

**ESPALHAMENTO MAGNETO-RAMAN RESSONANTE EM SEMICONDUTOR POLAR**

---

*Antonio José da Costa Sampaio*

*Trabalho apresentado ao Instituto de Física "Gleb Wataghin", Universidade Estadual de Campinas, para a obtenção do grau de Mestre em Ciências.*

*Fevereiro de 1977*

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS  
INSTITUTO DE FÍSICA  
BIBLIOTECA

*À Thais e ao Rudini*

## AGRADECIMENTOS

---

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

*À C.A. Ferrari, pela boa vontade demonstrada quando recorria à sua opinião e crítica.*

*Enfim, a todos aqueles que contribuíram para a minha formação profissional e àqueles que me ajudaram direta ou indiretamente, o meu muito obrigado.*

## ÍNDICE

RESUMO .....	5
I. INTRODUÇÃO .....	6
I.1 - Excitações Híbridas .....	9
I.2 - Formulação do Problema .....	13
II. CÁLCULO DA INTENSIDADE INTEGRADA E DAS FUNÇÕES AMORTECIMENTOS	
II.1 - A Hamiltoniana .....	15
II.2 - A Matriz $\hat{S}$ .....	17
II.3 - Secção Eficaz e I. Integrada de Espalhamento .....	29
II.4 - Amortecimento e Vida Média Eletrônica .....	32
III. APLICAÇÃO AO $I_n S_b$ E COMENTÁRIOS FINAIS	
III.1 - Aplicação para o $I_n S_b$ .....	39
III.2 - Comentários Finais .....	44
A.I Gas de eletrons na presença de um campo magnético .....	46
A.II Cálculo dos elementos de Matriz $I_1$ , $I_2$ e $I_3$ .....	52

## RESUMO

Neste trabalho discutimos o espalhamento Raman pelo sistema eletron-fónon LO na presença de um campo magnético constante no qual são os fonons os responsáveis diretos pelo processo. Estudamos um material semiconductor tipo n com pequena massa efetiva para campos tais que a frequência de ciclotron ( $\omega_c$ ) é aproximadamente igual a frequência da radiação incidente ( $\omega_0$ ) e daquela espalhada ( $\omega_s$ ). Para isso desenvolvemos um tratamento teórico onde, através de um formalismo de matriz  $\hat{S}$  e técnicas de propagadores no espaço dos momentos determinamos a Intensidade Integrada de espalhamento e a vida média dos estados eletrônicos.

Completamos o trabalho com uma aplicação ao caso Específico do  $I_nS_b$ , onde discutimos uma série de pontos interessantes. Não são incluídos efeitos de temperatura.

## CAPITULO I

### INTRODUÇÃO

Este trabalho tem como objetivo principal, estudar o espalhamento Raman de luz pelo sistema elétron-fônon-LO na presença de um campo magnético constante. Realmente estamos interessados/ no espalhamento Raman pelos fônons, devendo notar no entanto que, apesar dos elétrons não participarem diretamente no processo, eles influenciam fortemente o espectro da luz espalhada, influência esta conectada à interação entre estas excitações. Especificamente tentaremos entender como esta interação tipo Fröhlich<sup>1</sup> afetará a intensidade integrada da seção de espalhamento e a vida média dos estados eletrônicos. Uma explicação simples / deste fato é encontrada na mistura ressonante dos estados quânticos de fônons e elétrons nos níveis de Landau, devido o acoplamento de polaron de Fröhlich. Para resolver tal problema considere-se os estados puros e inclua a interação entre eles através de um amortecimento dependente da frequência. Grande interesse / tem despertado a introdução de amortecimento dependente da frequência e suas consequências nas características do espectro estudado. Para fônons LO, de frequência no infravermelho e momento aproximadamente nulo, os efeitos da interação elétron-fônon são mais relevantes se a frequência do fônon ( $\omega_0$ ) for aproximadamente igual a um número inteiro da frequência de ciclotron ( $\omega_c$ ), isto é,  $\omega_0 = n\omega_c$ .

A simplicidade introduzida em podermos considerar os estados quânticos independentes, nos fornece funções amortecimentos extremamente complicadas em seus cálculos explícitos. Nesse estudo desprezamos efeitos de temperatura em favor da obtenção de formas explícitas que nos levam a um melhor entendimento. Nota-se aqui que em linhas gerais os resultados devam ser aplicáveis a baixas temperaturas.

Desde que estamos interessados em estudar o espalhamento  $\text{Raman}^n$  pelo sistema elétron-fônon num campo magnético, torna-se necessário falar alguma coisa sobre o que se tem feito neste campo. Com o estudo do espalhamento magneto- $\text{Raman}^n$  em Semicondutores, tornou-se possível observar transições entre níveis de Landau  $\Delta n = 1$ , como também  $\Delta n = 2, 3$ , etc.

Estas possibilidades foram primeiramente sugeridas por Wolff<sup>3</sup>, quem calculou a secção eficaz de espalhamento para ambos espalhamentos elástico e inelástico ou  $\text{Raman}^n$ . Ele chamou atenção para o fato importante que, estados de Landau não perturbados de elétrons livres comportam-se como estados de osciladores harmônicos puros e não podem espalhar na aproximação de dipolo. Supondo a adição de um termo cinético anarmônico, ele mostrou que  $\Delta n = 2$  era esperado e calculou sua secção eficaz de espalhamento, levando em consideração apenas transições interbanda. Yafet<sup>4</sup>, para quebrar tal harmonicidade, introduziu efeitos de interação spin-órbita e, como Wolff, considerou apenas transições interbanda. O primeiro cheque destas suposições foram feitas por Slusher, Patel e Fleury<sup>5</sup> e Patel e Slusher<sup>6</sup> que confirmaram as linhas Stokes  $\Delta n = 1, 2$  embora com intensidades não explicadas.

No caso de semicondutores polares, tais como o InSb, o InAs, os efeitos da interação entre os elétrons de condução e os modos óticos longitudinais da rede nos níveis de Landau são anarmônicos e suas características são observáveis no espalhamento. Harper<sup>7</sup>, por exemplo, discutiu a possibilidade de espalhamento / duplo ciclotrônico no InSb, induzido pela interação de polaron. Isto é, a anarmonicidade dos níveis de Landau em semicondutores com bandas de condução parabólica é fornecida pela interação elétron-fônon. Ele mostrou que a secção eficaz de espalhamento é

bem pequena, dependendo do quadrado da constante de acoplamento  $\alpha$  no hamiltoniano de Fröhlich. O deslocamento na frequência, como calculado por Harper, mostra uma descontinuidade  $\propto \omega_0$  nas vizinhanças de  $\omega_0$ , e um enorme alargamento descontínuo no espectro espalhado.

O sistema elétron-fônon acoplado participa de duas maneiras diferentes em processos de espalhamento Raman de luz.

Os elétrons espalham luz, com ou sem campo magnético presente, acontecendo o mesmo com os fônons óticos longitudinais. Loudon em seu clássico artigo<sup>8</sup>, descreve o processo normal de espalhamento pelos fônons óticos longitudinais na ausência de campo magnético. Esse processo, com as modificações adequadas, continua a existir na presença de um campo magnético e é mediado pela formação de pares virtuais elétron-buraco (processo inter-banda). Loudon chama a atenção para o fato de que em semicondutores polares, os elétrons interagem fortemente com os fônons óticos longitudinais através de uma hamiltoniana tipo Fröhlich e que juntamente com o  $\vec{A} \cdot \vec{P}$  da hamiltoniana elétron-radiação tem papel importante no espalhamento da luz por este tipo de fônon. Finalmente, Genking e Zilberberg<sup>9</sup> notam que na presença de um campo magnético, um outro tipo de processo pode existir para o espalhamento da luz por fônons óticos longitudinais em semicondutores tipo n. Esse processo é semelhante ao anterior, porém é mediado por transições intrabanda, ou seja, pela transição virtual entre dois níveis de Landau na mesma banda. Essas Transições podem ser ditadas por qualquer um dos termos da hamiltoniana de radiação, seja o tipo  $\vec{A} \cdot \vec{P}$  ou o tipo  $A^2$ , sendo que a maior importância de um ou de outro termo é estabelecida pela ordem de grandeza da frequência ciclotrônica  $\omega_c$ . O processo que envolve o termo  $A^2$  só é predominante se  $\omega_0$ , a frequência do

fônon, for um número inteiro de  $\omega_c$ , isto é,  $\omega_0 = n\omega_c$  e não será tratado por nós. O que envolve o termo  $\vec{A} \cdot \vec{P}$  é importante quando a frequência do laser é da ordem de  $\omega_c$ , ou seja,  $\omega_l = \omega_c$ ; este é o que nos interessa mais de perto.

Estudaremos aqui dois aspectos do espalhamento, a intensidade integrada da secção de espalhamento e a vida média dos estados eletrônicos. Esta última sendo bastante afetada pela interação de Fröhlich.

Para calcular a intensidade, devemos considerar quais os processos que contribuem para o espalhamento. É ela, a intensidade, que determina quais entre eles os dominantes.

Estudaremos em detalhe, o processo que envolve o termo  $\vec{A} \cdot \vec{P}$  que apresenta uma dupla ressonância para  $\omega_l \approx \omega_c$  e  $\omega_s \approx \omega_c$ , e cuja intensidade é função do campo magnético nessa região. Desde que o nosso estudo baseiar-se-á no espalhamento da luz por um tipo de excitação bem particular, a qual denominamos excitação híbrida elétron-fônon ou pólaron, torna-se necessário falar algo / sobre tais excitações. Por não ser o nosso objetivo não entraremos em detalhes; faremos apenas um resumo.

## 1 - EXCITAÇÕES HÍBRIDAS

O espalhamento inelástico de luz tem provado ser uma ferramenta usual e poderosa no estudo da hibridização das excitações elementares em semicondutores, como por exemplo, os híbridos, fóton-fônon, plásmo-fônon, plásmo-poláriton e outras excitações acopladas. Tais excitações têm em comum uma curva de dispersão típica, veja fig. 1<sub>a</sub>. Nela traçamos o gráfico da frequência contra um certo parâmetro  $\beta$ , onde  $\beta$  pode ser um vetor de onda, um campo magnético, uma concentração de portadores ou qualquer outra quantidade da qual a frequência, de pelo menos um

dos modos puros, venha a depender. Note que  $\omega_1$  e  $\omega_2$  são as frequências dos dois modos puros no cristal que dependem de  $\beta$  como já foi dito acima. As frequências  $\omega_+$  e  $\omega_-$  são os resultados do desacoplamento desses modos puros, os quais interagem fracamente com um potencial de interação  $V$ . Vejamos rapidamente como se desacoplam tais modos puros. Usando teoria de perturbação, podemos escrever

$$H = H_0 + V \quad \text{I.1.1}$$

onde,  $H_0$  neste caso, possui dois autovalores muito próximos  $E_1^0$  e  $E_2^0$  correspondentes aos respectivos auto-estados  $\phi_1$  e  $\phi_2$ . Para desacoplá-los torna-se conveniente escrever

$$\psi = a\phi_1 + b\phi_2 \quad \text{I.1.2}$$

com  $\psi$  satisfazendo a condição

$$H\psi = E\psi \quad \text{ou melhor}$$

$$\{H - E\}\psi = 0 \quad \text{I.1.3}$$

esta eq. nos leva ao seguinte sistema de equações envolvendo  $a$  e  $b$ .

$$(H_{11} - E)a + H_{12}b = 0 \quad \text{I.1.4}$$

$$H_{21}a + (H_{22} + E)b = 0$$

e com isto vamos obter os resultados.

$$E_{1,2} = \frac{H_{11} + H_{22}}{2} \pm \left\{ H_{12} + \frac{(H_{11} - H_{22})^2}{8 H_{12}} \right\} \quad \text{I.1.5}$$

onde o  $|H_{12}| \ll |H_{11} - H_{22}|$

Assim temos a degenerescência levantada, ficando a hibridização determinada.

Os novos auto-estados do sistema hibridizado podem ser escritos

como .

$$\psi_{\pm} = \cos(\theta_{\pm})\phi_1 + \text{sen}(\theta_{\pm})\phi_2 \quad \text{I.1.6}$$

onde  $\theta_+ = \frac{\pi}{2} - \theta_-$

A contribuição percentual de um dos estados puros aos estados híbridos pode ser vista na fig. 1<sub>b</sub>, onde podemos perfeitamente apreciar o adjetivo híbrido para a mistura dos modos puros 1 e 2, dada a mudança progressiva entre eles à medida que cresce.

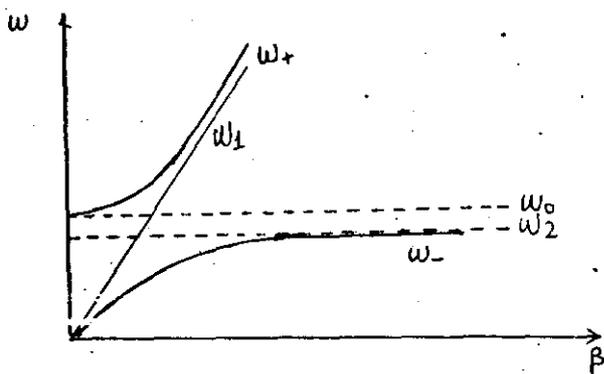


fig. 1<sub>a</sub>

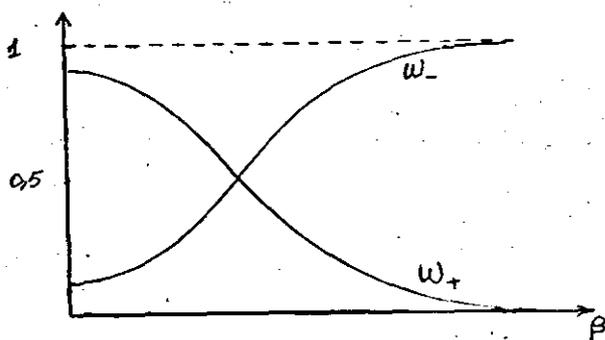


fig. 1<sub>b</sub>

Fig. 1: A curva superior nos fornece a relação de dispersão de excitações mistas num cristal. A ordenada é a frequência; a abscissa é uma variável da qual a frequência depende. Para fônons,  $\beta$  é um vetor de onda, para níveis de Landau,  $\beta$  é um campo magnético e para um plásmo,  $\beta$  é a raiz quadrada de uma concentração de portadores. A curva inferior mostra a contribuição percentual de um dos modos puros aos modos híbridos  $\omega_+$  e  $\omega_-$ .

O caso mais simples de tais excitações vem a ser o polariton ou o híbrido fóton-fônon, para o qual é a curva de disper

são da luz, com  $\omega_2$  e  $\omega_0$  representando as frequências dos fônons  $L0$  e  $T0$ , respectivamente.

As linhas achuriadas representam as curvas de dispersão / destes três modos, onde é visível a não interação entre eles; porém como sabemos, a luz interage com os fônons transversais e desse modo suas curvas de dispersão não podem cruzar-se, fazendo com que tais curvas se separem, resultando as linhas cheias para as curvas de dispersão depois da interação.

Tais linhas cheias foram observadas experimentalmente com o uso de espalhamento Raman, isto é, da simples conservação do momento, o vetor de onda da excitação observada foi variado e a frequência observada seguiu a linha cheia da fig. 1. Tais experiências têm sido feitas para uma série de cristais, como o  $G_aP^{10}$ , o  $ZnO^{11}$  e o Quartz<sup>12</sup>, o mais interessante que se tem notado é que sempre se pode predizer de uma maneira quantitativa as reais curvas de dispersão das excitações interagentes, se o número de modos de fônons é grande; no entanto, somente observando a fig. 1<sub>b</sub> é que podemos dizer qualitativamente o que corresponde à linha / cheia.

Note que para  $\beta = 0$ ,  $\omega_+$  corresponde ao modo puro de fônon e  $\omega_-$  aos fótons, entretanto, para um certo  $\beta_0$ , a mistura entre estes é máxima com uma contribuição de 50% de cada lado nos fornecendo assim, a excitação híbrida, o poláriton.

O acoplamento plásmo-fônon segue o mesmo aspecto qualitativo do caso anterior, diferenciando apenas na abcissa da fig. 1, em virtude da frequência do plásmo depender da raiz quadrada da densidade de portadores livres.

Um outro exemplo de tais excitações mistas é o sistema acoplado modos ciclôtrônicos-fônon  $L0$ . Este é de grande importân-

cia para nós. Aqui a frequência do nível de Landau ou a frequência clássica ciclotrônica de uma partícula num campo magnético é linearmente proporcional ao campo magnético  $\vec{B}$ . Desse modo a abscissa na fig. 1<sub>a</sub> será este campo e podemos analisar o sistema como foram anteriormente o poláriton e o plásmo-fônon.

## 2 - FORMULAÇÃO DO PROBLEMA

Como já foi mencionado anteriormente, o nosso interesse principal é estudar o espalhamento Raman pelo sistema híbrido nível de Landau-fônon LO, onde realmente nos interessa o espalhamento provocado pelos fônons na região ressonante duplo ciclotrônica  $\omega_L \approx \omega_C$  e  $\omega_S \approx \omega_C$ . O outro Processo também duplo ciclotrônico, no qual os elétrons participam diretamente do espalhamento, foi estudado por Harper, este tomou o ponto de vista anteriormente usado por Bloembergen<sup>13</sup>, quem introduz uma susceptibilidade Stokes complexa  $\chi$  para descrever a resposta não linear aos dois campos de radiação, o incidente e o espalhado. Bloembergen foi então capaz para relacionar o espalhamento Stokes ou Raman à parte imaginária  $\chi''$  da susceptibilidade Stokes.

No nosso caso resta saber em que condições o espectro estudado tem como contribuição dominante na região de frequência acima descrito.

Para se estudar a interação elétron-fônon LO tipo Fröhlich torna-se necessário a escolha de um semiconductor polar dopado, onde em muitos casos esta interação é dominante. A essa altura ressaltamos a importância da ação de blindagem do gas de elétrons no RPA. Isto acarreta uma modificação na hamiltoniana de interação elétron-fônon, dada a introdução da função  $\epsilon_{rpa}$ , a qual para  $q$  o momento do fônon pequeno, é simplesmente dada por

$$\epsilon_{rpa} \approx \epsilon_{\infty} + \frac{q_{tf}^2}{q^2}$$

onde  $q_{tf}$ , calculado na aproximação de Thomas-Fermi, é da ordem/ de  $K_f$ .

