-se:

$$(A.9) \quad \mathcal{U}_{Ia} = -i 2 (e^2 / 2m_e c^2) (2\tilde{\mu} \hbar c^2 / [E_\infty \sqrt{(4\omega_L \omega_S)}]^{1/2}) \\ \times \sum_{\vec{k}^+ \vec{k}^-} \int d^4x \exp[i(k^+ x_3 - k^- x)] (\hat{E}_L \cdot \hat{E}_S) C_{\vec{k}^+}^\dagger C_{\vec{k}^-}$$

O primeiro fator 2 na fórmula acima, aparece porque em cada \vec{A} , no hamiltoniano de interação, contém um fóton criado e um destruído.

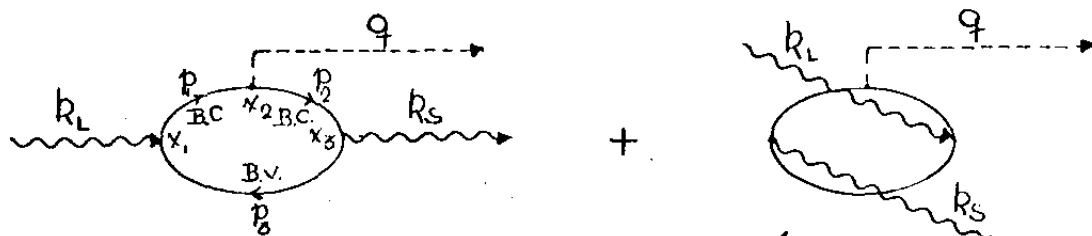
Integrando em x , obtem-se função δ de Dirac, de conservação de energia e momento, e escreve-se

$$(A.10) \quad \mathcal{U}_{Ia} = (-i) (e^2 / m_e c^2) [2\tilde{\mu} \hbar c^2 / E_\infty \sqrt{(4\omega_L \omega_S)}]^{1/2} (2\tilde{\mu})^4 \delta(E_f - E_i + \hbar\omega_S - \hbar\omega_L) (\hat{E}_L \cdot \hat{E}_S) \rho_q^e ,$$

com ρ_q^e densidade eletrônica dada por:

$$\rho_q^e = 1/V \sum_{\vec{k}} C_{\vec{k}+\vec{q}}^\dagger C_{\vec{k}}$$

b)



Tem-se o operador espalhamento \mathcal{U}_{Ib}^1 , para o primeiro gráfico,

$$(A.11) \quad \mathcal{U}_{Ib}^1 = (-i)^3 \int d^4x_1 \int d^4x_2 \int d^4x_3 H_{ER}(x_3) G(x_3, x_2) H_{EL}(x_2) G(x_2, x_1) H_{ER}(x_1) G(x_3, x_1) ,$$

como nos pontos x_1 e x_2 tem-se aniquilação e criação dos fótons, respectivamente, considera-se de H_{ER} dado em (A.1), apenas o primei

ro termo, e para os propagadores na B.C. usa-se (A.6) e na B.V.

(A.7), H_{EL} é dado em (A.3), assim após alguma algebra:

$$(A.12) \quad \mathcal{Z}_{\text{II}b}^1 = i(e^4/m_e^2) (2\tilde{\hbar})^{3/2} / [2v^{3/2} \epsilon_\infty (4\omega_L \omega_S)^{1/2}] (1/\epsilon_\infty - 1/\epsilon_0)^{1/2} \omega_{LO}^{1/2} / |q| \\ \times \int d^4 p_1 \int d^4 p_2 \int d^4 p_3 (\hat{E}_S \cdot \langle c | p_1 | \vec{p} | p_3 | u \rangle) (\hat{E}_L \cdot \langle u | p_3 | \vec{p} | p_2 | c \rangle) \\ \times [p_2^0 - E_c(p_2) + i\epsilon]^{-1} [p_1^0 - E_c(\vec{p}_1) + i\epsilon]^{-1} [p_3^0 - E_v(\vec{p}_3) - i\epsilon]^{-1} \\ \times \delta^4(p - k_L - p_3) \delta^4(q - p_2 - p_1) \delta^4(k_S + p_3 - p_2) \times a_q^+$$

Tem-se que,

$$p_3^0 = E_v(\vec{p}_3) \quad , \\ p_1^0 = E_v(\vec{p}_1) + \hbar\omega_L \quad , \\ p_2^0 = E_c(\vec{p}_2) + \hbar\omega_S \quad .$$

Integrando em p_1 e p_2 , e depois integrando por resíduos a parte em energia de p_3 , devido a presença do denominador

$$[E_v(\vec{p}_3) - E_v(\vec{p}_3)] \quad , \text{ obtem-se}$$

$$(A.13) \quad \mathcal{Z}_{\text{II}b}^1 = i(2\tilde{\hbar}i)(e^4/m_e^2) (2\tilde{\hbar})^{3/2} / [2v^{3/2} \epsilon_\infty (4\omega_L \omega_S)^{1/2}] (1/\epsilon_\infty - 1/\epsilon_0)^{1/2} \omega_{LO}^{1/2} / |q| \\ \times \int d^3 p_3 [\hat{E}_S \cdot \langle c, \vec{p}_3 + \vec{k}_S | \vec{p} | p_3 | u \rangle] [\langle u | p_3 | \vec{p} | p_3 + \vec{k}_L | c \rangle] \\ \times [E_v(\vec{p}_3) - E_c(\vec{p}_3 + \vec{k}_S) + \hbar\omega_S + i\epsilon]^{-1} \times [E_v(\vec{p}_3) - E_c(\vec{p}_3 + \vec{k}_L) + \hbar\omega_L + i\epsilon]^{-1} \\ \times a_q^+ \delta(E_f^{ph} - E_i^{ph} - \hbar\omega)$$

As somas na fórmula acima, de momento de eletrons e momento de fotons, despreza-se o momento dos fotons. Note-se também que $\vec{p}_3 \equiv \vec{p}$.

Para o processo de aniquilação de um fonon, o coeficiente do operador aniquilação de fonon a_q^+ na fórmula da matriz de probabilidade de transição fica identico ao coeficiente do operador criação de fonon a_q^+ na fórmula da matriz de probabilidade de transição dada acima. Então a soma dos dois processos,

obtem-se:

$$(A.14) \quad \mathcal{U}_{IIb}^1 = -i(2\tilde{u})^3 e^4/m_e^2 \hbar/[\epsilon_{\infty}^2 v(4\omega_L\omega_S)^{1/2}] 1/q^2 \\ \times \int d^3\vec{p}_0 (\hat{\epsilon}_S \cdot \vec{p}_{0c}) (\hat{\epsilon}_L \cdot \vec{p}_{0\sigma}) [E_v(\vec{p}_0) - E_c(\vec{p}_0) + \hbar\omega_S + i\epsilon]^{-1} \\ \times [E_v(\vec{p}_0) - E_c(\vec{p}_0) + \hbar\omega_L + i\epsilon]^{-1} \times \rho_q^i \delta(E_f^{ph} - E_i^{ph} - \hbar\omega),$$

onde

$$\vec{p}_{0c} = \langle \sigma \vec{p}_0 | \vec{p} | \vec{p}_0 c \rangle, \\ \vec{p}_{0\sigma} = \langle c \vec{p}_0 | \vec{p} | \vec{p}_0 \sigma \rangle,$$

e ρ_q^i é a densidade iônica dada por:

$$(A.15) \text{ com } \rho_q^i = Q (a_{\vec{q}} + a_{\vec{q}}^\dagger),$$

$$(A.16) \quad Q = -i (\hbar/2\tilde{u}v)^{1/2} (1/2e) q\omega_0^{1/2} \epsilon_{\infty} (1/\epsilon_{\infty} - 1/\epsilon_0)^{1/2}.$$

