

CARLOS EDUARDO DOS SANTOS LEAL

**PROPRIEDADES DE TRANSPORTE EM SISTEMAS SEMICONDUTORES
DE BAIXA DIMENSIONALIDADE VIA FORMALISMO DE FUNÇÃO MEMÓRIA**

Tese de **DOUTORADO**

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas

Rio de Janeiro, 1990

*À minha esposa Lídia Vitória, por seguirmos
como que encantados , numa estrada de amor
que avança no tempo e invade nossos corações.*

*Aos nossos filhos Gabriel e Izabel , como
estrelas da noite , resplandecem e alimentam
de luz os nossos momentos de vida.*

AGRADECIMENTOS

Ao Prof. Dr. Ivan C. da Cunha Lima, pela orientação segura e pela compreensão e estímulo em todas as etapas deste trabalho. Agradeço ainda o fato de ter me introduzido na área de semicondutores e pelo muito de sua experiência que me foi transmitida nesta direção. Além disso, pude compartilhar um forte sentimento de amizade que veio a se somar ao profundo respeito que tenho pela sua figura como pesquisador e com a qual tive o grande prazer de conviver nesses últimos anos.

Ao Prof. Dr. Amós Troper, pelo incentivo e pela orientação firme sempre presentes ao longo desta tese. Agradeço lhe também pelo enorme espectro de conhecimentos que recebi ao longo de minha formação acadêmica nesses últimos dez anos. Além disso, sua demonstração de carinho, estímulo e compreensão expressam um sentimento maior de amizade que guardo junto com o respeito e a admiração pela sua atividade científica e o seu lado humano.

Ao Dr. José Roberto S. Senna pelas proveitosas discussões que tivemos durante este trabalho, em particular ao que se refere o penúltimo capítulo desta tese.

Ao Dr. S. Das Sarma da Universidade de Maryland, e ao Prof. Dr. G. D. Mahan da Universidade do Tennessee, pelas sugestões e comentários significativos.

Aos amigos Professores Maurício R. Baldan e Erasmo A. de Andrada e Silva, que me honraram como colaboradores nesta linha de trabalho.

Aos inúmeros amigos que fiz no INPE, em particular no LAS e aos outros tantos que mantive no CBPF, durante esses últimos anos.

Aos amigos Paulo Henrique O. Rappl e Carlos Alexandre Wucnsche de Souza pelo incentivo ao longo desses anos de tese, consolidando cada vez mais essa amizade que nos une.

À toda a turma de operadores do computador, em especial ao meu amigo Antônio Pereira de A. L. Neto, pelas inúmeras noites e finais de semanas que estivemos juntos executando os programas ao longo desses últimos anos.

À Marilda P. Godoi de Moraes, pelo carinho e atenção a mim dispensados em várias oportunidades.

À Nancy Ayumi Kunihiro, pela sua presença amiga e pela grande ajuda na arte final da elaboração datilográfica desta tese.

À Maria Dalva Scatolini, Elizabeth Fátima H. T. Machado e Gabi Gama, em tempos diferentes à frente da secretaria do LAS, pelas respectivas ajudas em diversas ocasiões.

À Myriam Simões Coutinho, pelo carinho e dedicação com que cuidou dos meus interesses junto à comissão de Pós - Graduação do CBPF.

À Maria da Conceição F. Silveira, pelo trabalho na elaboração de uma parte das figuras contidas nesta tese.

Aos amigos Dr. Armando D. Tavares Jr., Prof. Carlos Augusto de Azevedo, Prof. José Soares e em especial ao Prof. José Carlos Xavier da Silva, da Universidade do Estado do Rio de Janeiro, pelas facilidades a mim proporcionadas, para a realização deste trabalho em tempo hábil.

Ao Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas - CBPF, por ter me proporcionado a oportunidade de desenvolver este trabalho de doutorado, como membro de seu corpo docente.

Ao Instituto de Pesquisas Espaciais - INPE, onde esse trabalho foi realizado e por ter me recebido em sua família de pesquisadores.

Ao International Centre for Theoretical Physics - ICTP, Trieste, que me recebeu como participante nas conferências: " School of Polimers Physics " e " Research Workshop in Condensed Matter, Atomic and Molecular Physics ", tendo sido ambas de grande valia no desenvolvimento

dessa tese.

À toda e minha grande família de parentes e amigos, em especial aos meus pais e sogros, pelo apoio e estímulo em todos os momentos.

À Lídia Vitória , Gabriel e Isabel , pelo apoio que me tem sido dado durante esses longos anos, pelo companherismo nos momentos difíceis e para os quais o meu amor é maior do que todas as palavras de agradecimentos que eu pudesse dizer.

Enfim, todos aqueles que de alguma maneira contribuíram para o sucesso deste trabalho.

ABSTRACT

In this work the projector - operator memory function formalism is used in order to study the transport properties in semiconductor heterostructures which exhibits conductor channels with effective dimension lower than the usual tri-dimensional case. It is treated, with especial emphasis, in the case of the contribution to the transport relaxation time of the electron gas, due to scattering by phonons, as a function of the temperature. At first time, a systematic study of the influence of the effective dimension of the phonon system acting on the electron gas is performed. This dimensional effect is also studied on the transport under the action of a strong magnetic field, especially the cyclotron resonance and the magnetophonon conductivity absorption spectrum. Finally, it is obtained the renormalization of the relaxation time due to phonons at the presence of a magnetic field, by impurities scattering. It is performed through vertex corrections on the force - force correlation function giving rise a diffusive pole in the electron gas polarization function. Thus, the study on the transport properties of low dimension electron gas systems is completed, regarding the contribution of the scattering by phonons at the weak localization regime.

RESUMO

Neste trabalho é utilizado o formalismo de Função Memória - Operador de Projeção para o estudo das propriedades de transporte em heteroestruturas semicondutoras que apresentem canais condutores com dimensão efetiva inferior ao caso usual tridimensional. É tratada, com ênfase especial, a contribuição do espalhamento por fônons no tempo de relaxação de transporte do gás de elétrons em função da temperatura do banho térmico. Pela primeira vez é feito um estudo sistemático da influência da dimensionalidade efetiva do sistema de fônons agindo sobre o gás de elétrons. É também estudado o efeito desta dimensionalidade no transporte sob ação de campo magnético forte, em especial na ressonância ciclotrônica e no espectro de absorção da magnetocondutividade. Finalmente, é obtido o resultado da renormalização do tempo de relaxação devido a fônons na presença de campo magnético forte por espalhamento via impurezas. Isto é feito através de correções de vértice na função de correlação força-força que dão origem a um polo difusivo na função de polarização do gás de elétrons. Assim, completa-se o estudo de transporte do gás de elétrons de baixa dimensionalidade com a contribuição do espalhamento por fônons no regime de localização fraca.

SUMÁRIO

	<u>PÁG.</u>
AGRADECIMENTOS	iii
RESUMO	v
LISTA DE FIGURAS	ix
LISTA DE TABELAS	x
INTRODUÇÃO	1
CAPÍTULO 1 - FORMALISMO DE FUNÇÃO MEMÓRIA	5
1.1 - Função de Correlação e Fórmula de Kubo	6
1.2 - Função Memória e Técnica de Operador de Projeção	9
1.3 - Interação Elétron-Fônon	12
1.4 - Formalismo de Temperatura Finita : Representação de Matsubara	13
CAPÍTULO 2 - INTERAÇÃO ELÉTRON-FÔNON :	
PROPRIEDADES DE TRANSPORTE	21
2.1 - Interação Elétron-Fônon em Sistemas Tridimensionais	23
2.2 - Interação Elétron-Fônon em Sistemas Bidimensionais	32
2.3 - Interação Elétron-Fônon em Sistemas Bidimensionais	39

CAPÍTULO 3 - RESSONÂNCIA CICLOTRÔNICA	
EM SISTEMAS BIDIMENSIONAIS	49
3.1 - Hamiltoniana e Formalismo de FM na Presença de Campo Magnético	51
3.2 - Cálculo da Função de Correlação Força-Força	55
3.3 - Magnetocondutividade : Absorção e Emissão de Fônons LA	59
3.4 - Resultados Numéricos	66
CAPÍTULO 4 - EFEITO DE DIFUSÃO EM SISTEMAS	
BIDIMENSIONAIS NUM CAMPO MAGNÉTICO	80
4.1 - Interação Elétron - Fônon LO	82
4.2 - Função de Polarização : Efeito de Difusão	87
4.3 - Cálculo do Tempo de Relaxação Γ'_{fon}	96
CAPÍTULO 5 - COMENTÁRIOS FINAIS	100
APÊNDICE A.1	
Teorema de Flutuação - Dissipação	102
APÊNDICE A.2	
Relação entre $C_{\nu\mu}(Z)$, $\chi_{\nu\mu}(Z)$ e $\chi_{\nu\mu}(o)$	105
APÊNDICE A.3	
Equação da Função Memória	107

APÊNDICE A.4	
	Relação entre $\langle \hat{\pi}_\nu \pi_\mu \rangle$ e $\langle [\pi_\nu, \pi_\mu] \rangle_{eq}$ 110
APÊNDICE A.5	
	Frequências de Fermi e de Bose 111
APÊNDICE A.6	
	Soma de Frequências de Matsubara 112
APÊNDICE A.7	
	Aproximação de Lindhard (RPA) 115
APÊNDICE A.8	
	Cálculo da Constante Dielétrica em 2DEG 118
APÊNDICE A.9	
	Cálculo da Constante Dielétrica em 1DEG 122
APÊNDICE A.10	
	Cálculo de $I(\beta)$ 124
APÊNDICE A.11	
	2 DEG num Campo Magnético 125
APÊNDICE A.12	
	Cálculo de $ J_{nn^1}(q) ^2$ 127
APÊNDICE A.13	
	Cálculo de $\chi_0^{RA}(\vec{q}, E_F + p_m, E_F)$ 129
BIBLIOGRAFIA 133

LISTA DE FIGURAS

Fig. 2.1a	25
Fig. 2.1b	25
Fig. 2.2	44
Fig. 2.3	47
Fig. 3.1	67
Fig. 3.2	68
Fig. 3.3	69
Fig. 3.4	70
Fig. 3.5	71
Fig. 3.6	72
Fig. 3.7	73
Fig. 3.8	74
Fig. 3.9	75
Fig. 3.10	76
Fig. 3.11	77
Fig. 3.12	78
Fig. 4.1	85
Fig. 4.2	91
Fig. 4.3	91
Fig. 4.4	96

LISTA DE TABELAS

Tabela 1	7
--------------------	---

INTRODUÇÃO

O desenvolvimento da Física de materiais semicondutores de baixa dimensionalidade, i.e., sistemas caracterizados por um gás de elétrons de dimensão efetiva dois, um ou zero, por exemplo, Poços Quânticos, Fios Quânticos e Pontos Quânticos, tem sido alvo de grande interesse nas últimas duas décadas. Desde a fabricação dos primeiros dispositivos de junção p-n de Si e Ge até as mais elaboradas heterojunções envolvendo diferentes materiais semicondutores, por exemplo, GaAlAs/GaAs, tem havido uma grande demanda desses materiais para aplicações de uso tecnológico, tal como na fabricação de dispositivos sensores de temperatura e de pressão. Grande parte do avanço desta área tornou-se possível devido ao desenvolvimento de técnicas refinadas de crescimento de cristais de alta qualidade com relação à pureza e composição. Dentre estas técnicas podemos citar a epitaxia por feixe molecular (MBE) (1, 2) e a deposição de vapor líquido organometálico (MOCVD) (3).

Do ponto de vista teórico, a Física do Estado Sólido tem se desenvolvido bastante através da utilização da teoria de Muitos-Corpos na solução de inúmeros problemas. O sucesso na descrição de vários fenômenos, tais como a supercondutividade e a superfluidade, entre outros, permite-nos estender a utilização das técnicas da teoria de Muitos-Corpos de forma quantitativa e com grande precisão para descrever as propriedades de transporte em sistemas semicondutores de baixa dimensionalidade. Nesse sentido, utilizaremos nesse trabalho de tese uma técnica alternativa da teoria de Muitos-Corpos chamada Função Memória, ao invés de usarmos a tradicional equação de transporte de Boltzmann (4,5). O formalismo da Função Memória (FM) teve, no passado,

sua aplicação voltada para processos hidrodinâmicos (6), sendo introduzida no formalismo de operador de projeção por Zwanzig (7) e Mori (8). Nos dias de hoje sua aplicação tem sido amplamente estendida à Física do Estado Sólido, e particularmente às propriedades quânticas de transporte de elétrons em sistemas que apresentam quebra de simetrias, por exemplo, sistemas sob a ação de campo magnético externo muito forte, onde a utilização da equação de Boltzmann não se aplica. Além disso, a Função Memória, representando o papel de uma "self-energy" em um propagador de muitas partículas, apresenta um comportamento bastante regular em função da frequência e do vetor de onda, em contraste com algumas possíveis violações na equação de Boltzmann num intervalo completo de frequências.

Neste trabalho, estamos interessados no estudo das propriedades estáticas e dinâmicas de transporte eletrônico em sistemas caracterizados por um gás de elétrons de dimensão n , ($n=1,2$), interagindo com fônons longitudinais acústicos e/ou ópticos de dimensão n , isto é, avaliamos o efeito de dimensionalidade na interação elétron-fônon. Tratamos a interação elétron-fônon dentro do formalismo de FM e de operador de projeção em termos da função de correlação força-força, na aproximação de ordem zero, ou seja, tratando o propagador de fônons e a função de correlação densidade-densidade de elétrons como um sistema de fônons livres e gás de elétrons não-interagentes, respectivamente. Além disso, como os resultados experimentais são sempre realizados à temperatura finita realizamos nossos cálculos fazendo uso do formalismo de temperatura finita de Matsubara. A técnica de Matsubara associada à funções de Green retardadas, ou seja, ligada diretamente as grandezas físicas mensuráveis, é um método direto de se calcular as quantidades que podem ser comparadas com os experimentos. Desta maneira, podemos descrever, em nossos cálculos, a dependência com a temperatura de várias grandezas do sistema, por exemplo, condutividade "d.c.", mobilidade eletrônica, magnetocondutividade, ressonância ciclotrônica, massa do polaron etc., e compará-las sempre que possível com os resultados experimentais disponíveis.

Esta tese apresenta em seu Capítulo 1, uma descrição geral a respeito do formalismo de Função Memória e de sua relação com as propriedades de transporte, estáticas e dinâmicas, obtidas a partir da expressão de Kubo para o tensor condutividade e da evolução temporal

da função de correlação corrente-corrente. A introdução da técnica de operador de projeção permite-nos descrever a FM em termos da função de correlação retardada força-força e do potencial de interação elétron-fônon no formalismo de temperatura finita de Matsubara. Neste mesmo capítulo, obtemos ainda o tempo de relaxação do gás de elétrons, via FM, em termos da constante dielétrica e comparamos com o resultado da equação de Boltzmann. No Capítulo 2, aplicamos o formalismo da FM à vários sistemas eletrônicos, por exemplo, metais, poços quânticos, fios quânticos e condutores orgânicos quase-unidimensionais, a fim de discutir a dependência com a temperatura das propriedades de transporte nesses sistemas e comparamos com os resultados de modelos anteriores e com os dados experimentais existentes na literatura. Além disso, investigamos o efeito da dimensionalidade da interação elétron-fônon e suas implicações nos processos de condução eletrônica.

O Capítulo 3 é dedicado ao estudo da ressonância ciclotrônica em um gás de elétrons bidimensionais sob a ação de um forte campo magnético externo, interagindo com fônons superficiais acústicos. Verificamos uma peculiar estrutura da FM, em função da frequência, associada as possíveis transições entre os diferentes níveis de Landau. Discutimos o comportamento da magnetocondutividade em função da temperatura e do campo magnético e sugerimos ainda, uma explicação para o aparecimento dos múltiplos picos ressonantes, verificados experimentalmente, no espectro de absorção/emissão magnetocondutividade devido a fônons.

No Capítulo 4, discutimos o espectro magneto-óptico de absorção de um gás de elétrons bidimensional interagindo com fônons superficiais ópticos, usando o método de Função Memória. Efetuamos uma renormalização no propagador de elétrons, em termos de simples correções de vértices devido a espalhamento por impurezas, o que dá origem a um comportamento difusivo na função resposta densidade-densidade de elétrons, i.e., na Função de Polarização. Verificamos que a existência de um efeito de difusão numa interação elétron-fônon LO sob a ação de um campo magnético forte, é responsável por remover divergências na Função Memória, que não são verificadas experimentalmente, e por um alargamento no espectro de absorção magneto-óptico, verificado em termos do tempo de relaxação do sistema.

Finalmente, no Capítulo 5 fazemos um comentário geral dos pontos básicos discutidos nesta

tese e um breve resumo dos principais resultados obtidos e respectivas conclusões. Além disso, fazemos uma breve discussão a respeito da viabilidade de se aplicar o formalismo de Função Memória de modo a se obter outras propriedades que não sejam as de transporte, por exemplo, no cálculo da energia resonante 4-f em terras raras leves, ou a sistemas mais complexos onde aproximações de ordens superiores na Função Memória se façam necessárias e ainda uma breve discussão a respeito da interação elétron-fônon em sistemas com confinamento de fônons.

CAPÍTULO 1

Neste capítulo apresentamos uma técnica alternativa da teoria de Muitos-Corpos, a fim de calcular a evolução temporal das funções de correlação, chamada de Função Memória, (FM), e que descreve o quanto os valores passados de uma propriedade dinâmica, $A(t)$, influenciam sua variação temporal no presente. O cálculo das propriedades de transporte é descrito no formalismo da FM a partir da expressão da equação de Kubo em termos da função de correlação corrente-corrente. No que concerne o método, a FM apresenta algumas vantagens em relação a outras técnicas existentes na literatura, tais como, equação de transporte de Boltzmann (4, 5) e expansões diagramáticas (9), por funcionar nos casos onde tanto uma quanto a outra apresentam sérias dificuldades nos cálculos, como por exemplo, em sistemas de spin. Particularmente, no formalismo da FM nenhum esforço extra se faz necessário de modo a se obter os coeficientes de transporte para todo o regime de frequência, desde que a FM é em geral uma função bem comportada da frequência e do vetor de onda. Conseqüentemente o uso do formalismo da FM se mostra de especial importância a determinados sistemas onde possíveis violações na equação de Boltzmann são esperadas, por exemplo, condutividades não-Drudeanas, ou onde somatórios de séries divergentes devão ser efetuados quando do uso de expansões diagramáticas. Além disso, simples aproximações na Função Memória geram resultados bastante compatíveis com os dados experimentais, além de permitir sua extensão de modo a descrever situações mais complexas (10), o que torna o método um instrumento matemático muito útil e eficiente na descrição de problemas de Muitos-Corpos. Grande parte desses aspectos foram discutidos, por exemplo, por

Gotze and Wolfle (11,12), os quais demonstraram, em particular, que no caso da condutividade num modelo jellium, a mais simples aproximação na FM reproduz, no limite estático, a solução variacional de ordem- zero da equação de Boltzmann.

1.1 - Função de Correlação e Fórmula de Kubo

A evolução temporal das funções de correlação são de grande importância na compreensão de como os sistemas físicos respondem a excitações externas numa aproximação linear. i.e., teoria da resposta linear. De outra forma, isto significa que as funções de correlação constituem uma maneira concisa de expressar a dinâmica das propriedades do sistema e de suas flutuações espontâneas em torno do equilíbrio durante um intervalo de tempo. Definimos a auto-função de correlação, $C_{AA}(t)$, para a propriedade dinâmica A, como sendo

$$C_{AA}(t) = \langle A(t) | A(0) \rangle, \quad (1.1.1)$$

onde o produto escalar entre duas grandezas é definido como :

$$\langle A | B \rangle = \beta^{-1} \int_0^\beta d\lambda \langle A^\dagger B(i\lambda) \rangle, \quad \beta = (k_B T)^{-1}, \quad (1.1.2)$$

onde T representa a temperatura e k_B é a constante de Boltzmann.

A resposta de um sistema a uma específica perturbação externa está diretamente relacionada a uma função de correlação ; conseqüentemente vários experimentos têm sido realizados de modo a determinar específicas funções de correlação. Apresentamos, na tabela 1, alguns exemplos de experimentos e suas respectivas funções de correlação, maiores detalhes ver refs. (13, 14). Nesse trabalho, estamos interessados na determinação das propriedades eletrônicas de transporte, estáticas e dinâmicas, em termos de um "kernel", (caroço), de relaxação, i.e., Função Memória, $M(w)$. Introduzimos inicialmente a expressão de Kubo (15) para o tensor condutividade,

$$\sigma_{\nu\mu}(w) = \delta_{\nu\mu} \frac{in_e e^2}{wm_e} + \frac{i}{w} \int_{-\infty}^{\infty} dt Q_{\nu\mu}(t) e^{iwt}, \quad (1.1.3)$$

onde m_e é a massa efetiva do elétron, n_e é o número (densidade) de portadores de carga $-e$ e $Q_{\nu\mu}(t)$ é a função de Green retardada associada a função de correlação densidade de corrente, $J(t)$, definida por :

$$Q_{\nu\mu}(t) = -i \Theta(t) \langle [J_\nu(t), J_\mu] \rangle, \quad (1.1.4)$$

na equação acima $\Theta(t)$ representa a função degrau de Heaviside, isto é, $\Theta(t) = 1$ se $t > 0$ e $\Theta(t) = 0$ se $t < 0$, enquanto ν, μ se referem as coordenadas cartesianas.