É visível em semicondutores polares a importância do espalhamento direto por níveis de Landau, como também pelo processo descrito por Loudon envolvendo o termo  $\vec{A} \cdot \vec{P}$  (interbanda) na região de interesse. Nota-se aqui que o primeiro por ser de ordem inferior poderia se tornar dominante e todos eles passariam a existir paralelamente. Entretanto estes podem ser evitados; nesse sentido impomos condições apropriadas a tornar o termo de interesse dominante.

Vamos usar em nosso estudo um cristal de Antimoniato de In dio ( $I_n S_b$ ) desde que tal material nos fornece perfeitas condições a tornar o termo  $\vec{A} \cdot \vec{P}$  intrabanda dominante nessa região / de interesse. Dessa maneira podemos fazer nossos cálculos se aplicarem à análise do espectro obtido.

## CAPITULO II

### CALCULO DA INTENSIDADE INTEGRADA E DAS FUNÇÕES AMORTECIMENTOS

#### 1 - A HAMILTONIANA

O sistema no qual estamos interessados, consiste de um campo de radiação (um feixe de fótons de uma fonte de laser), descrito por uma hamiltoniana de radiação  $H_r$ , que incide num semicondutor tipo n imerso num campo magnético constante  $\vec{B}$  sendo este tomado na direção z e tendo um potencial vetor associado  $\vec{A}_0$  no calibre de Landau  $(-By, 0, 0)$ .

Para tratar a interação da luz com o cristal considerado, tomamos uma hamiltoniana da forma

$$H = H_0 + H_{int}$$

onde  $H_0$  representa as hamiltonianas de campo livre de radiação, fônons e elétrons, estes por vez se distribuindo em níveis de Landau, dada a presença do campo magnético.  $H_{int}$  é composto por uma série de termos. Destes, apenas nos interessam as hamiltonianas de interação elétron-radiação e elétron-fônon LO, por serem essenciais à própria existência do espalhamento. Daremos ao último uma atenção especial, visto a importância que terá para a vida média dos estados eletrônicos. Os efeitos de outras interações, devido a presença de impurezas, fônons acústicos etc, sobre o sistema considerado, será levado em conta atribuindo-se fenomenologicamente às quasi-partículas uma vida média finita e independente da frequência.

Desse modo podemos reescrever a hamiltoniana do sistema como

$$H = H_e + H_f + H_r + H_{ef} + H_{er}$$

II.1.1

Devido a presença do campo magnético as hamiltonianas de interação, definidas por

$$H_{int} = g \psi(\vec{r}, t) \phi(\vec{r}, t) \psi(\vec{r}, t),$$

ficam bastante modificadas em virtude da função de onda eletrônica, neste caso, vir a ser dada pela função de onda magnética / de Landau. Aqui  $g$  é a constante de acoplamento e  $\psi(\vec{r}, t)$  e  $\phi(\vec{r}, t)$  são respectivamente os operadores de campo de fêrmions e de bósons. As hamiltonianas de campos livres escritas no mesmo formalismo acima (2ª quantização), são dadas por

$$H_f = \sum_{\vec{k}, \lambda} \hbar \omega_{\vec{k}} C_{\vec{k}, \lambda}^+ C_{\vec{k}, \lambda}$$

$$H_g = \sum_q \hbar \omega_q b_q^+ b_q$$

II.1.2

$$H_e = \sum_{i, \vec{k}, \sigma} \hbar \omega_n(k_z) a_{n, \vec{k}}^+ a_{n, \vec{k}} \quad \vec{k} \rightarrow (k_x, k_z)$$

Aqui  $\omega_n(k_z) = (n + \frac{1}{2}) \omega_c + \frac{\hbar k_z^2}{2 m^*}$  é a energia de excitação

do estado eletrônico,  $\omega_c$  é a frequência de ciclotron dada por

$\omega_c = \frac{e B}{m^* c}$ ,  $e$  e  $m^*$  representam a carga e a massa efetiva do elétron e  $c$  é a velocidade da luz.  $a_{n, \vec{k}}^+$  e  $a_{n, \vec{k}}$  são operadores de

criação e destruição de elétrons de Landau e obedecem as regras

de comutação para os operadores de fêrmions, enquanto que  $C_{\vec{k}, \lambda}^+$ ,

$C_{\vec{k}, \lambda}$ ,  $b_q^+$  e  $b_q$  são operadores de criação e destruição de fótons/

e fônons LO respectivamente e satisfazem as regras de comutação dos operadores de bósons.

A hamiltoniana dos elétrons juntamente com a hamiltoniana de interação elétron-radiação e a de interação elétron-fônon LO tipo Fröhlich podem ser encontradas no apêndice A<sub>1</sub>, lá discutimos o problema de um gás de elétrons num campo magnético e usa -

mos os operadores de campo modificados para reescrever as hamiltonianas de interação.

## 2 - A MATRIZ S

Partindo do fato que os auto-estados da hamiltoniana  $H_0$  descrevem perfeitamente o nosso sistema não perturbado, podemos usando o formalismo de matriz S em mais baixa ordem de perturbação obter a probabilidade de transição entre os estados iniciais e finais do sistema e como consequência achar a intensidade integrada para o espalhamento. Para encontrar a vida média dos estados eletrônicos, consideramo-los interagentes entre si e com o resto do sistema desse modo tomando-os como estados quasi estacionários, com uma vida média longa porém finita.

Como a participação dos elétrons é virtual, não nos interessam os processos que causam uma mudança real nos níveis eletrônicos, desse modo, o sistema eletrônico, que é suposto estar inicialmente em seu estado fundamental, permanecerá nele no final do espalhamento. Da suposição que inicialmente a baixas temperaturas ( $T=0\text{°K}$ ) não temos fônons na rede, podemos escrever o estado inicial do sistema como

$$|i\rangle = |\phi_0\rangle |n_{\vec{k}_e}\rangle |0\rangle_f \quad \text{II.2.1}$$

onde  $n_{\vec{k}_e}$  é o número de fônons incidente no cristal. O processo de espalhamento Stokes ou Raman de luz por fônons deixa a rede excitada por um fônnon no modo  $\vec{q}$  e um fôton de frequência mais baixa é espalhado. Sendo assim, podemos em primeira aproximação escrever o estado final do sistema da seguinte maneira

$$|f\rangle = |\phi_0\rangle |n_{\vec{k}_e}-1, 1_{\vec{k}_s}\rangle |1_{\vec{q}}\rangle_f \quad \text{II.2.2}$$

com  $\vec{k}_e$  e  $\vec{k}_s$  representando o vetor de onda da luz incidente e es-

palhada, respectivamente;  $\vec{q}$ , o vetor de onda do fônon excitado e  $|\psi_0\rangle$ , o estado fundamental do sistema eletrônico.

A matriz  $\hat{S}$ , como sabemos, é dada por

$$\hat{S} = \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^n \frac{1}{n!} \int_{-\infty}^{+\infty} dt_1 \dots \int_{-\infty}^{+\infty} dt_n \hat{P} \{ H_I(t_1) \dots H_I(t_n) \}$$

onde  $\hat{P}$  é um operador de ordenação temporal e os operadores  $H_I(t)$  são dados na representação de interação. A probabilidade de transição entre os estados inicial e final é dada por  $W_{fi}$  e pode ser ligada à intensidade integrada de uma forma simples, como veremos na secção 3 deste capítulo. Tal probabilidade de transição é dada por

$$W_{fi} = |\langle f | \hat{S} | i \rangle|^2 \quad \text{II.2.3}$$

Com isto vê-se a necessidade que temos de calcular os elementos de matriz acima especificados, isto será feito em mais baixa ordem de perturbação.

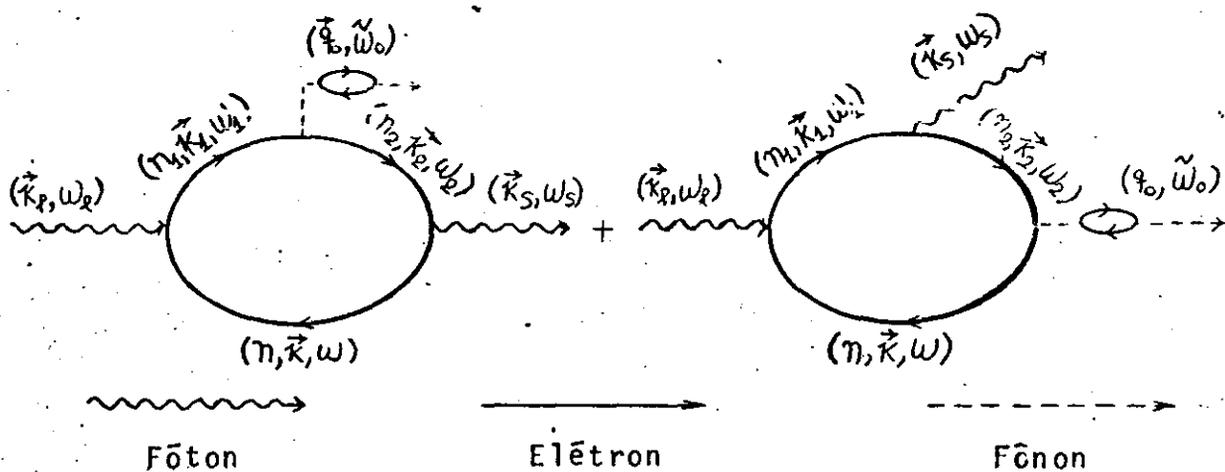
Os elementos de matriz  $\langle f | S^0 | i \rangle$ ,  $\langle f | S^1 | i \rangle$  e  $\langle f | S^2 | i \rangle$  não contribuem para o processo de espalhamento estudado por nós: o primeiro relaciona-se a espalhamento elástico, sendo aqui nulo, o segundo só existiria se a hamiltoniana do sistema contivesse / um termo de interação direto fônon-radiação, o último, relacionado ao termo  $A^2$  da hamiltoniana de interação elétron-radiação, ao qual podemos associar um diagrama com apenas dois vértices e que corresponde ao espalhamento de um fóton incidente com a criação de um fônon, não contribui na região de interesse estudada por nós, que é,  $\omega_e \approx \omega_e$ .

A esta altura, percebe-se então que o elemento de matriz de interesse para nós será o  $\langle f | S^3 | i \rangle$ , por ser dominante na região considerada. A este associamos diagramas que contêm 3 vértices. A

dois destes vertices associamos o termo  $\vec{A} \cdot \vec{p}$  da interacao ele-tron-radiacao ao outro a hamiltoniana de interacao ele-tron-fonon.

Para calcularmos o elemento de matriz acima considerado tor-na-se bastante conveniente recorrermos as tecnicas de propagado-res no espaco dos momentos. Aqui os resultados so imediatos e de ja, esto prontos  possveis comparacoes com os resultados ex-perimentais. Entretanto para tal intento, precisamos conhecer os diagramas de Feynman que descrevem tal processo de espalhamento. Estes so perfeitamente visveis no artigo de Loudon<sup>14</sup>, com a di-ferena que neste artigo ele trata o processo normal interbanda enquanto o nosso caso ocorre numa mesma banda.

Desta observacao concluimos que os diagramas ressonantes, que contribuem na regio estudada por nos sero os seguintes:



Fazendo uso das tecnicas<sup>15</sup> padroes, aplicadas aos diagra-mas de Feynman acima na representacao dos momentos, iremos obter

$$S^3 = (-i) \frac{2\pi}{\hbar^3} \sum_{\substack{n_1, n_2, n \\ \vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{k}}} \int d\omega d\omega_1 d\omega_2 \left\{ iG_n(k_0, \omega) [-iV_{k, k_1}^{(k_0)}] iG_{n_1}(k_1, \omega_1) [-iV_{k_1, k_2}^{(q)}] \times \right. \\ \left. iG_{n_2}(k_2, \omega_2) [-iV_{k_2, k}^{(k_s)}] \delta(\omega + \omega_2 - \omega_1) \delta(\omega_1 - \omega_0 - \omega_2) \delta(\omega_2 - \omega_s - \omega) + iG_n(k_3, \omega) [-iV_{k, k_1}^{(k_0)}] \right. \\ \left. iG_{n_1}(k_1, \omega_1) [-iV_{k_1, k_2}^{(k_s)}] iG_{n_2}(k_2, \omega_2) [-iV_{k_2, k}^{(q)}] \delta(\omega + \omega_2 - \omega_1) \delta(\omega_1 - \omega_s - \omega_2) \delta(\omega_2 - \omega_0 - \omega) \right\}$$

Aqui nota-se a ausência das funções deltas de conservação do momento, no entanto estas são carregadas nas transformadas de Fourier das hamiltonianas de interação, as quais são representadas por  $W_{K,K'}(K_e)$ ,  $W_{K,K'}(K_s)$  e  $V_{K,K'}(q)$ . Estes elementos de matriz são dados por

$$\begin{aligned} W_{K,K'}(K_e) &= A_{K_e} \hat{e}_p \cdot \langle n, \vec{k} | e^{i\vec{k}_e \cdot \vec{r}} \vec{p} | n', K' \rangle C_{\vec{K}_e} \\ W_{K,K'}(K_s) &= A_{K_s} \hat{e}_s \cdot \langle n, \vec{k} | e^{-i\vec{k}_s \cdot \vec{r}} \vec{p} | n', K' \rangle C_{\vec{K}_s}^+ \\ V_{K,K'}(q) &= V_q \langle n, \vec{k} | e^{-i\vec{q}_0 \cdot \vec{r}} | n', \vec{k}' \rangle h_{q_0}^+ \end{aligned} \quad \text{II.2.5}$$

onde  $A_{K_e} = \frac{e}{m^2 c} \sqrt{\frac{2\pi\hbar c}{V K_e \epsilon_{\infty}^{1/2}}}$ ,  $A_{K_s} = \frac{e}{m^2 c} \sqrt{\frac{2\pi\hbar c}{V K_s \epsilon_{\infty}^{1/2}}}$ ,  $V_q = \frac{i e q \epsilon_{\infty}}{q_0^2 \epsilon_0 + q_{TF}^2} \sqrt{\frac{2\pi\hbar \omega_b}{V} \left[ \frac{1}{\epsilon_{\infty}} - \frac{1}{\epsilon_0} \right]^{1/2}}$  e  $\vec{p} = \vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A}_0$

II.2.6<sub>a</sub>

Esta modificação foi introduzida desde que os operadores de campo de férmions na presença do campo magnético se escrevem como

$$\hat{\Psi}_I(\vec{r}, t) = \sum_{n, \vec{k}} a_{n, \vec{k}} \varphi_{n, \vec{k}}(\vec{r}) e^{-i\omega_n(K_s)t}$$

onde  $\varphi_{n, \vec{k}}(\vec{r})$  é a função de onda magnética de Landau e é dada por

$$\begin{aligned} \varphi_{n, \vec{k}}(\vec{r}) &= \frac{C_n}{\sqrt{L_x L_y}} e^{i(K_x x + K_y z)} e^{-\frac{1}{2} \left( \frac{y-y_0}{\lambda} \right)^2} H_n \left( \frac{y-y_0}{\lambda} \right) \\ C_n &= \left[ \frac{1}{2^n n! \lambda \sqrt{\pi}} \right]^{1/2}, \quad y_0 = \lambda^2 K_x, \quad \lambda = \sqrt{\frac{\hbar c}{e B}} \end{aligned} \quad \text{II.2.6}_b$$

Estes resultados serão apresentados no apêndice A<sub>I</sub> com mais detalhes.