Considerare-se que o produto de elementos de matriz

$(\hat{\epsilon}_S \cdot \vec{p}_{0c})(\hat{\epsilon}_L \cdot \vec{p}_{0\sigma})$ dependa muito pouco do momento, o que permitirá tirá-lo do integrando.

O cálculo do segundo gráfico é análogo ao do primeiro, trocando apenas

$$\hbar\omega_L \leftrightarrow -\hbar\omega_S \\ \hat{\epsilon}_L \leftrightarrow \hat{\epsilon}_S$$

assim a soma dos dois gráficos dará:

$$(A.17) \quad \mathcal{U}_{IIb} = \mathcal{U}_{IIb}^1 + \mathcal{U}_{IIb}^2 \\ = -i(2\tilde{u})^3 (e^4/m_e^2) \hbar/[\epsilon_{\infty}^2 v(4\omega_L\omega_S)^{1/2}] (1/q^2) (\hat{\epsilon}_S \cdot \vec{p}_{0c})(\hat{\epsilon}_L \cdot \vec{p}_{0\sigma}) \\ \times \int d^3\vec{p}_0 \left\{ [E_v(\vec{p}_0) - E_c(\vec{p}_0) + \hbar\omega_S + i\epsilon]^{-1} [E_v(\vec{p}_0) - E_c(\vec{p}_0) + \hbar\omega_L + i\epsilon]^{-1} \right. \\ \left. + [E_v(\vec{p}_0) - E_c(\vec{p}_0) - \hbar\omega_L + i\epsilon]^{-1} [E_v(\vec{p}_0) - E_c(\vec{p}_0) - \hbar\omega_S + i\epsilon]^{-1} \right\} \\ \times \rho_q^i \delta(E_f^{ph} - E_i^{ph} - \hbar\omega).$$

Na aproximação de bandas parabólicas, tem-se

$$(A.18^a) \quad E_c(\vec{p}_c) = E_c(\vec{k}) = \hbar^2 k^2 / 2m_e^*$$

$$(A.18^b) \quad E_v(\vec{p}_c) = E_v(\vec{k}) = -E_g - \hbar^2 k^2 / 2m_h^*$$

donde,

$$(A.19) \quad E_v(\vec{k}) - E_c(\vec{k}) = -E_g - \hbar^2 k^2 / 2\mu$$

com E_g o intervalo da banda proibida do cristal, e μ a massa reduzida efetiva definida por: $1/\mu = 1/m_e^* + 1/m_h^*$.

Assim,

$$(A.20) \quad \mathcal{U}_{IIb} = -i(2\pi)^3 e^4/m_e^2 \hbar/[E_\infty^2 \sqrt{(4m\omega_s)^2}] \frac{1}{q^2} (\hat{e}_s \cdot \vec{p}) (\hat{e}_L \cdot \vec{p}_c) \\ \times \{I_- + I_+\} \rho_q^i \delta(E_j^{ph} - E_i^{ph} - \hbar\omega)$$

onde

$$(A.21) \quad I_{\mp} = \int_0^{k_{max}} d^3\vec{k} [E_g + \hbar^2 k^2 / 2\mu \mp \hbar\omega_s]^{-1} [E_g + \hbar^2 k^2 / 2\mu \mp \hbar\omega_L]^{-1}$$

Obtem-se para as integrais acima,

$$(A.22) \quad I_{\mp} = (4\pi/h^4) (2\mu)^{3/2} / \omega_s \left\{ (E_g \mp \hbar\omega_s)^{1/2} \arctg \left[(\hbar^2 k_{max}^2 / 2\mu)^{1/2} / (E_g \mp \hbar\omega_s)^{1/2} \right] \right. \\ \left. - (E_g \mp \hbar\omega_L)^{1/2} \arctg \left[(\hbar^2 k_{max}^2 / 2\mu)^{1/2} / (E_g \mp \hbar\omega_L)^{1/2} \right] \right\}$$

onde k_{max} acha-se de acordo com referência 1.

APÊNDICE B:

Cálculo da Expressão Geral da Vida Média dos Estados Intermediários do Processo.

Zubarev² a partir de um sistema de eletrons e fonons interagentes, obtem usando o hamiltoniano de interação de Fröhlich a vida média do polaron, para um semiconductor qualquer. No desenvolvimento dos cálculos, o desacoplamento usado para as Funções de Green de ordem mais alta, consiste em empregar o método de Hartre-Fock e o método generalizado de Fock. Obtem assim a vida média do polaron como:

$$(B.1) \quad \Gamma_{\vec{k}}(\omega) = \tilde{n} \sum_{\vec{q}} A_{\vec{q}}^2 \left\{ (V_{\vec{q}} + 1 - n_{\vec{k}-\vec{q}}) \delta(\omega - T_{\vec{k}-\vec{q}} - \omega_{\vec{q}}) + (n_{\vec{k}-\vec{q}} + V_{\vec{q}}) \delta(\omega - T_{\vec{k}-\vec{q}} + \omega_{\vec{q}}) \right\} ,$$

onde $n_{\vec{k}}$ e $V_{\vec{q}}$ são as funções de distribuição de fermions e bosons, respectivamente.

No regime clássico (altas temperaturas) as distribuições são expressas segundo estatística de Boltzman, assim:

$$(B.2) \quad n_{\vec{k}} = \tilde{A}_c \exp(-\beta^e E(\vec{k})) ,$$

e

$$V_{\vec{q}} = k_B T^* / \omega_0$$

onde

$$(B.3) \quad \tilde{A}_c = (n_c/2) \left(2\tilde{n} \hbar^2 \beta^e / m_e^* \right)^{3/2} ,$$

$$E(k) = (\hbar^2 k^2 / 2m_e^*)$$

e

$$\beta^e = 1/k_B T^e ,$$

com T^e e T^* , respectivamente, as temperaturas dos sistemas eletrônico e iônico, k_B a constante de Boltzman, n_c a concentração eletrônica na banda de condução, ω_0 a frequência do fonon, m_e^* e m_h^* respectivamente, as massas efetivas do elétron e buraco.