Experimento	Quantidade Dinâmica	Função de Correlação
Coefficiente de Difusão	V ; velocidade do C.M. da molécula alvo.	$\langle V(t) V(0) \rangle$
Absorção Infravermelha	u ; vetor unitário na direção do dipolo molecular.	$\langle u(t) u(0) \rangle$
Tempo de Relaxação de Rotação de Spin	J ; momento angular em torno do C.M. molecular.	$\langle J(t) J(0) \rangle$
NMR	M_ν ; componente- ν da magnetização do sistema.	$\langle M_\nu(t) M_\nu(0) \rangle$

Tabela 1 - Relação entre a quantidade dinâmica obtida via experimento e a respectiva função de correlação

Introduzindo a função espectral $\chi''_{\nu\mu}(t)$ em termos da função de correlação densidade-densidade de corrente

$$\chi''_{\nu\mu}(t) = \frac{m_e^2}{2e^2} \langle [J_\nu(t), J_\mu(0)] \rangle_{eq}, \quad (1.1.5)$$

tal que,

$$Q_{\nu\mu} = -2i \frac{e^2}{m_e^2} \Theta(t) \chi''_{\nu\mu}(t), \quad (1.1.6)$$

onde $\langle \dots \rangle_{eq}$ representa uma média no equilíbrio termodinâmico.

A função espectral $\chi''(w)$ é dada pela descontinuidade através do eixo real,

$$\chi(w \pm i0^+) = \chi'(w) \pm i\chi''(w), \quad (1.1.7)$$

onde $\chi'(w)$ e $\chi''(w)$ representam, respectivamente, a parte real e a parte imaginária da função espectral. Definindo a transformada de Laplace de $\chi_{\nu\mu}(t)$ como

$$\chi(z) = 2i \int_0^\infty dt \chi''(t), \quad \text{Im } z > 0, \quad (1.1.8)$$

e substituindo na eq.(1.1.3), obtemos para a condutividade

$$\sigma_{\nu\mu}(z) = \frac{in_e e^2}{zm_e} \delta_{\nu\mu} - \frac{ie^2}{zm_e^2} \chi_{\nu\mu}(z), \quad (z = w + i0^+), \quad (1.1.9)$$

Em seguida definimos a função de correlação momento-momento,

$$C_{\nu\mu}(t) = \langle \pi_\nu(t) | \pi_\mu(0) \rangle, \quad \pi_\nu = -\frac{m_e}{e} J_\nu, \quad (1.1.10)$$

tal que, fazendo uso da definição do produto escalar, eq.(1.1.2), e do teorema flutuação-dissipação (vide Apêndice A.1) obtemos uma relação entre a transformada de Laplace $C_{\nu\mu}(z)$ e a função espectral $\chi_{\nu\mu}(z)$ dada por

$$C_{\nu\mu}(z) = (i\pi\beta)^{-1} \int_{-\infty}^\infty dw \frac{\chi_{\nu\mu}(w)}{w(w-z)}, \quad (1.1.11)$$

e desde que, (vide Apêndice A.2),

$$\chi_{\nu\mu}(z) = \int_{-\infty}^\infty \frac{dw}{\pi} \frac{\chi''_{\nu\mu}(w)}{(w-z)}, \quad (1.1.12)$$

podemos escrever,

$$C_{\nu\mu}(z) = -i \frac{\beta^{-1}}{z} [\chi_{\nu\mu}(z) - \chi_{\nu\mu}(0)], \quad (1.1.13)$$

ou ainda,

$$\chi_{\nu\mu}(z) = i\beta z C_{\nu\mu}(z) + \chi_{\nu\mu}(0), \quad (1.1.14)$$

onde $\chi(0)$ representa o limite estático de $\chi(z)$. Aplicando a equação acima na expressão da condutividade, eq.(1.1.9), e assumindo a condição de contorno de que o sistema é um condutor

normal, isto é, a condutividade permanece finita conforme $z \rightarrow 0$, obtemos

$$\chi_{\nu\mu} \equiv \chi_{\nu\mu}(0) = n_e m_e \delta_{\nu\mu}, \quad (1.1.15)$$

e finalmente, podemos escrever a condutividade ou a resistividade, $\rho = \sigma^{-1}$, em termos da função de correlação momento-momento

$$\sigma_{\nu\mu}(z) = \frac{e^2 \beta}{m_e^2} C_{\nu\mu}(z), \quad (1.1.16)$$

No que se segue, a função de correlação na eq.(1.1.16) é obtida em termos da FM operador de projeção.

1.2 - Função Memória e Técnica de Operador de Projeção

A função de correlação está diretamente relacionada a Função Memória através da seguinte equação matricial (6),(vide Apêndice A.3)

$$\tilde{C}(z) = i\beta^{-1}[z\tilde{I} - \tilde{\Omega} + \tilde{M}(z)]^{-1}\tilde{\chi}, \quad (1.2.1)$$

Na expressão acima, o símbolo til significa uma matriz, com $\tilde{\Omega}$ representando a matriz de frequências ressonantes, tal que, para os casos onde há simetria de inversão temporal, tem-se $\tilde{\Omega} = 0$. Usamos $\tilde{M}(z)$ de modo a representar a chamada Função Memória, que obedece as seguintes relações de simetria :

$$M_{\nu\mu}^\dagger(z) = M_{\nu\mu}(z^*), \quad (1.2.2)$$

e

$$M_{\nu\mu}(z) = -M_{\nu\mu}(-z), \quad (1.2.3)$$

Além disso, a matriz FM também pode ser representada por uma integral espectral do tipo da eq.(1.1.8), uma vez que

$$\tilde{M}(w + i0^+) = \tilde{M}'(w) + i\tilde{M}''(w), \quad (1.2.4)$$

$\tilde{M}'(w)$ e $\tilde{M}''(w)$ sendo respectivamente a parte real e a parte imaginária da FM, e que apresentam as seguintes propriedades,

$$\tilde{M}'(w) = -\tilde{M}'(-w), \quad (1.2.5.a)$$

$$\tilde{M}''(w) = \tilde{M}''(-w), \quad (1.2.5.b)$$

Introduzimos o operador de projeção \mathbf{P} em termos da variável momento, $\pi_\nu(t)$, (vide Apêndice A.3) :

$$\mathbf{P} = \sum_{\nu\mu} |\pi_\nu \rangle \beta \chi_{\nu\mu}^{-1} \langle \pi_\mu|, \quad (1.2.6)$$

A partir dos resultados obtidos nos Apêndices A.3 e A.4, podemos escrever os elementos de matriz de $\tilde{\Omega}$ e $\tilde{M}(z)$ da seguinte forma

$$\Omega_{\nu\mu} = i\beta \langle \dot{\pi}_\nu | \pi_\mu \rangle \chi_{\nu\mu} = \langle [\pi_\nu, \pi_\mu] \rangle_{eq} \chi_{\nu\mu}, \quad (1.2.7)$$

$$M_{\nu\mu}(z) = i\beta \langle \dot{\pi}_\nu | \mathbf{Q} \frac{i}{z - \mathbf{QLQ}} \mathbf{Q} | \dot{\pi}_\mu \rangle, \quad (1.2.8)$$

Na expressão acima \mathbf{L} é o operador Liouvilleano, $\mathbf{L}A = [H, A]$ e \mathbf{Q} é definido como sendo $\mathbf{Q} = \mathbf{1} - \mathbf{P}$. Nota-se, como veremos nos capítulos que se seguem, que sistemas onde verificam-se ausências de interações dependentes de spin ou de campo magnético, $\tilde{\Omega}$ é nulo, caracterizando uma assinatura da simetria de inversão temporal do sistema. Além do mais, $\tilde{\Omega}$ representa o valor da "self-energy" no limite de frequência infinita, isto é, $z \rightarrow \infty$, desde que $\tilde{M}(z) \rightarrow 0$ nesse limite. Nesse sentido, $\tilde{\Omega}$ corresponde a parte Hartree-Fock da "self-energy" na teoria de função de Green (6).

Expandindo o operador $(z - \mathbf{QLQ})^{-1}$ na eq.(1.2.8), obtemos

$$\begin{aligned} \frac{1}{z - \mathbf{QLQ}} | \dot{\pi}_\mu \rangle &= \frac{1}{z} \left[1 + \frac{1}{z} \mathbf{QLQ} + \frac{1}{z^2} \mathbf{QLQ}^2 \mathbf{LQ} + \dots \right] | \dot{\pi}_\mu \rangle \\ &\cong \frac{1}{z - \mathbf{QL}} | \dot{\pi}_\mu \rangle, \end{aligned} \quad (1.2.9)$$

onde $\dot{\pi}_\mu$ é a componente μ da força generalizada agindo sobre o gás de elétrons e usamos o fato de que $\mathbf{Q}^2 = \mathbf{Q}$ e $\mathbf{Q}|\dot{\pi}_\mu\rangle = |\dot{\pi}_\mu\rangle$, (vide Apêndice A.4). Introduzindo o resultado da eq.(1.2.9) na expressão da FM, obtemos a seguinte equação integral

$$M_{\nu\mu}(z) = \frac{i\beta}{n_e m_e} \int_0^\infty dt e^{izt} \langle \dot{\pi}_\nu | e^{-it\mathbf{QL}} | \dot{\pi}_\mu \rangle, \quad (1.2.10)$$

A eq.(1.2.10) é válida para qualquer processo de espalhamento para os elétrons, e.g., interação elétron-fônon, espalhamento por impurezas, sendo que no caso de potencial dependente de spin algumas alterações se façam necessárias. Por outro lado, a presença do operador $e^{-it\mathbf{QL}}$ torna impossível calcular-se $M_{\nu\mu}$ exatamente. Dentro das várias possibilidades que existem, a aproximação mais simples e usual e a qual trataremos ao longo deste trabalho, consiste na suposição que a dinâmica da força generalizada é governada pelo Liouvilleano completo:

$$\langle \dot{\pi}_\nu | e^{-it\mathbf{QL}} \approx \langle \dot{\pi}_\nu | e^{-it\mathbf{L}} = \langle \dot{\pi}_\nu(t) |, \quad (1.2.11)$$

o que significa que fazendo uso da expansão

$$e^{-it\mathbf{QL}} = e^{-it(\mathbf{L}-\mathbf{PL})} \cong e^{-it\mathbf{L}} - i \int_0^t dt' e^{-it'\mathbf{L}} \mathbf{PL} e^{-i(t-t')\mathbf{L}} + \dots, \quad (1.2.12)$$

vemos que tal aproximação consiste em desprezar o termo integral na equação acima, ou seja, desprezar os termos em $\langle \dot{\pi}_\nu(t) | \mathbf{P}$. Desse modo, obtemos uma expressão da FM dada por

$$M_{\nu\mu}^{(0)}(z) = \frac{i\beta}{n_e m_e} \int_0^\infty dt e^{izt} \langle \dot{\pi}_\nu(t) | \dot{\pi}_\mu \rangle, \quad (1.2.13)$$

Definindo a função de correlação (retardada) força-força como sendo,

$$\Pi_{\nu\mu}^R(\omega) = -i \int_{-\infty}^\infty \Theta(t) \langle [\dot{\pi}_\nu(t), \dot{\pi}_\mu(0)] \rangle e^{i\omega t} dt, \quad (1.2.14)$$

podemos escrever, de maneira análoga aos resultados obtidos anteriormente via eqs.(1.1.4), (1.1.5) e (1.1.13), uma expressão para a Função Memória, numa aproximação de ordem zero, em termos da função de correlação (retardada) força-força :

$$M_{\nu\mu}^{(0)}(w) = -\frac{1}{n_e m_e w} [\Pi_{\nu\mu}^R(w) - \Pi_{\nu\mu}^R(0)], \quad (1.2.15)$$

As eqs.(1.1.16), (1.2.1), (1.2.14) e (1.2.15) se constituem nas ferramentas fundamentais para o cálculo das propriedades de transporte no formalismo de Função Memória, independente do tipo de espalhamento sofrido pelo gás de elétrons. Na seção que se segue, discutimos o caso específico de espalhamento por fônons.

1.3 - Interação elétron - fônon

A interação elétron- fônon é um dos importantes tópicos na teoria de Muitos-Corpos. Em particular, os elétrons nos materiais metálicos, isto é, aqueles elétrons próximos à superfície de Fermi , têm seus movimentos fortemente influenciados por fônons. Nesse sentido, muitos experimentos de propriedades de transporte que envolvem esses elétrons, são diretamente afetados por espalhamentos por fônons, sejam estes de natureza acústicos ou ópticos. Desde o trabalho de Holstein, (16), com base na teoria da resposta linear, sabe-se que um metal puro ideal à temperatura zero, exhibe o desaparecimento da resistividade elétrica no limite estático, enquanto que valores finitos da resistividade são obtidos para freqüências finitas, como consequência direta da interação elétron-fônon. Contudo, na presença de um campo elétrico finito esta contribuição dos fônons para a resistividade não desaparece mesmo para $T = 0$ (17). Neste sentido, esperamos que o método de Função Memória, dependente da freqüência, seja um poderoso instrumento matemático para descrever sistemas sob interação elétron-fônon.

Introduzimos a hamiltoniana, em segunda quantização, que descreve um sistema formado por elétrons interagindo com fônons, escrito em relação ao centro de massa (CM) e das coordenadas relativas (17),

$$H = \sum_{\vec{k}} E_{\vec{k}} c_{\vec{k}}^{\dagger} c_{\vec{k}} + \sum_{\vec{q}} \hbar w_q a_{\vec{q}}^{\dagger} a_{\vec{q}} + H_r + \sum_{\vec{k}, \vec{q}} D(\vec{q}) c_{\vec{k}+\vec{q}}^{\dagger} c_{\vec{k}} A_{\vec{q}} e^{i\vec{q} \cdot \vec{R}}, \quad (1.3.1)$$

onde $c_{\vec{k}}^\dagger(a_{\vec{q}}^\dagger)$, $c_{\vec{k}}(a_{\vec{q}})$ são, respectivamente, os operadores de criação e de destruição de elétrons (fônons) com momento $\vec{k}(\vec{q})$. H_τ é o termo devido a interação elétron-elétron e que contém apenas coordenadas relativas. O último termo da eq.(1.3.1), $U(\vec{q})$, representa o potencial de interação elétron-fônon, sendo: $D(\vec{q})$ o acoplamento elétron-fônon, w_q a frequência dos fônons, $A_{\vec{q}} = (a_{\vec{q}} + a_{-\vec{q}}^\dagger)$ é o operador de fônons, enquanto, \vec{R} representa a posição do CM.

A componente- ν da força generalizada, devido ao espalhamento elétron-fônon, agindo sobre o CM pode ser escrita como sendo:

$$U_\nu = -\frac{\partial}{\partial R_\nu} U(\vec{q}) = -i \sum_{\vec{q}} q_\nu D(\vec{q}) \rho(\vec{q}) A_{\vec{q}} e^{i\vec{q} \cdot \vec{R}}, \quad (1.3.2)$$

onde $\rho(\vec{q})$ é a transformada de Fourier do operador densidade de elétrons,

$$\rho(\vec{q}) = \sum_{\vec{k}} c_{\vec{k}+\vec{q}}^\dagger c_{\vec{k}}, \quad (1.3.3)$$

e R_ν representa as coordenadas cartesianas (x,y,z) do CM.

Desta forma, temos que a expressão da função de correlação (retardada) força-força passa a ser definida em termos do potencial de interação elétron-fônon, via eq.(1.3.2),

$$\Pi_{\nu\mu}^R(w) = -i \int_0^\infty \Theta(t) \langle [U_\nu(t), U_\mu(0)] \rangle e^{i\omega t} dt, \quad (1.3.4)$$

Nosso presente objetivo é o de calcular a FM "self-energy" em termos da função de correlação retardada $\Pi_{\nu\mu}^R(w)$, fazendo uso da eq.(1.2.15), para um gás de elétrons espalhados por fônons. Nesse sentido, é conveniente introduzirmos o formalismo de temperatura finita para tratarmos o efeito de temperatura nas propriedades de transporte desses sistemas.

1.4 - Formalismo de temperatura finita: representação de Matsubara

O formalismo de temperatura finita, originariamente introduzido por Matsubara (18), revela-se um método bastante simples e de grande utilidade no cálculo de propriedades de trans-

porte, pelo fato de ser um maneira direta de se calcular quantidades físicas que podem ser comparadas com os experimentos. As funções de Green definidas no formalismo de temperatura finita de Matsubara são praticamente idênticas, na forma, à aquelas discutidas para $T = 0$, exceto, pela introdução do conceito de tempos e frequências complexas. As funções de Matsubara, ou seja, as funções de frequências complexas iw_n , são facilmente transformadas em funções de correlação retardadas, através de um procedimento conhecido por continuação analítica, que representa a substituição de iw_n por $w + i\delta$, onde δ é uma grandeza infinitesimal. Este simples procedimento permite descrever nossos cálculos em termos de funções retardadas, as quais representam quantidades físicas mensuráveis.

No formalismo de Matsubara o tempo se torna uma quantidade complexa que é usualmente denotado por τ , ($\tau = it$), tal que as funções de Green sejam funções de τ no domínio: $-\beta \leq \tau \leq \beta$. Definimos, a função de Green de um elétron no formalismo de Matsubara, como sendo

$$G(\vec{p}, \tau - \tau') = - \langle T_\tau c_{\vec{p}}(\tau) c_{\vec{p}}^\dagger(\tau') \rangle, \quad (1.4.1)$$

onde o fator T_τ é um operador de ordenamento temporal τ , que rearranja os operadores com tempos τ , em ordem decrescente, da esquerda para a direita e $c_{\vec{p}}^\dagger$ e $c_{\vec{p}}$ são respectivamente, os operadores de criação e de destruição de elétrons com mento \vec{p} .

Desde que a função de Green seja função apenas da diferença $\tau - \tau'$, não há necessidade de mantermos duas variáveis de tempo, conseqüentemente, podemos eliminar uma das variáveis tempo, sem perda de generalidade, e redefinir a função de Green de um elétron no intervalo de $-\beta \leq \tau \leq 0$, como:

$$G(\vec{p}, \tau) = - \langle T_\tau c_{\vec{p}}(\tau) c_{\vec{p}}^\dagger(0) \rangle, \quad (1.4.2)$$

além disso, de uma forma em geral, as funções de Matsubara podem ser expandidas em séries de Fourier do tipo:

$$F(\vec{p}, iw_n) = \int_0^\beta d\tau F(\vec{p}, \tau) e^{i\tau w_n}, \quad (1.4.3a)$$

e

$$F(\vec{p}, \tau) = \frac{1}{\beta} \sum_n e^{-iw_n \tau} F(\vec{p}, iw_n), \quad (1.4.3b)$$

mantendo-se em mente que as frequências complexas são sempre grandezas discretas.

Definimos então, a função de correlação força-força na representação de Matsubara da seguinte maneira :

$$\Pi_{\nu\mu}(\tau) = - \langle T_{\tau} U_{\nu}^{\dagger}(t) U_{\mu}(0) \rangle, \quad (1.4.4)$$

tal que, substituindo a eq.(1.3.2) na expressão acima obtemos,

$$\Pi_{\nu\mu}(\tau) = - \sum_{\vec{q}} q_{\nu} q_{\mu} |D(\vec{q})|^2 \langle T_{\tau} \rho(\vec{q}, \tau) \rho(-\vec{q}, 0) A_{\vec{q}}(\tau) A_{-\vec{q}}(0) \rangle, \quad (1.4.5)$$

Utilizando o teorema de Wick na equação acima, podemos desacoplar o produto de operadores, cada par separadamente, e efetuar a média termodinâmica sobre cada um dos pares de operadores estatisticamente independentes (19).

$$\Pi_{\nu\mu}(\tau) = - \sum_{\vec{q}} q_{\nu} q_{\mu} |D(\vec{q})|^2 \langle T_{\tau} \rho(\vec{q}, \tau) \rho(-\vec{q}, 0) \rangle \langle T_{\tau} A_{\vec{q}}(\tau) A_{-\vec{q}}(0) \rangle, \quad (1.4.6)$$

onde por definição, temos :

$$S(\vec{q}, \tau) = - \langle T_{\tau} \rho(\vec{q}, \tau) \rho(-\vec{q}, 0) \rangle, \quad (1.4.7)$$

sendo a função de correlação densidade-densidade de elétrons, que fornece a resposta do sistema para uma flutuação na densidade. O operador densidade possui propriedades de bósons, desde que ele representa o produto de dois operadores de férmions, (criação e destruição), onde um operador $\rho(-\vec{q}, 0)$ age num tempo $\tau = 0$ e outro num instante τ , enquanto que,

$$D(\vec{q}, \tau) = - \langle T_{\tau} A_{\vec{q}}(\tau) A_{-\vec{q}}(0) \rangle, \quad (1.4.8)$$

descreve o propagador (função de Green) dos fônons. Desta forma, usando as definições acima podemos escrever

$$\Pi_{\nu\mu}(\tau) = - \sum_{\vec{q}} q_{\nu} q_{\mu} |D(\vec{q})|^2 S(\vec{q}, \tau) D(\vec{q}, \tau), \quad (1.4.9)$$

cuja solução se faz a partir da determinação de $S(\vec{q}, \tau)$ e $D(\vec{q}, \tau)$. Neste sentido, transformamos essas duas grandezas, via eqs.(1.4.3), em $S(\vec{q}, iw)$ e $D(\vec{q}, iw)$, respectivamente, e efetuamos a soma de frequências de Matsubara. Assim podemos escrever :

$$\Pi_{\nu\mu}(iw) = - \sum_{\vec{q}} q_{\nu} q_{\mu} |D(\vec{q})|^2 \frac{1}{\beta} \sum_{i\epsilon_n, ip_n} S(\vec{q}, ip_n) D(\vec{q}, i\epsilon_n) \frac{1}{\beta} \int_0^{\beta} d\tau e^{i\tau(w-\epsilon_n-p_n)}, \quad (1.4.10)$$

onde, tanto a frequência $i\epsilon_n$ quanto ip_n são frequências de bósons, isto é, obedecem a função distribuição de Bose, $(e^{\beta w_q} - 1)^{-1}$, cujos pólos são múltiplos pares de $i\pi/\beta$, incluindo o zero.