Com os resultados das eq. II.2.5, podemos reescrever a eq. II.2.4 como segue:

$$\begin{aligned} S^0 &= (-i) \frac{2\pi A_{K_e} A_{K_s} V q_0}{\hbar^3} \sum_{\substack{n_1, n_2, n_3 \\ \vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{k}_3}} \int d\omega d\omega_1 d\omega_2 \left\{ G_{n_1}(k_3, \omega) \hat{e}_p \cdot \langle n_1, \vec{k}_1 | e^{i\vec{k}_e \cdot \vec{r}} \vec{p} | n_1, \vec{k}_1 \rangle G_{n_2}(k_1, \omega_1) \right. \\ &\times \langle n_1, \vec{k}_1 | e^{-i\vec{q}_0 \cdot \vec{r}} | n_2, \vec{k}_2 \rangle G_{n_2}(k_2, \omega_2) \hat{e}_s \cdot \langle n_2, \vec{k}_2 | e^{-i\vec{k}_s \cdot \vec{r}} \vec{p} | n_2, \vec{k}_2 \rangle \delta(\omega + \omega_1 - \omega_2) \delta(\omega_1 - \omega_2 - \omega) \delta(\omega_2 - \omega_1 - \omega) + \\ &+ G_{n_1}(k_3, \omega) \hat{e}_p \cdot \langle n_1, \vec{k}_1 | e^{i\vec{k}_e \cdot \vec{r}} \vec{p} | n_1, \vec{k}_1 \rangle G_{n_2}(k_1, \omega_1) \hat{e}_s \cdot \langle n_1, \vec{k}_1 | e^{-i\vec{k}_s \cdot \vec{r}} \vec{p} | n_2, \vec{k}_2 \rangle G_{n_2}(k_2, \omega_2) \dots \times \\ &\left. \times \langle n_2, \vec{k}_2 | e^{-i\vec{q}_0 \cdot \vec{r}} | n_1, \vec{k}_1 \rangle \delta(\omega + \omega_1 - \omega_2) \delta(\omega_1 - \omega_2 - \omega) \delta(\omega_2 - \omega_1 - \omega) \right\} C_{\vec{K}_s}^+ C_{\vec{K}_e} b_q^+ \end{aligned} \quad \text{II.2.7}$$

Usando os estados  $|i\rangle$  e  $|f\rangle$  definidos anteriormente obtemos

$$\begin{aligned} \langle f|S^3|i\rangle = & (-i) \frac{2n\sqrt{n k_0} A_{k_0} A_{k_5} V q_0}{\hbar^3} \sum_{\substack{n_1, n_2, n_3 \\ \vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{k}_3}} \int d\omega d\omega_1 d\omega_2 \left\{ G_n(\vec{k}_3, \omega) \hat{e}_1 \cdot \right. \\ & \cdot \langle n, \vec{k}_1 | e^{i\vec{k}_0 \cdot \vec{r}} P | n_1, \vec{k}_1 \rangle G_{n_1}(k_1, \omega_1) \langle n_1, \vec{k}_1 | e^{-i\vec{q}_0 \cdot \vec{r}} | n_2, \vec{k}_2 \rangle G_{n_2}(k_2, \omega_2) \hat{e}_5 \cdot \langle n_2, \vec{k}_2 | e^{-i\vec{k}_5 \cdot \vec{r}} P | n, \vec{k} \rangle \times \\ & \times \delta(\omega + \omega_2 - \omega_1) \delta(\omega_1 - \tilde{\omega}_0 - \omega_2) \delta(\omega_2 - \omega_5 - \omega) + G_n(\vec{k}_3, \omega) \hat{e}_1 \cdot \langle n, \vec{k}_1 | e^{i\vec{k}_0 \cdot \vec{r}} P | n_1, \vec{k}_1 \rangle G_{n_1}(k_1, \omega_1) \times \\ & \left. \hat{e}_5 \cdot \langle n_2, \vec{k}_2 | e^{-i\vec{k}_5 \cdot \vec{r}} P | n_2, \vec{k}_2 \rangle G_{n_2}(k_2, \omega_2) \langle n_2, \vec{k}_2 | e^{-i\vec{q}_0 \cdot \vec{r}} | n, \vec{k} \rangle \delta(\omega - \omega_1 - \omega_2) \delta(\omega_1 - \omega_5 - \omega_2) \delta(\omega_2 - \tilde{\omega}_0 - \omega) \right\} \end{aligned}$$

II.2.8

Devemos calcular todos os elementos de matriz que participam da eq. acima, no entanto dada a semelhança apresentada entre dois deles, tentaremos uma simplificação, consideraremos apenas os seguintes elementos:

$$I_{n, n'}^{\vec{\alpha}}(\vec{k}, \vec{k}') = \langle n, \vec{k} | e^{\pm i\vec{k} \cdot \vec{r}} P | n', \vec{k}' \rangle \quad \text{II.2.9}_a$$

$$I_{n, n'}^{\vec{q}}(\vec{q}) = \langle n, \vec{k} | e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}} | n', \vec{k}' \rangle \quad \text{II.2.9}_b$$

onde  $\alpha$  no elemento de matriz superior pode ser  $\ell$  ou  $S$ .

No apêndice A<sub>II</sub> mostramos que o elemento de matriz

$$I = \langle n, \vec{k} | e^{\pm i\vec{q} \cdot \vec{r}} | n', \vec{k}' \rangle$$

é dado por

$$I = \delta(k'_x, k_x + q_x) \delta(k'_y, k_y + q_y) e^{\pm i \frac{\lambda^2}{2} (k_x + k'_x) q_y} \begin{cases} I_{n, n'}(q_L) & n \geq n' \\ I_{n', n}(q_L) & n' \geq n \end{cases} \quad \text{II.2.10}$$

onde

$$I_{n, n'}(q_L) = 2^{\frac{n-n'}{2}} \left( \frac{n!}{n'} \right)^{1/2} \left[ \pm \frac{\lambda}{2} (q_x - i q_y) \right]^{n-n'} e^{-\frac{\lambda^2}{4} q_L^2} L_{n'}^{\frac{n-n'}{2}} \left( \frac{\lambda^2}{2} q_L^2 \right) \quad \text{II.2.11}$$

$$I_{n', n}(q_L) = 2^{\frac{n'-n}{2}} \left( \frac{n!}{n'} \right)^{1/2} \left[ \pm \frac{\lambda}{2} (q_x + i q_y) \right]^{n'-n} e^{-\frac{\lambda^2}{4} q_L^2} L_n^{\frac{n'-n}{2}} \left( \frac{\lambda^2}{2} q_L^2 \right) \quad \text{II.2.12}$$

aqui  $q_L^2 = q_x^2 + q_y^2$  e os  $L_m^m$  são as funções de Laguerre.

Desse modo temos  $I_{n,n}(\vec{q}_0)$  calculado, bastando portanto fazer  $\vec{q}=\vec{q}_0$  e tomar o sinal negativo no elemento de matriz da eq. II.2.10.

Nas eqs. II.2.6<sub>a</sub> temos  $\vec{P}=\vec{p}-\frac{e}{c}\vec{A}_0$ , este na representação das coordenadas é dado por

$$\vec{P} = -i\hbar[(\partial_x - i\frac{eB}{\hbar c}y)\hat{e}_x + \partial_y\hat{e}_y + \partial_z\hat{e}_z], \quad \text{II.2.13}$$

onde  $\hat{e}_x$ ,  $\hat{e}_y$  e  $\hat{e}_z$  são vetores unitários nas direções  $(x, y, z)$ . Substituindo este resultado na eq. II.2.9<sub>a</sub>, vamos ficar com

$$\begin{aligned} I_{n,n}(\vec{k}_\alpha) &= -i\hbar[(\langle n, \vec{k} | e^{\pm i\vec{k}_\alpha \cdot \vec{r}} \partial_x | n', \vec{k}' \rangle - \frac{eB}{\hbar c} \langle n, \vec{k} | e^{\pm i\vec{k}_\alpha \cdot \vec{r}} y | n', \vec{k}' \rangle) \hat{e}_x \\ &+ \langle n, \vec{k} | e^{\pm i\vec{k}_\alpha \cdot \vec{r}} \partial_y | n', \vec{k}' \rangle \hat{e}_y + \langle n, \vec{k} | e^{\pm i\vec{k}_\alpha \cdot \vec{r}} \partial_z | n', \vec{k}' \rangle]. \quad \text{II.2.14} \end{aligned}$$

Usando as funções de onda da eq. II.2.6<sub>b</sub>, vamos obter os seguintes resultados

$$\partial_x | n', \vec{k}' \rangle = i\kappa'_x | n', \vec{k}' \rangle$$

$$\partial_z | n', \vec{k}' \rangle = i\kappa'_z | n', \vec{k}' \rangle$$

$$\partial_y | n', \vec{k}' \rangle = -\left(\frac{y-y_0}{\lambda^2}\right) | n', \vec{k}' \rangle + \frac{c n'}{\sqrt{L_x L_y}} e^{i(\kappa'_x x + \kappa'_z z)} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{y-y_0}{\lambda}\right)} \partial_y \left[ H_n \left( \frac{y-y_0}{\lambda} \right) \right].$$

Entretanto sabemos que

$$\partial_y \left[ H_n \left( \frac{y-y_0}{\lambda} \right) \right] = \frac{1}{\lambda} H_{n+1} \left( \frac{y-y_0}{\lambda} \right), \quad \text{II.2.15}$$

onde  $H_n \left( \frac{y-y_0}{\lambda} \right)$  é definida apenas para  $n \geq 1$  e satisfaz a seguinte relação de recorrência

$$H_n \left( \frac{y-y_0}{\lambda} \right) = 2n H_{n-1} \left( \frac{y-y_0}{\lambda} \right). \quad \text{II.2.16}$$

Com a substituição das eqs. II.2.15 e 16 nas eqs. imediatamente acima, vamos obter

$$\partial_x | n', \vec{k}' \rangle = i\kappa'_x | n', \vec{k}' \rangle$$

$$\partial_z | n', \vec{k}' \rangle = i\kappa'_z | n', \vec{k}' \rangle$$

$$\partial_y | n', \vec{k}' \rangle = \kappa'_x | n', \vec{k}' \rangle - \frac{y}{\lambda^2} | n', \vec{k}' \rangle + \frac{2n'}{\lambda} | n'-1, \vec{k}' \rangle,$$

onde  $| n'-1, \vec{k}' \rangle = \frac{c n'}{\sqrt{L_x L_y}} e^{i(\kappa'_x x + \kappa'_z z)} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{y-y_0}{\lambda}\right)^2} H_{n-1} \left( \frac{y-y_0}{\lambda} \right)$  e é válida, apenas para  $n' \geq 1$ .

Usando o conjunto de eqs. II.2.17 e a eq. II.2.14, obtemos

$$\vec{I}_{\vec{n}, \vec{n}'}(\vec{k}_\alpha) = [\hbar k_x' I_1 - \frac{\hbar}{\lambda^2} I_2] \hat{e}_x - i \hbar [k_x' I_1 - \frac{1}{\lambda^2} I_2 + \frac{2n'}{\lambda} I_3] \hat{e}_y + \hbar k_z' I_1 \hat{e}_z, \quad \text{II.2.18}$$

onde

$$\begin{aligned} I_1 &= \langle n, \vec{k} | e^{\pm i \vec{k}_\alpha \cdot \vec{r}} | n', \vec{k}' \rangle \\ I_2 &= \langle n, \vec{k} | e^{\pm i \vec{k}_\alpha \cdot \vec{r}} | n', \vec{k}' \rangle \\ I_3 &= \langle n, \vec{k} | e^{\pm i \vec{k}_\alpha \cdot \vec{r}} | n'-1, \vec{k} \rangle. \end{aligned} \quad \text{II.2.19}$$

Estes elementos de matriz são calculados com todos os detalhes necessários no apêndice A<sub>2</sub>, aqui tomamos apenas os resultados finais, notando no entanto que I<sub>1</sub> é dado pelo resultado da eq.

II.2.10; I<sub>2</sub> e I<sub>3</sub> são dados por

$$\begin{aligned} I_2 &= \delta(k_x', k_x + k_{xx}) \delta(k_y', k_y + k_{yy}) e^{\pm i \frac{\lambda^2}{2} (k_x' + k_x) k_{xy}} e^{-\frac{\lambda^2}{4} k_{x\perp}^2} 2^{\frac{n-n'}{2}} \left(\frac{n!}{n'}\right)^{1/2} \left[ \pm \frac{\lambda}{2} (k_{xx} - i k_{yy}) \right]^{n-n'} \\ &\times \left\{ \lambda^2 [k_x \mp \frac{1}{2} (k_{xx} - i k_{yy})] \left[ L_{n'}^{\frac{\lambda^2}{2} k_{x\perp}^2} \right]^{n-n'} \mp \frac{n}{k_{xx} - i k_{yy}} \left[ L_{n'}^{\frac{\lambda^2}{2} k_{x\perp}^2} \right]^{n-n-1} \mp \frac{\lambda^2}{2} (k_{xx} - i k_{yy}) \right. \\ &\left. \times \left[ L_{n'-1}^{\frac{\lambda^2}{2} k_{x\perp}^2} \right]^{n-n+1} \right\}, \text{ isto se } n > n'. \end{aligned} \quad \text{II.2.20}_a$$

Aqui o último termo será nulo para n'=0, mais detalhes veja A.II

$$\begin{aligned} I_2 &= \delta(k_x', k_x + k_{xx}) \delta(k_y', k_y + k_{yy}) e^{\pm i \frac{\lambda^2}{2} (k_x' + k_x) k_{xy}} e^{-\frac{\lambda^2}{4} k_{x\perp}^2} 2^{\frac{n'-n}{2}} \left(\frac{n!}{n'}\right)^{1/2} \left[ \pm \frac{\lambda}{2} (k_{xx} + i k_{yy}) \right]^{n'-n} \\ &\times \left\{ \lambda^2 [k_x \mp (k_{xx} - i k_{yy})] \left[ L_n^{\frac{\lambda^2}{2} k_{x\perp}^2} \right]^{n'-n} \pm \frac{n'}{k_{xx} + i k_{yy}} \left[ L_n^{\frac{\lambda^2}{2} k_{x\perp}^2} \right]^{n'-n-1} \pm \frac{\lambda^2}{2} (k_{xx} - i k_{yy}) \right. \\ &\left. \times \left[ L_{n-1}^{\frac{\lambda^2}{2} k_{x\perp}^2} \right]^{n'-n+1} \right\}, \text{ isto se } n' > n \end{aligned} \quad \text{II.2.20}_b$$

O mesmo argumento acima anula o último termo desta eq. para n=0.

$$\begin{aligned} I_3 &= \delta(k_x', k_x + k_{xx}) \delta(k_y', k_y + k_{yy}) e^{\pm i \frac{\lambda^2}{2} (k_x' + k_x) k_{xy}} e^{-\frac{\lambda^2}{4} k_{x\perp}^2} \left\{ \begin{aligned} &2^{\frac{n-n'}{2}} \left(\frac{n!}{n'}\right)^{1/2} \left[ \pm \frac{\lambda}{2} (k_{xx} - i k_{yy}) \right]^{n-n'} \\ &\times \left[ L_{n'-1}^{\frac{\lambda^2}{2} k_{x\perp}^2} \right]^{n-n+1} \quad n \geq n' \\ &2^{\frac{n'-n}{2}} \left(\frac{n!}{n'}\right)^{1/2} \left[ \pm \frac{\lambda}{2} (k_{xx} + i k_{yy}) \right]^{n'-n} \\ &\times \left[ L_n^{\frac{\lambda^2}{2} k_{x\perp}^2} \right]^{n'-n-1} \quad n' > n \end{aligned} \right. \end{aligned} \quad \text{II.2.21}$$

Este último elemento (I<sub>3</sub>) é completamente nulo se n'=0.

Com os resultados obtidos para  $I_1$ ,  $I_2$  e  $I_3$  podemos reescrever a eq. II.2.18 da seguinte forma

$$\vec{I}_{\frac{n,n'}{k,k'}}(\vec{k}) = [\hat{a}_x^{n,n'} \hat{e}_x + \hat{a}_y^{n,n'} \hat{e}_y + \hat{a}_z^{n,n'} \hat{e}_z] e^{-\frac{\lambda^2 k_x^2}{4}} e^{\pm i \frac{\lambda^2}{2} (k_x' + k_x) k_y} \delta(k_x', k_x \mp k_{xx}) \delta(k_z', k_z \mp k_{zz}),$$

II.2.22

onde os coeficientes  $\hat{a}_x^{n,n'}$ ,  $\hat{a}_y^{n,n'}$  e  $\hat{a}_z^{n,n'}$  serão dados para  $n > n'$  por

$$\begin{aligned} \hat{a}_x^{n,n'} &= 2^{\frac{n-n'}{2}} \left(\frac{n!}{n'}\right)^{\frac{1}{2}} \left[ \mp \frac{\lambda}{2} (k_{xx} - i k_{xy}) \right]^{n-n'} \left\{ \hbar k_x' \left[ \begin{matrix} n-n' \\ n' \end{matrix} \right] - \hbar \left[ k_x \mp \frac{1}{2} (k_{xx} - i k_{xy}) \right] \left[ \begin{matrix} n-n' \\ n' \end{matrix} \right] \pm \frac{n \hbar}{\lambda^2 (k_{xx} - i k_{xy})} \left[ \begin{matrix} n-n-1 \\ n' \end{matrix} \right] \right. \\ &\quad \left. \pm \frac{\hbar}{2} (k_{xx} - i k_{xy}) \left[ \begin{matrix} n-n-1 \\ n-1 \end{matrix} \right] \right\} \\ \hat{a}_y^{n,n'} &= 2^{\frac{n-n'}{2}} \left(\frac{n!}{n'}\right)^{\frac{1}{2}} \left[ \mp \frac{\lambda}{2} (k_{xx} - i k_{xy}) \right]^{n-n'} \left\{ \hbar \left[ k_x \mp \frac{1}{2} (k_{xx} - i k_{xy}) \right] \left[ \begin{matrix} n-n' \\ n' \end{matrix} \right] - \hbar k_x' \left[ \begin{matrix} n-n' \\ n' \end{matrix} \right] \mp \frac{n \hbar}{\lambda^2 (k_{xx} - i k_{xy})} \left[ \begin{matrix} n-n-1 \\ n' \end{matrix} \right] \right. \\ &\quad \left. \pm \frac{\hbar}{2} (k_{xx} - i k_{xy}) \left[ \begin{matrix} n-n-1 \\ n-1 \end{matrix} \right] \right\} \\ \hat{a}_z^{n,n'} &= \left\{ 2^{\frac{n-n'}{2}} \left(\frac{n!}{n'}\right)^{\frac{1}{2}} \left[ \mp \frac{\lambda}{2} (k_{xx} - i k_{xy}) \right]^{n-n'} \left[ \begin{matrix} n-n' \\ n' \end{matrix} \right] \right\} \hbar k_z'. \end{aligned}$$

II.2.23

Relembramos que o último termo contido em  $\hat{a}_x^{n,n'}$  e  $\hat{a}_y^{n,n'}$  será nulo para  $n' = 0$ . Para  $n' > n$  os coeficientes acima ficam dados por

$$\begin{aligned} \hat{a}_x^{n,n'} &= 2^{\frac{n-n'}{2}} \left(\frac{n!}{n'}\right)^{\frac{1}{2}} \left[ \pm \frac{\lambda}{2} (k_{xx} + i k_{xy}) \right]^{n-n'} \left\{ \hbar k_x' \left[ \begin{matrix} n-n' \\ n' \end{matrix} \right] - \hbar \left[ k_x \mp \frac{1}{2} (k_{xx} - i k_{xy}) \right] \left[ \begin{matrix} n-n' \\ n' \end{matrix} \right] \mp \frac{n \hbar}{\lambda^2 (k_{xx} + i k_{xy})} \left[ \begin{matrix} n-n-1 \\ n' \end{matrix} \right] \right. \\ &\quad \left. \mp \frac{\hbar}{2} (k_{xx} + i k_{xy}) \left[ \begin{matrix} n-n-1 \\ n-1 \end{matrix} \right] \right\} \\ \hat{a}_y^{n,n'} &= 2^{\frac{n-n'}{2}} \left(\frac{n!}{n'}\right)^{\frac{1}{2}} \left[ \pm \frac{\lambda}{2} (k_{xx} + i k_{xy}) \right]^{n-n'} \left\{ \hbar \left[ k_x \mp \frac{1}{2} (k_{xx} - i k_{xy}) \right] \left[ \begin{matrix} n-n' \\ n' \end{matrix} \right] - \hbar k_x' \left[ \begin{matrix} n-n' \\ n' \end{matrix} \right] \mp \frac{n \hbar}{\lambda^2 (k_{xx} + i k_{xy})} \left[ \begin{matrix} n-n-1 \\ n' \end{matrix} \right] \right. \\ &\quad \left. \mp \frac{\hbar}{2} (k_{xx} + i k_{xy}) \left[ \begin{matrix} n-n-1 \\ n-1 \end{matrix} \right] \right\} \\ \hat{a}_z^{n,n'} &= \left\{ 2^{\frac{n-n'}{2}} \left(\frac{n!}{n'}\right)^{\frac{1}{2}} \left[ \pm \frac{\lambda}{2} (k_{xx} + i k_{xy}) \right]^{n-n'} \left[ \begin{matrix} n-n' \\ n' \end{matrix} \right] \right\} \hbar k_z'. \end{aligned}$$

II.2.24

onde novamente chamamos a atenção para o último termo de  $\hat{a}_x^{n,n'}$  e  $\hat{a}_y^{n,n'}$  que será nulo para  $n = 0$ .