Calcula-se que:

$$(B.4) \quad A_q^2 = \bar{\alpha} / q^2 \quad ,$$

onde

$$(B.5) \quad \bar{\alpha} = \alpha \sqrt{4\pi} / \sqrt{\omega_0^2 / (2m_e^* \omega_0)^{1/2}}$$

Em B.1 em vez de somarmos os estados discretos dos momentos q , faremos uma integração no espaço contínuo dos momentos, através da substituição do somatório \sum_q por

$V / (2\pi)^3 \int d\vec{q} = V / (2\pi)^2 \int_{-1}^1 d\mu \int_{q_{min}}^{q_{max}} dq q^2$, com $\mu = \cos\theta$, $\pi \leq \theta \leq 0$, e ainda devido a propriedades da função δ de Dirac, podemos escrever:

$$(B.6) \quad \Gamma_k(\omega) = \sqrt{4\pi} (V / (2\pi)^2) \bar{\alpha} \left\{ (v_q + 1) I_1 - I_2 + I_3 + v_q I_4 \right\} \quad ,$$

onde

$$(B.7) \quad I_1 = \int_{q_{min}}^{q_{max}} dq \int_{-1}^{+1} d\mu \frac{m_e^*}{kq} \delta\left(\frac{m_e^*}{kq} [\omega - \omega_0] - (k^2 + q^2) / 2kq + \mu\right),$$

$$I_2 = \int_{q_{min}}^{q_{max}} dq \int_{-1}^{+1} d\mu \frac{n_{k+q}^* m_e^*}{kq} \delta\left(\frac{m_e^*}{kq} [\omega - \omega_0] - (k^2 + q^2) / 2kq + \mu\right),$$

e I_4 fica igual a I_1 trocando-se $-\omega_0$ por ω_0 ; o mesmo acontecendo com I_3 e I_2 .

Para cálculo das integrais I_1 e I_2 , precisaremos determinar q_{\min} e q_{\max} , o que teremos através da função δ de Dirac que elas contêm. Assim, devemos ter que:

$$(m_e^*/kq)(\omega - \omega_0) - (k^2 + q^2)/(2kq) + \mu = 0,$$

ou

$$\mu = (k^2 + q^2)/(2kq) - (m_e^*/kq)(\omega - \omega_0)$$

e como $-1 \leq \mu \leq 1$, vamos conseguir o sistema:

$$(B.8^a) \quad q^2 - 2kq + k^2 \leq 0$$

$$(B.8^b) \quad q^2 + 2kq + k^2 \geq 0$$

com

$$k^2 = k^2 - 2m_e^*(\omega - \omega_0).$$

De B.8^a tiramos que as raízes de $q^2 - 2kq + k^2 = 0$, são

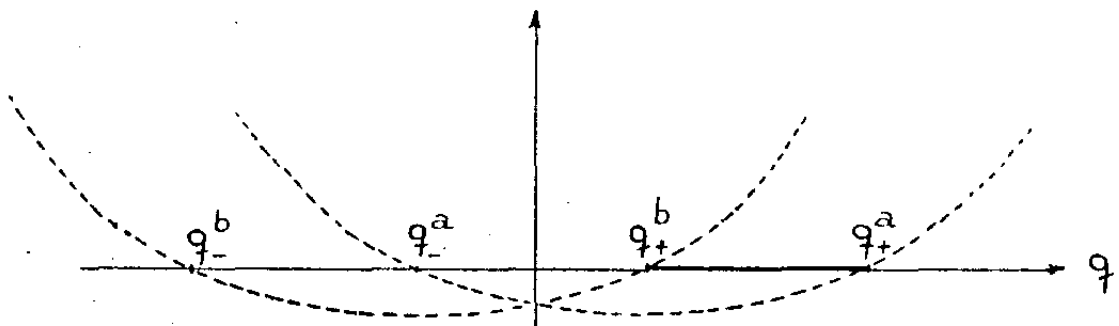
$$q_{\pm}^a = k \pm [2m_e^*(\omega - \omega_0)]^{1/2}$$

e de B.8^b, as raízes de $q^2 + 2kq + k^2 = 0$, que são:

$$q_{\pm}^b = -k \pm [2m_e^*(\omega - \omega_0)]^{1/2}$$

Para $\omega > \omega_0$ e $k < [2m_e^*(\omega - \omega_0)]^{1/2}$, teremos as curvas:

curvas:



Escolhendo $q_{+}^b \leq q \leq q_{+}^a$, estaremos satisfazendo (B.8).

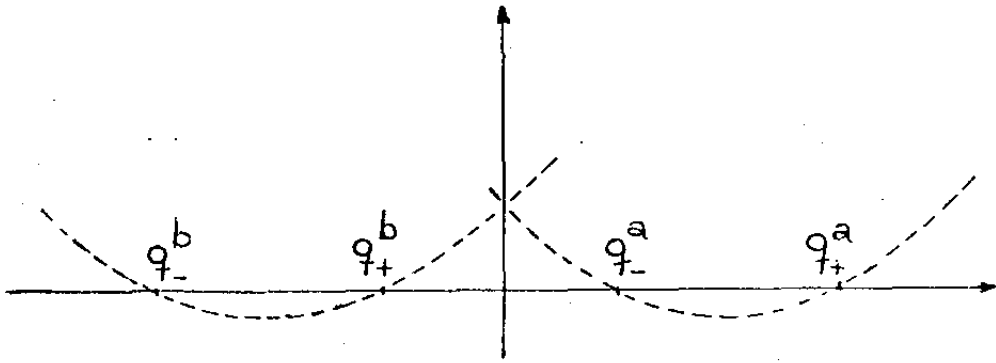
Assim a solução de \bar{I}_1 será:

$$(B.9) \quad I_1 = \frac{m_e^*}{k} \ln \left| \frac{q_+^a}{q_+^b} \right| = \frac{m_e^*}{k} \ln \left| \frac{([2m_e^*(\omega - \omega_0)]^{1/2} + k)}{([2m_e^*(\omega - \omega_0)]^{1/2} - k)} \right|$$

e para I_2 de (B.7), obtemos:

$$(B.10) \quad I_2 = \tilde{A}_c \frac{m_e^*}{k} \exp[-\beta^e(\omega - \omega_0)] \ln \left| \frac{([2m_e^*(\omega - \omega_0)]^{1/2} + k)}{([2m_e^*(\omega - \omega_0)]^{1/2} - k)} \right|$$

Se agora em vez de tomarmos $k < [2m_e^*(\omega - \omega_0)]^{1/2}$, tivéssemos tomado $k > [2m_e^*(\omega - \omega_0)]^{1/2}$, teríamos as curvas:



e então para satisfazer (B.8) deveríamos tomar $q_-^a \leq q \leq q_+^a$, mas devido o módulo no logarítmo em (B.9) e (B.10) o resultado para a integral não se alteraria. Logo I_1 e I_2 vale para qualquer k com um polo em $k = [2m_e^*(\omega - \omega_0)]^{1/2}$.