Entretanto,

$$\frac{1}{\beta} \int_0^{\beta} d\tau e^{i\tau(p_n - p_{n'})} = \frac{1}{\beta i (p_n - p_{n'})} (e^{i\beta(p_n - p_{n'})} - 1), \quad (1.4.11)$$

$$= \frac{1}{2i\pi (n - n')} (e^{i2\pi(n-n')} - 1) = 0; \quad n \neq n', \quad (1.4.12)$$

o que equivale a escrevermos,

$$\frac{1}{\beta} \int_0^{\beta} d\tau e^{i\tau(p_n - p_{n'})} = \delta(p_n - p_{n'}), \quad (1.4.13)$$

e conseqüentemente temos,

$$\Pi_{\nu\mu}(iw) = - \sum_{\vec{q}} q_{\nu} q_{\mu} |D(\vec{q})|^2 \frac{1}{\beta} \sum_{ip_n} S(\vec{q}, ip_n) D(\vec{q}, iw - ip_n), \quad (1.4.14)$$

Fazemos agora, as seguintes aproximações na função de correlação força-força :

- i - Desprezamos a interação elétron-elétron no cálculo da função de correlação densidade-densidade
- ii - Desprezamos a interação entre os fônons no cálculo do propagador de fônons

Isto corresponde a se ter um sistema de elétrons não interagentes onde a função de correlação densidade de elétrons $S(\vec{q}, \tau)$ é descrita em termos do propagador de elétron livre, $G^o(\vec{k}, \tau)$, e a um sistema de fônons livres, descrito por uma função de Green , de fônons, não perturbada. Desse modo, temos

$$S(\vec{q}, \tau) \cong S^{(0)}(\vec{q}, \tau) = - \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} \langle T_\tau c_{\vec{k}+\vec{q}}^\dagger(\tau) c_{\vec{k}}(\tau) c_{\vec{k}'}^\dagger(0) c_{\vec{k}'}(0) \rangle, \quad (1.4.15)$$

usando novamente o teorema de Wick e a definição da função de Green de um elétron, temos

$$S^{(0)}(\vec{q}, \tau) = \sum_{\vec{k}} G^\circ(\vec{k} + \vec{q}, -\tau) G^\circ(\vec{k}, \tau), \quad (1.4.16)$$

Nosso próximo passo é aplicar a transformada de Fourier na expressão acima, o que nos leva diretamente ao seguinte resultado :

$$S^{(0)}(\vec{q}, ip_n) = \frac{1}{\beta} \sum_{\vec{k}} \sum_{ik_n} G^\circ(\vec{k} + \vec{q}, ik_n - ip_n) G^\circ(\vec{k}, ik_n), \quad (1.4.17)$$

onde ik_n representa uma frequência de férmion, e as funções de Green são simplesmente

$$G^\circ(\vec{k}, ik_n) = \frac{1}{ik_n - E_{\vec{k}}}, \quad (1.4.18a)$$

$$G^\circ(\vec{k} + \vec{q}, ik_n - ip_n) = \frac{1}{ik_n - ip_n - E_{\vec{k}+\vec{q}}}, \quad (1.4.18b)$$

De maneira análoga, fazendo a aproximação de fônons livres e efetuando a transformação de Fourier no propagador de fônons, obtemos a dependência de frequência da função de Green de fônons, (19),

$$D(\vec{q}, \tau) \cong D^\circ(\vec{q}, \tau), \quad (1.4.19a)$$

e daí,

$$D^\circ(\vec{q}, iw'_n) = \frac{1}{iw'_n - w_q} - \frac{1}{iw'_n + w_q} = - \frac{2 w_q}{w_n'^2 + w_q^2}, \quad (1.4.19b)$$

Observa-se nas eqs.(1.4.18) e (1.4.19b) que a informação a cerca da temperatura está embutida nas expressões acima, uma vez que as frequências são proporcionais à $\frac{i\pi}{\beta}$. Veremos logo adiante, que os fatores de ocupação aparecem nas expressões assim que efetuarmos as somas de frequências de Matsubara. Agora, de volta a expressão de $\Pi_{\nu\mu}(iw)$, eq.(1.4.14), e fazendo uso das definições acima, obtemos a expressão da função de correlação força-força, na aproximação de ordem zero, em função da frequência, como sendo:

$$\Pi_{\nu\mu}(iw) = - \sum_{\vec{q}, \vec{k}} q_\nu q_\mu |D(\vec{q})|^2 \frac{1}{\beta^2} \sum_{ip_n, ik_n} D^\circ(\vec{q}, iw - ip_n) G^\circ(\vec{k} + \vec{q}, ik_n - ip_n) G^\circ(\vec{k}, ik_n), \quad (1.4.20)$$

cuja solução se verifica a partir das somas de frequência de Matsubara.

Neste sentido, escrevemos inicialmente uma série como sendo,

$$A = - \frac{1}{\beta} \sum_n F(iw_n), \quad (1.4.21)$$

onde $F(iw_n)$ é um tipo qualquer de função de Green. O somatório é então calculado por uma integração de contorno da forma :

$$I = \lim_{R \rightarrow \infty} \int_C \frac{dz}{2\pi i} F(z) \eta(z), \quad (1.4.21)$$

onde o contorno é um grande círculo de raio R no limite em que $R \rightarrow \infty$. A função $\eta(z)$ é escolhida de modo a ter pólos nos pontos iw_n e com os resíduos nesses pólos sendo $\pm \frac{1}{\beta}$, tal que

$$\eta_{\pm}(z) = (e^{\beta z} \pm 1)^{-1}, \quad (1.4.22)$$

conforme estejamos somando férmions, $\eta_+(z)$, ou séries de bósons, $\eta_-(z)$, (vide Apêndice A.6).

Além disso, devemos procurar os pólos simples, z_j de $F(z)$ e nesses pólos encontrar os resíduos r_j de $F(z)$. No limite em que $R \rightarrow \infty$ e desde que se tenha apenas pólos simples, a integral desaparece e encontramos,

$$A = \sum_j R_j$$

$$R_j = r_j \eta(z_j), \quad (1.4.23)$$

No caso particular de interação elétron-fônon, eq.(1.4.20), obtemos após o somatório de frequência de Matsubara, (vide Apêndice A.6), a seguinte expressão:

$$\frac{1}{\beta} \sum_{\vec{k}} \sum_{ik_n} G^\circ(\vec{k} + \vec{q}, ik_n - ip_n) G^\circ(\vec{k}, ik_n) D^\circ(\vec{q}, iw - ip_n) =$$

$$= \frac{[\eta_-(w_q) - \eta_-(\epsilon_{\vec{k}+\vec{q}} - \epsilon_{\vec{k}})] [\eta_+(\epsilon_{\vec{k}}) - \eta_+(\epsilon_{\vec{k}+\vec{q}})]}{(\epsilon_{\vec{k}+\vec{q}} - \epsilon_{\vec{k}} - w_q + i w)} - \text{termo}(w_q \rightarrow -w_q), \quad (1.4.24)$$

Efetuada agora a continuação analítica, isto é, $i w \rightarrow w + i \delta$, obtemos facilmente a função de correlação retardada força-força, $\Pi_{\nu\mu}^R(w)$, tal que,

$$\Pi_{\nu\mu}^R(w) = - \sum_{\vec{q}, \vec{k}} q_\nu q_\mu |D(\vec{q})|^2 \lim_{\delta \rightarrow 0^+} \left\{ \frac{[\eta_-(w_q) - \eta_-(\epsilon_{\vec{k}+\vec{q}} - \epsilon_{\vec{k}})] [\eta_+(\epsilon_{\vec{k}}) - \eta_+(\epsilon_{\vec{k}+\vec{q}})]}{\epsilon_{\vec{k}+\vec{q}} - \epsilon_{\vec{k}} - w_q + w + i \delta} \right. \\ \left. - \text{termo}(w_q \rightarrow -w_q) \right\}, \quad (1.4.25)$$

No formalismo da FM o tempo de relaxação de transporte de elétrons no limite estático é diretamente expresso em termos dos elementos de matriz diagonais da FM, tal que

$$\Gamma^{-1} = \lim_{w \rightarrow 0} \text{Im} M_{\nu\nu}(w), \quad (1.4.26)$$

desta forma, tomando o limite $w \rightarrow 0$ na equação acima, obtemos a condutividade "d.c.", via fórmula de Drude, em termos da FM

$$\tilde{\sigma}^{-1} = \frac{m_\epsilon}{n_e e^2} \lim_{w \rightarrow 0} \tilde{M}^\mu(w), \quad (1.4.27)$$

De volta à expressão de $\Pi_{\nu\nu}^R(w)$, e lembrando o fato que

$$\frac{1}{x + i \delta} = P(1/x) \mp i \pi \delta(x), \quad (1.4.28)$$

onde P significa a parte principal de Cauchy, encontramos que a parte imaginária da função retardada força-força é dada diretamente por

$$\text{Im} \Pi_{\nu\nu}^R(w) = \pi \sum_{\vec{q}, \vec{k}} q_\nu^2 |D(\vec{q})|^2 [\eta_+(\epsilon_{\vec{k}}) - \eta_+(\epsilon_{\vec{k}+\vec{q}})] \times \\ \times \{ [\eta_-(w_q) - \eta_-(w_q - w)] \delta(\epsilon_{\vec{k}+\vec{q}} - \epsilon_{\vec{k}} - w_q + w) - \text{termo}(w_q \rightarrow -w_q) \}, \quad (1.4.29)$$

Agora, dividindo a expressão acima por w , de modo a se obter a parte imaginária da FM, eq.(1.2.15), e fazendo o limite em que $w \rightarrow 0$, eq.(1.4.26), obtemos finalmente, após algumas passagens algébricas, o tempo de relaxação de transporte de elétrons interagindo com fônons dado por

$$\Gamma^{-1} = \frac{2\pi\beta}{n_e m_e} \sum_{\vec{q}} q_\nu^2 |D(\vec{q})|^2 \frac{e^{\beta w_q}}{(e^{\beta w_q} - 1)^2} \sum_{\vec{k}} [\eta_+(\epsilon_{\vec{k}+\vec{q}}) - \eta_+(\epsilon_{\vec{k}})] \delta(\epsilon_{\vec{k}+\vec{q}} - \epsilon_{\vec{k}} - w_q), \quad (1.4.30)$$

onde o tempo de relaxação Γ , obtido desta forma no formalismo de FM está associado aos efeitos dissipativos na dinâmica do gás de elétrons, devido ao espalhamento de elétrons por fônons, em contraste com o tempo de relaxação obtido via equação de Boltzmann, o qual representa o tempo necessário para que o sistema retorne a situação de equilíbrio. O formalismo de FM, que também pode ser interpretado com bases na equação de balanço de forças (17), as contribuições para o tempo de relaxação pode ser descrito separadamente pelas contribuições devido a espalhamento por fônons e impurezas

$$\frac{1}{\Gamma} = \frac{1}{\Gamma_{fon}} + \frac{1}{\Gamma_{imp}}, \quad (1.4.31)$$

sendo que em nossos cálculos desprezamos completamente os efeitos devidos a espalhamento por impurezas e tratamos somente das contribuições para o tempo de relaxação devido aos fônons.

No capítulo que se segue, discutiremos as propriedades estáticas de transporte em alguns sistemas físicos específicos, onde investigamos o efeito de dimensionalidade do gás de elétrons, interagindo com fônons acústicos e/ou ópticos.

CAPÍTULO 2

Neste capítulo discutiremos as propriedades de transporte em vários sistemas físicos caracterizados por um gás de elétrons de dimensão efetiva n interagindo com um sistema de fônons, na ausência de campo magnético externo. Os fônons estudados são de natureza longitudinal acústico (LA) ou longitudinal óptico (LO) e em ambos os casos o espalhamento dos elétrons por fônons é descrito em termos da função de correlação força-força, via formalismo de Função Memória. Nesse sentido, investigamos ao longo deste capítulo determinadas situações onde a dimensionalidade do sistema de fônons seja igual ou diferente à dimensionalidade do gás de elétrons espalhados. Desse modo, podemos avaliar o comportamento das propriedades de transporte em função do efeito de dimensionalidade na interação elétron-fônon.

Apresentamos inicialmente, na seção (2.1), um estudo das propriedades de transporte, no limite estático, de um sistema metálico puro. Nesses sistemas, os efeitos de espalhamento por impurezas podem ser desprezados e, conseqüentemente, a maior contribuição para a resistividade elétrica advém do espalhamento dos elétrons pelos fônons, incluindo o espalhamento por fônons acústicos e fônons ópticos. Nesse sentido, nosso objetivo é o de calcular a condutividade estática em metais, em função da temperatura, usando o formalismo de FM e operador de projeção. O cálculo é realizado para um gás de elétrons tridimensional (3 DEG) interagindo com um sistema de fônons (3 D) longitudinais acústicos e longitudinais ópticos. Os resultados obtidos nesta seção são de grande importância no estudo do formalismo da FM, por permitirem uma imediata comparação, numa aproximação de ordem zero, com os valores experimentais e

com os resultados obtidos via a equação de transporte de Boltzmann (5).

Na seção seguinte, investigamos um outro tipo de sistema físico, conhecido na literatura como Poço Quântico ("Quantum Well") (20). Esses sistemas são formados por um crescimento epitaxial de dois compostos semicondutores diferentes que apresentam valores para as constantes de rede aproximadamente iguais, tais como, GaAs e GaAlAs. Nesses sistemas, o movimento do gás de elétrons é confinado num plano paralelo às interfaces entre esses materiais por uma diferença na energia dos elétrons de condução entre os materiais adjacentes, sendo porém, permitido aos elétrons se moverem livremente ao longo das interfaces. Deste modo, o confinamento dos portadores de carga próximos à hetero-interface, dá origem a formação de um gás bidimensional preenchendo sub-bandas de energia na direção perpendicular à interface. O estudo da formação de um gás de elétrons bidimensional (2 DEG) nessas estruturas tem sido de grande importância na compreensão de alguns fenômenos tais como: efeito Hall quantizado (21), efeito Hall quantizado fracionário (22) e no desenvolvimento da eletrônica e informática. Nesse sentido, na seção (2.2), efetuamos o cálculo do tempo de relaxação do transporte eletrônico devido exclusivamente ao espalhamento do gás de elétrons bidimensional por fônons.

Mais recentemente, Sakaki et al. (23), apresentaram uma outra formação especial de heteroestruturas comumente chamadas de Fios Quânticos ("Quantum Well Wire") por apresentarem como característica fundamental, um comportamento efetivo unidimensional para o gás de elétrons (1 DEG). Nesses sistemas o gás de elétrons é fortemente confinado em duas dimensões, numa estrutura semicondutora, na forma de um fio, por potenciais do tipo barreira ou oscilador harmônico e livre de movimento ao longo da direção do fio. Na seção (2.3), realizamos um estudo da mobilidade eletrônica num sistema condutor unidimensional, tal como, fios quânticos de GaAs/ GaAlAs, espalhados por fônons longitudinais acústicos unidimensionais e verificamos que os resultados podem ser aplicados a vários outros tipos de materiais que se comportam com características de um sistema de elétrons unidimensionais, como por exemplo, polímeros condutores do tipo $(TMTSF)_2PF_6$ ou compostos inorgânicos com cadeias lineares de mercúrio, do tipo $Hg_{3-\delta}AsF_6$.

2.1 - Interação elétron-fônon em metais

Inicialmente, estudaremos a interação elétron-fônon num metal, através do espalhamento do gás de elétrons 3D por fônons 3D longitudinais acústicos. Nesse sentido, retornaremos à Hamiltoniana definida na eq.(1.3.1) em termos do centro de massa do sistema, com $\hbar = 1$.

$$H = \sum_{\vec{k}} E_{\vec{k}} c_{\vec{k}}^{\dagger} c_{\vec{k}} + \sum_{\vec{q}} w_q a_{\vec{q}}^{\dagger} a_q + H_{\tau} + \sum_{\vec{k}, \vec{q}} D(\vec{q}) c_{\vec{k}+\vec{q}}^{\dagger} c_{\vec{k}} A_{\vec{q}} e^{i\vec{q} \cdot \vec{R}}, \quad (2.1.1)$$

onde os termos que aparecem na equação acima são os mesmos já definidos na seção (1.3). Utilizamos o método do potencial-deformação no estudo da interação elétron-fônon LA, tal que, o acoplamento do potencial elétron-fônon para fônons acústicos, $D_{ac}(q)$, no limite de grande comprimento de onda, é dado simplesmente por,

$$D_{ac}(q) = \Xi_d (2Nm_i w_q)^{-1/2} q \quad ; \quad q = |\vec{q}|, \quad (2.1.2)$$

onde Ξ_d é a constante de acoplamento de deformação, enquanto N representa o número de células da rede e m_i é a massa iônica. A frequência dos fônons LA é descrita no modelo de Debye, isto é, supomos que a energia dos fônons seja proporcional ao vetor de onda, $w_q = c_s q$, onde c_s é a velocidade do som.

De acordo com o que foi apresentado no Capítulo 1, podemos escrever a função de correlação força-força para um sistema sob interação elétron-fônon LA da seguinte maneira:

$$\Pi_{\nu\mu}(\tau) = - \sum_{\vec{q}} q_{\nu} q_{\mu} |D_{ac}(q)|^2 S(\vec{q}, \tau) D(\vec{q}, \tau), \quad (2.1.3)$$

onde $S(\vec{q}, \tau)$ e $D(\vec{q}, \tau)$ representam a função densidade-densidade, eq.(1.4.7), e o propagador de fônons, eq.(1.4.8), respectivamente.

A aproximação de ordem zero na função de correlação força-força é descrita em termos de uma função de Green de duas-partículas livres, eq.(1.4.16), correspondendo exatamente ao primeiro termo na expansão da matriz \tilde{S} no cálculo da função de correlação densidade-densidade (vide Apêndice A.7), e de um sistema de fônons livres descrito pela função de Green de fônon não perturbada, definida na eq.(1.4.19), tal que

$$\Pi_{\nu\mu}(\tau) = - \sum_{\vec{k}, \vec{q}} q_\nu q_\mu |D_{ac}(q)|^2 D^0(\vec{q}, \tau) G^0(\vec{k} + \vec{q}, -\tau) G^0(\vec{k}, \tau). \quad (2.1.4)$$

A título de ilustração, representaremos os processos físicos embutidos na expressão acima utilizando a técnica de representação diagramática. Este método, originalmente introduzida por Feynman, permite a representação, por meios de diagramas, de funções de Green dependentes do tempo ou de sua transformada de Fourier, obtidas a partir dos termos da expansão da matriz \tilde{S} na representação das interações (19). Como exemplo, temos que os diagramas, no espaço dos tempos, que representam funções de Green de elétrons livres, $G^0(\vec{k}, \tau - \tau')$, são descritos por uma linha sólida que vai de τ' para τ , incluindo uma seta a fim de representar esta direção, enquanto que a função de Green de fônons livres, $D^0(\vec{q}, \tau - \tau')$, é representada por uma simples linha tracejada sem necessidade de se especificar a direção, enquanto que um operador de interação é associado com cada vértice do diagrama.

Neste sentido, a função de correlação densidade-densidade ou função de polarização, de ordem zero, eq.(1.4.17), pode ser graficamente representada, de acordo com a Figura (2.1a), por um simples diagrama de bolha, onde desprezamos todas as possíveis correções de vértices. Da mesma forma, a função de correlação força-força na aproximação de ordem mais baixa para a interação elétron-fônon pode ser esquematicamente representada pela Figura (2.1b), onde os processos de espalhamento de ordens superiores representados diagramaticamente, por exemplo, por linhas de fônons ou de impurezas que unam duas linhas de elétrons, foram desprezados.

De volta à eq.(2.1.4) e após algumas passagens algébricas, efetuando o somatório sobre as frequências de Matsubara e a continuação analítica, obtemos que o termo diagonal da função de correlação retardada força-força, na aproximação de ordem zero, levando em conta a degenerescência de spin, é dada por

$$\begin{aligned} \Pi_{\nu\nu}^R(w) = & -2 \sum_{\vec{k}, \vec{q}} q_\nu^2 |D_{ac}(q)|^2 \lim_{\delta \rightarrow 0^+} \left\{ \frac{[\eta_-(w_q) - \eta_-(\epsilon_{\vec{k}+\vec{q}})] [\eta_+(\epsilon_{\vec{k}}) - \eta_+(\epsilon_{\vec{k}+\vec{q}})]}{\epsilon_{\vec{k}+\vec{q}} - \epsilon_{\vec{k}} - w_q + w + i\delta} \right. \\ & \left. - \text{termo}(w_q \rightarrow -w_q) \right\}, \end{aligned} \quad (2.1.5)$$

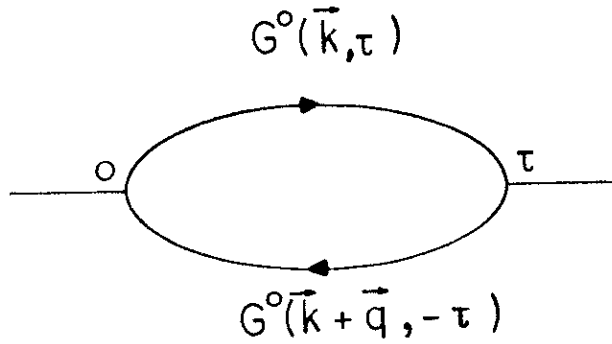


Fig. 2.1a - Representação diagramática de ordem zero da função de correlação densidade-densidade.