Por simplificação omitimos o argumento das funções de Laguerre, que sabemos ser igual a  $\frac{\lambda^2}{2} k_{xL}^2$ .

Com o resultado obtido na eq. II.2.22 e com o resultado da integração em  $\omega_1$  e  $\omega_2$ , a equação II.2.8 fica dada por

$$\begin{aligned} \langle f | S^3 | i \rangle &= (-i) \frac{2\pi \sqrt{m k_3} A_{k_2} A_{k_3} V_0}{\hbar^3} \sum_{\substack{n_1, n_2 \\ k_1, k_2, k_3}} \int d\omega \left\{ G_n(k_3, \omega) [\hat{e}_r \cdot \vec{I}_{\frac{n,n'}{k,k'}}(\vec{k}_3)] G_{n'}(k_2, \omega + \omega_2) \right. \\ &\quad \times I_{\frac{n_1, n_2}{k_1, k_2}}(\omega_1) G_{n_2}(k_2, \omega + \omega_2) [\hat{e}_s \cdot \vec{I}_{\frac{n_1, n_2}{k_1, k_2}}(\vec{k}_2)] + G_n(k_3, \omega) [\hat{e}_r \cdot \vec{I}_{\frac{n,n'}{k,k'}}(\vec{k}_3)] G_{n'}(k_2, \omega + \omega_2) [\hat{e}_s \cdot \vec{I}_{\frac{n_1, n_2}{k_1, k_2}}(\vec{k}_2)] \\ &\quad \times I_{\frac{n_1, n_2}{k_1, k_2}}(\omega_1) \left. \right\} \delta(\omega_1 - \omega_2 - \tilde{\omega}_0). \end{aligned}$$

II.2.25

A seguir estudaremos as possíveis transições que poderão ocorrer, para isto supomos uma baixa concentração eletrônica tal que a bem baixas temperaturas os elétrons se encontrem ocupando o estado  $(n=0, k_3=0)$ , cuja densidade, dada por  $\frac{eBL_x L_y}{2\pi \hbar c}$ , pode acomodar todos eles. Uma densidade eletrônica em torno de  $10^{14} \text{ cm}^{-3}$ , por exemplo, requererá uma energia de Férmi da ordem de 1% de  $\hbar\omega_c$ , isto medido a partir da base da primeira sub-banda de Landau, tornando assim a suposição acima adequadamente satisfeita para tais semicondutores.

Com a suposição de que inicialmente a baixas temperaturas não há fônons excitados na rede, inexistindo desse modo qualquer acoplamento a tais modos; a radiação ótica incidente, com uma componente elétrica perpendicular a  $\vec{B}$  excita o estado  $(n=1, k_3)$  onde  $k_3 = k_{3y} + k_{3z}$  e que será praticamente nulo desde que  $k_{3y} \approx 0$ . A esta altura torna-se interessante acrescentar que o tipo de espalhamento estudado por nós preenche a desigualdade  $\omega_i > \omega_c > \omega_0$ . Esta condição não permite transições entre sub-bandas de Landau por acoplamento aos modos da rede, sendo possível associar a este tipo de acoplamento apenas transições intra sub-banda. Com estes resultados podemos ditar as transições possíveis de acontecer observando os diagramas da fig. II.2. São elas

Para o primeiro diagrama temos,  $n=0, n_1=1$  e  $n_2=1$  II.2.26

Para o segundo ficamos com  $n=0, n_1=1$  e  $n_2=0$

Essa condição faz com que a eq. II.2.25 seja dada por

$$\begin{aligned} \langle f | S^3 | i \rangle = & (-i) \frac{2\pi \sqrt{m} A_{k_2} A_{k_3} V q_0}{\hbar^3} \sum_{\vec{k}, \vec{k}_1, \vec{k}_2} \int d\omega \left\{ G_0(k_3, \omega) [\hat{e}_x \cdot \vec{I}_{\frac{q_1}{k_1}, \frac{q_2}{k_2}}^{(k_3)}] G_1(k_{13}, \omega + \omega_1) I_{\frac{q_1}{k_1}, \frac{q_2}{k_2}}^{(q_0)} \right. \\ & \times G_1(k_{23}, \omega + \omega_2) [\hat{e}_s \cdot \vec{I}_{\frac{q_1}{k_1}, \frac{q_2}{k_2}}^{(k_3)}] + G_0(k_3, \omega) [\hat{e}_x \cdot \vec{I}_{\frac{q_1}{k_1}, \frac{q_2}{k_2}}^{(k_3)}] G_1(k_{13}, \omega + \omega_2) [\hat{e}_s \cdot \vec{I}_{\frac{q_1}{k_1}, \frac{q_2}{k_2}}^{(k_3)}] G_0(k_3, \omega + \omega_0) \\ & \left. \times I_{\frac{q_1}{k_1}, \frac{q_2}{k_2}}^{(q_0)} \right\} \delta(\omega_1 - \omega_2 - \omega_0). \end{aligned} \quad \text{II.2.27}$$

Das eqs. II.2.9<sub>b</sub>, II.2.10, e II.2.11 tiramos que

$$\vec{I}_{\frac{0,0}{k_x, k_x}}^{(q_0)} = f_{k_x, k_x}(-q_0) \delta(k_x, k_{2x} + q_{0x}) \delta(k_z, k_{2z} + q_{0z})$$

II.2.28

$$\vec{I}_{\frac{1,1}{k_x, k_x}}^{(q_0)} = f_{k_x, k_x}(-q_0) \left[ 1 - \frac{\lambda^2}{2} q_{01}^2 \right] \delta(k_{2x}, k_{1x} + q_{0x}) \delta(k_{2z}, k_{1z} + q_{0z}) .$$

Da eq. II.2.22 concluímos que

$$\vec{I}_{\frac{0,1}{k_x, k_x}}^{(k_0)} = \left[ a_x^{0,1} \hat{e}_x + a_y^{0,1} \hat{e}_y + a_z^{0,1} \hat{e}_z \right] f_{k_x, k_x}(k_0) \delta(k_{1x}, k_x - k_{lx}) \delta(k_{1z}, k_z - k_{lz}) ,$$

onde os valores de  $a_x^{0,1}$ ,  $a_y^{0,1}$  e  $a_z^{0,1}$  tirados das eqs. II.2.24 ficaram dados por

$$a_x^{0,1} = -\frac{\hbar}{\sqrt{2}} \left[ \frac{\lambda}{2} (k_{lx} + i k_{ly})^2 + \frac{1}{\lambda} \right]$$

$$a_y^{0,1} = i \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \left[ \frac{\lambda}{2} (k_{lx} + i k_{ly})^2 - \frac{1}{\lambda} \right]$$

$$a_z^{0,1} = \frac{\hbar \lambda}{\sqrt{2}} (k_{lx} + i k_{ly}) k_{lz} .$$

Resta assim encontrarmos  $\vec{I}_{\frac{1,0}{k_x, k_x}}^{(k_0)}$  e  $\vec{I}_{\frac{1,1}{k_x, k_x}}^{(k_0)}$ . Dada a semelhança entre eles, calculemos o elemento  $\vec{I}_{\frac{1,0}{k_x, k_x}}^{(k_0)}$ , dado por

$$\vec{I}_{\frac{1,0}{k_x, k_x}}^{(k_0)} = \left[ a_x^{1,0} \hat{e}_x + a_y^{1,0} \hat{e}_y + a_z^{1,0} \hat{e}_z \right] f_{k_x, k_x}(-k_0) \delta(k_x', k_x + k_{sx}) \delta(k_z', k_z + k_{sz}) ,$$

onde os valores  $a_x^{1,0}$ ,  $a_y^{1,0}$  e  $a_z^{1,0}$  serão encontrados nesse caso no conjunto de eqs. II.2.23, os quais são

$$a_x^{1,0} = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \left[ \frac{\lambda k_{s1}^2}{2} - \frac{1}{\lambda} \right]$$

$$a_y^{1,0} = -i \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \left[ \frac{\lambda k_{s1}^2}{2} - \frac{1}{\lambda} \right]$$

$$a_z^{1,0} = \frac{\hbar \lambda}{\sqrt{2}} (k_{sx} - i k_{sy}) k_z' .$$

Desde que trabalhamos em torno de  $k_z = 0$ , os elementos  $a_z^{0,1}$  e  $a_z^{1,0}$  serão nulos. Com isto e com a suposição que  $k_x \approx k_s \approx 0$ , podemos definir os seguintes dois vetores.

$$\vec{P}_+ = -\frac{\hbar}{\lambda \sqrt{2}} [\hat{e}_x + i \hat{e}_y]$$

$$\vec{P}_- = -\frac{\hbar}{\lambda \sqrt{2}} [\hat{e}_x - i \hat{e}_y] .$$

II.2.29

Desse modo podemos escrever

$$\vec{I}_{\frac{0,1}{k_x, k_x}}^{(k_0)} = \vec{P}_+ f_{k_x, k_x}(k_0) \delta(k_{1x}, k_x - k_{lx}) \delta(k_{1z}, k_z - k_{lz})$$

$$\vec{I}_{\frac{1,0}{k_x, k_x}}^{(k_0)} = \vec{P}_- f_{k_x, k_x}(k_0) \delta(k_x, k_{2x} + k_{sx}) \delta(k_z, k_{2z} + k_{sz})$$

II.2.30

$$\vec{I}_{\frac{1,1}{k_x, k_x}}^{(k_0)} = \vec{P}_- f_{k_x, k_x}(k_0) \delta(k_{2x}, k_{1x} + k_{sx}) \delta(k_{2z}, k_{1z} + k_{sz}) .$$

Substituindo as equações II.2.28 e II.2.30 na eq. II.2.27 e somando em  $\vec{K}_1$  e  $\vec{K}_2$ , onde relembramos que  $\vec{K} = (K_x, K_y)$ , vamos obter.

$$\begin{aligned} \langle f | S^3 | i \rangle = & (-i) \frac{2\pi \sqrt{m k_0} A_{k_0} A_{k_1} V_0}{\hbar^3} \sum_{\vec{K}} \int d\omega \left\{ G_0(k_3, \omega) [\hat{e}_1 \cdot \hat{e}_2] f_{K_x - K_x, K_y - K_y}^{(K_0)} G_1(k_3 - k_3, \omega + \omega_1) \right. \\ & \times (1 - \frac{\lambda^2}{2} q_{0z}^2) f_{K_x - K_x, K_y - K_y}^{(-q_0)} G_1(k_3 - k_3, \omega + \omega_2) [\hat{e}_3 \cdot \hat{e}_4] f_{K_x - K_x, K_y - K_y}^{(-K_3)} + G_0(k_3, \omega) [\hat{e}_1 \cdot \vec{P}_+] f_{K_x - K_x, K_y - K_y}^{(K_0)} \\ & \left. \times G_1(k_3 - k_3, \omega + \omega_1) [\hat{e}_3 \cdot \vec{P}_-] f_{K_x - q_{0x}, K_y - K_y}^{(-K_3)} G_0(k_3 - q_{0z}, \omega + \tilde{\omega}_0) f_{K_x - q_{0x}, K_y - q_{0y}}^{(-q_0)} \right\} \delta(K_{1x}, K_x + q_{0x}) \delta(K_{1y}, K_y + q_{0y}) \delta(\omega_1 - \omega_2 - \tilde{\omega}_0). \end{aligned}$$

No primeiro termo da eq. acima temos que o produto

$$\begin{aligned} f(K_0) f(-q_0) f(-K_3) = & e^{-\frac{\lambda^2}{4}(K_{1x}^2 + K_{1y}^2 + q_{0z}^2)} e^{i\lambda^2 K_x (K_{1y} - K_{2y} - q_{0y})} e^{-i\frac{\lambda^2}{2}(K_x + q_{0x})(K_{1y} - K_{2y} - q_{0y})} \\ & \times e^{-i\frac{\lambda^2}{2}(K_{1x} K_{2y} - K_{2x} K_{1y})} \end{aligned}$$

e que no segundo termo o mesmo produto é dado por

$$\begin{aligned} f(K_0) f(-K_3) f(-q_0) = & e^{-\frac{\lambda^2}{4}(K_{1x}^2 + K_{1y}^2 + q_{0z}^2)} e^{i\lambda^2 K_x (K_{1y} - K_{2y} - q_{0y})} e^{-i\frac{\lambda^2}{2}(K_x + q_{0x})(K_{1y} - K_{2y} - q_{0y})} \\ & \times e^{-i\frac{\lambda^2}{2}(K_{1x} q_{0y} - q_{0x} K_{1y})}. \end{aligned}$$

Substituindo estes dois resultados na eq. para  $\langle f | S^3 | i \rangle$  acima e somando para todos os  $K_x$  aparecerá o seguinte resultado

$$\sum_{K_x} e^{i\lambda^2 K_x (K_{1y} - K_{2y} - q_{0y})} \text{ e que mostramos no apêndice A.I valer } \frac{L_x L_y}{2\pi \lambda^2} \delta(K_{1y}, K_{2y} + q_{0y}).$$

Desse modo vamos ficar com

$$\begin{aligned} \langle f | S^3 | i \rangle = & (-i) \frac{L_x L_y \sqrt{m k_0} A_{k_0} A_{k_1} V_0}{\lambda^2 \hbar^3} [\hat{e}_1 \cdot \vec{P}_+] [\hat{e}_3 \cdot \vec{P}_-] \sum_{\vec{K}} \int d\omega \left\{ [1 - \frac{\lambda^2}{2} q_{0z}^2] G_0(k_3, \omega) \right. \\ & \times G_1(k_3, \omega + \omega_1) G_1(k_3, \omega + \omega_2) + G_0(k_3, \omega) G_1(k_3, \omega + \omega_1) G_0(k_3, \omega + \tilde{\omega}_0) \left. \right\} \\ & \times \delta(\vec{K}_1 - \vec{K}_2, \vec{q}_0) \delta(\omega_1 - \omega_2 - \tilde{\omega}_0). \end{aligned} \quad \text{II.2.31}$$

Desde que os propagadores para os elétrons são por demais conhecidos na literatura<sup>(16,14)</sup>, ou seja

$$G_n(k_3, \omega) = \frac{1}{\omega - \omega_n(k_3) - M_{n,K}(\omega)} \quad \text{II.2.32}$$

onde  $M_{n,K}(\omega) = P_{m,K}(\omega) - (\delta_j)_{n,K}(\omega)$ , com  $\delta_j$  podendo ser (+1) ou (-1), vem do fato de termos considerado tais propagadores renormalizados. A parte real  $P_{m,K}(\omega)$  será incorporado a  $\omega_n(k_3)$  (e.g redefinindo a massa) e com isto ficamos com

$$G_n(k_3, \omega) = \frac{1}{\omega - \omega_n(k_3) + i\delta_j \gamma_{n,k}} \quad \text{II.2.33}$$

Substituindo este resultado na eq. II.2.31 e integrando no semi-plano complexo inferior em  $\omega$ , vamos obter o seguinte resultado.

$$\langle f | S^3 | i \rangle = D(k_e, k_s, q_0) \sum_{k_3} [\hat{e}_e \cdot \hat{e}_-] \left\{ \frac{1 - \frac{\lambda^2}{2} q_{e1}^2}{[\omega_0(k_3) - \omega_1(k_3) + \omega_e + i\gamma(\omega_e)][\omega_0(k_3) - \omega_1(k_3) + \omega_s + i\gamma(\omega_s)]} + \frac{1}{[\omega_0(k_3) - \omega_1(k_3) + \omega_e + i\gamma(\omega_e)][\tilde{\omega}_0 + i\gamma(\tilde{\omega}_0)]} \right\} [\hat{e}_- \cdot \hat{e}_s] \delta(\omega_e - \omega_s - \tilde{\omega}_0) \delta(\vec{k}_e - \vec{k}_s, \vec{q}_0),$$

onde as funções  $\gamma(\omega_e)$ ,  $\gamma(\omega_s)$ ,  $\gamma(\tilde{\omega}_0)$  e  $D(k_e, k_s, q_0)$  são dadas por

$$\begin{aligned} \gamma(\omega_e) &= \gamma_{1, k_3} [\omega_0(k_3) + \omega_e] + \gamma_{0, k_3} [\omega_0(k_3)] \\ \gamma(\omega_s) &= \gamma_{1, k_3} [\omega_0(k_3) + \omega_s] + \gamma_{0, k_3} [\omega_0(k_3)] \end{aligned} \quad \text{II.2.34}$$

$$\gamma(\tilde{\omega}_0) = \gamma_{0, k_3} [\omega_0(k_3) + \tilde{\omega}_0] + \gamma_{0, k_3} [\omega_0(k_3)]$$

$$D(k_e, k_s, q_0) = \frac{L_x L_y \sqrt{n_{k_e} A_{k_e} A_{k_s} V q_0}}{\hbar^2 \lambda^4}, \quad \text{II.2.35}$$

$$\text{com } \hat{e}_+ = \hat{e}_x + i\hat{e}_y \quad \text{e} \quad \hat{e}_- = \hat{e}_x - i\hat{e}_y. \quad \text{II.2.36}$$

Sabemos que  $\omega_n(k_3) = (n + \frac{1}{2})\omega_e + \frac{\hbar k_3^2}{2m^*}$ . Com este resultado e com o fato que  $\frac{\lambda^2 q_{e1}^2}{2} \ll 1$ , podemos reescrever a eq. II.2.33 como segue

$$\langle f | S^3 | i \rangle = D(k_e, k_s, q_0) \sum_{k_3} \hat{e}_e \cdot \hat{e}_+ \left\{ \frac{1}{[\omega_e - \omega_e - i\gamma(\omega_e)][\omega_e - \omega_s - i\gamma(\omega_s)]} - \frac{1}{[\omega_e - \omega_e - i\gamma(\omega_e)][\tilde{\omega}_0 + i\gamma(\tilde{\omega}_0)]} \right\} \hat{e}_- \cdot \hat{e}_s \delta(\omega_e - \omega_s - \tilde{\omega}_0). \quad \text{II.2.37}$$

Para obter tal resultado tivemos que somar sobre todos os possíveis estados finais de fônons ( $\vec{q}_0$ ) e usamos a função  $\delta(\vec{k}_e - \vec{k}_s, \vec{q}_0)$ . Assim temos o elemento de matriz  $S$  entre um estado inicial de  $n_{k_e}$  fônons e um estado final onde um desses fônons é espalhado com momento  $\vec{k}_s$ , e um fônon é excitado na rede.