Finalmente teremos para a vida média do polaron,

$$(B.11) \quad \Gamma_k(\omega) = \frac{1}{2} \frac{\alpha}{k} (2m_e^*)^{1/2} \omega_0^{3/2} \left\{ \left[(k_B T^* / \omega_0 + 1) - \frac{\eta_c}{2} (2\hat{u} \hbar^2 \beta^e / m_e^*)^{3/2} \right] \right. \\ \times \exp[-\beta^e(\omega - \omega_0)] \ln \left| \frac{([2m_e^*(\omega - \omega_0)]^{1/2} + k)}{([2m_e^*(\omega - \omega_0)]^{1/2} - k)} \right| \\ \left. + \left[\frac{\eta_c}{2} (2\hat{u} \hbar^2 \beta^e / m_e^*)^{3/2} \exp[\beta^e(\omega - \omega_0)] + k_B T^* / \omega_0 \right] \ln \left| \frac{([2m_e^*(\omega + \omega_0)]^{1/2} + k)}{([2m_e^*(\omega + \omega_0)]^{1/2} - k)} \right| \right\}$$

O processo de nosso interesse, exige a vida média de estados intermediários em tres estados de energia diferentes, na aproximação de bandas parabólicas. A saber:

A) Primeiro estado, tem energia $\hbar\omega = E_v = -E_g - \hbar^2 k^2 / 2m_h^*$, onde E_v é a energia do buraco na banda de valência, E_g é o intervalo da banda proibida do cristal e m_h^* é a massa específica do buraco.

Na fórmula (B.11), os termos $(\omega - \omega_0)$ e $(\omega + \omega_0)$ aparecem dentro de uma raiz e deverão ser positivos. Assim para o valor de $\hbar\omega$ acima, tem-se

$$a) \quad \omega - \omega_0 > 0$$

ou

$$-E_g - \hbar^2 k^2 / 2m_h^* > \omega_0$$

o que não se estabelece.

$$b) \quad \omega + \omega_0 > 0$$

ou

$$-E_g - \hbar^2 k^2 / 2m_h^* > -\omega_0$$

ou ainda

$$E_g + \hbar^2 k^2 / 2m_h^* < \omega_0$$

o que quer dizer que o fonon ω_0 produzido tem valor de energia maior que o intervalo da banda proibida E_g , do cristal mais um termo positivo. Impossível.

B) Segundo estado, tem energia $\hbar\omega = E_c + \hbar\omega_1$, assim de considerações dos termos $(\omega \mp \omega_0)$ da fórmula B.11 tem-se:

$$a) \quad \omega - \omega_0 > 0$$

APÊNDICE C:

Teorema Generalizado da Flutuação-Dissipação

O sistema em estudo no capítulo II, pode ser entendido estar em banho térmico a uma dada temperatura T e cada um dos subsistemas que o compõe, a temperaturas bem definidas, digamos, T^e para os eletrons e T^* para os íons. Entre os subsistemas existe interação, e então após transcorrer certo intervalo de tempo — τ^e para o subsistema eletrônico e τ^* para o iônico, ditos tempo de relaxação — estabelece-se o equilíbrio térmico entre as partes. Entretanto, se medidas de processo de espalhamento forem registradas para tempo de interação τ , da radiação com o sistema, menor que os tempos de relaxação τ^e e τ^* pode-se considerar cada subsistema em temperaturas diferentes e dizemos que o sistema esta em quasi-equilíbrio térmico. Precisa-se assim, de que o Teorema de Flutuação-Dissipação seja modificado para aplicá-lo a estas condições.

Fica-se, para isto, relacionados com termos do tipo:

$$A = \langle \rho^e(\vec{x}, t) \rho^{e\dagger}(\vec{x}, t) \rangle, B = \langle \rho^i(\vec{x}, t) \rho^{i\dagger}(\vec{x}, t) \rangle$$

e termos que envolvem densidades eletrônica e iônica, i.e', $C = \langle \rho^i(\vec{x}, t) \rho^{e\dagger}(\vec{x}, t) \rangle$ e $D = \langle \rho^e(\vec{x}, t) \rho^{i\dagger}(\vec{x}, t) \rangle$.

Vamos tratá-los de cada vez. Na definição de valor estatístico médio, sejam Z^e e H_e^0 , Função de Partição e hamiltoniano livre do subsistema eletrônico, e as correspondentes ao subsistema iônico Z^* e H_{ph}^0 . Assim:

$$A = \langle \rho^e(\vec{x}, t) \rho^{e\dagger}(\vec{x}, t) \rangle = \frac{1}{Z^e} \text{Tr} \{ \exp(-\beta H_e^0) \rho^e(\vec{x}, t) \rho^{e\dagger}(\vec{x}, t) \}$$

$$= \text{Tr} \left\{ \frac{1}{Z^e} \rho^{e\dagger}(\vec{x}, t) \exp[i(t+i\beta^e)H_e^0] \rho^e(\vec{x}, 0) \exp[-i(t+i\beta^e)H_e^0] \exp(-\beta H_e^0) \right\}$$

$$= \langle \rho^{e\dagger}(\vec{x}, t) \rho^e(\vec{x}, t+i\beta^e) \rangle,$$

i.e', mostramos que:

$$\langle \rho^e(\vec{x}, t) \rho^{\dagger e}(\vec{x}', t') \rangle = \langle \rho^{\dagger e}(\vec{x}', t) \rho^e(\vec{x}, t + i\beta^e) \rangle,$$

ou sua transformada de Fourier:

$$\langle \rho^e(\vec{x}) \rho^{\dagger e}(\vec{x}') ; \omega \rangle = \langle \rho^{\dagger e}(\vec{x}') \rho^e(\vec{x}) ; -\omega \rangle \exp(\beta^e \omega)$$

Considerando que

$$\text{Im} G_{(\vec{x}, \vec{x}')}^{ee}(\omega) = \frac{1}{2} \{ \langle \rho^e(\vec{x}) \rho^{\dagger e}(\vec{x}') ; \omega \rangle - \langle \rho^{\dagger e}(\vec{x}') \rho^e(\vec{x}) ; \omega \rangle \}$$

obtemos de

$$\text{Im} G_{(\vec{x}, \vec{x}')}^{ee}(\omega) = \frac{1}{2} \langle \rho^e(\vec{x}) \rho^{\dagger e}(\vec{x}') ; \omega \rangle \{ 1 - \exp(-\beta^e \omega) \},$$

ou sua transformada de Fourier no espaço dos momentos

$$(C.1) \quad \text{Im} G_{(\vec{q})}^{ee}(\omega) = \frac{1}{2} \langle \rho_{\vec{q}}^e \rho_{\vec{q}}^{\dagger e} ; \omega \rangle \{ 1 - \exp(-\beta^e \omega) \}$$

Analogamente, para os íons, i.e., para o termo B, tere-

mos:

$$(C.2) \quad \text{Im} G_{(\vec{q})}^{ii}(\omega) = \frac{1}{2} \langle \rho_{\vec{q}}^i \rho_{\vec{q}}^{\dagger i} ; \omega \rangle \{ 1 - \exp(-\beta^* \omega) \}$$