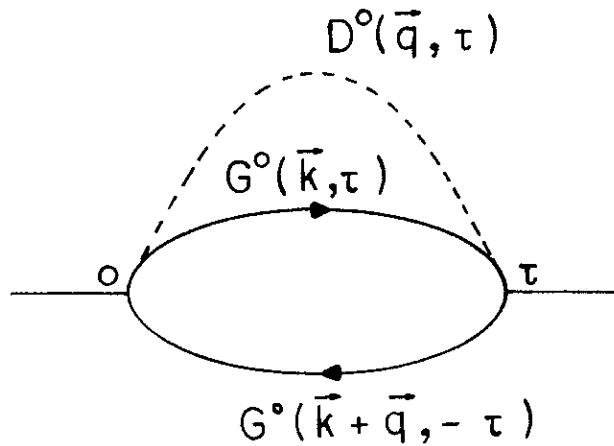


Fig. 2.1b - Representação diagramática de ordem mais baixa da função de correlação força-força para a interação elétron-fônon.

Em nossos cálculos a parte imaginária da função de correlação força-força pode ser expressa em termos da parte imaginária da constante dielétrica, $\varepsilon_2(\vec{q}, w)$, na aproximação "Random Phase Approximation", RPA, (vide Apêndice A.7). Desta forma, obtemos para a parte imaginária da Função Memória no limite estático ($w = 0$)

$$M''(0) = \frac{8\beta}{3m_e n_e} \frac{1}{(2\pi)^3} \int_0^{q_D} dq q^4 |D_{ac}(q)|^2 \frac{e^{\beta w_q}}{(e^{\beta w_q} - 1)^2} \frac{\varepsilon_2(\vec{q}, w_q)}{v_q}, \quad (2.1.6)$$

onde efetuamos convenientemente a mudança de somatório para integral

$$\sum_{\vec{q}} \rightarrow \frac{1}{(2\pi)^n} \int d^n q, \quad (2.1.7)$$

sendo n a dimensão do sistema de fônons e v_q a transformada de Fourier do potencial de Coulomb. Nota-se ainda, que o limite superior na eq.(2.1.6) é dado em termos de q_D , que corresponde ao raio de uma esfera em substituição à zona de Brillouin, na aproximação de Debye.

Na aproximamação RPA, a expressão analítica da parte imaginária da constante dielétrica para um sistema 3 DEG, na estatística de Fermi-Dirac é dada por, (19),

$$\frac{\varepsilon_2(\vec{q}, w_q)}{v_q} = \frac{m_e^2}{2\pi q \beta} \ln \left[\frac{1 + e^{-\beta(E_- - \mu)}}{1 + e^{-\beta(E_+ - \mu)}} \right], \quad (2.1.8)$$

com

$$E_{\pm} = \frac{(E_q \pm w_q)^2}{4E_q}, \quad (2.1.9a)$$

$$E_q = \frac{q^2}{2m_e}, \quad (2.1.9b)$$

No regime de baixa temperatura, i.e., $k_B T \ll \mu = E_F$, onde E_F representa a energia do nível de Fermi, podemos efetuar a seguinte aproximação

$$\ln[1 + e^{-\beta(E_{\mp} - \mu)}] \approx \beta(E_F - E_{\mp}) \Theta(E_F - E_{\mp}), \quad (2.1.10)$$

Finalmente, substituindo este resultado na expressão de $\varepsilon_2(\vec{q}, w_q)$ obtemos, após algumas passagens algébricas, segundo o formalismo de Função Memória, uma expressão analítica para a condutividade "d.c.", da Cunha Lima et al.(24)

$$\sigma^{-1} = \frac{\pi m_e^2 \Xi_d^2 (k_B \theta_D)^5}{12N m_i n_e^2 e^2 c_s^6} \left(\frac{T}{\theta_D} \right)^5 J_5(\theta_D/T), \quad (2.1.11)$$

onde θ_D é a temperatura de Debye e $J_r(Y)$ é conhecida como a integral de Debye de ordem r .

$$J_r(Y) = \int_0^Y dx \frac{x^r e^x}{(e^x - 1)^2}, \quad (2.1.12)$$

assumindo como valores assintóticos (4),

$$\begin{aligned} J_r(Y) &= \frac{1}{(r-1)} Y^{r-1} \quad , \quad \lim_{Y \rightarrow 0} \\ J_r(Y) &= \text{constante} \quad , \quad \lim_{Y \rightarrow \infty} \end{aligned} \quad (2.1.13)$$

Desse modo, podemos avaliar, nos limites assintóticos, o comportamento da condutividade estática em função da temperatura, o que leva-nos a uma expressão do tipo $\sigma \propto T^{-5} J_5(T)$, i.e., relação de Bloch-Grüneisen. A partir das aproximações efetuadas na eq.(2.1.13), obtemos em nossos cálculos que a condutividade, σ , obedece a uma lei de temperatura, em comparação com a temperatura de Debye, θ_D , proporcional a T^{-5} no limite de baixas temperaturas, ou seja, ($T \ll \theta_D$), e uma lei inversamente proporcional a T no limite de altas temperaturas, isto é, ($T \gg \theta_D$). Esses resultados apresentam uma excelente concordância com os valores experimentais de condutividade elétrica em vários metais e com os resultados teóricos obtidos via a equação de transporte de Boltzmann para um gás de elétrons 3D interagindo com fônons LA 3D (5). Além disso, verificamos, neste caso, que um simples cálculo via o formalismo de Função Memória, numa aproximação de ordem zero, reproduz a solução da equação de Boltzmann, conforme verificado anteriormente no trabalho de Gotze e Wolffe (12). Além disso, conforme veremos nos capítulos seguintes o formalismo de FM permite-nos descrever determinadas situações onde a aplicação da equação de Boltzmann se dá de maneira problemática.

Agora, discutiremos brevemente, um interessante resultado acerca da interação elétron-fônon, descrita por da Cunha Lima et al. (25). Nesse trabalho, os autores descrevem as propriedades de transporte para um gás de elétrons bidimensionais (2 DEG) interagindo com fônons LA 3D. A relação dos fônons 3D e sua interação efetiva com o gás de elétrons 2D é comparado ao caso do 3 DEG, sendo tratado aqui como um efeito de dimensionalidade na interação elétron-fônon.

Iniciamos nossos cálculos descrevendo a interação de um sistema de elétrons bidimensionais com fônons tridimensionais, a partir da hamiltoniana da eq.(2.1.1), tomando o cuidado de separar

explicitamente o momento dos fônons, \vec{Q} , tal que

$$\vec{Q} = \vec{q} + q_z \hat{k} ; \quad \vec{q} = q_x \hat{i} + q_y \hat{j} , \quad (2.1.14)$$

e que o movimento do gás de elétrons bidimensional se faz no plano XY. Fazendo as devidas substituições na Hamiltoniana e efetuando todas as etapas descritas anteriormente, encontramos a seguinte expressão para a função de correlação força-força

$$\Pi_{\nu\mu}(iw) = - \sum_{\vec{Q}} q_\nu q_\mu |D_{ac}(Q)|^2 \frac{1}{\beta} \sum_{ip_n} S^0(\vec{q}, ip_n) D^0(\vec{Q}, iw - ip_n), \quad (2.1.15)$$

onde o propagador de fônons livres é dado por

$$D^0(\vec{Q}, iw - ip_n) = - \frac{2w_Q}{(w - p_n)^2 + w_Q^2} ; \quad w_Q = c_s Q. \quad (2.1.16)$$

Após efetuar o somatório de frequências de Matsubara, podemos escrever a parte imaginária da FM em termos da parte imaginária da constante dielétrica 2D,

$$M''(w) = \frac{1}{n_e m_e} \sum_{\vec{Q}} q_\nu^2 |D_{ac}(Q)|^2 \frac{w^{-1} e^{\beta w_Q} (e^{\beta w} - 1)}{(e^{\beta w_Q} - 1) (e^{\beta(w_Q + w)} - 1)} \frac{\varepsilon_2(\vec{q}, w_Q + w)}{v_q} + \text{termo}(w \rightarrow -w). \quad (2.1.17)$$

Fazendo o limite $w \rightarrow 0$ e substituindo o valor de $\varepsilon_2(\vec{q}, w_Q)$ (vide Apêndice A.8), obtemos

$$M''(0) = \left(\frac{2 m_e}{E_F}\right)^{1/2} \frac{\Xi_d^2 \beta}{16 \pi N m_i n_e} \int_0^{Q_{max}} dQ Q^5 \frac{e^{\beta w_Q}}{(e^{\beta w_Q} - 1)^2}, \quad (2.1.18)$$

onde Q_{max} é o momento máximo transferido ao elétron e pode ser associado a uma temperatura característica máxima, θ_m . Finalmente, após algumas simples mudanças de variáveis encontramos,

$$M''(0) = A (k_B \theta_m)^5 \left(\frac{T}{\theta_m}\right)^5 J_5(\theta_m/T), \quad (2.1.19)$$

sendo A uma constante.

Analisando este resultado, eq.(2.1.19), e comparando com o caso de um sistema de elétrons tridimensionais, verificamos que não existe nenhuma modificação crucial quanto a dependência

de temperatura da condutividade estática entre um gás de elétrons 2D e um gás de elétrons 3D, ambos interagindo com um sistema de fônons LA tridimensional. Desse modo, podemos concluir diretamente a partir deste resultado, que o comportamento de temperatura das propriedades estáticas de transporte estejam fundamentalmente associadas a dimensionalidade do sistema de fônons.

De outro modo, concentraremos nossa atenção agora, no cálculo das propriedades ópticas de um sistema de partículas livres, tal como elétrons num metal ou semicondutores. Em particular, estamos interessados no cálculo da condutividade elétrica dinâmica no caso da interação entre um gás de elétrons 3D interagindo com um sistema de fônons ópticos longitudinais (LO) tridimensionais, utilizando a função de correlação força-força. A interação é descrita pela hamiltoniana de Fröhlich, eq.(1.3.1). Os fônons LO são representados usualmente pelo modelo de Einstein, i.e., aproximando a frequência dos fônons, w_q , por uma frequência constante w_{LO} .

O acoplamento do potencial elétron-fônion LO, D_{op} , é dado por (19)

$$D_{op} = [4\pi \alpha w_{LO} (\frac{w_{LO}}{2m_e})^{1/2}]^{1/2} \frac{1}{q}, \quad (2.1.20)$$

onde introduzimos a constante de acoplamento polar, adimensional, α , definida como

$$\alpha = e^2 (\frac{m_e}{2w_{LO}})^{1/2} (\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_0}), \quad (2.1.21)$$

sendo ϵ_0 a constante dielétrica estática e ϵ_∞ a constante dielétrica no limite em que $w \rightarrow \infty$, enquanto que os outros termos que aparecem na equação acima são os mesmos já definidos anteriormente.

Assumiremos que os polarons, i.e., quase-partículas descritas como sendo um elétron mais a polarização (deformação) da rede, vista como uma excitação de fônons ópticos, apresentam uma pequena concentração n , tal que a interação elétron- elétron possa ser desprezada e a função de correlação densidade-densidade pode ser novamente representada por um simples diagrama de bolha, eq.(1.4.17) e Fig.(2.1.a) e utilizamos ainda, o propagador de fônons não-perturbado, eq.(1.4.19), a fim de descrever o sistema de fônons.

Neste sentido, após algumas passagens algébricas, obtemos a seguinte expressão para a parte imaginária da Função Memória em função da frequência w ,

$$\begin{aligned}
M''(w) = & \frac{2\pi}{nm_\epsilon w} \sum_{\vec{q}} |D_{op}|^2 q_\nu^2 \sum_{\vec{k}} [\eta_+(\epsilon_{\vec{k}+\vec{q}}) - \eta_+(\epsilon_{\vec{k}})] \times \\
& \{ [\eta_-(w_{LO}) - \eta_-(w_{LO} - w)] \delta(\epsilon_{\vec{k}+\vec{q}} - \epsilon_{\vec{k}} - w_{LO} + w) \\
& - \text{termo}(w \rightarrow -w) \}. \tag{2.1.22}
\end{aligned}$$

Desde que os polarons obedeam a estatística de Maxwell-Boltzmann os fatores exponenciais que aparecem na expressão logarítmica, eq.(2.1.8), da parte imaginária da constante dielétrica, $\epsilon_2(\vec{q}, w)$, são relativamente pequenos e podem ser expandidos de modo a se obter,

$$\epsilon_2(\vec{q}, w_{LO} + w) = \frac{n e^2 m_e^2}{q^3 \beta} \left(\frac{2\pi \beta}{m_e} \right)^{3/2} [e^{-\beta(w_{LO} + w - \epsilon_q)^2 / 4\epsilon_q} - e^{-\beta(w_{LO} + w + \epsilon_q)^2 / 4\epsilon_q}]. \tag{2.1.23}$$

Fazendo algumas substituições e efetuando simples mudanças de variáveis, encontramos a seguinte expressão para $M''(w)$

$$\begin{aligned}
M''(w) = & \frac{\alpha}{3\pi^2} (\pi\beta w_{LO})^{3/2} \frac{e^{\beta w_{LO}}}{(e^{\beta w_{LO}} - 1)} \times \\
& \left\{ \frac{w^{-1} (e^{\beta w} - 1)}{(e^{\beta(w_{LO} + w)} - 1)} [I_-(\beta(w_{LO} + w)) - I_+(\beta(w_{LO} + w))] + \text{termo}(w \rightarrow -w) \right\}, \tag{2.1.24}
\end{aligned}$$

onde definimos

$$I_{\mp}(\beta(w_{LO} + w)) = \int_0^\infty d\epsilon e^{-\beta(w_{LO} + w \mp \epsilon)/4\epsilon} = 2(w_{LO} + w) e^{\pm\beta(w_{LO} + w)/2} K_1(\beta(w_{LO} + w)/2), \tag{2.1.25}$$

e conseqüentemente,

$$\begin{aligned}
M''(w) = & \frac{2\pi \alpha}{3\beta} \left(\frac{w_{LO}\beta}{\pi} \right)^{3/2} \frac{e^{\beta w_{LO}}}{(e^{\beta w_{LO}} - 1)} \times \\
& \left\{ w^{-1} (e^{\beta w} - 1) (w_{LO} + w) e^{-\beta(w_{LO} + w)/2} K_1(\beta(w_{LO} + w)/2) + \text{termo}(w \rightarrow -w) \right\}, \tag{2.1.26}
\end{aligned}$$

com os valores assintóticos de $K_1(x)$, (28),

$$K_1(x) \rightarrow \frac{1}{x} ; \lim_{x \rightarrow 0}, \tag{2.1.27a}$$

e

$$K_1(x) \rightarrow \sqrt{\frac{\pi}{x}} e^{-x} \left[1 + \frac{3}{8x} + \dots \right] ; \lim_{x \rightarrow \infty}, \tag{2.1.27b}$$

No limite de altas temperaturas, i.e., $k_B T \gg (w_{LO} + w)/2$, temos em particular,

$$M''(w) = \frac{8\alpha w_{LO}}{3w} \left(\frac{w_{LO} k_B T}{\pi} \right)^{1/2} \frac{\sinh(\beta w/2)}{\sinh(\beta w_{LO}/2)}, \quad (2.1.28)$$

além disso, no limite estático, obtemos o tempo de relaxação Γ , via a fórmula de Drude, (25), como sendo

$$\Gamma^{-1} = \frac{8\alpha}{3} \left(\frac{k_B T w_{LO}}{\pi} \right)^{1/2}, \quad (2.1.28)$$

De outro modo, no regime de baixa temperatura, i.e., $k_B T \ll |\frac{w_{LO} + w}{2}|$, encontramos a seguinte expressão para a parte imaginária da Função Memória

$$M''(w) = \frac{2\alpha w_{LO}^{3/2}}{3w} \frac{(e^{-\beta w} - e^{-\beta w/2})}{(e^{\beta w_{LO}/2} - e^{-\beta w_{LO}/2})} \times \\ \{ (w_{LO} + w)^{1/2} e^{-\beta(w_{LO} + w)/2} - |w_{LO} - w|^{1/2} e^{-\beta|w_{LO} - w|/2} \}. \quad (2.1.29)$$

No regime de altas frequências a parte real da condutividade é proporcional a $\frac{1}{\Gamma}$, (19), tal que

$$Re [\sigma(w)] = \frac{n e^2}{m_e w^2} \frac{1}{\Gamma} \left[1 + O\left(\frac{1}{w^2 \Gamma^2}\right) \right], \quad (2.1.30)$$

sendo que o método da função de correlação força-força faz uso desta expressão no limite de altas frequências.

Desse modo, efetuando o cálculo para o caso limite de temperatura zero, onde o fator de ocupação dos bósons é tal que, $\eta_-(w) = -\Theta(-w)$, obtemos, na aproximação de ordem zero para a função de correlação força-força, uma expressão da parte real da condutividade dinâmica, $\sigma(w)$, proporcional ao parametro α .

$$Re [\sigma(w)] = \frac{2n m_e \alpha w_{LO}^{3/2}}{3m_e w^3} (w - w_{LO})^{1/2} \Theta(w - w_{LO}). \quad (2.1.31)$$

O resultado final, eq.(2.1.31), mostra que polarons livres podem absorver radiação e emitir fônons LO somente quando a energia do polaron exceder a energia do fônon, i.e., ($w > w_{LO}$). Embora, este resultado tenha sido obtido anteriormente por Gurevich et al. (28), nosso cálculo

utilizando o formalismo de Função Memória, (24), mostra mais uma vez que o método, mesmo numa aproximação de ordem zero, está em excelente acordo com os resultados experimentais conhecidos na literatura e com cálculos anteriores obtidos através de outros modelos. Além disso, acreditamos que o método de FM permita, sem envolver cálculos extremamente laboriosos, o tratamento das possíveis correções de vértices no cálculo da função de correlação força-força capazes de descrever a condutividade dinâmica em ordens superiores do parâmetro α .

Neste sentido, é de se esperar que cálculos futuros nessa direção permita-nos tanto, comparar novos resultados via formalismo de FM com resultados conhecidos na literatura, como por exemplo, Devreese (29), onde foi calculado os termos de absorção óptica dos polarons proporcionais a α^2 , usando o método de Integral de Caminho de Feynman, quanto dar uma nova luz na solução de problemas de transporte em outros sistemas, como por exemplo, sistemas de baixa dimensionalidade.

2.2 - Interação elétron-fônon em sistemas bidimensionais

Nos últimos anos, um grande interesse tem sido dado ao estudo da interação elétron-fônon em sistemas de elétrons bidimensionais (2 DEG), como por exemplo, em poços quânticos ou super-redes semicondutoras (20). Nesse sentido, verificou-se, por exemplo, que o espalhamento do 2DEG por fônons longitudinais ópticos é um importante mecanismo na determinação da mobilidade eletrônica à temperatura ambiente em heteroestruturas de GaAs/GaAlAs (30). De uma forma em geral, a interação do gás de elétrons bidimensional com fônons tridimensionais tem sido investigada exaustivamente nos trabalhos de Das Sarma et al. (31-33), a partir de um tratamento perturbativo, usando o fato de que nesses sistemas o acoplamento elétron-fônon é muito pequeno. Mais recentemente, da Cunha Lima et al. (25) discutiram as propriedades estáticas de transporte do 2 DEG interagindo com fônons LA e LO tridimensionais, utilizando o método de operador de projeção e Função Memória. Entretanto, recentes resultados experimen-

tais tem revelado que o espalhamento por modos vibração superficiais acústicos, isto é, próximos às interfaces, podem se tornar relevantes, dependendo da arquitetura das heteroestruturas. Isto seria o caso, por exemplo, em heteroestruturas dopadas, onde a formação do gás de elétrons 2D se faz próxima à interface entre o GaAs/GaAlAs (34).

Nesse sentido, discutiremos nessa seção as propriedades estáticas de transporte de um gás de elétrons bidimensional, em um poço quântico, interagindo com fônons longitudinais acústicos superficiais, utilizando o formalismo de Função Memória, Leal et al.(35). Iniciamos a discussão do problema, a partir da mesma hamiltoniana, apresentada na sec.(2.1), descrita em relação ao CM,

$$H = \sum_{\vec{k}} E_{\vec{k}} c_{\vec{k}}^{\dagger} c_{\vec{k}} + \sum_{\vec{q}} w_{\vec{q}} a_{\vec{q}}^{\dagger} a_{\vec{q}} + H_r + \sum_{\vec{q}} D_{ac}(\vec{q}) \rho(\vec{q}) A(\vec{q}) e^{i\vec{q}\cdot\vec{R}}, \quad (2.2.1)$$

onde supomos que ambos os momentos \vec{q} e \vec{k} , respectivamente, dos fônons e dos elétrons sejam vetores bidimensionais no plano paralelo às interfaces. $\rho(\vec{q})$ é a transformada de Fourier do operador densidade de elétrons e D_{ac} , o acoplamento do potencial elétron-fônon acústico, é definido de acordo com a eq.(2.1.2).

A condutividade estática do gás de elétrons 2D, via fórmula de Drude, i.e., $\sigma = n_e e^2 \Gamma / m_e$, é obtida diretamente no formalismo de FM, em termos da equação (1.4.26). Neste sentido, escrevemos mais uma vez a expressão da parte imaginária da FM, $M''(w)$, em termos da função de correlação força-força, na aproximação de ordem zero

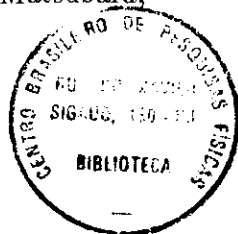
$$M''_{\nu\mu}(w) = -\frac{1}{n_e m_e w} [\text{Im} \Pi_{\nu\mu}^R(w) - \text{Im} \Pi_{\nu\mu}^R(0)], \quad (2.2.2)$$

onde

$$\Pi_{\nu\mu}^R(w) = -i \int_0^{\infty} \Theta(t) \langle [U_{\nu}(t), U_{\mu}(0)] \rangle e^{iwt} dt, \quad (2.2.3)$$

sendo U_{ν} , eq.(1.3.2), a componente- ν da força generalizada que age sobre o CM do sistema, devido exclusivamente a interação entre elétrons bidimensionais e fônons superficiais.