Por simplificação continuaremos a usar  $\vec{q}_0$  tendo em mente no entanto que  $\vec{q}_0 = \vec{k}_e - \vec{k}_s$ .

### 3 - SECÇÃO EFICAZ E INTENSIDADE I. DE ESPALHAMENTO

Nesta secção tentaremos determinar a intensidade integrada que todavia é definida em termos da secção eficaz de espalhamento, esta por sua vez bastante conhecida na literatura<sup>(18,19)</sup>, é definida através da probabilidade de transição por unidade de tempo. Na equação II.2.3 temos definido a probabilidade de transição entre os estados inicial e final do sistema em termos da matriz S. Entretanto foi estabelecido no princípio que nem todos os elementos da matriz S contribuem para o processo estudado, apenas predominando o termo  $\langle f | S^3 | i \rangle$  cujo resultado é determinado na eq. II.2.37. Desse modo substituindo esta eq. na eq. II.2.3, obtemos

$$W_{fi}(\infty) = |D(k_e, k_s, \gamma_0)|^2 \left| \sum_{k_3} \hat{e}_+ \cdot \hat{e}_+ \left\{ \frac{1}{[\omega_c - \omega_e - i\gamma(\omega_e)] [\omega_c - \omega_s - i\gamma(\omega_s)]} - \frac{1}{[\omega_c - \omega_e - i\gamma(\omega_e)] [\tilde{\omega}_0 + i\gamma(\tilde{\omega}_0)]} \right\} \hat{e}_- \cdot \hat{e}_s \right|^2 \delta^2(\omega_e - \omega_s - \tilde{\omega}_0).$$

Desde que a probabilidade de transição por unidade de tempo é definida por

$$P_{fi}(k_s) = \frac{W_{fi}(\infty)}{T},$$

precisamos reescrever o quadrado da função delta na seguinte forma<sup>19\*</sup>

$$\delta^2(\omega_e - \omega_s - \tilde{\omega}_0) = \frac{\delta(\omega_e - \omega_s - \tilde{\omega}_0)}{2\pi} \left[ \lim_{T \rightarrow \infty} \int_{-T/2}^{T/2} dt \right] \quad \text{II.3.1}$$

e desse modo vamos obter para um momento  $\vec{k}_s$  bem definido

$$P_{fi}(k_s) = \frac{|D(k_e, k_s, \gamma_0)|^2}{2\pi} \left| \sum_{k_3} \hat{e}_+ \cdot \hat{e}_+ \left\{ \frac{1}{[\omega_c - \omega_e - i\gamma(\omega_e)] [\omega_c - \omega_s - i\gamma(\omega_s)]} - \frac{1}{[\omega_c - \omega_e - i\gamma(\omega_e)] [\tilde{\omega}_0 + i\gamma(\tilde{\omega}_0)]} \right\} \hat{e}_- \cdot \hat{e}_s \right|^2 \delta(\omega_e - \omega_s - \tilde{\omega}_0).$$

II.3.2

Em geral não somente um fóton chega ao detetor, mas um grupo deles que se propagam numa certa direção  $(\theta, \varphi)$  dentro de um ângulo sólido  $d\Omega$ , assim para encontrar a probabilidade que um fóton chegue ao detetor precisamos somar para todo  $\vec{k}_s$  nesse ângulo sólido. Isto é

$$P_{fi}(d\Omega) = \sum_{\vec{k}_s \in d\Omega} P_{fi}(\vec{k}_s).$$

Esta soma pode ser transformada numa integral, desde que os níveis formam um quase contínuo de estados. Assim ficamos com

$$P_{fi}(d\Omega) = \int_{d\Omega} \int_0^\infty d\omega_s P(\omega_s) P_{fi}(\omega_s), \quad \text{II.3.3}$$

$$\text{onde } P(\omega_s) = \frac{V}{(2\pi c)^3} \omega_s^2 \epsilon_0^{3/2}, \text{ aqui } V \text{ é o volume.} \quad \text{II.3.4}$$

Usando a função  $\delta(\omega_s - \omega_0)$ , a relação entre  $\omega_s$  e  $k_s$  e o fato que  $\omega_s \gg \omega_0$  obtemos

$$P_{fi}(d\Omega) = D_{n_{k_x}}(\varphi) \left| \int dk_z \left\{ \frac{1}{[\omega_c - \omega_s - i\gamma(\omega_s)][\omega_c - \omega_s + i\gamma(\omega_s)]} - \frac{1}{[\omega_c - \omega_s - i\gamma(\omega_s)][\omega_0 + i\gamma(\omega_0)]} \right\} \right|^2 d\Omega \quad \text{II.3.5}$$

$$\text{onde } D_{n_{k_x}}(\varphi) = \frac{\hbar n_{k_x} e^6 \omega_0 \epsilon_0^{1/2} [e_x^+ e_s^-]^2}{q_0^2 c^3 m^4 \lambda^3 (\epsilon_0 + \frac{\hbar^2 k_x^2}{4m^2})^2} \left[ \frac{1}{\epsilon_0} - \frac{1}{\epsilon_0} \right], \quad \text{II.3.6}$$

aqui  $e_x^+ = \hat{e}_x \cdot (\hat{e}_x + i\hat{e}_y)$  e  $e_s^- = \hat{e}_s \cdot (\hat{e}_x - i\hat{e}_y)$ .

Com este resultado, torna-se de imediato o cálculo da seção eficaz de espalhamento, definida como a probabilidade que um fóton chegue ao detetor num ângulo sólido  $d\Omega$  por fluxo incidente  $\phi_0$  que é o numero de partículas incidentes por unidade de área por unidade de tempo, ou seja

$$d\sigma = \frac{P_{fi}(d\Omega)}{\phi_0},$$

$$\text{onde } \phi_0 = \frac{n_{k_x} c}{V \epsilon_0^{1/2}}, \text{ fazendo com que}$$

$$d\sigma = \frac{P_{fi}(d\Omega) V \epsilon_0^{1/2}}{n_{k_x} c}. \quad \text{II.3.7}$$

Chamamos a atenção para o fato da secção eficaz de espalhamento depender do volume, parecendo desse modo algo estranho, no entanto lembramos que aqui tal função representa a secção de espalhamento total vista pelo fóton e não a secção de espalhamento por centro espalhador.

A esta altura é mais conveniente introduzirmos a secção eficaz de espalhamento por unidade de ângulo sólido e por unidade de frequência espalhada, a qual será dada por

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\omega_s} = \frac{D(q_0)}{\lambda^8} \left| \int d^3k_3 \left\{ \frac{1}{[\omega_c - \omega_k - i\gamma(\omega_k)][\omega_c - \omega_s - i\gamma(\omega_s)]} - \frac{1}{[\omega_c - \omega_k - i\gamma(\omega_k)][\tilde{\omega}_0 + i\gamma(\tilde{\omega}_0)]} \right\} \right|^2 \delta(\omega_k - \omega_s - \tilde{\omega}_0) \quad \text{II.3.8}$$

$$\text{onde } D(q_0) = \frac{\hbar \omega_0 e^6 V [e_1^* e_3]^{-2} q_0^2 \epsilon_\infty}{4\pi^2 c^4 m^4 (\epsilon_\infty q_0^2 + q_{TF}^2)^2} \left[ \frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_0} \right] \quad \text{II.3.9}$$

Com este resultado podemos encontrar a intensidade integrada; precisamos apenas somar o valor acima sobre todas as frequências espalhadas dentro do ângulo sólido  $d\Omega$ , ou seja

$$I(\omega_0) = \int \frac{d^2\sigma}{d\Omega d\omega_s} d\omega_s \quad \text{ou}$$

$$I(\omega_0) = \frac{2K_{3F}^0 D(q_0)}{\lambda^8 (\omega_c - \omega_k - i\gamma(\omega_k))} \left\{ \frac{1}{\omega_c - \omega_s - \tilde{\omega}_0 - i\gamma(\omega_s)} - \frac{1}{\tilde{\omega}_0 + i\gamma(\tilde{\omega}_0)} \right\} \quad \text{II.3.10}$$

Note que a integral em  $k_3$  foi realizada e seu resultado é  $2K_{3F}^0$ .

## 4 - AMORTECIMENTO E VIDA MÉDIA ELETRÔNICA

Na secção anterior ao calcularmos a secção eficaz de espalhamento, levamos em conta que os estados quânticos de elétrons e fônons são interagentes entre si o que tornou possível uma vida média para os estados eletrônicos as quais são definidas como o inverso das funções amortecimentos  $\gamma(\omega_k)$ ,  $\gamma(\omega)$  e  $\gamma(\tilde{\omega}_k)$ . Estas por vez poderiam ser calculadas pelo método de funções de Green a temperaturas finitas de Zubarev<sup>20</sup> ou por teoria de propagadores. Aqui optamos pelo segundo caso, dada a grande simplicidade e as facilidades apresentadas.

Na eq. II.2.32, temos que

$$G_n(k_3, \omega) = \frac{\hbar^{-1}}{\omega - \tilde{\omega}_n(k_3) - M_{n,k}(\omega)} \quad \text{II.4.1}$$

Tal função é solução da eq. de Dyson a qual pode ser representada graficamente por

e é dada por

$$G_n(k_3, \omega) = G_n^o(k_3, \omega) + G_n^o(k_3, \omega) M_{n,k}^{(\omega)} G_n(k_3, \omega) \quad \text{II.4.2}$$

Onde  $M_{n,k}^{(\omega)}$  é a soma sobre todos os sub-diagramas de auto-energia própria e  $G_n^o(k_3, \omega)$  é o propagador para o sistema não interagente, o qual é simplesmente dado por

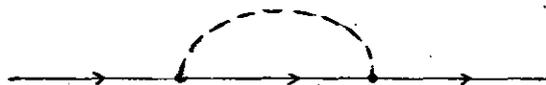
$$G_n^o(k_3, \omega) = \frac{\hbar^{-1}}{\omega - \tilde{\omega}_n(k_3) - i\eta_p} \quad \eta_p \rightarrow 0_+ \quad \text{II.4.3}$$

Nosso objetivo maior aqui é determinar o termo de auto-energia própria  $M_{n,k}^{(\omega)}$ . Para esse intento precisamos conhecer o propagador de fônons o qual é definido por  $D_c(q)$  e é dado por

$$D_0(q) = \frac{\hbar^{-1} \omega_0}{\omega^2 - (\omega_0 + i\delta)^2} \quad \text{II.4.4}$$

onde  $\omega_0$  é a frequência do fônon não renormalizada.

Em primeira aproximação na constante de acoplamento  $\propto$  da hamiltoniana de Frölich, para o qual apenas contribue o diagrama



onde  $---$  representa o propagador de fonon

podemos determinar  $M_{n,k}(\omega)$ . Entretanto, por simplificação fixamos  $\vec{k}$  o momento do elétron e tomamos arbitrário o momento  $\vec{q}$  do fônon, com isto o diagrama anterior fica dado por

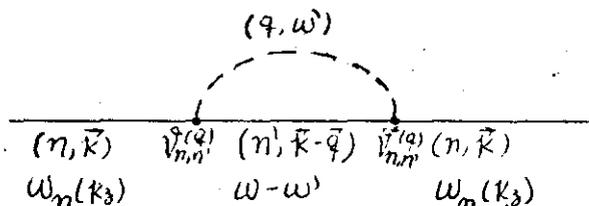


fig. 4.2

Usando as regras padrões para propagadores no espaço dos momentos, obtemos.

$$M_{n,k}(\omega) = i \sum_{n',q} \int \frac{d\omega'}{2\pi} V_{n,n'}(q) G_{n'}^0(k-q) V_{n,n}^*(q) D_0(q) \quad \text{II.4.5}$$

Substituindo as eqs. II.4.3 e II.4.4 nesta equação ficamos com

$$M_{n,k}(\omega) = (i) \frac{\hbar^{-2}}{2\pi} \sum_{n',q} \int d\omega' \frac{\omega_0 |V_{n,n'}(q)|^2}{(\omega - \omega_n(k_3) - \omega') [\omega'^2 - (\omega_0 + i\delta)]^2} \quad \text{II.4.6}$$

onde o elemento  $V_{n,n'}^{(q)}$  é a componente de Fourier da hamiltoniana / de interação elétron-fônon e é dado por

$$V_{n,n'}^{(q)} = V_q I_{n,n'}^{(q)} \quad \text{II.4.7}$$

onde  $I_{n,n'}^{(q)}$  é dado nas eqs. II.2.11 e 12.

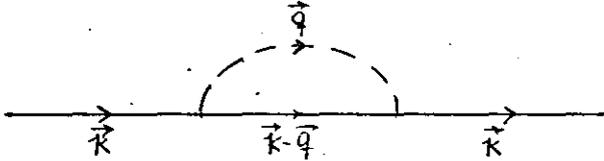
Integrando a eq. II.4.6 no plano complexo em  $\omega'$ , vamos obter dois resultados, devendo-se isto ao fato da existência dos dois polos  $\omega' = \omega_0$   $\omega' = -\omega_0$

São eles os seguintes

$$M_{n,k}(\omega) = \hbar^{-2} \sum_{n',q} |V_q|^2 |I_{n,n'}(q)|^2 [\omega - \omega_n(k_3 - q_3) - \omega_0 - i\eta]^{-1} \quad \text{II.4.8}$$

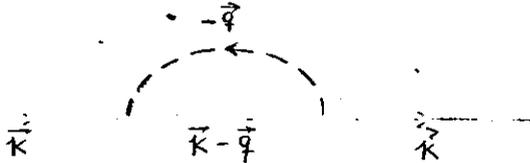
$$M_{n,k}(\omega) = \hbar^{-2} \sum_{n',q} |V_q|^2 |I_{n,n'}(q)|^2 [\omega - \omega_n(k_3 - q_3) + \omega_0 + i\eta]^{-1}$$

Aqui a primeira equação está relacionada ao diagrama,



onde o sistema eletrônico faz uma transição de um estado de energia mais alta para outro de energia mais baixa, emitindo um fônon, posteriormente reabsorvendo-o e voltando ao estado inicial.

A segunda eq. corresponde ao diagrama



Nesse caso o processo se dá ao contrário do caso anterior.

Desde que é válida a igualdade

$$\frac{1}{x \pm i\epsilon} = P\left(\frac{1}{x}\right) \mp i\pi\delta(x)$$

podemos dizer que

$$M_{n,k}(\omega) = \hbar^{-2} P \sum_{n',q} \frac{|V_q|^2 |I_{n,n'}(q)|^2}{\omega - \omega_n(k_3 - q_3) \pm \omega_0} \mp i\pi \hbar^{-2} \sum_{n',q} |V_q|^2 |I_{n,n'}(q)|^2 \delta[\omega - \omega_n(k_3 - q_3) \pm \omega_0]$$

e com isto obter o função amortecimento

$$\gamma_{n,k}(\omega) = \mp \pi \hbar^{-2} \sum_{n',q} |V_q|^2 |I_{n,n'}(q)|^2 \delta[\omega - \omega_n(k_3 - q_3) \pm \omega_0] \quad \text{II.4.9}$$

Com este resultado o conjunto de equações II.2.34 pode ser determinado, bastando portanto calcularmos os seguintes elementos

$$\gamma_{o,k_j}[\omega_o(k_j)] = \pi \hbar^{-2} \sum_{n,q} |V_q|^2 |I_{o,n}(q)|^2 \delta[\omega_o(k_j) - \omega_n(k_j - q_j) \pm \omega_0]$$

$$\gamma_{o,k_j}[\omega_o(k_j) + \tilde{\omega}_o] = \pi \hbar^{-2} \sum_{n,q} |V_q|^2 |I_{o,n}(q)|^2 \delta[\omega_o(k_j) - \omega_n(k_j - q_j) + \tilde{\omega}_o \pm \omega_0]$$

$$\chi_{1,k_3}[\omega_0(k_3) + \omega_\alpha] = \pi \hbar^{-2} \sum_{n,q} |V_q|^2 |I_{1,n}(q)|^2 \delta[\omega_0(k_3) - \omega_0(k_3 - q) + \omega_\alpha \pm \omega_0] \quad \text{II.4.10}$$

Na última equação  $\omega_x$  poderá ser  $\omega_x$  ou  $\omega_s$ .

Em termos da constante de acoplamento podemos dizer que

$$|V_q|^2 = \frac{\alpha (\hbar \omega_0)^2}{V} \left( \frac{\hbar}{2m^* \omega_0} \right)^{1/2} \frac{4\pi q^2}{\left( q^2 + \frac{q_{TE}^2}{\epsilon_0} \right)^2} \quad \text{II.4.11}$$

onde  $\alpha = \frac{e^2}{2\hbar \omega_0 L_0} \left[ \frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_0} \right]^{1/2}$  com  $L_0 = \frac{\hbar}{2m^* \omega_0}$

Resta para nós, saber se todos os termos do somatório em  $n$  são importantes, ou se existe algum deles que seja predominante / sobre os outros.