Para os termos C e D, definidos pelas densidades dos

dois subsistemas, temos o seguinte desenvolvimento:

$$\begin{aligned} C &= \langle \rho^i(\vec{x}, t) \rho^{\dagger e}(\vec{x}', t') \rangle = \text{Tr} \left\{ \frac{\exp(-\beta^e H_e^0)}{\mathcal{Z}^e} \frac{\exp(\beta^* H_{ph}^0)}{\mathcal{Z}^*} \rho^i(\vec{x}, t) \rho^{\dagger e}(\vec{x}', t') \right\} \\ &= \text{Tr} \left\{ \frac{1}{(\mathcal{Z}^e \mathcal{Z}^*)} \exp(\beta^e H_e^0) \rho^{\dagger e}(\vec{x}', t') \exp[i(t+i\beta^*) H_{ph}^0] \rho^i(\vec{x}, 0) \exp[i(t+i\beta^*) H_{ph}^0] \right. \\ &\quad \left. \times \exp(-\beta^* H_{ph}^0) \right\} = \langle \rho^{\dagger e}(\vec{x}', t') \rho^i(\vec{x}, t + i\beta^*) \rangle, \end{aligned}$$

i.e', mostramos que:

$$\langle \rho^i(\vec{x}, t) \rho^{\dagger e}(\vec{x}', t') \rangle = \langle \rho^{\dagger e}(\vec{x}', t) \rho^i(\vec{x}, t + i\beta^*) \rangle$$

ou sua transformada de Fourier:

$$\langle \rho^i(\vec{x}) \rho^{\dagger e}(\vec{x}') ; \omega \rangle = \langle \rho^{\dagger e}(\vec{x}') \rho^i(\vec{x}) ; -\omega \rangle \exp(\beta^* \omega)$$

e concluímos que:

$$(C.3) \quad \text{Im} G_{(\vec{q})}^{ie}(\omega) = \frac{1}{2} \langle \rho_{\vec{q}}^i \rho_{\vec{q}}^{\dagger e} ; \omega \rangle \{ 1 - \exp(-\beta^* \omega) \}$$

Para o termo D ,

$$D = \langle \rho^e(\vec{x}, t) \rho^{ti}(\vec{x}, t) \rangle = \text{Tr} \left\{ \frac{\exp(-\beta^* H_{ph}^0)}{Z^*} \frac{\exp(-\beta^e H_e^0)}{Z^e} \right. \\ \left. \rho^{ti}(\vec{x}, t) \exp(-\beta^e H_e^0) \exp(it H_e^0) \rho^e(\vec{x}, 0) \exp(-it H_e^0) \exp(\beta^e H_e^0) \right. \\ \left. \times \exp(-\beta^e H_e^0) \right\rangle = \langle \rho^{ti}(\vec{x}, t) \rho^e(\vec{x}, t + i\beta^e) \rangle$$

o que nos permite concluir que:

$$(c.4) \quad \text{Im } G(\vec{q}, \omega) = \frac{1}{2} \langle \rho_q^e \rho_q^{ti}; \omega \rangle \{ 1 - \exp(-\beta^e \omega) \}$$

As expressões obtidas de 1 a 4 leva-nos a uma expressão para a secção de choque por unidade de frequência e ângulo sólido, para uma experiência de espalhamento de radiação por sistema formado por subsistemas, e no presente caso em número de dois, em equilíbrio térmico. A saber, levando em conta (II 19) e procedimento bem conhecido.³

$$(c.5) \quad \frac{d^2\sigma}{d\omega d\Omega} \sim \frac{e^2}{\epsilon_\infty^2} \left\{ [1 - \exp(-\beta^e \omega)]^{-1} \text{Im } G(\vec{q}, \omega) + [1 - \exp(-\beta^* \omega)]^{-1} \right. \\ \times \text{Im} \left(\frac{|B(q)|^2}{|A(q)|^2} G(\vec{q}, \omega) \right) + [1 - \exp(-\beta^* \omega)]^{-1} \\ \left. \times \text{Im} \left(\frac{A(q) B(q)^*}{|A(q)|^2} G(\vec{q}, \omega) \right) + [1 - \exp(-\beta^e \omega)]^{-1} \text{Im} \left(\frac{A(q)^* B(q)}{|A(q)|^2} G(\vec{q}, \omega) \right) \right\}$$

A generalização do Teorema de Flutuação-Dissipação - permitirá aproximar-se de tratamentos mais realistas das excitações em quasi-equilíbrio térmico.

APÊNDICE D: Cálculo das Funções de Green $G_{\vec{q}}^{ee}(\omega) (\equiv \langle \rho_{\vec{q}}^e | \rho_{\vec{q}}^{e\dagger}; \omega \rangle)$,
 $G_{\vec{q}}^{ei}(\omega) (\equiv \langle \rho_{\vec{q}}^e | \rho_{\vec{q}}^i; \omega \rangle)$, $G_{\vec{q}}^{ie}(\omega) (\equiv \langle \rho_{\vec{q}}^i | \rho_{\vec{q}}^e; \omega \rangle)$,
 $G_{\vec{q}}^{ii}(\omega) (\equiv \langle \rho_{\vec{q}}^i | \rho_{\vec{q}}^i; \omega \rangle)$.

Seja a densidade de carga eletrônica $\rho_{\vec{q}}^e$ e iônica $\rho_{\vec{q}}^i$ dadas por:

$$(D.1) \quad \rho_{\vec{q}}^e = \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}} C_{\vec{k}+\vec{q}}^{\dagger} C_{\vec{k}}$$

$$(D.2) \quad \rho_{\vec{q}}^i = Q (b_{\vec{q}}^{\dagger} + b_{\vec{q}})$$

sendo $C_{\vec{k}}^{\dagger}$ e $C_{\vec{k}}$ operadores de criação e aniquilação, respectivamente, de um elétron de momento \vec{k} , $b_{\vec{q}}^{\dagger}$ e $b_{\vec{q}}$ os operadores de criação e aniquilação, respectivamente, de um fonon de momento \vec{q} , e, finalmente, Q está definido em II.40.

O hamiltoniano total H do sistema, é dado por:

$$(D.3) \quad H = H_0 + H_{\text{coul.}}$$

onde H_0 é o hamiltoniano das partículas livres dado por:

$$(D.4) \quad H_0 = \sum_{\vec{k}} E_{\vec{k}} C_{\vec{k}}^{\dagger} C_{\vec{k}} + \sum_{\vec{q}} \hbar \omega_{\vec{q}} (b_{\vec{q}}^{\dagger} b_{\vec{q}} + 1/2)$$

onde $E_{\vec{k}}$ são as energias de Bloch da banda de condução e $\hbar \omega_{\vec{q}}$ as energias dos fonons, e H_{coul} em D.3 é o hamiltoniano de interação coulombiana entre as partículas dado por:

$$(D.5) \quad H_{\text{coul}} = \frac{1}{2} \sum_{\vec{q}} (4\pi e^2 v) / q^2 \rho_{\vec{q}} \rho_{-\vec{q}}$$

com

$$\rho_q = \rho_q^e + \rho_q^i$$

a densidade de carga total do sistema.