Uma vez introduzido no capítulo anterior, é conveniente utilizarmos o formalismo de temperatura finita, a fim de tratarmos os efeitos de temperatura nas propriedades de transporte, também em sistemas sob interação elétron-fônon de dimensionalidade reduzida. Desse modo, escrevemos a função de correlação força-força, na representação de frequências de Matsubara,



em termos da função de Green de fônons não perturbada, eq.(1.4.19b), e da função de correlação densidade-densidade de ordem zero, eq.(1.4.17). Nesse sentido, temos que

$$\Pi_{\nu\mu}(iw) = -\frac{1}{\beta} \int_0^\beta d\tau e^{i(w-\epsilon_n-p_n)\tau} \sum_{\vec{q}} q_\nu q_\mu |D_{ac}(q)|^2 \frac{1}{\beta} \sum_{ip_n, i\epsilon_n} D^0(i\epsilon_n) S^0(\vec{q}, ip_n), \quad (2.2.4)$$

onde $i\epsilon_n, ip_n$ são frequências de bósons. Observa-se que esse cálculo, tal como o da seção anterior, pode ser representado por um simples diagrama, Fig.(2.1b), caracterizando um gás de elétrons não-interagentes e um sistema de fônons livres.

Nesse sentido, efetuando o somatório das frequências de Matsubara, vide os resultados do Apêndice A.6, levando-se em conta a degenerescência de spin e fazendo a continuação analítica, eq.(1.4.25), obtemos a seguinte expressão para a parte imaginária do termo diagonal da função retardada força-força

$$\begin{aligned} Im \Pi_{\nu\nu}^R(w) = & 2\pi \sum_{\vec{q}, \vec{k}} q_\nu^2 |D_{ac}(q)|^2 [\eta_+(\epsilon_{\vec{k}}) - \eta_+(\epsilon_{\vec{k}+\vec{q}})] \times \\ & \{ [\eta_-(w_q) - \eta_-(w_q - w)] \delta(\epsilon_{\vec{k}+\vec{q}} - \epsilon_{\vec{k}} - w_q + w) - termo(w_q \rightarrow -w_q) \}, \end{aligned} \quad (2.2.5)$$

onde verifica-se facilmente que

$$Im \Pi_{\nu\nu}^R(0) = 0. \quad (2.2.6)$$

Além disso,

$$[\eta_-(w_q) - \eta_-(w_q - w)] = \frac{e^{\beta w_q} (e^{-\beta w} - 1)}{(e^{\beta w_q} - 1) (e^{\beta(w_q - w)} - 1)}, \quad (2.2.7)$$

tal que, podemos escrever o termo em que $w_q \rightarrow -w_q$ da seguinte forma:

$$[\eta_-(w_q) - \eta_-(w_q - w)] = [\eta_-(w_q) - \eta_-(w_q - w)]_{(w \rightarrow -w)}. \quad (2.2.8)$$

Expressamos a parte imaginária da função constante dielétrica a partir da função de polarização na aproximação RPA (vide Apêndice A.7), como sendo

$$\frac{\epsilon_2(\vec{q}, w)}{v_q} = 2\pi [\eta_+(\epsilon_{\vec{k}+\vec{q}}) - \eta_+(\epsilon_{\vec{k}})] \delta(\epsilon_{\vec{k}+\vec{q}} - \epsilon_{\vec{k}} - w_q + w). \quad (2.2.9)$$

Desse modo, podemos expressar a eq.(2.2.5) em termos de $\epsilon_2(\vec{q}, w)$ para um gás de elétrons bidimensional, tal que

$$\begin{aligned}
\text{Im } \Pi_{\nu\nu}^R(w) = & -\frac{1}{4\pi} \int dq q^3 |D_{ac}(q)|^2 \frac{e^{\beta w_q}}{(e^{\beta w_q} - 1)} \times \\
& \left\{ \frac{(e^{\beta w} - 1)}{(e^{\beta(w_q+w)} - 1)} \frac{\varepsilon_2(\vec{q}, w_q + w)}{v_q} - \text{termo}(w \rightarrow -w) \right\}, \quad (2.2.10)
\end{aligned}$$

onde usamos o fato de que $\varepsilon_2(\vec{q}, w)$ é uma função antissimétrica em frequência

$$\varepsilon_2(\vec{q}, -w) = -\varepsilon_2(\vec{q}, w), \quad (2.2.11)$$

e transformamos o somatório em 2 dimensões na seguinte integral

$$\begin{aligned}
\sum_{\vec{q}} q_\nu^2 F(|\vec{q}|) & \rightarrow \frac{1}{2} \sum_{\vec{q}} (q_\nu^2 + q_\mu^2) F(|\vec{q}|) = \frac{1}{2} \sum_{\vec{q}} q^2 F(|\vec{q}|) = \\
& \sum_{\vec{q}} q_\nu^2 F(|\vec{q}|) \rightarrow \frac{1}{4\pi} \int dq q^3 F(q), \quad (2.2.12)
\end{aligned}$$

tendo sido previamente efetuada a integração angular e com $F(q)$ representando uma função dependente apenas do módulo de q .

Desse modo, a expressão de $M''_{\nu\nu}(w)$ pode ser escrita simplesmente como sendo

$$\begin{aligned}
M''_{\nu\nu}(w) = & -\frac{1}{n_e m_e w} \text{Im } \Pi_{\nu\nu}^R(w) = \\
= & \frac{1}{4\pi n_e m_e} \int dq q^3 |D_{ac}(q)|^2 \frac{e^{\beta w_q}}{(e^{\beta w_q} - 1)} \times \\
& \left\{ w^{-1} \frac{(e^{\beta w} - 1)}{(e^{\beta(w_q+w)} - 1)} \frac{\varepsilon_2(\vec{q}, w_q + w)}{v_q} + \text{termo}(w \rightarrow -w) \right\}. \quad (2.2.13)
\end{aligned}$$

Nosso objetivo agora, é aplicar a expressão da FM, eq(2.2.13), ao caso particular de espalhamento do 2 DEG por fônons acústicos superficiais (2D) no limite estático.

$$M''(0) = \lim_{w \rightarrow 0} M''(w), \quad (2.2.14)$$

onde omitimos o sub-índice ν , por simplicidade, de modo a não sobrecarregar a notação. Assim,

$$M''(0) = \frac{2\beta}{4\pi n_e m_e} \int dq q^3 |D_{ac}|^2 \frac{e^{\beta w_q}}{(e^{\beta w_q} - 1)} \frac{\varepsilon_2(\vec{q}, w_q)}{v_q}, \quad (2.2.15)$$

onde

$$\lim_{w \rightarrow 0} \left\{ \frac{w^{-1}(e^{\beta w} - 1)}{(e^{\beta(w_q+w)} - 1)} \frac{\varepsilon_2(\vec{q}, w_q + w)}{v_q} + \text{termo}(w \rightarrow -w) \right\} = \frac{2\beta \varepsilon_2(\vec{q}, w_q)}{(e^{\beta w_q} - 1)}, \quad (2.2.16)$$

Expressamos a parte imaginária da constante dielétrica estática em 2D, de acordo com os resultados exibidos no Apêndice A.8, no regime de baixa temperatura, na estatística de Fermi-Dirac, Leal et al. (35, 36)

$$\begin{aligned} \frac{\varepsilon_2(\vec{q}, w_q)}{v_q} \cong & \frac{m_e}{2\pi\epsilon_q^{1/2}} \left\{ \left[2(E_F - \epsilon_1)^{1/2} - \frac{\pi^2\beta^{-2}}{12}(E_F - \epsilon_1)^{-3/2} \right] \Theta(E_F - \epsilon_1) + \right. \\ & \left. - \left[2(E_F - \epsilon_2)^{1/2} - \frac{\pi^2\beta^{-2}}{12}(E_F - \epsilon_2)^{-3/2} \right] \Theta(E_F - \epsilon_2) + O(T^4) \right\}, \end{aligned} \quad (2.2.17)$$

lembrando que

$$\begin{aligned} \epsilon_1 = \frac{(\epsilon_q - w_q)^2}{4\epsilon_q} \quad ; \quad \epsilon_2 = \frac{(\epsilon_q + w_q)^2}{4\epsilon_q} \\ \epsilon_2 - \epsilon_1 = w_q \quad ; \quad \epsilon_q = \frac{q^2}{2m_e}, \end{aligned} \quad (2.2.18)$$

Desse modo, assumindo a aproximação de Debye para a relação de dispersão dos fônons acústicos, i.e., $w_q = c_s q$ até um valor máximo $q_{max} = 2k_F$, que corresponde ao momento máximo transferido ao electron a baixa temperatura, e substituindo as expressões de $D_{ac}(q)$, eq.(2.1.2), e de $\varepsilon_2(\vec{q}, w_q)$, eq.(2.2.17), na eq.(2.2.15), obtemos, em primeira aproximação,

$$M''(0) \cong \frac{(2m_e)^{3/2} \Xi_d^2 \beta}{8\pi^2 m_e n_e m_i N c_s} \int_0^{q_{max}} dq q^3 \frac{e^{\beta c_s q}}{(e^{\beta c_s q} - 1)^2} \left[(E_F - \epsilon_1)^{1/2} - (E_F - \epsilon_2)^{1/2} \right], \quad (2.2.19)$$

expandindo em série de Taylor, desde que $E_F \gg \epsilon_1, \epsilon_2$, encontramos

$$\left[(E_F - \epsilon_1)^{1/2} - (E_F - \epsilon_2)^{1/2} \right] \cong \frac{1}{2} E_F^{-1/2} c_s q, \quad (2.2.20)$$

e daí,

$$M'' = \frac{(2m_e)^{3/2} \Xi_d^2 E_F^{-1/2} \beta}{16\pi^2 N n_e m_e m_i} \int_0^{q_{max}} dq q^4 \frac{e^{\beta c_s q}}{(e^{\beta c_s q} - 1)^2}, \quad (2.2.21)$$

Efetuando uma mudança de variável, e associando o momento q_{max} a uma temperatura θ_{max} , a qual define a escala de temperatura em nosso problema: $\theta = 2k_F c_s / k_B$. Em particular, no caso de heteroestruturas de GaAlAs/GaAs, temos $\theta_{max} \cong 10K$, (35). Desse modo, a integral

que aparece na expressão de $M''(0)$, pode ser escrita como uma simples integral de Debye de quarta ordem, $J_4(Y)$, desde que

$$\int_0^{q_{max}} \beta dq q^4 \frac{e^{\beta c_s q}}{(e^{\beta c_s q} - 1)^2} \rightarrow \frac{1}{\beta^4 c_s^5} \int_0^Y dx x^4 \frac{e^x}{(e^x - 1)^2} = \frac{1}{\beta^4 c_s^5} J_4(Y), \quad (2.2.22)$$

sendo

$$Y = \beta c_s q_{max} = \frac{\theta_{max}}{T}, \quad (2.2.23)$$

Desse modo, obtemos finalmente uma expressão geral para o tempo de relaxação de um sistema de elétrons bidimensionais (2 DEG) interagindo com fônons superficiais acústicos (2D) (35).

$$\Gamma^{-1} = M''(0) = \left(\frac{1}{2E_F}\right)^{1/2} \left(\frac{\Xi_d}{2\pi}\right)^2 \frac{m_e^{3/2}}{N n_e m_e m_i c_s^5} (k_B \theta_{max})^4 \left(\frac{T}{\theta_{max}}\right)^4 J_4(\theta_{max}/T), \quad (2.2.24)$$

Assumindo os valores assintóticos da integral de Debye, $J_4(Y)$. (35),

$$J_4(Y) = \frac{4\pi^4}{15} ; \quad \lim_{Y \rightarrow \infty}$$

$$J_4(Y) = \frac{Y^3}{3} ; \quad \lim_{Y \rightarrow 0}, \quad (2.2.25)$$

substituindo na expressão geral de $M''(0)$, eq.(2.2.24), encontramos, respectivamente, no limite de baixa temperatura (36) e alta temperatura (35):

$$\Gamma^{-1} = M''(0) = \left(\frac{2m_e}{E_F}\right)^{1/2} \frac{\Xi_d^2 \pi^2}{30 N n_e m_i c_s^5} (k_B \theta_{max})^4 \left(\frac{T}{\theta_{max}}\right)^4 ; \quad \frac{\theta_{max}}{T} \rightarrow \infty, \quad (2.2.26)$$

e

$$\Gamma^{-1} = M''(0) = \left(\frac{2m_e}{E_F}\right)^{1/2} \frac{\Xi_d^2}{24 \pi^2 c_s^5 N n_e m_i} (k_B \theta_{max})^4 \left(\frac{T}{\theta_{max}}\right) ; \quad \frac{\theta_{max}}{T} \rightarrow 0, \quad (2.2.27)$$

Nota-se que a dependência de temperatura do inverso do tempo de relaxação aparece explicitamente na eq.(2.2.24), como $(T/\theta_{max})^r J_r(\theta_{max}/T)$, e em particular, temos $r = 4$ para o caso de espalhamento do 2 DEG por fônons 2D acústicos. Este resultado, obtido pela primeira vez por Leal et al. (35,36), apresenta diferentes leis de potência de temperatura, em termos de θ_{max}/T , para os dois regimes de temperatura, a saber: $T \ll \theta_{max}$ e $T \gg \theta_{max}$. Conforme

discutimos na seção (2.1) a lei de potência da condutividade estática, obtida a partir da interação entre um sistema de fônons LA tridimensionais e um gás de elétrons 2D ou 3D, (24), é descrita em ambos os casos como sendo proporcional a $(\theta_{max}/T)^5$, no regime de baixa temperatura, i.e., $T \ll \theta_{max}$. Entretanto este resultado, conhecido na literatura como a relação de Bloch-Grüneisen, difere sensivelmente do resultado obtido nesta seção, onde encontramos a partir de um cálculo direto, via fórmula de Drude, que a condutividade "d.c.", $\sigma(T)$, apresenta um comportamento de temperatura proporcional a T^{-4} no regime de baixa temperatura. Desse modo, podemos concluir que, sob interação elétron-fônon LA, a dependência de temperatura das propriedades de transporte, por exemplo: condutividade, tempo de relaxação, mobilidade eletrônica etc, é fortemente afetada pela dimensionalidade do sistema de fônons, efeito de dimensionalidade da interação elétron-fônon, no regime quântico, i.e., $T \ll \theta_{max}$. Vale apenas ressaltarmos, ainda, que a mobilidade eletrônica, obtida em nossos cálculos via expressão de Drude, $\mu = e/m_e M''(0)$, no regime de $T \ll \theta_{max}$, decresce mais lentamente do que o resultado obtido por Price, (37), onde o efeito de blindagem ("screening") causado pelos elétrons sobre o potencial de interação foi considerado no cálculo. Apesar de termos desprezado este efeito em nossos cálculos, supondo sistemas de elétrons com baixa densidade de partículas, acreditamos que este problema possa ser incluído, a princípio, em nosso formalismo, a partir da determinação de uma nova constante dielétrica renormalizada, sem gerar necessariamente grandes dificuldades nos cálculos, podendo ser, no futuro, objeto de possíveis análises dentro do formalismo de Função Memória. Por outro lado, observamos que no limite clássico, i.e., $\theta_{max} \ll T \ll E_F/k_B$, as propriedades de transporte eletrônico exibem a mesma dependência de temperatura proporcional a T^{-1} (25, 35) tanto no caso de interação do 2 DEG com fônons LA 2D, eq.(2.2.27), quanto no caso de espalhamento do 2 DEG por fônons LA 3D, eq.(2.1.11). Este resultado, que está em excelente acordo com os resultados experimentais (38), permite-nos especular sobre o fato de que no regime de alta temperatura, tendo o material um comportamento típico de um metal 3D, o sistema de fônons LA venha a perder a informação acerca de sua dimensionalidade na interação com o gás de elétrons.

2.3 - Interação elétron-fônon em sistemas unidimensionais

Recentemente, muita atenção tem sido dada aos materiais condutores unidimensionais, caracterizados por um gás de elétrons de dimensão efetiva um (1 DEG). Esses sistemas unidimensionais, em geral, apresentam uma instabilidade peculiar conhecida como instabilidade de Peierls. Este fenômeno é caracterizado pela formação de um "gap" no nível de Fermi e a verificação de um máximo, bastante estreito, na variação do logaritmo da resistividade em relação a temperatura, i.e., $\partial \ln \rho / \partial T$, numa determinada temperatura, chamada temperatura de transição ou temperatura de Peierls, T_p . Esse decréscimo na condutividade e uma modulação da rede podem ser compreendido a partir do mecanismo de Peierls (39, 40), baseado na interação elétron-fônon. A interação elétron-fônon é responsável pelo aparecimento de uma onda de densidade de carga, "charge-density wave" (CDW), e por uma modulação da rede de comprimento de onda π/k_F no gás de elétrons unidimensional (1 DEG), sendo k_F o vetor de onda na superfície de Fermi. Este estado "CDW" tem sido verificado em muitos materiais metálicos 1D, como por exemplo, o condutor orgânico TTF-TCNQ (41). Entretanto, vários outros materiais caracterizados por um gás de elétrons unidimensional parecem não exibir uma transição de Peierls, como por exemplo, o material inorgânico, $Hg_{3-\delta}AsF_6$, caracterizado por uma cadeia linear incomensurável de Hg em um composto hospedeiro de AsF_6 , gerando desse modo uma dinâmica de rede unidimensional e conseqüentemente uma forte anisotropia nas propriedades eletrônicas (42). Além desses, outros exemplos de sistemas condutores uni- ou quase-unidimensionais têm sido investigados na literatura, tais como os compostos orgânicos $(TMTSF)_2PF_6$ e $(TMTSF)_2AsF_6$, que consistem em pilhas planas de moléculas de $TMTSF$ com complexos de PF_6 ou AsF_6 empilhados separadamente (43).

Por outro lado, muito interesse tem sido dado também ao estudo das propriedades de transporte eletrônico de sistemas unidimensionais denominados fios quânticos, "quantum-well-wire" (QWW). Esses sistemas, formados por materiais semicondutores, por exemplo $GaAs/GaAlAs$, são caracterizados por um gás de elétrons livres unidimensional, tal como numa estrutura de um fio, devido ao um forte confinamento em duas de suas dimensões (23, 44, 45). Nesse sen-

tido, vários trabalhos (46, 47) têm surgido, recentemente, na literatura ilustrando um crescente interesse na compreensão dos fenômenos de transporte em fios quânticos.

Nesta seção examinamos esses materiais 1D com uma estrutura do tipo de um fio quântico, sem apresentar instabilidade de Peierls, pelo menos, na faixa de temperatura de nosso interesse. Utilizamos o método de Função Memória e operador de projeção de modo a descrever o comportamento de temperatura das propriedades de transporte do 1 DEG, em particular, a mobilidade eletrônica, devido exclusivamente ao espalhamento por fônons longitudinais. Nesse sentido, supomos que, o número de fônons ópticos excitados termicamente na faixa de temperatura de nosso interesse seja relativamente pequeno, não sendo esperado, portanto, que o sistema de fônons ópticos venha a desempenhar um papel fundamental no processo de espalhamento do gás de elétrons em nosso problema. Nesse sentido, desprezamos esse tipo de interação com o 1 DEG e consideramos em nossos cálculos, apenas, o caso de espalhamento do 1 DEG devido a fônons longitudinais acústicos. Usando o método do potencial-deformação, podemos escrever que a Hamiltoniana do problema, descrevendo a interação entre um gás de elétrons unidimensional e um sistema de fônons LA, em relação ao centro de massa do sistema, é análoga a da eq.(2.1.1). Entretanto, devido à forte anisotropia do sistema, adotamos um modelo de 1D para o sistema de fônons, já que somente fônons com vetores de onda ao longo da mesma direção de movimento do 1 DEG contribuem para o espalhamento e conseqüentemente para a resistividade do sistema.

$$H = \sum_{\vec{k}} E_{\vec{k}} c_{\vec{k}}^{\dagger} c_{\vec{k}} + \sum_{\vec{q}} \hbar w_q a_{\vec{q}}^{\dagger} a_{\vec{q}} + \sum_{\vec{q}, \vec{k}} D_{ac}(q) c_{\vec{k}+\vec{q}}^{\dagger} (a_{\vec{q}} + a_{-\vec{q}}^{\dagger}) e^{i\vec{q} \cdot \vec{R}}, \quad (2.3.1)$$

com

$$D_{ac}(q) = [(\hbar/2m_i N w_q)]^{1/2} \Xi_d q, \quad (2.3.2)$$

onde mais uma vez utilizamos o modelo de Debye a fim de representar a frequência dos fônons LA, i.e., supomos que $w_q = c_s q$, sendo \vec{q} e c_s , respectivamente, o vetor de onda 1D dos fônons e a velocidade do som no material.

Partindo da expressão de Kubo para o tensor condutividade, eq.(1.1.3), podemos escrever simplesmente (ver seções anteriores) que a condutividade "d.c." pode ser obtida em termos da

Função Memória como

$$\sigma^{-1} = \frac{m_e}{n_e e^2} \text{Im } M(0), \quad (2.3.3)$$

sendo $M(0)$ o valor estático da função complexa Função Memória.

Utilizamos novamente, a função de correlação retardada força-força, $\Pi^R(w)$, como ponto de partida no cálculo da FM, tal que, na aproximação de ordem zero, temos que

$$M^{(0)}(0) = -\frac{1}{n_e m_e} \lim_{w \rightarrow 0} \Pi^R(w) w^{-1}, \quad (2.3.4)$$

onde por definição, eq.(1.3.4), escrevemos Π_{xx}^R em termos da força generalizada U_x agindo ao longo da única direção x de propagação dos elétrons e fônons,

$$U_x = -i \sum_{\vec{q}} q_x D_{ac}(q) \rho(\vec{q}) (a_{\vec{q}} + a_{-\vec{q}}^\dagger) e^{iq_x x}, \quad (2.3.5)$$

sendo que, por simplicidade, omitiremos o subíndice x ao longo deste trabalho.