Usando as eqs. II.2.11 e 12 e a definição das funções associadas de Laguerre, obtemos

$$|I_{0,n}(q)|^2 = \frac{1}{2^n n!} [\lambda^2 q_1^2]^n e^{-\frac{\lambda^2}{2} q_1^2} \quad \text{II.4.12}$$

$$|I_{1,0}(q)|^2 = \frac{\lambda^2}{2} q_1^2 e^{-\frac{\lambda^2}{2} q_1^2} \quad \text{II.4.13}$$

$$|I_{1,n}(q)|^2 = \frac{1}{2^{n-1} n!} [\lambda^2 q_1^2]^{n-1} \left[ n - \frac{\lambda^2}{2} q_1^2 \right] e^{-\frac{\lambda^2}{2} q_1^2} \quad \text{II.4.14}$$

Com estes resultados e usando o fato que  $\lambda q \ll 1$ , facilmente se mostra que os elementos predominantes são  $|I_{0,0}|^2$  e  $|I_{1,1}|^2$

Estes são dados por

$$|I_{0,0}|^2 = e^{-\frac{\lambda^2}{2} q_1^2} \quad \text{II.4.15}$$

$$|I_{1,1}|^2 \cong e^{-\frac{\lambda^2}{2} q_1^2}$$

Substituindo estes valores no conjunto de eqs. II.4.10 obtemos

$$\chi_{0,k_3}[\omega_0(k_3)] = \pi \hbar^{-2} \sum_q |V_q|^2 e^{-\frac{\lambda^2}{2} q_1^2} \delta[\omega_0(k_3) - \omega_0(k_3 - q) + \omega_0]$$

$$\chi_{0,k_3}[\omega_0(k_3) + \tilde{\omega}_0] = \pi \hbar^{-2} \sum_q |V_q|^2 e^{-\frac{\lambda^2}{2} q_1^2} \delta[\omega_0(k_3) - \omega_0(k_3 - q) + \tilde{\omega}_0 - \omega_0]$$

$$\delta_{1, k_3} [\omega_0(k_3) + \omega_x] = \pi \hbar^{-2} \sum_q |V_q|^2 e^{-\frac{\lambda^2}{2} q_1^2} \delta [\omega_0(k_3) - \omega_1(k_3 - q_3) + \omega_x \mp \omega_0] \quad \text{II.4.16}$$

Aqui levamos em consideração que o estado  $(n=0, k_3=0)$  é perfeitamente excitável com a absorção de um fônon ótico, enquanto que os estados  $(n=0, k_3+q_3)$  e  $(n=1, k_3+k_{i3})$  são estados excitados e a tendência natural dos mesmos é decair para um estado de menor energia com a emissão de um fônon.

Partindo do fato que trabalhamos numa região para a qual  $k_3 \simeq 0$  e usando o resultado para  $\omega_n(k_3)$  dado por

$$\omega_n(k_3) = (n + \frac{1}{2}) \omega_c + \frac{\hbar k_3^2}{2m^*}$$

vamos obter

$$\delta_0[\omega_0(k_3)] = C(\omega_0) \int dq_3 \int dq_1 \frac{e^{-\frac{\lambda^2}{2} q_1^2} (q_3^2 + q_1^2)}{(q_3^2 + q_1^2 + \frac{q_1^2}{\epsilon_0})^2} \delta(\frac{\hbar q_3^2}{2m^*} - \omega_0)$$

$$\delta_0[\omega_0(k_3) + \tilde{\omega}_0] = C(\omega_0) \int dq_3 \int dq_1 \frac{e^{-\frac{\lambda^2}{2} q_1^2} (q_3^2 + q_1^2)}{(q_3^2 + q_1^2 + \frac{q_1^2}{\epsilon_0})^2} \delta[\frac{\hbar q_3^2}{2m^*} - (\tilde{\omega}_0 - \omega_0)]$$

$$\delta_1[\omega_0(k_3) + \omega_x] = C(\omega_0) \int dq_3 \int dq_1 \frac{e^{-\frac{\lambda^2}{2} q_1^2} (q_3^2 + q_1^2)}{(q_3^2 + q_1^2 + \frac{q_1^2}{\epsilon_0})^2} \delta[\frac{\hbar q_3^2}{2m^*} - (\omega_x - \omega_c + \omega_0)]$$

onde  $C(\omega_0) = \frac{\alpha \omega_0^2}{4} \left(\frac{\hbar}{2m^* \omega_0}\right)^{\frac{1}{2}}$ .

Aqui levamos em consideração que a frequência do fônon é constante, desde que trabalhamos no centro da zona de Brillouin, ou seja  $q_3 \simeq 0$ . Os limites para  $q_3$  e  $q_1$  são determinados pela célula unitária da rede recíproca. A integral em  $q_3$  é suposta de  $-\infty$  a  $+\infty$  e é feita usando-se as propriedades das funções deltas de Dirac. Desse modo ficamos com

$$\delta_0[\omega_0(k_3)] = C(\omega_0) \sqrt{\frac{2m^*}{\hbar \omega_0}} \int_0^\infty \frac{dq_1 q_1 \left(\frac{2m^* \omega_0}{\hbar} + q_1^2\right) e^{-\frac{\lambda^2}{2} q_1^2}}{\left(q_1^2 + \frac{2m^* \omega_0}{\hbar} + \frac{q_1^2}{\epsilon_0}\right)^2}$$

$$\delta_0[\omega_0(k_3) + \tilde{\omega}_0] = C(\omega_0) \sqrt{\frac{2m^*}{\hbar(\tilde{\omega}_0 - \omega_0)}} \int_0^\infty \frac{dq_1 q_1 \left[\frac{2m^*}{\hbar}(\tilde{\omega}_0 - \omega_0) + q_1^2\right] e^{-\frac{\lambda^2}{2} q_1^2}}{\left[q_1^2 + \frac{2m^*}{\hbar}(\tilde{\omega}_0 - \omega_0) + \frac{q_1^2}{\epsilon_0}\right]^2}$$

$$\chi_1[\omega_c(k_3) + \omega_x] = C(\omega_c) \sqrt{\frac{2m^*}{\hbar(\omega_x - \omega_c + \omega_b)}} \int_0^\infty \frac{d^2 q_1 \frac{q_1}{\hbar} \left[ \frac{2m^*}{\hbar} (\omega_x - \omega_c + \omega_b) + q_1^2 \right] e^{-\frac{\lambda^2}{2} q_1^2}}{\left[ q_1^2 + \frac{2m^*}{\hbar} (\omega_x - \omega_c + \omega_b) + \frac{q_{TE}^2}{\epsilon_0} \right]} \quad \text{II.4.17}$$

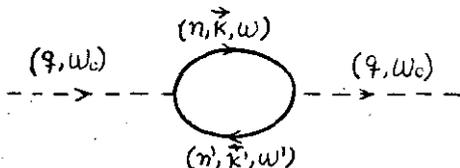
Resolvendo as integrais acima, mostramos que

$$\begin{aligned} \chi_a[\omega_c(k_3)] &= C(\omega_c) \sqrt{\frac{2m^*}{\hbar\omega_b}} \left\{ \left( 1 + \frac{\lambda^2 q_{TE}^2}{2\epsilon_0} \right) e^{\frac{\lambda^2}{2} \left[ \frac{2m^*}{\hbar} \omega_b + \frac{q_{TE}^2}{\epsilon_0} \right]} E_1 \left[ \frac{\lambda^2}{2} \left( \frac{2m^*}{\hbar} \omega_c + \frac{q_{TE}^2}{\epsilon_0} \right) \right] - \frac{q_{TE}^2 / \epsilon_0}{\frac{2m^*}{\hbar} \omega_c + \frac{q_{TE}^2}{\epsilon_0}} \right\} \\ \chi_b[\omega_c(k_3) + \tilde{\omega}_c] &= C(\omega_c) \sqrt{\frac{2m^*}{\hbar(\tilde{\omega}_c - \omega_c)}} \left\{ \left( 1 + \frac{\lambda^2 q_{TE}^2}{2\epsilon_0} \right) e^{\frac{\lambda^2}{2} \left[ \frac{2m^*}{\hbar} (\tilde{\omega}_c - \omega_c) + \frac{q_{TE}^2}{\epsilon_0} \right]} E_1 \left\{ \frac{\lambda^2}{2} \left[ \frac{2m^*}{\hbar} (\tilde{\omega}_c - \omega_c) + \frac{q_{TE}^2}{\epsilon_0} \right] \right\} \right. \\ &\quad \left. - \frac{q_{TE}^2 / \epsilon_0}{\frac{2m^*}{\hbar} (\tilde{\omega}_c - \omega_c) + \frac{q_{TE}^2}{\epsilon_0}} \right\} \\ \chi_1[\omega_c(k_3) + \omega_x] &= C(\omega_c) \sqrt{\frac{2m^*}{\hbar(\omega_x - \omega_c + \omega_b)}} \left\{ \left( 1 + \frac{\lambda^2 q_{TE}^2}{2\epsilon_0} \right) e^{\frac{\lambda^2}{2} \left[ \frac{2m^*}{\hbar} (\omega_x - \omega_c + \omega_b) + \frac{q_{TE}^2}{\epsilon_0} \right]} \right. \\ &\quad \left. \times E_1 \left\{ \frac{\lambda^2}{2} \left[ \frac{2m^*}{\hbar} (\omega_x - \omega_c + \omega_b) + \frac{q_{TE}^2}{\epsilon_0} \right] \right\} - \frac{q_{TE}^2 / \epsilon_0}{\frac{2m^*}{\hbar} (\omega_x - \omega_c + \omega_b) + \frac{q_{TE}^2}{\epsilon_0}} \right\} \quad \text{II.4.18} \end{aligned}$$

onde  $E_1(x)$  é denominada por integral exponencial e é definida por

$$E_1(x) = \int_x^\infty e^{-t} t^{-1} dt.$$

A esta altura torna-se necessário mostrar quanto vale a diferença  $\tilde{\omega}_c - \omega_c$ . Usando o diagrama



onde fixamos o momento do fônon e tomamos o momento do elétron arbitrário, podemos mostrar, usando as regras padrões para propagadores no espaço dos momentos, que

$$P_q(\omega) = \tilde{\omega}_c - \omega_c = P \sum_{n, n', k} \frac{|V_q|^2 |I_{n, n'}(q)|^2}{\omega_c - \omega_n(k_3) - \omega_{n'}(k_3 - q_3)} \quad \text{II.4.19}$$

onde  $P$  significa o valor principal da integral. Para que este elemento não seja nulo, precisamos ter um estado ocupado para  $|k_3| < k_{3F}$  e um estado vazio para  $|k_3| > k_{3F}$ , no entanto dada a pequena concentração de portadores e a baixa temperatura ( $T=0$ ) somente o estado  $n=0, k_3=0$  está ocupado, com isto e com a suposição

que  $\omega_c \gg \omega_0$ , sômente ocorre transições entre  $n=0$  e  $n=1$ , o que nos leva a

$$P_q(\omega_0) = \frac{V|V_q|^2 |I_{cc}(q_z)|^2}{2\pi^2 \hbar^2 \lambda^2} P \int_{-k_{3F}^0}^{+k_{3F}^0} \frac{dk_z}{\omega_0 - \frac{\hbar q_z k_z}{m^2}} \quad \text{II.4.20}$$

entretanto como  $k_z \approx 0$  e  $q_z \approx 0$  obtemos

$$P_q(\omega_0) = \frac{k_{3F} V |V_q|^2 |I_{cc}(q_z)|^2}{\pi^2 \lambda^2 \hbar^2 \omega_0} \quad \text{II.4.21}$$

onde  $|V_q|^2 |I_{cc}(q_z)|^2 = \frac{4\pi \alpha q^2 (\hbar \omega_0)^2 e^{-\frac{\lambda^2 q^2}{2} q_z^2}}{\sqrt{[q^2 + q_{TF}^2/\epsilon_0]^2}} \left(\frac{\hbar}{2m^* \omega_0}\right)^{1/2} \quad \text{II.4.22}$

Substituindo este resultado no conjunto de eqs. II.4.18 e por vez substituindo estas equações no conjunto de eqs. II.2.34, vamos obter os resultados para  $\chi(\omega_0)$ ,  $\chi(\omega_3)$  e  $\chi(\tilde{\omega}_0)$ . Não vamos escrever seus resultados, dada a grande extensão.

## CAPITULO III

### III - APLICAÇÃO AO InSb E COMENTARIOS FINAIS

Esta secção será devotada ao estudo qualitativo da intensidade integrada da secção de espalhamento e da vida média dos estados eletrônicos. Nesse sentido, usaremos os resultados quantitativos do capítulo anterior e levamos em consideração parâmetros apropriados para o Antimoniato de Índio (InSb). Justifica-se o uso do InSb, um semiconductor tipo n facilmente obtido, por ser este bastante estudado e apesar disso ainda permanece sem explicação / uma série de problemas relacionados as suas propriedades físicas.

Um outro fator importante vem do fato que, a ressonância /  $\omega_c \simeq \omega_p$  é facilmente obtida para semicondutores com pequena massa efetiva <sup>9</sup>, isto justifica ainda mais o uso do mesmo, desde / que tendo este pequena massa efetiva, satisfaz o requisito acima considerado, que é o passo importante para que o processo estudado por nos seja dominante.

Ressaltamos novamente o fato de termos apenas o estado  $n=0$ ,  $k_y=0$  ocupado, onde uma baixa concentração de portadores em torno de  $2 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$  e baixa temperatura foram consideradas. Concentrações de portadores entre  $10^{14}$  e  $10^{18} \text{ cm}^{-3}$  em semicondutores são bons plásmas <sup>21</sup> o que justifica perfeitamente o uso de um potencial de Fröhlich blindado. Nota-se entretanto que não consideramos as partículas com uma excitação coletiva (o plasmon), mas sim a excitação de partícula individual (o elétron), isto é perfeitamente justificavel, desde que estando o material imerso num campo magnético, o comprimento magnético que é proporcional a distância média interpartículas é bem menor que  $\lambda_D = q_{TF}^{-1}$  o comprimento de blindagem. Este resultado é facilmente explicado por um raciocinio clássico: Elétrons livres em campos magnéticos descrevem uma hélice em torno do campo, cuja projeção no plano perpêndi

cular a este campo são círculos de raio  $R = \frac{m v}{e B}$  (onde  $v$  é a velocidade do elétron). Se o campo magnético for tal que o raio cíclico,  $R$ , seja bem menor que a distância inter-eletrônica média ( $\lambda \ll \bar{J}_S$ ), é de se esperar que os elétrons se movimentem em torno do campo sem sentir muito a influência dos outros.

A seguir fornecemos os parâmetros relacionados ao InSb, acima comentados, citando as referências usadas.

$$m^* = 0,147 m_e^{22}$$

$$\hbar \omega_0 = 22,8 \text{ meV}^{23}$$

$$\epsilon_0 = 17,88^{24}$$

$$\epsilon_\infty = 15,68^{24}$$

$$\alpha = 0,02^{23}$$

Especificado o cristal, nos preocuparemos com a escolha do laser e da geometria mais favorável.

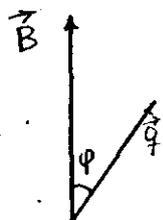
Fixando uma frequência para o laser em torno de  $1,310^{14} \text{ seg}^{-1}$ , que corresponde a um comprimento de onda  $\lambda_0 \approx 150.000 \text{ \AA}$ , o que nos dá uma radiação no infravermelho. Aqui ressaltamos as dificuldades que poderão ocorrer ao se tentar determinar experimentalmente esse processo, dada a baixa frequência da radiação incidente. Com a frequência incidente dessa ordem vamos obter um pico ressonante para campos magnéticos em torno de  $10^5$  gauss.

O valor de  $\vec{q} = \vec{k}_e - \vec{k}_s$  é perfeitamente fixado pela geometria experimental e seu valor é facilmente determinado, desde que  $|\vec{k}_e| \approx |\vec{k}_s|$ , escolhemos arbitrariamente um ângulo de  $60^\circ$  entre eles e com isto obtemos

$$|\vec{q}| \approx |\vec{k}_e| = \frac{\omega_0 \sqrt{\epsilon_0}}{c} = 1,71 \times 10^4 \text{ cm}^{-1} \quad \text{III.1.1}$$

A dependência angular de maior importância para o problema foi aquela da orientação do momento do fônon com relação ao campo

magnético. Denominando esse ângulo de  $\varphi$ , podemos com ele determinar  $q_{\parallel}$  e  $q_{\perp}$  e assim determinar as funções amortecimentos.



$$q_{\parallel} = q \cos \varphi$$

$$q_{\perp} = q \sin \varphi$$

III.1.2

No cálculo das funções amortecimentos surge uma pequena dependência nesse ângulo, carregada no termo de renormalização da energia do fônon, entretanto observou-se que tal dependência não modificava tanto a função, o que tornou possível tomar como desprezível sua participação.