1. Cálculo de $G_q^{ee}(\vec{q}, \omega)$

A equação de movimento II.26 capítulo II, toma a forma:

$$(D.6) \quad \omega \langle\langle \rho_q^e | \rho_q^{\dagger e}; \omega \rangle\rangle = \frac{1}{2\pi} \langle [\rho_q^e, \rho_q^{\dagger e}] \rangle + \langle\langle [\rho_q^e, H] | \rho_q^{\dagger e}; \omega \rangle\rangle.$$

Usando as regras normais de comutação para os operadores de criação e aniquilação, obtém-se após alguma álgebra:

$$(D.7) \quad [\rho_q^e, \rho_q^{\dagger e}] = \sum_{\vec{k}} C_{\vec{k}+\vec{q}}^{\dagger} C_{\vec{k}+\vec{q}} - \sum_{\vec{k}} C_{\vec{k}}^{\dagger} C_{\vec{k}}$$

$$(D.8) \quad [\rho_q^e, H] = \sum_{\vec{k}} (E_{\vec{k}} - E_{\vec{k}+\vec{q}}) C_{\vec{k}+\vec{q}}^{\dagger} C_{\vec{k}} + \frac{1}{2} \sum_{\vec{q}'} (4\pi e^2 / \epsilon_{\infty} q'^2) (\rho_{\vec{q}}^e - \rho_{\vec{q}}^i) \sum_{\vec{k}} (C_{\vec{k}+\vec{q}}^{\dagger} C_{\vec{k}+\vec{q}'} - C_{\vec{k}+\vec{q}-\vec{q}'}^{\dagger} C_{\vec{k}})$$

onde $E_{\vec{k}}$ são as energias de Bloch da banda de condução.

Assim D.6, fica com a seguinte expressão:

$$(D.9) \quad \omega \langle\langle \rho_{\vec{q}}^e | \rho_{\vec{q}}^e; \omega \rangle\rangle = \frac{1}{2\pi} \langle \sum_{\vec{R}} C_{\vec{R}+\vec{q}}^+ C_{\vec{R}+\vec{q}} - \sum_{\vec{R}} C_{\vec{R}}^+ C_{\vec{R}} \rangle + \sum_{\vec{R}} (E_{\vec{R}} - E_{\vec{R}+\vec{q}}) \langle\langle C_{\vec{R}+\vec{q}}^+ C_{\vec{R}} | \rho_{\vec{q}}^e; \omega \rangle\rangle \\ \times \sum_{\vec{R}} \sum_{\vec{q}'} (4\pi e^2 / (\epsilon_{\infty} q'^2)) \langle\langle (\rho_{\vec{q}}^e - \rho_{\vec{q}'}^i) (C_{\vec{R}+\vec{q}}^+ C_{\vec{R}+\vec{q}'} - C_{\vec{R}+\vec{q}-\vec{q}'}^+ C_{\vec{R}}) | \rho_{\vec{q}}^e; \omega \rangle\rangle$$

Pode-se obter alguns efeitos da interação nos cálculos, linearizando através da aproximação de fase aleatória (R.P.A): na determinação do movimento de uma excitação de momento \vec{q} , mantemos somente o termo associado com o q -ésimo momento transferido. Assim a expressão acima se reduz:

$$(D.10) \quad \omega \langle\langle C_{\vec{R}+\vec{q}}^+ C_{\vec{R}} | \rho_{\vec{q}}^e; \omega \rangle\rangle = \frac{1}{2\pi} (n_{\vec{R}+\vec{q}} - n_{\vec{R}}) + (E_{\vec{R}} - E_{\vec{R}+\vec{q}}) \langle\langle C_{\vec{R}+\vec{q}}^+ C_{\vec{R}} | \rho_{\vec{q}}^e; \omega \rangle\rangle \\ + V_{\vec{q}} (n_{\vec{R}+\vec{q}} - n_{\vec{R}}) \{ \langle\langle \rho_{\vec{q}}^e | \rho_{\vec{q}}^e; \omega \rangle\rangle - \langle\langle \rho_{\vec{q}}^i | \rho_{\vec{q}}^e; \omega \rangle\rangle \},$$

onde

$$(D.11) \quad V_{\vec{q}} = (2\pi e^2) / (\epsilon_{\infty} q^2),$$

$$(D.12) \quad n_{\vec{R}} = \langle C_{\vec{R}}^+ C_{\vec{R}} \rangle = [1 + \exp(\beta E_{\vec{R}})]^{-1}$$

Definindo

$$(D.13) \quad L(\vec{q}, \omega) = \sum_{\vec{R}} (n_{\vec{R}} - n_{\vec{R}+\vec{q}}) / [\omega - E_{\vec{R}} + E_{\vec{R}+\vec{q}}]^{+1}$$

finalmente escreve-se:

$$(D.14) \quad [1 + V_{\vec{q}} L(\vec{q}, \omega)] G_{\vec{q}}^{ee}(\vec{q}, \omega) - V_{\vec{q}} L(\vec{q}, \omega) G_{\vec{q}}^{ie}(\vec{q}, \omega) \\ + \frac{1}{2\pi} L(\vec{q}, \omega) = 0$$

2. Cálculo de $G(\vec{q}, \omega)^{ei}$

A equação de movimento II.26, cap.II, toma a forma:

$$(D.15) \quad \omega \langle\langle \rho_q^e | \rho_q^i; \omega \rangle\rangle = \frac{1}{2\pi} \langle [\rho_q^e, \rho_q^i]_- \rangle + \langle\langle [\rho_q^e, H]_- | \rho_q^i; \omega \rangle\rangle$$

O primeiro termo do segundo membro se anula, por se tratar de comutação de operadores relativos a partículas diferentes. Das expressões D.10 e D.13, e usando R.P.A, obtem-se:

$$(D.16) \quad G(\vec{q}, \omega)^{ei} = v_q L(\vec{q}, \omega) / [1 + v_q L(\vec{q}, \omega)] G(\vec{q}, \omega)^{ii},$$

com v_q dado por D.11

3. Cálculo de $G(\vec{q}, \omega)^{ie}$

Da equação II.26, cap.II, tem-se:

$$(D.17) \quad \omega \langle\langle \rho_q^i | \rho_q^e; \omega \rangle\rangle = \frac{1}{2\pi} \langle [\rho_q^i, \rho_q^e]_- \rangle + \langle\langle [\rho_q^i, H]_- | \rho_q^e; \omega \rangle\rangle$$

O primeiro termo do segundo membro se anula. E desenvolvendo $[\rho_q^i, H]_-$ obtem-se:

$$(D.18) \quad [\rho_q^i, H]_- = \omega_q Q_q (b_q - b_q^+)$$

e assim D.17 fica:

$$(D.19) \quad \omega \langle\langle \rho_q^i | \rho_q^e; \omega \rangle\rangle = \omega_q Q_q \langle\langle b_q - b_q^+ | \rho_q^e; \omega \rangle\rangle,$$