A função de correlação retardada pode ser escrita, dentro do formalismo de Matsubara de frequências complexas, em termos da função de correlação densidade-densidade, $S(\vec{q}, ip_n)$, e da função de Green, $D(\vec{q}, iw - ip_n)$, que representa o sistema de fônons

$$\Pi^R(iw) = -2 \sum_{\vec{q}} q^2 |D_{ac}|^2 \frac{1}{\beta} \sum_{ip_n} S(\vec{q}, ip_n) D(\vec{q}, iw - ip_n), \quad (2.3.6)$$

onde levamos em conta a degenerescência de spin.

Entretanto, ao invés de usarmos a expressão acima, realizamos nossos cálculos fazendo aproximações de ordem zero nos propagadores de elétrons e de fônons, a saber: supomos um gás de elétrons unidimensional não-interagente e um sistema de fônons livres, eqs.(A.6.11) e (1.4.19), respectivamente. Neste sentido, após várias passagens algébricas, podemos expressar a parte imaginária de $\Pi^R(w)$ em termos da parte imaginária da constante dielétrica $\varepsilon_2(\vec{q}, w)$, na aproximação RPA, para um gás de elétrons 1D:

$$\text{Im } \Pi^R(w) = -2 \sum_{\vec{q}} q^2 |D_{ac}(q)|^2 \times$$

$$\times \left\{ \frac{e^{\hbar\beta w_q} (e^{\hbar\beta w} - 1)}{(e^{\hbar\beta w_q} - 1) (e^{\hbar\beta(w_q + w)} - 1)} \frac{\varepsilon_2(\vec{q}, w_q + w)}{v_q} - \text{termo}(w \rightarrow -w) \right\}, \quad (2.3.7)$$

De acordo com a eq.(2.3.4), no limite estático, i.e., $w \rightarrow 0$, a parte imaginária da Função Memória é dada por

$$M''(0) = \frac{2\hbar\beta}{n_e m_e} \sum_{\vec{q}} q^2 |D_{ac}(q)|^2 \frac{e^{\hbar\beta w_q}}{(e^{\hbar\beta w} - 1)^2} \frac{\varepsilon_2(\vec{q}, w_q)}{v_q}. \quad (2.3.8)$$

Calculamos a expressão de $\varepsilon_2(\vec{q}, w_q)$ para um sistema 1 DEG, na estatística de Fermi-Dirac, (vide Apêndice A.9), cujo resultado é dado por, Leal et al.(48)

$$\frac{\varepsilon_2(\vec{q}, w_q)}{v_q} = \frac{1}{\hbar} \left(\frac{2m_e}{\epsilon_q}\right)^{1/2} [\eta_+(\epsilon_-) - \eta_+(\epsilon_+)], \quad (2.3.9)$$

onde $\eta_+(\epsilon)$ é a função distribuição de Fermi-Dirac, v_q é a transformada de Fourier do potencial de Coulomb, enquanto, ϵ_q e ϵ_{\mp} são dados, respectivamente, por

$$\epsilon_q = \frac{\hbar^2 q^2}{2m_e}, \quad (2.3.10)$$

e

$$\epsilon_{\mp} = \frac{(\epsilon_q \mp \hbar w_q)^2}{4\epsilon_q} = \epsilon_0 \left[\frac{\hbar q}{2m_e c_s} \mp 1 \right]^2, \quad (2.3.11)$$

sendo

$$\epsilon_0 = \frac{m_e c_s^2}{2}. \quad (2.2.12)$$

Considerando o caso de espalhamento do 1 DEG por fônons LA 1D, com momento máximo transferido $q_{max} = 2k_F = 2\pi n_e/2$, para o caso particular do 1 DEG (49), e transformando o somatório em \vec{q} numa integral simples na variável q , obtemos após algumas substituições que

$$M''(0) = \frac{\Xi_d^2 \beta}{\pi N n_e m_i c_s} \int_0^{2k_F} dq q^2 \frac{e^{\beta\hbar c_s q}}{(e^{\beta\hbar c_s q} - 1)^2} [\eta_+(\epsilon_-) - \eta_+(\epsilon_+)]. \quad (2.3.13)$$

De acordo com as definições de $\epsilon_{\mp}(q)$, eq.(2.3.11), podemos separar as duas equações integrais, eq.(2.3.13), da seguinte forma

$$I_-(\beta) = \int_0^{2k_F} dq q^2 \frac{e^{\beta\hbar c_s q}}{(e^{\beta\hbar c_s q} - 1)^2} \eta_+(\epsilon_-) =$$

$$I_-(\beta) = I'_-(\beta) + I''_-(\beta) + I'''_-(\beta), \quad (2.3.14)$$

e

$$I_+(\beta) = \int_0^{2k_F} dq_+ q_+^2 \frac{e^{\beta\hbar c_s q_+}}{(e^{\beta\hbar c_s q_+} + 1)^2} \eta_+(\epsilon_+), \quad (2.3.15)$$

onde

$$I'_-(\beta) = \int_0^{2m_e c_s / \hbar} dq'_- q'^{-2} \frac{e^{\beta\hbar c_s q'_-}}{(e^{\beta\hbar c_s q'_-} - 1)^2} \eta_+(\epsilon_-(q'_-)), \quad (2.3.16a)$$

$$I''_-(\beta) = \int_{2m_e c_s / \hbar}^{4m_e c_s / \hbar} dq''_- q''^{-2} \frac{e^{\beta\hbar c_s q''_-}}{(e^{\beta\hbar c_s q''_-} - 1)^2} \eta_+(\epsilon_-(q''_-)), \quad (2.3.16b)$$

$$I'''_-(\beta) = \int_{4m_e c_s / \hbar}^{2k_F} dq'''_- q'''^{-2} \frac{e^{\beta\hbar c_s q'''_-}}{(e^{\beta\hbar c_s q'''_-} - 1)^2} \eta_+(\epsilon_-(q'''_-)), \quad (2.3.16c)$$

sendo os limites de integração, nas equações acima, obtidos a partir da relação direta entre as variáveis q'_-, q''_-, q'''_-, q_+ , e as definições de ϵ_{\mp} , eq.(2.3.11), tal que

$$q'_- = \frac{2m_e c_s}{\hbar} [1 - \epsilon_0^{-1/2} \epsilon_-^{1/2}] \quad \epsilon_- \leq \epsilon_0, \quad (2.3.17a)$$

$$q''_- = \frac{2m_e c_s}{\hbar} [1 + \epsilon_0^{-1/2} \epsilon_-^{1/2}] \quad \epsilon_- \leq \epsilon_0, \quad (2.3.17b)$$

$$q'''_- = \frac{2m_e c_s}{\hbar} [1 + \epsilon_0^{-1/2} \epsilon_-^{1/2}] \quad \epsilon_- > \epsilon_0, \quad (2.3.17c)$$

$$q_+ = \frac{2m_e c_s}{\hbar} [-1 + \epsilon_0^{-1/2} \epsilon_+^{1/2}] \quad \epsilon_+ \geq \epsilon_0, \quad (2.3.17d)$$

Efetuando uma mudança de variáveis de $q \rightarrow \epsilon$, transformamos cada uma das equações integrais, representadas pelas eqs.(2.3.14) e (2.3.15), em integrais na variável de energia, ϵ , com a seguinte forma geral

$$I(\beta) = \int_a^b d\epsilon g(\epsilon) \eta_+(\epsilon), \quad (2.3.18)$$

e em particular, obtemos

$$I_-(\beta) = A \left[\int_0^{\epsilon_0} d\epsilon g'_-(\epsilon) \eta_+(\epsilon) + \int_0^{\epsilon_-(2k_F)} d\epsilon g''_-(\epsilon) \eta_+(\epsilon) \right], \quad (2.3.19)$$

e

$$I_+(\beta) = A \left[\int_{\epsilon_0}^{\epsilon_+(2k_F)} d\epsilon g_+(\epsilon) \eta_+(\epsilon) \right], \quad (2.3.20)$$

onde

$$A = \left(\frac{2m_e c_s}{\hbar} \right)^2 \frac{(2m_e)^{1/2}}{\hbar}, \quad (2.3.21)$$

enquanto,

$$g'_-(\epsilon) = [1 - \epsilon_0^{-1/2} \epsilon^{1/2}]^2 \frac{e^{4\beta\epsilon_0(1-\epsilon^{-1/2}\epsilon^{1/2})}}{(e^{4\beta\epsilon_0(1-\epsilon_0^{-1/2}\epsilon^{1/2})} - 1)^2} \epsilon^{-1/2}, \quad (2.3.22)$$

$$g''_-(\epsilon) = g'''_-(\epsilon) = [1 + \epsilon_0^{-1/2} \epsilon^{1/2}]^2 \frac{e^{4\beta\epsilon_0(1+\epsilon^{-1/2}\epsilon^{1/2})}}{(e^{4\beta\epsilon_0(1+\epsilon_0^{-1/2}\epsilon^{1/2})} - 1)^2} \epsilon^{-1/2}, \quad (2.3.23)$$

e

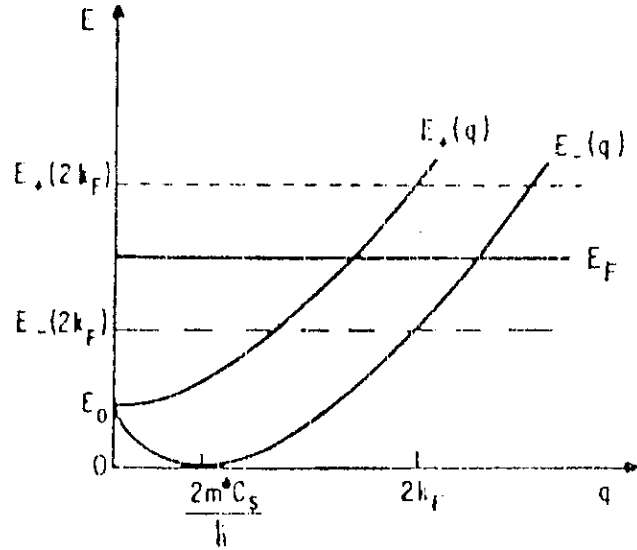
$$g_+(\epsilon) = [-1 + \epsilon_0^{-1/2} \epsilon^{1/2}]^2 \frac{e^{4\beta\epsilon_0(-1+\epsilon_0^{-1/2}\epsilon^{1/2})}}{(e^{4\beta\epsilon_0(-1+\epsilon_0^{-1/2}\epsilon^{1/2})} - 1)^2} \epsilon^{-1/2}, \quad (2.3.24)$$

A Figura (2.2) descreve o comportamento das curvas de energia de ϵ_{\mp} em função do momento transferido q , permitindo uma descrição da região de integração em ϵ . Supomos no caso do *GaAs/GaAlAs* os seguintes valores: $n_e = 4 \cdot 10^5 \text{ cm}^{-3}$; $c_s = 5 \cdot 10^5 \text{ cm/s}$ (45), tal que

$$\epsilon_-(2k_F) \cong E_F - O(k_F)$$

$$\epsilon_+(2k_F) \cong E_F + O(k_F), \quad (2.3.25)$$

Fig. 2.2 - Energias $\epsilon_+(q)$ e $\epsilon_-(q)$ em função do momento transferido q . De acordo com a eq.(2.3.25), temos $\epsilon_-(2k_F) < E_F < \epsilon_+(2k_F)$.



A equação integral de $I(\beta)$, eq.(2.3.18), apresenta uma simples solução, através da expansão de Sommerfeld (vide Apêndice A.10), tal que

$$I(\beta) = [G(E_F) - G(a)] \Theta(E_F - a) - [G(E_F) - G(b)] \Theta(E_F - b), \quad (2.3.26)$$

onde

$$G(\epsilon) = \int_0^\epsilon g(\epsilon') d\epsilon'. \quad (2.3.27)$$

Conseqüentemente, substituindo na eq.(2.3.36) os valores dos limites a e b de cada equação integral, eq.(2.3.19) e eq.(2.3.20), obtemos

$$I_-(\beta) = A \{ [G'_-(E_F) - (G'_-(E_F) - G'_-(\epsilon_0)) \Theta(E_F - \epsilon_0)] + \\ + [G''_-(E_F) - (G''_-(E_F) - G''_-(\epsilon_-(2k_F))) \Theta(E_F - \epsilon_-(2k_F))] \}, \quad (2.3.28)$$

e

$$I_+(\beta) = A \{ [G_+(E_F) - G_+(\epsilon_0)] \Theta(E_F - \epsilon_0) + \\ - [G_+(E_F) - G_+(\epsilon_+(2k_F))] \Theta(E_F - \epsilon_+(2k_F)) \}, \quad (2.3.29)$$

onde, de acordo com a eq.(2.3.27) e substituindo as expressões definidas nas eqs. (2.3.22), (2.3.23) e (2.3.24), temos, após algumas mudanças de variáveis,

$$A G'_-(\epsilon) = -\frac{\beta^{-3}}{\hbar^3 c_s^3} [J_2(X'_-(\epsilon)) - J_2(4\beta\epsilon_0)], \quad (2.3.30a)$$

$$A G''_-(\epsilon) = \frac{\beta^{-3}}{\hbar^3 c_s^3} [J_2(X''_-(\epsilon)) - J_2(4\beta\epsilon_0)], \quad (2.3.30b)$$

$$A G_+(\epsilon) = \frac{\beta^{-3}}{\hbar^3 c_s^3} [J_2(X_+(\epsilon)) + J_2(4\beta\epsilon_0)], \quad (2.3.30c)$$

sendo,

$$X'_-(\epsilon) = 4\beta\epsilon_0(1 - \epsilon_0^{-1/2} \epsilon^{1/2}), \quad (2.3.31a)$$

$$X''_-(\epsilon) = 4\beta\epsilon_0(1 + \epsilon^{-1/2} \epsilon^{1/2}), \quad (2.3.31b)$$

$$X_+(\epsilon) = 4\beta\epsilon_0(-1 + \epsilon^{-1/2} \epsilon^{1/2}), \quad (2.3.31c)$$

onde $J_2(Y)$ é a integral de Debye de ordem $r = 2$, atendendo à seguinte propriedade: $J_2(Y) = -J_2(-Y)$.

Desse modo, fazendo as substituições acima e levando na eq.(2.3.13), obtemos finalmente uma expressão analítica para o tempo de relaxação, via Função Memória, para o espalhamento do gás de elétrons unidimensional com fônons LA 1D, Leal et al.(48)

$$\Gamma^{-1} = M''(0) \cong \frac{\Xi_d^2 \beta^{-2}}{\pi N n_e m_i \hbar^3 c_s^4} \times$$

$$\times \{ J_2 [4\beta\epsilon_0(1 + (E_F/\epsilon_0)^{1/2})] - J_2 [4\beta\epsilon_0(-1 + (E_F/\epsilon_0)^{1/2})] \}, \quad (2.3.32)$$

Além disso, podemos obter ainda uma expressão do comportamento de temperatura da mobilidade eletrônica estática, μ , via fórmula de Drude, como

$$\mu(T) \cong A' \left(\frac{T}{\theta_{max}} \right)^{-2} \{ J_2 [4\beta\epsilon_0(1 + (E_F/\epsilon_0)^{1/2})] - J_2 [4\beta\epsilon_0(-1 + (E_F/\epsilon_0)^{1/2})] \}^{-1}, \quad (2.3.33)$$

sendo

$$A' = \frac{\pi e N n_e m_i \hbar^3 c_s^4}{m_e \Xi_d^2 (k_B \theta_{max})^2}, \quad (2.3.34)$$

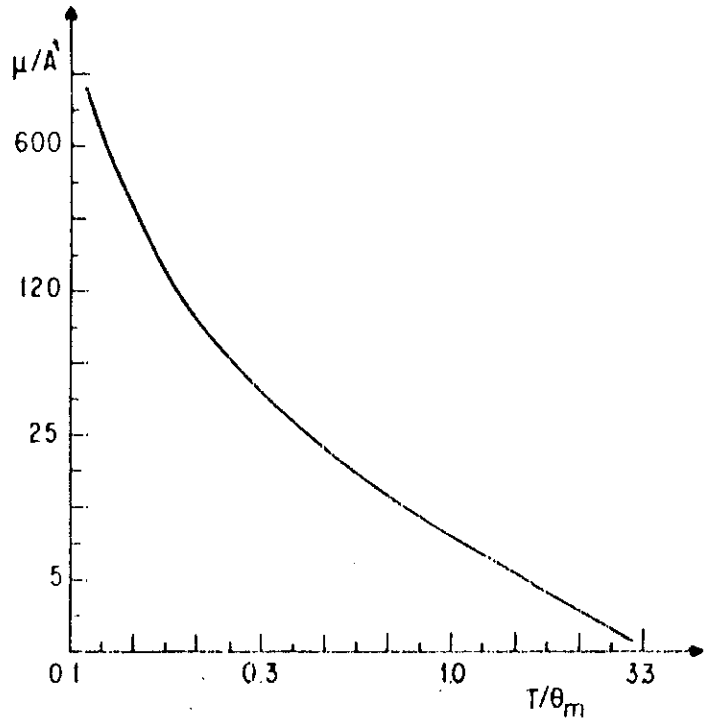
onde introduzimos a temperatura θ_{max} associada ao momento máximo transferido ao elétron, no regime de baixas temperaturas, i.e., $k_B T \ll E_F$. No caso de um fio quântico de *GaAs/GaAlAs* encontramos $\theta_{max} = 4.4K$.

A dependência de temperatura da mobilidade eletrônica para um gás de elétrons unidimensional interagindo com um sistema de fônons longitudinais acústicos 1D, descrita pela eq.(2.3.33), é válida para toda a faixa de temperatura em que o material tem um comportamento metálico. Neste trabalho, efetuamos nossos cálculos da dependência de temperatura de $\mu(T)$, para o caso do "QWW" de *GaAs/GaAlAs*, numa faixa de temperatura de $T/\theta_{max} \cong 0.1$ até o valor de $T = T_F$, onde T_F representa a temperatura de Fermi, que vale em torno de $15K$ neste caso.

Observamos na Figura (2.3), através do gráfico log-log, que os resultados numéricos da mobilidade (em unidades de A'), obtidos em nosso modelo, via eq. (2.3.33), apresentam uma complexa variedade em leis de potência de T/θ_{max} , ao longo de toda a faixa de temperatura de interesse, i.e., longe da região de instabilidade de Peierls. Em particular, no limite de altas temperaturas, i.e., $T > \theta_{max}$, a curva da mobilidade em função da temperatura apresenta uma inclinação proporcional a -1 , o que corresponde a se ter uma resistividade ρ linearmente proporcional a T .

Por outro lado, no limite de baixas temperaturas, i.e., $T < \theta_{max}$, observamos, através da Fig.(2.3), que a inclinação negativa da curva $\mu/A' \times T/\theta_{max}$ aumenta rapidamente a medida em que a temperatura decresce, indo de T^{-2} entorno de $T/\theta_{max} \cong 0.25$ até potências cada vez maiores para temperaturas muito baixas.

Fig. 2.3 - Dependência de temperatura da mobilidade eletrônica $\mu(T)$, em unidades de A' , na faixa de temperatura $T < \theta_{max}$ e $1 < T/\theta_{max} < T_F = 15K$ para um fio quântico de $GaAs/GaAlAs$. A' é uma constante dada pela eq.(2.3.34).



Neste sentido, é interessante compararmos os resultados numéricos obtidos em nosso modelo (48), a fim de descrever a mobilidade eletrônica de um material caracterizado por um gás de elétrons 1D sob espalhamento por fônons 1D LA, via Função Memória, com os resultados obtidos, através de outros modelos, para alguns outros sistemas metálicos unidimensionais. Em particular, Conwell et al. (50), realizaram um cálculo "tight-binding", baseado na equação de Boltzmann, para o cálculo da resistividade do composto $(TMTSF)_2PF_6$, na região metálica, i.e., a partir da temperatura de transição de Peierls do composto, $T_p = 14K$, até o limite de altas temperaturas, $T > \theta_{max}$. Nesse sentido, os autores, ref. (50), obtiveram uma dependência de temperatura de ρ proporcional a $1/\sinh(\theta_{max}/T)$, sendo $\theta_{max} = 60K$ neste caso. Entretanto, ambos os modelos apresentam de uma forma geral leis de potências similares para a resistividade, nas regiões $T/\theta_{max} \cong 0.25$ e $T > \theta_{max}$, dadas respectivamente por T^2 e T^1 , em excelente acordo com os resultados experimentais exibidos por Conwell (50).

Isto permite-nos sugerir que o fato de usarmos em nossos cálculos, para as propriedades de transporte em sistemas unidimensionais sob interação elétron-fônon, o modelo de potencial de deformação (48), ao invés de um acoplamento elétron-fônon característico de compostos de cadeias lineares, via uma aproximação "tight-binding" (41, 50) não representa um papel fundamental na determinação dessas propriedades, uma vez que os resultados obtidos em ambos os modelos apresentam resultados bastante semelhantes para a resistividade do sistema em

função da temperatura. Nesse sentido, esperamos que o modelo aqui proposto para um fio quântico de $GaAs/GaAlAs$, possa ser aplicado, sem maiores problemas, a outros sistemas metálicos 1D, como por exemplo: $Hg_{3-\delta}AsF_6$, $(TMTSF)_2PF_6$, etc, na faixa de temperatura acima da transição de Peierls, levando-se em conta, em cada caso, os correspondentes valores da temperatura característica θ_{max} .