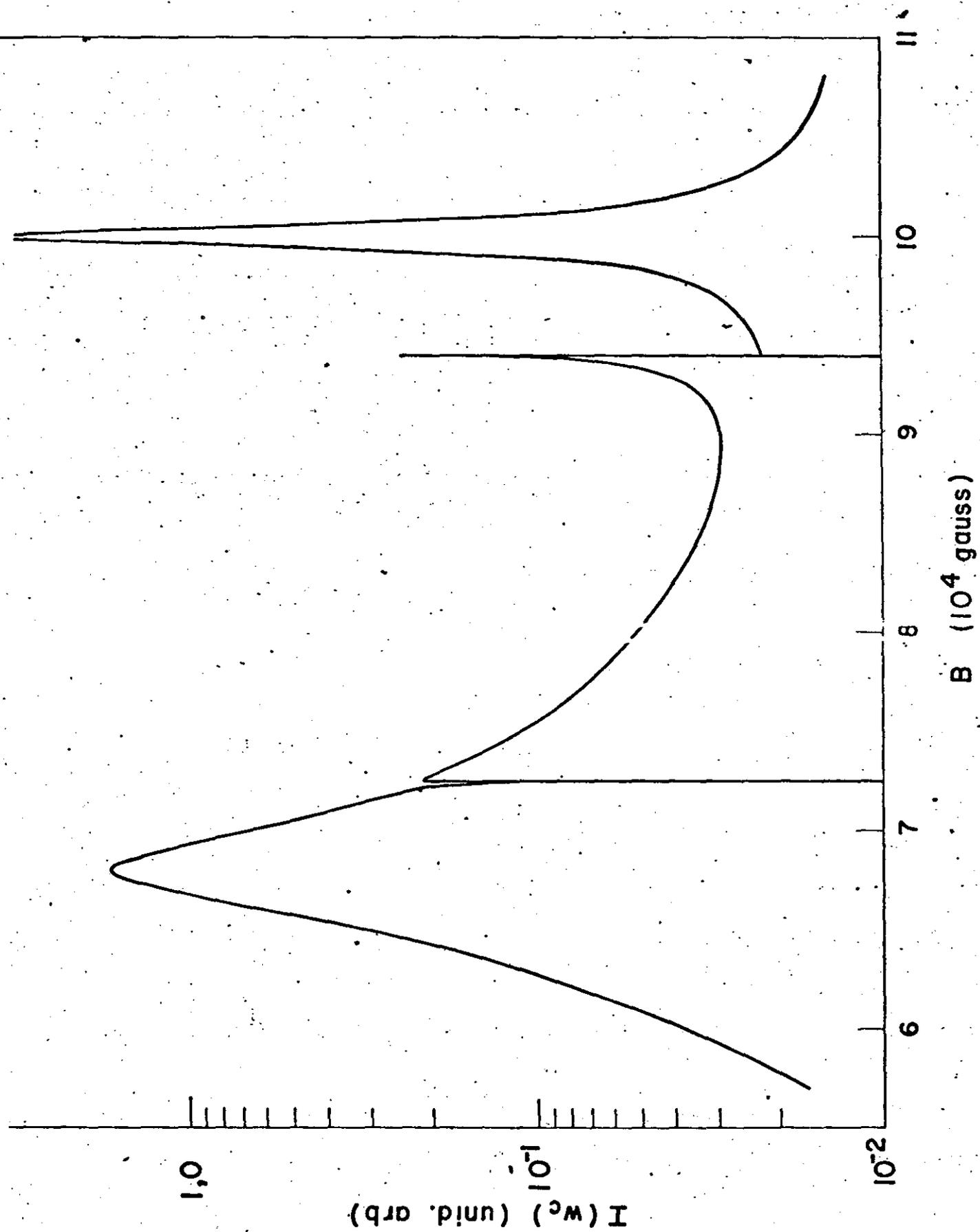


Fig. III.1

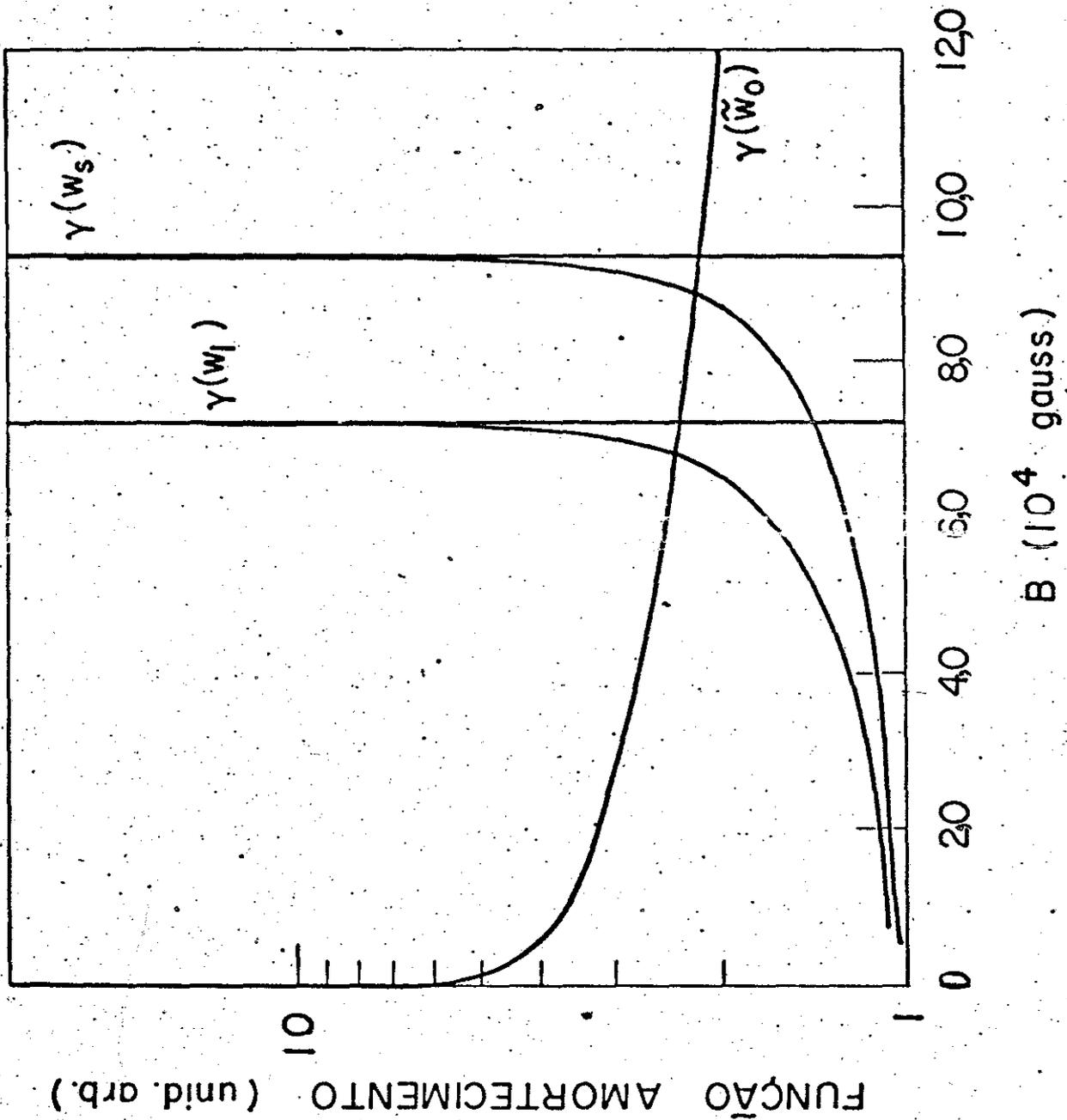


Fig. III.2

## COMENTARIOS FINAIS

Nesse trabalho foi considerada a participação do sistema elétron-fônon LO no processo de espalhamento Raman num semicondutor fracamente dopado, imerso num campo magnético. Aqui demos ênfase a situação de ressonância, onde a frequência da luz incidente ( $\omega_e$ ) era idêntica a frequência de ciclotron ( $\omega_c$ ), entretanto este requisito só é possível para semicondutores com pequena massa efetiva o que justifica perfeitamente o uso do InSb.

O acoplamento dos fônons aos modos ciclotrônicos de Landau foi de suma importância nesse estudo, dada a carga de anarmonicidade fornecida ao processo o que torna possível a observação das características do espalhamento. Este mesmo acoplamento nos leva a determinação das funções amortecimentos dependentes da frequência, nesse sentido usamos, do mesmo modo que fizemos para determinar a intensidade, técnicas de propagadores no espaço dos momentos; é bom frisar que isto foi possível, desde que trabalhamos em baixas temperaturas ( $T=0$ ). O cálculo destas funções foi feito na secção 4 do capítulo II; a parte real do elemento de auto-energia própria serviu para renormalizar a massa do elétron e a parte imaginária, que na realidade, dada a presença das funções deltas de conservação de energia, se compõem para dar a vida média dos estados eletrônicos, são encontradas nos gráficos da fig. III.2 onde o campo magnético é tomado como a abcissa.

No sentido de determinar a intensidade integrada foi utilizado o formalismo de matriz S com opção às técnicas de propagadores no espaço dos momentos; calculamos a secção de espalhamento e em seguida somamos sobre todas as frequências espalhadas num ângulo sólido

Os nossos cálculos tiveram seu teste neste capítulo, onde

fazemos uma aplicação ao caso específico do InSb. A principal prova desse fato se encontra no gráfico da fig. III.1, onde temos / plotado a intensidade integrada versus campo magnético. Note, / eram esperados picos ressonantes infinitos em torno de 32,65 mev e 53,85 mev o que corresponderia a campos em torno de 100 kgauss e 72,45 kgauss respectivamente, o primeiro satisfazendo a condição /  $\omega_c \approx \omega_e$  e o segundo correspondendo a condição  $\omega_c \approx \omega_s$ , caso considerassemos os estados puramente estacionários. Entretanto dada a umas certas considerações feitas por nós, onde levamos em conta os propagadores de elétrons e a massa do fônon renormalizados respectivamente, obtivemos um pico ressonante finito deslocado para 56,15 mev ou 67,973 kgauss, sem qualquer modificação aparente para o primeiro pico  $\omega_c \approx \omega_e$ ; de qualquer forma esse último requisito era esperado, desde que o princípio de conservação da energia anula as funções amortecimentos  $\gamma(\omega_e)$  e  $\gamma(\omega_s)$  para regiões de campo acima de 93,92 kgauss; observa-se que tais funções foram de suma importância na modificação anterior.

Outro fato interessante que observamos foram as descontinuidades anômalas que surgiram para campos em torno de 72,45 kgauss e 93,92 kgauss respectivamente. Falo anômalo, porque as funções  $\gamma(\omega_e)$  e  $\gamma(\omega_s)$  têm um crescimento extremamente assintótico para regiões de campo praticamente desprezíveis próximo desses valores e isto se deve às singularidades do tipo  $\frac{1}{x}$  e elípticas. Entretanto este fato não carrega qualquer significado físico importante, e mais, poderíamos inclusive dizer que dada a pequena região de campo onde isso ocorre em nada afetará o processo. Uma situação semelhante ocorre quando a teoria de espalhamento Ramam de Loudon é reconsiderada e são incluídos efeitos de polaron<sup>25</sup> nos estados / intermediários excitados virtuais. Nesse caso a anomalia deveu-se a singularidades do tipo logarítmica.

APENDICE A.1

GAS DE ELETRONS NUM CAMPO MAGNETICO

As bases dos efeitos magnético-óticos em sólidos é naturalmente, transições entre estados eletrônicos magneticamente quantizados. Para elétrons livres, a natureza destes estados é bem conhecida da solução devido a Landau<sup>26</sup> da equação de Schrodinger / num campo magnético.

A hamiltoniana do nosso problema é

$$H = \frac{1}{2m^*} \sum_{\mathbf{k}} (\vec{p}_{\mathbf{k}} + e \vec{A}_0(\mathbf{k}))^2 + \gamma_B H \sigma_z \quad \text{A.I.1}$$

onde  $\sigma_z$  é a matriz spin de Pauli,  $\gamma_B = \frac{e\hbar}{2m^*c}$  é o magneton de Bohr e nós temos tomado um campo magnético  $\vec{H}$  na direção  $z$  com um potencial vetor associado  $\vec{A}_0$ , no calibre de Landau  $(-By, 0, 0)$ . Uma vez que  $\sigma_z$  atua somente nas variáveis de spin, a hamiltoniana da eq. acima pode ser separada em partes de spin e coordenadas o que leva a uma solução em forma de produto. Para as nossas considerações apenas nos interessa a parte das coordenadas.

Tomando o campo magnético representado pelo potencial vetor  $\vec{A}_0 = (-By, 0, 0)$  e substituindo  $p_k = -i\hbar\nabla$  na eq.A.I.1, obtemos

$$\frac{-\hbar^2}{2m^*} \left[ \left( \partial_x - \frac{ieBy}{\hbar} \right)^2 + \partial_y^2 + \partial_z^2 \right] \psi_{n,k}(\vec{r}) = E \psi_{n,k}(\vec{r}) \quad \text{A.I.2}$$

em coordenadas cartesianas.

Esta equação é separável se nós fazemos

$$\psi_{n,k}(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi^2} e^{i(k_x x + k_z z)} \phi(y) \quad \text{A.I.3}$$

onde  $p_x = \hbar k_x$  e  $p_z = \hbar k_z$  são bons números quânticos, isto é ( $p_x$  e  $p_z$  comutam com a hamiltoniana). A equação para  $\phi(y)$  torna-se

$$\left[ \frac{-\hbar^2}{2m^*} \partial_y^2 - \hbar \omega_c k_x y + \frac{m^* \omega_c^2}{2} y^2 \right] \phi(y) = \left( E - \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m^*} - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*} \right) \phi(y),$$

mudando as variáveis  $y = y' + \lambda^2 k_x$  e  $\lambda^2 = \frac{\hbar c}{eB}$ ,

A.I.4

nós transformamos a equação acima em

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m^*} \partial_y^2 + \frac{m^* \omega_c^2}{2} y^2 \right] \phi = \left( E - \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m^*} \right) \phi \quad \text{A.I.5}$$

que vem a ser idêntica com o problema do oscilador harmônico unidimensional.

Os autovalores são encontrados de imediato, ou seja

$$E - \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m^*} = \left( n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_c \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots$$

$$\text{ou } E = \left( n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_c + \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m^*} \quad \text{A.I.6}$$

e as autofunções são dadas por

$$\phi(y) = \varphi_n \left( \frac{y - y_0}{\lambda} \right) \quad \text{A.I.7}$$

onde  $y_0 = \lambda^2 k_x$  e  $\varphi_n$  são as funções de osciladores harmônicos, isto é

$$\varphi_n \left( \frac{y - y_0}{\lambda} \right) = C_n e^{-\frac{(y - y_0)^2}{2\lambda^2}} H_n \left( \frac{y - y_0}{\lambda} \right) \quad \text{A.I.8}$$

aqui  $H_n$  são os polinômios de Hermite e os  $C_n$  são os fatores de normalização os quais são dados por

$$C_n = \left[ 2^n n! \sqrt{\pi} \lambda \right]^{-\frac{1}{2}} \quad \text{A.I.9}$$

$\lambda$  é chamado de raio magnético e seu comprimento é característico para o tratamento quântico do nosso problema.

Com esta normalização nossas funções de onda satisfazem as relações de ortonormalidades.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_{m, k}^*(\vec{r}) \Psi_{n, k'}(\vec{r}) d\vec{r} = \delta_{n, m} \delta_{k'_x, k_x} \delta_{k'_z, k'_z} \quad \text{A.I.10}$$

Nota-se aqui a existência de tres constantes independentes de movimento.

$$E_1 = \left( n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_c, \quad E_2 = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m^*} = \frac{p_x^2}{2m^*} \quad \text{e} \quad y_0 = \lambda^2 k_x = \frac{c p_x^0}{e B} \quad \text{A.I.11}$$

Vamos tentar, a seguir, entender dentro de um sentido quântico o movimento dos elétrons neste campo magnético e como consequência a alta degenerescência dos estados eletrônicos.

O movimento oscilatório dos elétrons se dá no plano  $(x, y)$  tendo como centro o ponto  $(x_0, y_0)$ , onde  $x_0 = X - \lambda^2 k_y$  e  $y_0 = \lambda^2 k_x$ , nota-se aqui que  $x_0$  também é uma constante do movimento e que  $x_0$  e  $y_0$  não comutam, ou seja

$$[x_0, y_0] = i\lambda^2 \quad \text{A.I.12}$$

com isto temos uma incerteza na medida do centro de oscilação, sendo  $\lambda^2$  a área mínima na qual este pode ser localizado.

A degenerescência dos níveis e a densidade de estados para um elétron num campo magnético são facilmente verificadas.

Consideremos por exemplo um elétron confinado numa caixa retangular de dimensões  $L_x$ ,  $L_y$  e  $L_z$ . Aplicando condições de contorno periódicas para as funções da eq. A.I.3 nas direções  $x$  e  $z$ , então os valores permitidos de  $k_x$  e  $k_z$  são.

$$k_x = \frac{2\pi}{L_x} n_x \quad \text{e} \quad k_z = \frac{2\pi}{L_z} n_z \quad \text{A.I.13}$$

onde  $n_x$  e  $n_z$  são inteiros.

Agora vamos supor que o centro da órbita  $y_0$  é confinado entre  $y=0$  e  $y=L_y$  (isto leva a modificações das funções com centros localizados dentro da distância  $\lambda$  dos contornos, mas o número relativo de tais funções é bem pequeno tanto quanto  $\lambda \ll L_y$ ). De acordo com a equação A.I.11 isto significa que  $0 \leq k_x \leq \frac{L_y}{\lambda^2}$ .

Uma vez que dentro de um comprimento unitário de  $k_x$  existe  $\frac{L_x}{2\pi}$  valores permitidos de  $k_x$ , o número total de  $k_x$  permitido será

$$N = \frac{L_x L_y}{2\pi \lambda^2} \quad \text{A.I.14}$$

e esta é a degenerescência de cada nível de Landau para um dado valor de  $k_z$ . Quando o campo magnético é forte, de tal modo que o intervalo  $\hbar\omega_c$  entre os níveis para um dado valor de  $k_z$  é grande, existe um enorme agrupamento de valores permitidos ao redor dos níveis dados por  $\epsilon = (n + \frac{1}{2}) \hbar\omega_c$ .

No sentido de determinar a densidade de estados por unidade de energia associada com cada nível quantizado, vamos escrever

$$\varepsilon_z = E - (n + \frac{1}{2}) \hbar \omega_c = \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*} \quad \text{A.I.15}$$

O número de valores de  $k_z$  tais que  $|k_z| < k_z^0$  é  $\frac{L_z k_z^0}{\pi}$ . O número permitido de  $\varepsilon_z$  tais que  $\varepsilon_z < \varepsilon_z^0$  é entretanto também igual a  $\frac{L_z k_z^0}{\pi}$ . Expressando isto por  $\varepsilon_z$ , nós obtemos

$$\frac{L_z (2m^* \varepsilon_z)^{1/2}}{\pi \hbar}$$

Com isto o número de níveis permitidos no intervalo  $d\varepsilon_z$ ,  $\rho(\varepsilon_z) d\varepsilon_z$  é entretanto dado por

$$\rho(\varepsilon_z) d\varepsilon_z = \frac{L_z (2m^*)^{1/2}}{2\pi \hbar \sqrt{\varepsilon_z}} d\varepsilon_z \quad \text{A.I.16}$$

De maneira a obter a densidade total de estados, nós temos que somar sobre todos os níveis para os quais  $\varepsilon_z \geq 0$ , lembrando que cada tem uma degenerescência  $N = \frac{L_x L_y}{2\pi \lambda^2}$ .