Aplica-se novamente a eq. de movimento II.26, para a função de Green, que aparece no segundo membro de D.19, e após alguma algebra obtem-se para D.19,

$$(D.20) \quad (\omega^2 - \omega_q^2 - \Omega_q^2) G_{(q, \omega)}^{ie} + \Omega_q^2 G_{(q, \omega)}^{ee} = 0$$

onde

$$(D.21) \quad \Omega_q^2 = 4V_q \omega_q Q_q Q_q^*$$

4. Cálculo de $G_{(q, \omega)}^{ii}$

A equação de movimento, II.26, cap.II, toma a forma:

$$(D.22) \quad \omega \langle\langle \rho_q^i | \rho_q^{\dagger i}; \omega \rangle\rangle = \frac{1}{2\pi} \langle [\rho_q^i, \rho_q^{\dagger i}] \rangle + \langle\langle [\rho_q^i, H] | \rho_q^{\dagger i}; \omega \rangle\rangle$$

O primeiro termo do segundo membro se anula. E de D.18 com alguma algebra, obtem-se:

$$(D.23) \quad (\omega^2 - \omega_q^2 - \Omega_q^2) G_{(q, \omega)}^{ii} + \Omega_q^2 G_{(q, \omega)}^{ei} - \frac{1}{4\pi} \Omega_q^2 / V_q = 0,$$

com Ω_q^2 definido em D.21 e V_q em D.11

Tem-se portanto um sistema de equações, formado por D.14, D.16, D.20 e D.23, cuja solução será:

$$(D.24) \quad G_{(\vec{q}, \omega)}^{ee} = -\frac{1}{2\pi} M(\vec{q}, \omega) \left[1 - \Omega_q^2 v_q M(\vec{q}, \omega) / D_q^2 \right],$$

$$G_{(\vec{q}, \omega)}^{ei} = G_{(\vec{q}, \omega)}^{ie} = \frac{1}{2\pi} \Omega_q^2 M(\vec{q}, \omega) / D_q^2,$$

$$G_{(\vec{q}, \omega)}^{ii} = \frac{1}{2\pi} (\Omega_q^2 / v_q) / D_q^2,$$

onde

$$(E.25) \quad M(\vec{q}, \omega) = L(\vec{q}, \omega) / [1 + v_q L(\vec{q}, \omega)]$$

$$(D.26) \quad D_q^2 = \omega^2 - \omega_q^2 - \Omega_q^2 / [1 + v_q L(\vec{q}, \omega)].$$

Tem-se assim as formas explícitas das Funções de Green, calculadas a partir da equação de movimento obtida no capítulo II.

Cálculo das partes real e imaginária das Funções de Green, nas quais inclui-se a largura de linha do fonon longitudinal óptico

a) Cálculo para $G_{(\vec{q}, \omega)}^{ee}$

Em D.26, inclui-se Γ_{ph} , a largura de linha do fonon longitudinal óptico, e tem-se para D.24

$$(D.27) \quad G_{(\vec{q}, \omega)}^{ee} = -\frac{1}{2\pi} M(\vec{q}, \omega) \left[1 - \Omega_q^2 v_q M(\vec{q}, \omega) / (\omega^2 - \omega_0^2 - \frac{\Omega_q^2}{1 + v_q L(\vec{q}, \omega)} + i\omega\Gamma_{ph}) \right]$$

onde se pos $\omega_q = \omega_0$, frequência do fonon TO, e obtém-se a parte real

$$(D.28) \quad \text{Re } G_{(\vec{q}, \omega)}^{ee} = -\frac{1}{2\pi} \left\{ \alpha' [(\omega^2 - \omega_L^2)(v_q \alpha'(\omega^2 - \omega_0^2) + (\omega^2 - \omega_L^2)) + (\omega\Gamma_{ph})^2 (1 + v_q \alpha')] + \alpha'' [(\omega\Gamma_{ph})^2 + (\omega^2 - \omega_L^2)(\omega^2 - \omega_0^2)] v_q \alpha'' \right\} / D_q^2$$

e sua parte imaginária,

$$(D.29) \quad \text{Im } G_{\vec{q}}^{ee}(\omega) = -\frac{1}{2\pi} \left\{ \alpha' \sqrt{v_q} \alpha' (\omega_L^2 - \omega_0^2) \omega \Gamma_{ph} + \alpha'' (\omega^2 - \omega_L^2) \right. \\ \left. \times [(\omega^2 - \omega_L^2) - \omega \Gamma_{ph} \sqrt{v_q} \alpha''] + \alpha'' \omega \Gamma_{ph} [\sqrt{v_q} \alpha'' (\omega^2 - \omega_0^2) + \omega \Gamma_{ph}] \right\} / D_q^2$$

onde

$$(D.30) \quad D_q^2 = [(\omega^2 - \omega_L^2) + \alpha' \sqrt{v_q} (\omega^2 - \omega_q^2) - \alpha'' \sqrt{v_q} \omega \Gamma_{ph}]^2 \\ + [\alpha'' \sqrt{v_q} (\omega^2 - \omega_q^2) + (\alpha' \sqrt{v_q} + 1) \omega \Gamma_{ph}]^2$$

e α' e α'' , são respectivamente a parte real e imaginária da função $L(\vec{q}, \omega)$.

b) Cálculo para $G_{\vec{q}}^{ei}(\omega) (\equiv G_{\vec{q}}^{ie}(\omega))$

Inclue-se em D. 24 a largura de linha Γ_{ph} do fonon, e tem-se, para $G_{\vec{q}}^{ei}$,

$$(D.31) \quad G_{\vec{q}}^{ei}(\omega) = \frac{1}{2\pi} \Omega_q^2 M(\vec{q}, \omega) / \left(\omega^2 - \omega_0^2 - \frac{\Omega_q^2}{1 + \sqrt{v_q} L(\vec{q}, \omega)} + i \omega \Gamma_{ph} \right)$$

As partes real e imaginária obtem-se:

$$(D.32) \quad \text{Re } G_{\vec{q}}^{ei}(\omega) \equiv \text{Re } G_{\vec{q}}^{ie}(\omega) = \frac{1}{2\pi} \Omega_q^2 \left\{ \alpha' [(\omega^2 - \omega_L^2) \right. \\ \left. + \sqrt{v_q} \alpha' (\omega^2 - \omega_0^2)] + \alpha'' [\sqrt{v_q} \alpha'' (\omega^2 - \omega_0^2) + \omega \Gamma_{ph}] \right\} / D_q^2$$

$$(D.33) \quad \text{Im } G_{\vec{q}}^{ei}(\omega) \equiv \text{Im } G_{\vec{q}}^{ie}(\omega) = \frac{1}{2\pi} \Omega_q^2 \left\{ \alpha'' [(\omega^2 - \omega_L^2) \right. \\ \left. - \sqrt{v_q} \alpha'' \omega \Gamma_{ph}] - \alpha' (1 + \sqrt{v_q} \alpha') \omega \Gamma_{ph} \right\} / D_q^2$$

com D_q^2 definido em D.30.