Vale apenas mencionar, que o modelo proposto neste trabalho para sistemas unidimensionais, via formalismo de FM (48), pode ser ainda generalizado de modo a obter propriedades de transporte dinâmicas ou incluir efeitos de muitos-corpos em nossos cálculos. De fato, a aproximação de um gás de elétrons não-interagentes, utilizada ao longo deste trabalho, na função de correlação densidade-densidade, $S^{(0)}(\vec{q}, ip_n)$, implica no fato de se desprezar as correções quânticas na determinação da condutividade. Entretanto, esperamos que esses efeitos não desempenhem um papel importante para o caso de espalhamento por fônons LA num material 1D, na faixa de temperatura de interesse. Além disso, podemos utilizar o formalismo de FM de modo a descrever as propriedades de transporte em sistemas quase-unidimensionais com diferentes arquiteturas quanto ao confinamento do gás de elétrons 1D (51, 52). Nesse sentido, Baldan et al. (51) apresentaram recentemente um cálculo da resistividade de um sistema quase-unidimensional, modelando os estados de elétrons através de um confinamento lateral do tipo potencial harmônico (eixo x) e uma barreira de potencial na direção do crescimento epitaxial (eixo z) e livres de movimento na direção de um fio quântico de $GaAs/GaAlAs$. Nesse trabalho, ref.(51), os autores puderam observar o comportamento da resistividade, como função da densidade de elétrons e da temperatura, levando em conta a posição do nível de Fermi e efeitos de transições inter- e intra- sub-bandas, devido a espalhamentos por fônons ópticos longitudinais 3D. Finalmente, podemos ainda estender nosso formalismo de FM a incluir efeitos da ação de campo magnético externo em sistemas de baixa dimensionalidade. Neste sentido, cálculos nessa direção foram efetuados nos capítulos que se seguem para sistemas bidimensionais.

CAPÍTULO 3

Neste capítulo discutiremos as propriedades de magneto-transporte em sistemas com um gás de elétrons bidimensional (2 DEG), ou seja, com o movimento dos elétrons confinado num plano, tais como, em camadas de inversão de *Si - MOSFET* ("Metal-Oxide-Semiconductor Field Effect Transistor") e heteroestruturas semicondutoras de *GaAs/GaAlAs*, sob a ação de um campo magnético externo forte (20, 30). Tem-se observado, na literatura, um crescente interesse nos últimos anos quanto ao estudo do comportamento da ressonância ciclotrônica (RC) nesses materiais. Em grande parte, isto se deve ao fato de que a ressonância ciclotrônica num campo magnético forte, aplicado na direção perpendicular ao plano de condução dos elétrons, tem sido um instrumento bastante útil na investigação das propriedades dinâmicas desses materiais, para vários tipos de mecanismos de espalhamentos (30, 31). Como exemplo, temos que as medidas de RC obtidas a partir do espectro de absorção magneto-óptica de um 2 DEG interagindo com fônons longitudinais ópticos (LO) podem fornecer importantes descrições acerca dos efeitos polarônicos como, por exemplo, a renormalização da massa ciclotrônica do polaron (53, 54).

De uma forma geral, a interação do 2 DEG tanto com fônons LO tridimensionais quanto com fônons longitudinais acústicos (LA) 3D tem sido objeto de um grande número de estudos teóricos (53 - 56) e experimentais (34, 57). Entretanto, existe apenas um número bastante reduzido de trabalhos teóricos que tratam efetivamente do efeito da interação entre o gás de elétrons bidimensional e modos de fônons superficiais (2D) (35, 58) e que discutem a importância desse tipo de interação nas propriedades de magneto-transporte. Neste sentido, verificou-se recentemente,

ref.(59), que a contribuição dominante na interação elétron-fônon, no caso de poços quânticos estreitos, advém principalmente dos modos superficiais, nas interfaces dos materiais semicondutores, enquanto que em sistemas com larguras maiores que 100\AA , a contribuição principal se deve aos modos de vibração de fônons tridimensionais ("bulk"). Do ponto de vista experimental, recentes resultados obtidos por Wixforth et al. (34) mostraram que, para algumas arquiteturas de heterojunções, a interação 2D- elétron - fônon LA, sob a ação de um campo magnético forte, pode ser responsável por oscilações quânticas na atenuação do som. Além disso, Brummell et al. (57) sugeriram que a dependência de temperatura observada no espectro de ressonância ciclotrônica numa heteroestrutura de *GaAs/GaAlAs*, possa ser derivada de um espalhamento do 2 DEG por fônons LO superficiais.

Neste sentido, discutiremos neste capítulo, a importância do papel da interação entre um gás de elétrons e fônons superficiais num sistema 2 DEG. Utilizaremos o método de Função Memória a fim de investigar os efeitos de muitos-corpos no espectro de ressonância ciclotrônica e o comportamento da magnetocondutividade, devido a espalhamento por fônons longitudinais acústicos superficiais, em termos dos efeitos dissipativos e reativos do gás de elétrons. As propriedades da RC do 2 DEG interagindo com fônons LA, foram estudadas, inicialmente, por Horovitz et al. (56) e mais recentemente por Hu e O'Connell (60). Entretanto, vários aspectos fundamentais acerca da dinâmica dos elétrons, não considerados por esses autores, são descritos de maneira sistemática ao longo deste capítulo. Efetuamos o cálculo das propriedades dinâmicas de transporte do 2 DEG, baseados num simples modelo de temperatura finita, onde desprezamos, por simplicidade, os efeitos de não-parabolicidade da banda de condução e o efeito de "screening" no gás de elétrons, e analisamos o comportamento das contribuições da FM em função da temperatura e da intensidade do campo magnético. Na seção (3.1) descrevemos a hamiltoniana do sistema, sob a ação de um campo magnético, no referencial do centro de massa do gás de elétrons (17) e estendemos o formalismo de Função Memória de modo a incluir efeitos magnéticos no cálculo da função de correlação, tal como no trabalho de da Cunha Lima e Ying (10). Na seção (3.2) efetuamos o cálculo da função de correlação força-força, devido ao espalhamento por fônons superficiais LA, em termos da função de polarização do gás de elétrons sob a ação de um campo

magnético, a partir de funções de Green de quase-partículas de Landau. Finalmente, na seção (3.3) apresentamos os resultados numéricos da dependência de temperatura e de intensidade do campo magnético das contribuições $M'(w)$ e $M''(w)$ da Função Memória e investigamos os efeitos de muitos-corpos, responsáveis pelo surgimento de vários picos ressonantes no espectro de absorção e de emissão de fônons, no cálculo da magnetocondutividade, em excelente acordo com os resultados experimentais (61).

3.1 - Hamiltoniana e formalismo de FM na presença de campo magnético

Na presença de um campo magnético forte, $\vec{B} = B\hat{z}$, aplicado perpendicularmente a camada de elétrons bidimensional (2 DEG), como no caso de uma camada de inversão num *Si - MOSFET* ou em outras heteroestruturas semicondutoras, como num poço quântico de *GaAs/GaAlAs*, os níveis de energia do gás de elétrons 2D, não-interagentes, são completamente quantizados em níveis discretos de Landau (30). Em particular, na ausência de espalhamento por impurezas, a densidade de estados do 2 DEG consiste numa série de funções δ -Dirac nas posições desses níveis de Landau. Neste trabalho desprezaremos os espalhamentos por impurezas, de modo que nenhum alargamento dos níveis de Landau será considerado para efeito de cálculo das propriedades de transporte. Introduzimos a hamiltoniana do sistema, descrevendo a interação entre o 2 DEG e os fônons superficiais LA, sob a ação de um campo magnético perpendicular a direção de movimento do 2 DEG, da seguinte forma

$$H = H_{ele} + H_{ele-ele} + H_{fon} + \dot{H}_{ele-fon}, \quad (3.1.1)$$

onde o primeiro termo, H_{ele} , correspondendo a energia cinética dos elétrons 2D, é dado por

$$H_{ele} = \sum_j \frac{1}{2m_e} (\vec{p}_j + n_e e \vec{A}(\vec{r}_j))^2, \quad (3.1.2)$$

onde \vec{p}_j (\vec{r}_j) é o operador 2D- momento linear (posição) do j -ésimo elétron, n_e representa o número de elétrons por unidade de área, m_e é a massa efetiva da banda, enquanto $\vec{A}(\vec{r}_j)$ repre-

senta o potencial vetor descrevendo o campo magnético (na direção do eixo z) perpendicular a camada bidimensional (plano xy) de movimento dos elétrons que estejam nas posições \vec{r}_j .

O segundo termo da eq.(3.1.1), $H_{ele-ele}$, descreve a interação elétron-elétron

$$H_{ele-ele} = \sum_{j>l} V(\vec{r}_j - \vec{r}_l), \quad (3.1.3)$$

e os dois últimos termos da eq.(3.1.1), H_{fon} e $H_{ele-fon}$, correspondem, respectivamente, a hamiltoniana relativa aos fônons LA, e a interação elétron- fônon, sendo que ambos os termos podem ser descritos no formalismo de segunda quantização, da seguinte forma

$$H_{fon} = \sum_{\vec{q}} \hbar w_q a_{\vec{q}}^{\dagger} a_{\vec{q}}, \quad (3.1.4a)$$

e

$$H_{ele-fon} = \sum_{\vec{q}} D_{ac}(q) \rho(\vec{q}) A_{\vec{q}}, \quad (3.1.4b)$$

onde $a_{\vec{q}}^{\dagger}$ ($a_{\vec{q}}$) é o operador criação (destruição) de um fônon 2D LA com vetor de onda \vec{q} e energia $\hbar w_q$, $D_{ac}(q)$ é o potencial de interação elétron-fônon, eq.(2.3.2), $\rho(\vec{q})$ é o operador densidade de elétrons , enquanto $A_{\vec{q}} = (a_{\vec{q}} + a_{-\vec{q}}^{\dagger})$.

Usando o fato de que para um campo magnético uniforme, o potencial vetor $\vec{A}(\vec{r}_j)$ possa ser escrito como,

$$\vec{A}(\vec{r}_j) = \vec{A}(\vec{r}_j - \vec{R}) + \vec{A}(\vec{R}), \quad (3.1.5)$$

e introduzindo o conceito de centro de massa (CM), tal que possamos separar na hamiltoniana, o movimento do centro de massa, visto agora, exatamente, como uma partícula de carga $-n_e e$ e massa $M_e = n_e m_e$ num campo magnético uniforme, e o movimento relativo dos elétrons, podemos reescrever a hamiltoniana, eq.(3.1.1), da seguinte forma

$$H = \left[\frac{\vec{P} + n_e e \vec{A}(\vec{R})}{2M_e} \right]^2 + \sum_{\vec{q}} \hbar w_q a_{\vec{q}}^{\dagger} a_{\vec{q}} + \sum_{\vec{q}} D_{ac}(q) A_{\vec{q}} \rho(\vec{q}) e^{i\vec{q} \cdot \vec{R}} + H_{rel}, \quad (3.1.6)$$

onde $\vec{P}(\vec{R})$ é o momento (coordenada) do centro de massa dos elétrons. H_{rel} é a hamiltoniana que descreve o movimento relativo entre os elétrons, incluindo as interações elétron-elétron e que

depende apenas das coordenadas relativas dos elétrons. Além disso, escolhemos um "gauge" de Landau (vide Apêndice A.11), tal que, $\vec{A}(\vec{R}) = (0, Bx, 0)$.

Deste modo, podemos definir o vetor momento linear, $\vec{\pi}$, tal que

$$\vec{\pi} = \vec{P} + n_e e \vec{A} = P_x \hat{i} + (P_y + n_e e m_e w_c x) \hat{j}, \quad (3.1.7)$$

onde $w_c = eB/m_e$ representa a frequência ciclotrônica.

Partimos da definição da função de Green retardada, $Q_{\nu\mu}(t)$, associada a função de correlação densidade de corrente, $J(t)$, eq.(1.1.4), e introduzimos esse resultado na expressão de Kubo para o tensor condutividade, eq.(1.1.3). Após algumas passagens algébricas, obtemos a condutividade, $\sigma_{\nu\mu}(z)$, no formalismo de Função Memória, em termos da transformada de Laplace da função de correlação momento- momento, $C_{\nu\mu}(z)$, (vide Capítulo I), tal que

$$\sigma_{\nu\mu}(z) = \frac{e^2 \beta}{m_e^2} C_{\nu\mu}(z) = \frac{e^2 \beta}{m_e^2} \frac{i \beta^{-1} \chi_{\nu\mu}}{[z \delta_{\nu\mu} - \Omega_{\nu\mu} + M_{\nu\mu}(z)]}, \quad (3.1.8)$$

sendo

$$\tilde{\chi} = n_e m_e \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (3.1.9)$$

e

$$\tilde{\Omega} = \tilde{w} \tilde{\chi}^{-1}, \quad (3.1.10)$$

onde (vide Apêndice A.4)

$$w_{\nu\mu} = i\beta \langle \tilde{\pi}_\nu | \pi_\mu \rangle = \langle [\pi_\nu, \pi_\mu] \rangle_{eq}, \quad (3.1.11)$$

Fazendo uso da definição de π_ν , eq.(3.1.7), com $\nu = x$ e $\mu = y$, e usando a expressão da hamiltoniana, eq.(3.1.6), obtemos

$$\pi_x = \frac{i}{\hbar} [H, \pi_x] = \frac{1}{\hbar} (-w_c \pi_y - U_x), \quad (3.1.12a)$$

$$\pi_y = \frac{i}{\hbar} [H, \pi_y] = \frac{1}{\hbar} (w_c \pi_x - U_y), \quad (3.1.12b)$$

onde a força generalizada U_ν , devido ao espalhamento elétron-fônon, agindo sobre o centro de massa, é definido de acordo com a eq.(1.3.2). Desse modo, obtemos

$$[\pi_x, \pi_y] = -in_e m_e w_c, \quad (3.1.13a)$$

$$[\pi_y, \pi_x] = i n_e m_e w_c, \quad (3.1.13b)$$

e conseqüentemente,

$$\tilde{\Omega} = -i w_c \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (3.1.14)$$

onde verifica-se imediatamente que no caso em que há a aplicação de um campo magnético, obtemos $\tilde{\Omega} \neq 0$, caracterizando um sistema sem simetria de inversão temporal (6). Além disso, verificamos, a partir das eqs.(3.1.12) e (3.1.13), a seguinte condição: $\langle U_\nu | \pi_\mu \rangle = 0$, $\forall \nu, \mu$.

Introduzimos o formalismo de operador de projeção \mathbf{P} em termos da variável momento $\pi_\nu(t)$ (vide Capítulo 1)

$$\mathbf{P} = \sum_{\nu\mu} | \pi_\nu \rangle \beta \chi_{\nu\mu}^{-1} \langle \pi_\mu | \equiv \mathbf{1} - \mathbf{Q}, \quad (3.1.15)$$

tal que, de acordo com as definições acima, verificamos as seguintes condições:

$$\mathbf{P} | \pi_\nu \rangle = | \pi_\nu \rangle$$

$$\mathbf{Q} | \pi_\nu \rangle = 0$$

$$\mathbf{Q} | U_\nu \rangle = | U_\nu \rangle, \quad (3.1.16)$$

A Função Memória, $M(z)$, pode ser escrita como sendo,

$$M_{\nu\mu}(z) = i\beta \langle U_\nu | \frac{i}{z - \mathbf{QLQ}} | U_\mu \rangle, \quad (3.1.17)$$

e após algumas aproximações, escrevemos a FM, na aproximação de ordem zero, em termos da função de correlação retardada força-força, $\Pi_{\nu\mu}^R(w)$,

$$M_{\nu\mu}^{(0)}(w) = -\frac{1}{n_e m_e w} [\Pi_{\nu\mu}^R(w) - \Pi_{\nu\mu}^R(0)], \quad (3.1.18)$$

Neste formalismo, a condutividade dinâmica de um gás de elétrons bidimensional num campo magnético, (62), pode ser escrita da seguinte forma

$$\sigma_\pm(w) = \sigma_{xx} \pm i\sigma_{xy}(w) = \frac{i n_e e^2}{m_e} [w \mp w_c + M(w)]^{-1}, \quad (3.1.19)$$

com

$$M(w) = M'(w) + iM''(w), \quad (3.1.20)$$

onde σ_{xx} e σ_{xy} são, respectivamente, a condutividade transversal e a condutividade Hall, enquanto o sinal $+(-)$ representa uma onda circularmente polarizada para à esquerda (direita). $M'(w)$ e $M''(w)$ representam, respectivamente, as componentes diagonais das parte real e da parte imaginária da Função Memória, descrevendo os efeitos reativos e dissipativos da dinâmica dos elétrons, responsáveis, respectivamente, pelo deslocamento e pela largura da linha de ressonância ciclotrônica.

Desta forma, o comportamento de $\sigma(w)$ em função da frequência, temperatura e intensidade do campo magnético fica determinado, imediatamente, a partir da solução da FM, eq.(3.1.19), em termos da função de correlação retardada força-força. Neste sentido, efetuamos, na seção seguinte, o cálculo de $\Pi^R(w)$ em termos da função de correlação densidade-densidade para um gás de elétrons não-interagentes bidimensional na presença de um campo magnético forte (63) e sendo espalhados por fônons superficiais LA Leal et al. (64, 70).

3.2 - Cálculo da função de correlação força-força

Efetuamos o cálculo da função de correlação força-força utilizando o formalismo de temperatura finita na representação de Matsubara, onde por definição , temos

$$\Pi_{\nu\mu}(\tau) = - \langle T_\tau U_\nu^\dagger(\tau) U_\mu(0) \rangle, \quad (3.2.1)$$

ou ainda, de acordo com a eq.(1.3.2),

$$\Pi_{\nu\mu}(\tau) = - \sum_{\vec{q}} q_\nu q_\mu |D_{ac}(q)|^2 D(\vec{q}, \tau) S(\vec{q}, \tau), \quad (3.2.2)$$

cuja solução se verifica a partir da soma de frequências de Matsubara das respectivas transformadas de Fourier, $S(\vec{q}, ip_m)$ e $D(\vec{q}, iw - ip_m)$, sendo iw e ip_m ambas frequências de Bose.

No caso de um gás de elétrons 2D sob a ação de um campo magnético "d.c" forte, podemos expressar $S(\vec{q}, \tau)$ em função de uma base de operadores de quase-partícula de Landau, tal que

$$S(\vec{q}, \tau) = - \langle T_\tau \rho(\vec{q}, \tau) \rho(-\vec{q}, 0) \rangle, \quad (3.2.3)$$

sendo o operador densidade, $\rho(\vec{q}, \tau)$, dado por

$$\rho(\vec{q}) = \sum_{k_y, n, n'} J_{nn'}(-q_x, k_y, k_y + q_y) c_{n, k_y + q_y}^\dagger c_{n', k_y}, \quad (3.2.4)$$

onde c_{n, k_y}^\dagger (c_{n, k_y}) representa o operador criação (destruição) de elétrons no nível de Landau (n, k_y) , com energia do nível de Landau $\epsilon_n = \hbar \omega_c (n + 1/2)$, sendo $n = 0, 1, 2, \dots$ os índices dos níveis de Landau.

A função de onda associada com o nível de Landau é dada por

$$\psi_{n, k_y}(x, y) = e^{-ik_y y} \phi_n(x/l_0 + l_0 k_y). \quad (3.2.5)$$

Aqui, $\phi_n(x/l_0 + l_0 k_y)$ é a n -ésima autofunção de um simples oscilador harmônico e que pode ser expressa em termos dos polinômios de Hermite, H_n , através da equação

$$\phi_n(x/l_0 + l_0 k_y) = (\sqrt{\pi} 2^n n! l_0)^{-1/2} H_n(x/l_0 + l_0 k_y) e^{-\frac{1}{2}(x/l_0 + l_0 k_y)^2}, \quad (3.2.6)$$

além disso, $J_{nn'}$ é definido como sendo

$$J_{nn'}(q_x, k, k') = \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{iq_x x} \phi_n(x/l_0 + l_0 k) \phi_{n'}(x/l_0 + l_0 k'), \quad (3.2.7)$$

onde

$$l_0 = \left(\frac{\hbar}{m_e \omega_c}\right)^{1/2}, \quad (3.2.8)$$

representa o comprimento do raio magnético.

De volta as eqs.(3.2.3) e (3.2.4), e assumindo o gás de elétrons 2D não-interagentes, isto é, fazendo uma aproximação de ordem zero na função de correlação densidade-densidade, $S^{(0)}(\vec{q}, \tau)$, temos, após simples passagens algébricas, que a função de polarização, $\chi^0(\vec{q}, ip_m)$, para um gás de elétrons, sob um campo magnético forte, pode ser escrita da seguinte forma

$$\begin{aligned} \chi^0(\vec{q}, ip_m) &= \sum_{k_y, n, n'} J_{n, n'}(q_x, k_y + q_y, k_y) J_{n', n}(-q_x, k_y, k_y + q_y) \times \\ &\times \frac{1}{\beta} \sum_{i\varepsilon_m} G^0(n', k_y, i\varepsilon_m) G^0(n, k_y + q_y, i\varepsilon_m - ip_m), \end{aligned} \quad (3.2.9)$$

onde, por definição,

$$G^0(n, k_y, \tau) = - \langle T_\tau c_{n, k_y}(\tau) c_{n, k_y}^\dagger(0) \rangle_0, \quad (3.2.10)$$

representa a função de Green não-perturbada de quase-partículas de Landau. Neste sentido, desde que estejamos trabalhando com um gás de elétrons bidimensional na presença de um campo magnético, a energia de Landau desses elétrons depende unicamente do número quântico n e não mais dos momentos k_y ou q_y (62). Com isso, temos imediatamente que as funções de Green, definidas acima, não dependem explicitamente dos índices dos momentos e consequentemente podemos omitir esses índices, por simplicidade, tal que

$$G^0(n', i\varepsilon_m) = G^0(n', k_y, i\varepsilon_m)$$

$$G^0(n, i\varepsilon_m - ip_m) = G^0(n, k_y + q_y, i\varepsilon_m - ip_m), \quad (3.2.11)$$

onde

$$G^0(n, i\varepsilon_m) = \frac{1}{i\varepsilon_m - \epsilon_n}, \quad (3.2.12)$$

Além disso, podemos definir ainda na eq.(3.2.9), uma função $C_{nn'}(q)$ como sendo

$$\begin{aligned} C_{nn'}(q) &= \sum_{k_y} J_{nn'}(q_x, k_y + q_y, k_y) J_{n'n}(-q_x, k_y, k_y + q_y) = \\ C_{nn'}(q) &= \sum_{k_y} |J_{nn'}(q)|^2 = \mathbf{p} |J_{nn'}(q)|^2, \end{aligned} \quad (3.2.13)$$

onde $\mathbf{p} = 1/2\pi l_0^2$ representa a degenerescência ou o número de estados em cada nível de Landau.