Usando a definição A.I.15, obtemos

$$\rho(\varepsilon) = V \left( \frac{2m^*}{\hbar} \right)^{1/2} \frac{1}{4\pi^2 \lambda^2} \sum_{n=0}^{n_{\text{Max}}} \left[ E - (n + \frac{1}{2}) \hbar \omega_c \right]^{-1/2}$$

A.I.17

onde  $V$  é o volume da caixa.

Como segue da derivação, o somatório se estende sobre todos os valores de  $n$  para os quais a raiz quadrada é todavia positiva. Isto significa que o  $n$ -ésimo nível de Landau contribui para a densidade de estados somente para energias  $E \geq (n + \frac{1}{2}) \hbar \omega_c$ .

### AS HAMILTONIANAS DE INTERAÇÃO

Com as funções de onda para uma partícula num campo magnético, passamos ao formalismo de segunda quantização e escrevemos os operadores de campo  $\hat{\Psi}(\vec{r}, t)$  e  $\hat{\Psi}^*(\vec{r}, t)$  como

$$\begin{aligned} \hat{\Psi}(\vec{r}, t) &= \sum_{n, k, \sigma} \Psi_{n, k}(\vec{r}) a_{n, k, \sigma}(t) \\ \hat{\Psi}^*(\vec{r}, t) &= \sum_{n, k, \sigma} \Psi_{n, k}^*(\vec{r}) a_{n, k, \sigma}^{\dagger}(t) \end{aligned} \quad \text{A.I.18}$$

Ao escrever esta expressão usamos a notação simplificadora

que passaremos a adotar  $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$ . No mais a notação é usual sendo  $a_{n_j, \mathbf{k}}^+$  e  $a_{n_j, \mathbf{k}}$  respectivamente operadores de criação e aniquilação para um elétron no estado  $(n, k_x, k_y, \sigma)$ , onde  $\sigma$  é o índice de spin. Portanto em segunda quantização obtemos para a hamiltoniana de elétrons a expressão dada na eq. II.1.2, onde tomamos  $V \rightarrow \infty$ .

$$\hat{H}_e = \int_{-\infty}^{+\infty} d^3r \Psi^\dagger(\vec{r}) H_e \Psi(\vec{r}) = \sum_{n, \mathbf{k}, \sigma} E_n(k_y) a_{n, \mathbf{k}}^+ a_{n, \mathbf{k}} \quad \text{A.I.19}$$

aqui  $E_n(k_y) = (n + \frac{1}{2}) \hbar \omega_c + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m}$

Adicionando ao problema do gás de elétrons num campo magnético um campo de radiação representado pelo potencial vetor  $\vec{A}(\vec{r}, t)$ ; O novo sistema ficará descrito pela hamiltoniana

$$H = H_r + \frac{1}{2m^*} \left[ \vec{p} + \frac{e}{c} (\vec{A}_0 + \vec{A}(\vec{r}, t)) \right]^2 \quad \text{A.I.20}$$

onde  $H_r$  é a hamiltoniana de campo livre de radiação e o segundo termo nos dá a hamiltoniana para o elétron na presença do campo de radiação adicional.

Desenvolvendo a expressão acima ficamos com

$$H = H_r + \frac{1}{2m^*} \left( \vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A}_0 \right)^2 + \frac{e}{m^* c} \left( \vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A}_0 \right) \cdot \vec{A}(\vec{r}, t) + \frac{e^2}{2m^* c} A^2(\vec{r}, t)$$

$$H = H_e + H_r + H_{e-r} \quad \text{A.I.21}$$

onde  $H_e$  é dado por A.I.19 e  $H_{e-r}$  representa o termo de interação entre os elétrons e a radiação. Escrevendo  $H_{e-r} = H_1 + H_2$ , onde tomamos

$$H_1 = \frac{e}{m^* c} \left( \vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A}_0 \right) \cdot \vec{A}(\vec{r}, t) \quad \text{A.I.22}$$

$$H_2 = \frac{e^2}{2m^* c} A^2(\vec{r}, t)$$

e passando para o formalismo de segunda quantização, vamos obter

$$H_1(\vec{r}, t) = \frac{e}{m^* c} \sum_{\substack{n, \mathbf{k}, m, \mathbf{k} \\ k_y}} \sqrt{\frac{2 \pi \hbar c}{V k_y \epsilon_0}} \langle n, \mathbf{k} | \hat{e}_y \cdot \left( \vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A}_0 \right) | n, \mathbf{k} \rangle e^{-i \mathbf{k}_y \cdot \vec{r}} \times \left\{ C_{\mathbf{k}_y}^+(t) + C_{-\mathbf{k}_y}(t) \right\} a_{n, \mathbf{k}}^+(t) a_{n, \mathbf{k}}(t) \quad \text{A.I.23}$$

$$H_2(\vec{r}, t) = \sum_{\substack{n, \vec{k}, n', \vec{k}' \\ \vec{k}_x, \vec{k}_y}} \frac{\pi \hbar e^2 (\hat{e}_x \cdot \hat{e}_y)}{\sqrt{cm} \epsilon_0 \sqrt{k_x k_y}} \langle n, \vec{k} | e^{-i(\vec{k}_x + \vec{k}_y) \cdot \vec{r}} | n', \vec{k}' \rangle \{ C_{\vec{k}_x}^+(t) + C_{-\vec{k}_x}^-(t) \} \{ e_{\vec{k}_y}^+(t) + e_{-\vec{k}_y}^-(t) \} a_{n, \vec{k}}^+(t) a_{n, \vec{k}}(t), \quad \text{A.I.24}$$

onde

$$\begin{cases} C_{\vec{k}_x}^-(t) = C_{\vec{k}_x} e^{-i\omega_{\vec{k}_x} t} \\ a_{n, \vec{k}}^+(t) = a_{n, \vec{k}} e^{-i\omega_n(\vec{k}) t} \end{cases} \quad \text{A.I.25}$$

Esses resultados são dados na representação de interação, apropriados ao formalismo usado na secção do capítulo II.

### HAMILTONIANA DE INTERAÇÃO ELETRON-FÔNON

A hamiltoniana de interação elétron-fônon é definida por

$$H_{e-f} = \sum_{\vec{q}} V_{\vec{q}} e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}} [b_{\vec{q}}^+(t) + b_{-\vec{q}}(t)] \quad \text{A.I.26}$$

onde

$$V_{\vec{q}} = i \frac{e}{q} \sqrt{\frac{2\pi \hbar \omega_{\vec{q}}}{V}} \left( \frac{1}{\epsilon_0} - \frac{1}{\epsilon_\infty} \right)^{1/2} \quad \text{A.I.27}$$

Quando tratamos os elétrons como partículas livres, tal hamiltoniana pode ser escrita em termos de segunda quantização por

$$H_{e-f} = \sum_{\substack{\vec{k}, \vec{k}', \vec{q}}} V_{\vec{q}} \langle \vec{k}' | e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}} | \vec{k} \rangle \{ b_{\vec{q}}^+(t) + b_{-\vec{q}}(t) \} a_{\vec{k}'}^+(t) a_{\vec{k}}(t)$$

onde  $| \vec{k} \rangle = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}$  e  $b_{\vec{q}}^-(t) = b_{\vec{q}} e^{-i\omega_{\vec{q}} t}$  A.I.28

No caso de termos os elétrons num campo magnético temos uma modificação a fazer desde que a função de onda é substituída pela função de onda de Landau, a qual é dada por A.I.17. Desse modo ficamos com

$$H_{e-f} = \sum_{\substack{n, \vec{k}, n', \vec{k}' \\ \vec{q}}} V_{\vec{q}} \langle n, \vec{k}' | e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}} | n, \vec{k} \rangle \{ b_{\vec{q}}^+(t) + b_{-\vec{q}}(t) \} a_{n, \vec{k}'}^+(t) a_{n, \vec{k}}(t) \quad \text{A.I.29}$$

onde o elemento de matriz  $\langle n, \vec{k}' | e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}} | n, \vec{k} \rangle$  será calculado no apêndice que se segue, no sentido de facilitar seu uso no texto deste trabalho.

APENDICE A.II

Nesse apêndice calculamos os elementos de matriz da eq. II.2.19, onde levamos em consideração quase todas as passagens intermediárias; isto é feito no sentido de facilitar a aqueles que necessitarem consultar este trabalho.

Seja  $I_1$  o elemento de matriz dado por

$$I_1 = \langle n, k | e^{\pm i\vec{q}\cdot\vec{r}} | n', k' \rangle = \int d^3r \varphi_{m,k}^*(\vec{r}) e^{\pm i\vec{q}\cdot\vec{r}} \varphi_{m',k'}(\vec{r})$$

onde  $\varphi_{m,k}(\vec{r})$ ,  $\gamma_0$  e  $C_n$  são dados no conjunto de eqs. II.2.6<sub>b</sub>. Substituindo estes resultados na eq. acima, obtemos

$$I_1 = \frac{C_n C_{n'}}{L_x L_y} \int dx e^{i(k'_x - k_x \mp q_x)x} \int dz e^{i(k'_z - k_z \mp q_z)z} \int dy e^{-\left[\frac{(y-\gamma_0)^2}{2\lambda^2} + \frac{(y-\gamma'_0)^2}{2\lambda^2}\right]} \times e^{\pm i q_y y} H_n\left(\frac{y-\gamma_0}{\lambda}\right) H_{n'}\left(\frac{y-\gamma'_0}{\lambda}\right) \quad \text{ou}$$

$$I_1 = C_n C_{n'} \delta(k'_x, k_x \mp q_x) \delta(k'_z, k_z \mp q_z) \int dy e^{-\left[\frac{(y-\gamma_0)^2}{2\lambda^2} + \frac{(y-\gamma'_0)^2}{2\lambda^2}\right]} \times e^{\pm i q_y y} H_n\left(\frac{y-\gamma_0}{\lambda}\right) H_{n'}\left(\frac{y-\gamma'_0}{\lambda}\right) \quad \text{A.II.1}$$

Definindo A como sendo o expoente da exponencial na eq. acima ou seja

$$A = -\left[\frac{(y-\gamma_0)^2}{2\lambda^2} + \frac{(y-\gamma'_0)^2}{2\lambda^2}\right] \pm i q_y y \quad \text{A.II.2}$$

e usando o fato que  $\gamma_0 = \lambda^2 k_x$  e  $\gamma'_0 = \lambda^2 k'_x$  e a conservação do momento / carregada nas funções deltas de Kronecker, obtemos para A o seguinte resultado

$$A = -\frac{\lambda^2}{4} q_y^2 \pm i \frac{\lambda^2}{2} (k'_x + k_x) q_y - \left[\frac{y - \lambda^2 k_x}{\lambda} \pm \frac{\lambda^2}{2} (q_x - i q_y)\right]^2 \quad \text{A.II.3}$$

entretanto, para isto foi necessário somar e subtrair alguns termos. Substituindo este resultado na eq. A.II.2, obtemos

$$I_1 = f_{n,n'}(k, k', q) \int dy e^{-\left[\frac{y - \lambda^2 k_x}{\lambda} \pm \frac{\lambda^2}{2} (q_x - i q_y)\right]} H_n\left[\frac{y - \lambda^2 k_x}{\lambda}\right] H_{n'}\left[\frac{y - \lambda^2 k_x}{\lambda} \pm \lambda q_x\right]$$

onde  $f_{n,n'}(k, k', q) = C_n C_{n'} \delta(k'_x, k_x \mp q_x) \delta(k'_z, k_z \mp q_z) e^{-\frac{\lambda^2}{4} q_y^2 \pm i \frac{\lambda^2}{2} (k'_x + k_x) q_y}$

Fazendo algumas mudanças de variáveis na integral acima, vamos obter

$$I_1 = \lambda f_{m,n'}(k,k',q) \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-x^2} H_m \left[ x \mp \frac{\lambda}{2} (q_x - iq_y) \right] H_{m'} \left[ x \mp \frac{\lambda}{2} (q_x - iq_y) \pm \lambda q_x \right]$$

$$I_1 = \lambda f_{m,n'}(k,k',q) \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-x^2} H_m \left[ x \mp \frac{\lambda}{2} (q_x - iq_y) \right] H_{m'} \left[ x \pm \frac{\lambda}{2} (q_x + iq_y) \right]$$

A integral na equação imediatamente acima é tabelada<sup>27</sup> e desse modo vamos obter

$$I_1 = \lambda f_{m,n'}(k,k',q) \begin{cases} 2^n \pi^{\frac{1}{2}} n! \left[ \mp \frac{\lambda}{2} (q_x - iq_y) \right]^{n-n'} L_{n-n'}^{\left( \frac{\lambda^2 q_1^2}{2} \right)} & \text{se } n' \leq n \\ 2^{n'} \pi^{\frac{1}{2}} n! \left[ \pm \frac{\lambda}{2} (q_x + iq_y) \right]^{n'-n} L_{n-n'}^{\left( \frac{\lambda^2 q_1^2}{2} \right)} & \text{se } n \leq n' \end{cases}$$

onde  $L_m^{m'}$  são as funções associadas de Laguerre.

O cálculo de  $I_3$  vem de imediato desde que a função

$$|n', k\rangle = \left[ \frac{2^n n! \sqrt{\pi} \lambda}{L_x L_z} \right]^{-\frac{1}{2}} e^{i(k_x x + k_z z)} e^{-\frac{(y-y_0)^2}{2\lambda^2}} H_{n-1} \left( \frac{y-y_0}{\lambda} \right)$$

onde o índice  $n'$  aqui é válido somente para inteiros maiores do que 1. Isto nos leva ao caso anterior com algumas modificações superficiais, desse modo fazendo com que obtenhamos o resultado / da eq. II.2.21.

Para calcular  $I_2$  tentaremos uma simplificação. As integrais em  $x$  e  $z$  são idênticas àquelas dos casos anteriores, por isso escrevemos de imediato

$$I_2 = \lambda^2 f_{m,n'}(k,k',q) \left\{ \left[ \lambda k_x \mp \frac{\lambda}{2} (q_x - iq_y) \right] \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-x^2} H_m(x \mp \alpha) H_{m'}(x \pm \beta) + \int_{-\infty}^{+\infty} dx x e^{-x^2} H_m(x \mp \alpha) H_{m'}(x \pm \beta) \right\}$$

onde  $\alpha = \frac{\lambda}{2} (q_x - iq_y)$  e  $\beta = \frac{\lambda}{2} (q_x + iq_y)$  e onde já temos realizado uma / série de mudanças de variáveis. A primeira integral na eq. acima é tabelada e seu resultado já foi usado no cálculo de  $I_1$  e  $I_3$ . A segunda integral pode ser feita por partes, entretanto devemos / notar até onde valem as relações de recorrências para as funções

de Hermite . É este fato que seleciona alguns termos do resultado final para índices determinados. O resultado obtido é aquele das / eqs. II.2.20.

## REFERÊNCIAS

1. H.Fröhlich, Advan.Phys. 3, 325 (1954).
2. S.F.Pessoa e R.Luzzi, Phys.Rev.13, 5420 (1976).
3. P.A.Wolff, Phys.Rev.Letters 16, 225 (1966).
4. Y.Yafet, Phys.Rev. 171, 436 (1968).
5. R.E.Slusher, C.K.N.Patel e P.A.Fleury, Phys.Rev.Letters 18, 77 (1967).
6. C.K.N.Patel e R.E.Slusher, Phys.Rev. 167, 413 (1968).
7. P.G.Harper, Phys.Rev.178, 1229 (1969).
8. R.Loudon, Proc.Roy.Soc. A275, 218 (1963).
9. G.M.Genkin e V.V.Zil'berberg, Sov.Phys. - Sol.State, 11, 1465 (1970).
10. C.H.Henry e J.J.Hopfield, Phys.Rev. Letter, 15, 964 (1965).
11. S.P.S.Porto, B.Fell e T.C.Damen, Phys.Rev.Letter, 16, 450 (1966).
12. J.P.Scott, L.E.Cheesman e S.P.S.Porto, Phys.Rev.162, 834 (1967).
13. N.Bloembergen, Nonlinear Optics (W.A.Benjamin, Inc. N.York, 1965).
14. R.Loudon, veja referência 8.
15. A.A.Abrikosov, L.P.Gor'kov e I.Ye Dzyaloshinskii, Quantum Field Theoretical Methods in Statistical Physics. (Pergamon Press, 1965).
16. A.L.Fetter e J.D.Walecka, Quantum Theory of Many-Particle Systems. (McGraw-Hill Book Company).
17. J.M.Ziman, Elements of Advanced Quantum Theory(Cambridge at the University Press).
18. A.Messiah, Quantum Mechanics, vol.II (North Holland Publishing Company).
19. A.S.Davidov, Quantum Mechanics, pg.420, Neo Press.
20. D.N.Zubarev, Sov.Phys. Uspekhi 3, 320 (1960).
21. P.R.Wallace, Phys. of Solid. in Int.Mag.Fields, pg.62(Plenum Press), (1969).

22. C.Hilsum, *Semiconductor e Semimetals*, 1 pg.9 - Academic Press.
23. R.N.Hall, J.H.Racette e H.Ehrenreich, *Phys.Rev.Letters* 4, 456 (1960).
24. M.Hass e B.W.Henvis, *J.Phys. Chem.Solids*, 23, 1099 (1962).
25. C.A.Ferrari, J.B.Salzberg e R.Luzzi, *Sol.State Communications*, 15, pg.1081 (1974).
26. L D.L<sup>an</sup> ~~London~~<sup>au</sup>, *Z.Physik* 64, 629 (1930).
27. I.S.Gradshteyn e I.M.Ryzhik, I.M., *Table of Integrals series and products* , Academic Press (1965).