c) Cálculo para $G_{(\vec{q}, \omega)}^{ii}$

A largura de linha Γ_{ph} do fonon é incluída em D.24 e assim G_{ii} fica:

$$(D.34) \quad G_{(\vec{q}, \omega)}^{ii} = \frac{1}{2\pi} \left(\frac{\Omega_q^2}{V_q} \right) / \left(\omega^2 - \omega_0^2 - \frac{\Omega_q^2}{1 + V_q L(\vec{q}, \omega)} + i\omega \Gamma_{ph} \right)$$

e obtém-se as partes real e imaginária,

$$(D.35) \quad \text{Re } G_{(\vec{q}, \omega)}^{ii} = \frac{1}{2\pi} \left(\frac{\Omega_q^2}{V_q} \right) \left\{ [(\omega^2 - \omega_L^2) + V_q \alpha'(\omega^2 - \omega_0^2)] \times (1 + V_q \alpha') + V_q \alpha'' V_q \alpha''' (\omega^2 - \omega_0^2) \right\} / \mathbb{D}_q^2$$

e

$$(D.36) \quad \text{Im } G_{(\vec{q}, \omega)}^{ii} = \frac{1}{2\pi} \left(\frac{\Omega_q^2}{V_q} \right) \left\{ V_q \alpha'' (\omega_0^2 - \omega_L^2) - \omega \Gamma_{ph} \times (V_q \alpha'' V_q \alpha'' - \omega \Gamma_{ph} (1 + V_q \alpha')^2) \right\} / \mathbb{D}_q^2$$

onde \mathbb{D}_q^2 está definido em D.30.

APÊNDICE E:

A Função de Green eletrônica não perturbada é

$$(E.1) \quad L(\vec{q}, \omega) = \sum_{\vec{k}} (n_{\vec{k}} - n_{\vec{k}+\vec{q}}) / [\omega - E(\vec{k}) + E(\vec{k}+\vec{q})]$$

onde $n_{\vec{k}} = \langle C_{\vec{k}}^\dagger C_{\vec{k}} \rangle = [1 + \exp(\beta^e E(\vec{k}))]^{-1}$ é a função distribuição de partículas, sendo $\langle \dots \rangle$ o valor estatístico médio, no caso, aplicado ao operador número de partículas. Tem-se ainda que $\beta^e = (k_B T^e)^{-1}$ e $E(\vec{k})$ são as energias de Bloch da banda de condução.

Presentemente esta-se interessado em desenvolver (E.1) para o caso de um gás eletrônico não degenerado ($T^e \gg T^F$). A estas altas temperaturas internas T^e do sistema eletrônico, a função $n_{\vec{k}}$ torna-se a função distribuição de Boltzmann, i.e.:

$$(E.2) \quad n_{\vec{k}} = A \exp(-\beta^e E(\vec{k}))$$

onde

$$(E.3) \quad A = (2\tilde{n} \beta^e / m_e^*)^{3/2} n$$

com n a concentração eletrônica.

Para pequenas transferências de momento \vec{q} , obtem-se para (E.1),

$$(E.4) \quad L(\vec{q}, \omega) = \mathcal{L}'_{\vec{q}} + i \mathcal{L}''_{\vec{q}},$$

com

$$(E.5) \quad \mathcal{L}'_{\vec{q}} = \mathcal{G} \sum_{\vec{k}} (-\vec{q} \cdot \vec{\nabla} n_{\vec{k}}) / (\omega + \vec{q} \cdot \vec{\nabla} E(\vec{k})),$$

e

$$(E.6) \quad \mathcal{L}''_{\vec{q}} = \tilde{n} \sum_{\vec{k}} \vec{q} \cdot \vec{\nabla} n_{\vec{k}} \delta(\omega + \vec{q} \cdot \vec{\nabla} E(\vec{k})),$$

sendo g o símbolo do valor principal da função.

Após alguma álgebra, obtém-se:

$$(E.7) \quad \mathcal{L}'_q = n \beta^e [1 - (2/\sqrt{\pi}) z^3 I(z)]$$

com $z = \omega/(q v_{th})$, sendo v_{th} a velocidade térmica dada por

$$(1/2) m_e v_{th}^2 = (\beta^e)^{-1}$$

e a integral $I(z)$ é,

$$I(z) = \int_0^{\infty} dx \times \exp(-z^2 x^2) \ln |(x+1)/(x-1)|$$

Desenvolvendo a parte imaginária \mathcal{L}''_q , E.6, obtemos:

$$\mathcal{L}''_q = -A \beta^e v_{th}^3 / (2\sqrt{\pi})^2 \int dk k^2 \exp(-\beta^e \hbar^2 k^2 / 2m_e^*) \int_{-1}^1 dx \times \delta(\omega m_e^* / qk + x)$$

com dado (E.3). A presença da função δ na fórmula acima no integrando da integral em x , leva a determinação de um limite inferior para o momento para o cálculo da integral desta variável. Este limite inferior é $k_{min} = \omega m_e^* / q$, o que permitirá obter:

$$(E.8) \quad \mathcal{L}''_q = \sqrt{\pi} n v(\omega/q) \sqrt{2m_e^*} (\beta^e)^{3/2} \exp(-\beta^e \omega^2 m_e^* / 2q)$$

Esta fórmula é conhecida como amortecimento de Landau das excitações eletrônicas.

Pode-se fazer um tratamento em $L(\vec{q}, \omega)$ para se levar em conta o tempo de relaxação τ_p do plasma. A extensão analítica de $L(\vec{q}, \omega)$, dá para a parte real,

$$(E.9) \quad \nabla_q L(\vec{q}, \omega) = -\omega_p^2 / \omega^2$$

com ω_p , a frequência de plasma. Nesta fórmula, substitui-se ω^2

por $\omega(\omega + i/\tau_e)$ o que levará as partes real \mathcal{L}' e imaginária \mathcal{L}'' de $\chi(\vec{q}, \omega)$ ter valores:

(E.10)

$$\chi_q \mathcal{L}'_q = -\omega_p^2 (\omega^2 + 1/\tau_e^2)$$

e

(E.11)

$$\chi_q \mathcal{L}''_q = (\omega_p^2/\omega) \tau_e / (1 + \omega^2 \tau_e^2)$$

Tem-se assim o tratamento da Função de Green eletrônica não perturbada.

BIBLIOGRAFIA

1. Bendow B., Birman J.L., Ganguly A.K., Damen T.C., Leite R.C.C. and Scott J.F., Opt. Commun. 1, 6, 267 (1970).
2. D.N. Zubarev, Soviet Physics Uspekhi, vol.3, n^o 3, 320 (1960).
3. L.Van Hove, Phys.Rev. 95, 249 (1954); 95, 1374 (1954).