A função $C_{nn'}(q)$, definida na equação acima, foi discutida por Mermin e Canal (65) para o caso de um gás de elétrons tridimensional. Entretanto, como a função de onda do oscilador harmônico ϕ_n , que entra na eq.(3.2.13) através de $J_{nn'}$, é independente da dimensionalidade do gás de elétrons, então a quantidade $C_{nn'}(q)$ é a mesma para ambos os casos. Desse modo, de acordo com a ref.(65), $C_{nn'}(q)$ pode ser escrita como sendo

$$C_{nn'}(q) = \mathbf{p} \frac{n!}{n'!} \left(\frac{l_0 q}{\sqrt{2}}\right)^{2(n'-n)} e^{(-l_0^2 q^2/2)} [L_n^{n'-n}(l_0^2 q^2/2)]^2, \quad (3.2.14)$$

A função $L_n^{n'-n}(x)$ significa o polinômio associado de Laguerre (66). Em particular, para $n' - n > 0$, temos

$$L_n^{n'-n}(x) = \sum_{l=0}^n (-1)^l \frac{n!}{(n'-n+l)! (n-l)!} \frac{x^l}{l!}, \quad (3.2.15)$$

Desta forma, podemos escrever a função de correlação força-força, na representação de Matsubara, da seguinte maneira

$$\begin{aligned} \Pi_{\nu\mu}(i\omega) = & -2\frac{1}{\beta} \sum_{\vec{q}, ip_m} q_\nu q_\mu |D_{ac}(q)|^2 D^0(\vec{q}, i\omega - ip_m) \sum_{nn'} C_{nn'}(q) \times \\ & \times \frac{1}{\beta} \sum_{i\epsilon_m} G^0(n', i\epsilon_m) G^0(n, i\epsilon_m - ip_m), \end{aligned} \quad (3.2.16)$$

onde utilizamos o propagador de fônons não-perturbado $D^0(\vec{q}, i\omega - ip_m)$, eq.(1.4.19), a fim de representar o sistema de fônons, na aproximação de ordem zero.

Neste sentido, efetuando a soma de frequências de Matsubara para a função de correlação densidade-densidade, descrita em termos das funções de Green de quase-partícula de Landau não-perturbada, obtemos, na aproximação RPA, (63)

$$\frac{1}{\beta} \sum_{i\epsilon_m} G^0(n', i\epsilon_m) G^0(n, i\epsilon_m - ip_m) = \frac{\eta_+(\epsilon_{n'}) - \eta_+(\epsilon_n)}{-ip_m + \epsilon_{n'} - \epsilon_n}, \quad (3.2.17)$$

onde $\eta_+(\epsilon_n)$ é a função distribuição de Fermi.

Desse modo, no formalismo de temperatura finita, a função de polarização $\chi^0(\vec{q}, ip_m)$ para um gás de elétrons 2D não-interagentes, na presença de um campo magnético forte, na aproximação RPA, é dada simplesmente por

$$\chi^0(\vec{q}, ip_m) = \sum_{nn'} \chi_{nn'}^0(\vec{q}, ip_m) = \sum_{nn'} C_{nn'}(q) \frac{\eta_+(\epsilon_{n'}) - \eta_+(\epsilon_n)}{-ip_m + \epsilon_{n'} - \epsilon_n}, \quad (3.2.18)$$

Efetando agora, o somatório sobre a frequência de Matsubara ip_m , na eq.(3.2.16), obtemos finalmente, a seguinte expressão para a função de correlação força-força para um gás de elétrons 2D interagindo com fônons LA,

$$\begin{aligned} \Pi_{\nu\mu}(i\omega) = & -2 \sum_{\vec{q}, nn'} q_\nu q_\mu |D_{ac}(q)|^2 C_{nn'}(q) \times \\ & \times \left\{ \frac{[\eta_-(w_q) - \eta_-(\epsilon_n - \epsilon_{n'})] [\eta_+(\epsilon_{n'}) - \eta_+(\epsilon_n)]}{i\omega + \epsilon_n - \epsilon_{n'} - w_q} - \text{termo}(w_q \rightarrow -w_q) \right\}, \end{aligned} \quad (3.2.19)$$

onde $\eta_-(w)$ representa a função distribuição de Bose-Einstein. Além disso, fazendo a extensão analítica, i.e., $i\omega \rightarrow w + i\delta$, encontramos

$$\begin{aligned} \Pi_{\nu\nu}^R(w) = & -2 \sum_{\vec{q}, n, n'} q_\nu q_\mu |D_{ac}(q)|^2 C'_{nn'}(q) \lim_{\delta \rightarrow 0} [\eta_+(\epsilon_{n'}) - \eta_+(\epsilon_n)] \times \\ & \times \left\{ \frac{[\eta_-(w_q) - \eta_-(\epsilon_n - \epsilon_{n'})]}{\epsilon_n - \epsilon_{n'} - w_q + w + i\delta} - \text{termo}(w_q \rightarrow -w_q) \right\}, \end{aligned} \quad (3.2.20)$$

A partir das eqs.(3.1.18) e (3.2.20), calculamos na próxima seção os termos da FM como função da temperatura e da intensidade do campo magnético.

3.3 - Magneto-condutividade: Absorção e Emissão de Fônons

Nesta seção efetuamos o cálculo das duas contribuições da Função Memória, i.e., a parte real $M'(w)$ e a parte imaginária $M''(w)$, como função da frequência, da temperatura e da intensidade do campo magnético e discutimos os efeitos desses comportamentos sobre o deslocamento e a forma da linha de ressonância ciclotrônica. Além disso, investigamos a influência dos efeitos de muitos-corpos no espectro de absorção (emissão) de fônons da condutividade dinâmica.

No formalismo de Função Memória, a parte imaginária diagonal $M''(w)$ pode ser escrita, de acordo com as eqs.(1.2.4) e (1.2.15), como sendo

$$M''(w) = -\frac{1}{n_e m_e w} [Im \Pi_{\nu\nu}^R(w) - Im \Pi_{\nu\nu}^R(0)], \quad (3.3.1)$$

onde argumentos de simetria revelam que os termos não-diagonais são nulos e que os dois elementos diagonais são iguais.

Desse modo, partindo da expressão de $\Pi_{\nu\nu}^R(w)$, eq.(3.2.20), com $\nu = \mu = x$ e fazendo uso da relação definida na eq.(1.4.28), podemos escrever

$$\begin{aligned} M''(w) = & -\frac{2\pi}{n_e m_e w} \sum_{\vec{q}, n, n'} q_x^2 |D_{ac}(q)|^2 C_{nn'}(q) [\eta_+(\epsilon_{n'}) - \eta_+(\epsilon_n)] \times \\ & \times \left\{ [\eta_-(w_q) - \eta_-(w_q - w)] \delta(w - w_{nn'} - w_q) - [\eta_-(w_q) - \eta_-(w_q + w)] \delta(w - w_{nn'} + w_q) \right\}, \end{aligned} \quad (3.3.2)$$

onde, verificamos imediatamente da eq.(3.2.20), a seguinte condição:

$$Im \Pi_{xx}^R(0) = 0. \quad (3.3.3)$$

Usamos a definição da função de polarização, $\chi^0(\vec{q}, w)$, para um gás de elétrons não-interagentes, na aproximação RPA, sob a ação de um campo magnético, eq.(3.2.18), tal que

$$\chi^0(\vec{q}, w) = \sum_{nn'} \chi_{nn'}^0(\vec{q}, w) = \sum_{nn'} C_{nn'}(q) \frac{[\eta_+(\epsilon_n) - \eta_+(\epsilon_{n'})]}{w - w_{nn'} + i\delta}, \quad (3.3.4)$$

sendo

$$\chi^0(\vec{q}, w) = \chi_1^0(\vec{q}, w) + i\chi_2^0(\vec{q}, w), \quad (3.3.5)$$

onde $\chi_1^0(\vec{q}, w)$ e $\chi_2^0(\vec{q}, w)$ são respectivamente a parte real e a parte imaginária da função de polarização,

$$\chi_1^0(\vec{q}, w) = P \sum_{nn'} C_{nn'}(q) \frac{[\eta_+(\epsilon_n) - \eta_+(\epsilon_{n'})]}{w - w_{nn'}}, \quad (3.3.6)$$

e

$$\chi_2^0(\vec{q}, w) = \pi \sum_{nn'} C_{nn'} [\eta_+(\epsilon_{n'}) - \eta_+(\epsilon_n)] \delta(w - w_{nn'}), \quad (3.3.7)$$

onde P significa a parte principal de Cauchy.

Após uma pequena álgebra, podemos escrever $M''(w)$, em termos da função de polarização RPA, devido ao espalhamento elétron-fônon, como sendo

$$M''(w) = -\frac{2}{n_e m_e w} \sum_{\vec{q}} q_x^2 |D_{ac}(q)|^2 \times \\ \times \{ [\eta_-(w_q) - \eta_-(w + w_q)] \chi_2^0(\vec{q}, w + w_q) + [\eta_-(w_q) - \eta_-(w_q - w)] \chi_2^0(\vec{q}, w - w_q) \}, \quad (3.3.8)$$

ou então, simplesmente

$$M''(w) = \frac{2\pi}{n_e m_n} \sum_{\vec{q}} q_x^2 |D_{ac}(q)|^2 \frac{e^{\beta\hbar w_q}}{(e^{\beta\hbar w_q} - 1)} \times \\ \times \sum_{nn'} C_{nn'} [\eta_+(\epsilon_n) - \eta_+(\epsilon_{n'})] \times \\ \times \left\{ \frac{w^{-1} (e^{\beta\hbar w} - 1)}{(e^{\beta\hbar(w_q+w)} - 1)} \delta(\hbar w_q - w_{nn'} + \hbar w) + \text{termo}(w \rightarrow -w) \right\}, \quad (3.3.9)$$

Em nossos estudos, adotamos o modelo de fónons 2D proposto por Kawaji (67) para uma camada de inversão em *Si - MOSFET*, que é baseado no método do potencial de deformação. No modelo do potencial de deformação, a interação elétron-fónon 2D LA pode ser escrita como

$$|D_{ac}(q)|^2 = \frac{\hbar \Xi_d^2 q^2}{2\rho d w_q}, \quad (3.3.10)$$

onde Ξ_d é a constante de acoplamento do potencial de deformação, ρ é a densidade de massa, d é a espessura da camada de inversão, enquanto que a relação de dispersão dos fónons acústicos longitudinais é dada por

$$w_q = c_s q, \quad (3.3.11)$$

onde c_s representa a velocidade das ondas acústicas.

De acordo com a eq.(2.2.12) e fazendo algumas substituições, obtemos

$$M''(w) = \frac{\hbar \pi l_0^3}{\tau 8m_e^2} \sum_{nn''} \int dq q^4 \frac{e^{\beta \hbar w_q}}{(e^{\beta \hbar w_q} - 1)} C_{nn''}(q) [\eta_+(\epsilon_n) - \eta_+(\epsilon_{n'})] \times \\ \times \left\{ \frac{w^{-1}(e^{\beta \hbar w} - 1)}{(e^{\beta \hbar (w_q + w)} - 1)} \delta(-w_{nn'} + \hbar w_q + \hbar w) + \text{termo}(w \rightarrow -w) \right\}, \quad (3.3.12)$$

onde por definição,

$$\frac{1}{\tau} = \frac{2m_e \Xi_d^2}{\pi l_0^3 n_e \rho d c_s}, \quad (3.3.13)$$

O duplo somatório sobre os índices dos níveis de Landau (n, n') reflete a possibilidade de ocorrer transições entre os diferentes estados, com energia de separação $w_{nn'}$ dada por

$$w_{nn'} = (\epsilon_{n'} - \epsilon_n) = (n' - n)\hbar w_c, \quad (3.3.14)$$

tal que, cada termo no somatório (n, n') corresponda especificamente à uma transição do elétron, ou seja, o elétron inicialmente num nível de Landau n absorveria um fóton com energia $\hbar w$, emitindo um fónon LA e efetuaría uma transição para um estado final n' .

Neste trabalho, supomos que os níveis de Landau sejam do tipo função δ e desprezamos quaisquer sobreposição ("overlap") das densidades de estados entre níveis de Landau adjacentes. Consequentemente, somente transições entre níveis de Landau devido as excitações térmicas dos elétrons são consideradas como responsáveis pela dinâmica do gás de elétrons. Diferentemente

do tratamento dado em trabalhos anteriores (68), onde apenas $n = 0$ representava o estado inicial dos elétrons, neste trabalho, consideramos como estado inicial dos elétrons, tanto o nível de Landau mais baixo ($n = 0$), como também outros níveis de Landau com ($n \geq 0$).

Dada a relação entre a densidade de elétrons e a degenerescência do nível de Landau, temos que os níveis abaixo do nível de Fermi estão completamente ocupados. Desta forma, as possíveis transições devem satisfazer as seguintes condições: $0 \leq n \leq (n_{max} - 1)$ e $n' > (n_{max} - 1)$, onde $n_{max} = (n_e/p)$ representa o número máximo de níveis de Landau completamente ocupados. Entretanto, muitas dessas possíveis transições são restritas pela estatística de Fermi-Dirac. Esse efeito de ocupação, devido a estatística de Fermi-Dirac, proíbe necessariamente o elétron de efetuar transições para estados que já estejam ocupados. Desse modo, fazendo algumas considerações acerca das posições dos níveis de Landau inicial e final e o nível de Fermi, podemos escrever

$$M''(w) = \frac{\pi \hbar l_0^3}{\tau 8 m_e^2} \int_0^\infty dq q^4 \frac{e^{\beta \hbar w_q}}{(e^{\beta \hbar w_q} - 1)} \sum_{nm} C_{n,n+m}(q) \Theta(E_F - \epsilon_n) \Theta(\epsilon_{n+m} - E_F) \times$$

$$\times \left\{ \frac{w^{-1} (e^{\beta \hbar w} - 1)}{(e^{\beta \hbar (w_q + w)} - 1)} \delta(\hbar w_q - m \hbar w_c + \hbar w) + \right.$$

$$\left. + \frac{(-w)^{-1} (e^{-\beta \hbar w} - 1)}{(e^{\beta \hbar (w_q - w)} - 1)} [\delta(\hbar w_q - m \hbar w_c - \hbar w) - \delta(\hbar w_q + m \hbar w_c - \hbar w)] \right\}, \quad (3.3.15)$$

onde substituímos n' por $n + m$, sendo m um número positivo inteiro, ($m = 1, 2, 3, \dots$), caracterizando o número de transições efetuadas pelo elétron. $\Theta(x)$ representa a função degrau de Heaviside, tal que

$$\Theta(x) = 1 \quad ; \quad x > 0$$

$$\Theta(x) = 0 \quad ; \quad x < 0, \quad (3.3.16)$$

Finalmente, após algumas mudanças de variáveis e efetuando o cálculo das integrais da eq.(3.3.15), obtemos a seguinte expressão analítica para a imaginária da Função Memória (64)

$$M''(w) = \frac{\pi l_0^7 w_c^5}{8 \tau \hbar^2 c_s^5 y} \sum_{nm} \Theta(E_F - \epsilon_n) \Theta(\epsilon_{n+m} - E_F) \times$$

$$\times \left\{ (m - y)^4 \frac{1}{(1 - e^{-\beta \hbar w_c (m - y)})} \frac{(e^{\beta \hbar w_c y} - 1)}{(e^{\beta \hbar w_c m} - 1)} C_{n,n+m}[(m - y)w_c/c_s] \Theta(m - y) + \right.$$

$$\begin{aligned}
& + (y - m)^4 \frac{1}{(1 - e^{-\beta\hbar w_c(y-m)})} \frac{(e^{-\beta\hbar w_c y} - 1)}{(e^{-\beta\hbar w_c m} - 1)} C_{n,n+m}[(y - m)w_c/c_s] \Theta(y - m) + \\
& - (m + y)^4 \frac{1}{(1 - e^{-\beta\hbar w_c(m+y)})} \frac{(e^{-\beta\hbar w_c y} - 1)}{(e^{\beta\hbar w_c m} - 1)} C_{n,n+m}[(m + y)w_c/c_s] \}, \quad (3.3.17)
\end{aligned}$$

onde introduzimos a grandeza adimensional y , definida como $y = w/w_c$.

Na equação acima, o primeiro e o segundo termo correspondem, respectivamente, ao caso de absorção de fônons ($m > y$) e emissão de fônons ($y > m$). Verificamos, em nossos resultados numéricos, que o último termo da eq.(3.3.17), derivado da emissão de fônons com grande vetor de onda é responsável por uma contribuição muito pequena. Isto mostra imediatamente, que a principal contribuição para esse tipo de interação é basicamente devido ao espalhamento do 2 DEG por fônons com pequeno vetor de onda.

No limite estático, $y \rightarrow 0$, a parte imaginária da FM, eq.(3.3.17), fica reduzida à seguinte expressão

$$M''(0) \cong \frac{\pi l_0^7 w_c^6 \beta}{4\tau \hbar c_s^5} \sum_{nm} m^4 \frac{e^{\beta\hbar w_c m}}{(e^{\beta\hbar w_c m} - 1)^2} C_{n,n+m}(mw_c/c_s), \quad (3.3.18)$$

a qual entretanto, apresenta uma contribuição bastante pequena para as condições experimentais usuais.

De acordo com a eq.(3.3.17), verificamos facilmente que $M''(w)$ possui uma dependência linear com a temperatura, para ambos os limites de baixas e altas temperaturas, em excelente acordo com os resultados experimentais (69). Um resultado semelhante quanto a esta dependência de temperatura, para a parte imaginária da FM foi obtido no trabalho de Hu e O'Connell (60). Por outro lado, esses mesmos autores obtiveram resultados bastante conflitantes para $M''(w)$ em relação a dependência de frequência e de campo magnético. Isto se deve basicamente ao fato de que vários aspectos físicos relevantes não foram levados em conta por esses autores, como por exemplo: a existência de transições proibidas devido aos efeitos de ocupação. Além disso, verificamos em nossos cálculos, seção (3.4), que cada transição permitida, associada com um estado inicial n ($n > 0$), dá origem a n depressões na estrutura de $M''(w)$, em adição aquelas que ocorrem para y inteiro, devido ao envolvimento de fônons de modos nulos nesses pontos, e y semi-inteiro devido ao pequeno número de fônons nessas regiões (60). De uma forma em geral, esses resultados são consequências diretas do número n de raízes correspondentes ao

polinômio de Laguerre, $L_n^m(x)$, eq.(3.2.15) no cálculo da FM e consequentemente, desde que o número de níveis de Landau ocupados no sistema aumentam a medida que a intensidade de campo magnético diminui, temos que uma estrutura bastante complexa de $M''(w)$ seja esperada para os casos de campos magnéticos baixos, em contraste com uma estrutura singular correspondendo ao caso do limite quântico, i.e., somente o primeiro nível de Landau ocupado, Leal et al. (64).

Desde que, obtivemos em nossos cálculos, uma expressão analítica para a parte imaginária da Função Memória, podemos obter imediatamente a contribuição da parte real da FM. A parte real e a parte imaginária da Função Memória, dependente da frequência, são relacionadas uma com a outra através da relação de Kramers-Kronig, tal que

$$M'(w) = \frac{2}{\pi} w P \int_0^\infty dw' \frac{M''(w')}{(w'^2 - w^2)}, \quad (3.3.19)$$

Desse modo, de volta à expressão de $M''(w')$, eq.(3.3.9), e fazendo as substituições na equação acima, obtemos

$$\begin{aligned} M'(w) = & \frac{4w}{n_e m_e \hbar} P \sum_{\vec{q}, nn'} q_x^2 |D_{ac}(q)|^2 \frac{e^{\beta \hbar w_q}}{(e^{\beta \hbar w_q} - 1)} C_{n,n'}(q) [\eta_+(\epsilon_n) - \eta_+(\epsilon_{n'})] \times \\ & \times \frac{(e^{\beta \hbar (w_{nn'} - w_q)} - 1)}{(e^{\beta \hbar w_{nn'}} - 1)} \frac{1}{(w_{nn'} - w_q)} \left[\frac{1}{((w_{nn'} - w_q)^2 - w^2)} + \frac{1}{((w_q - w_{nn'})^2 + w^2)} \right], \end{aligned} \quad (3.3.20)$$

De acordo com a definição da parte real da função de polarização em RPA, eq.(3.3.6), podemos escrever

$$\begin{aligned} M'(w) = & \frac{-2}{n_e m_e w} \sum_{\vec{q}} q_x^2 |D_{ac}(q)|^2 \times \\ & \times \{ \coth(\beta \hbar w_q / 2) [\chi_1^0(\vec{q}, w + w_q) + \chi_1^0(\vec{q}, w_q - w) - 2\chi_1^0(\vec{q}, w_q)] + \\ & - \sum_{nn'} \coth(\beta \hbar w_{nn'} / 2) [\chi_{1nn'}^0(\vec{q}, w + w_q) + \chi_{1nn'}^0(\vec{q}, w_q - w) - 2\chi_{1nn'}^0(\vec{q}, w_q)] \}, \end{aligned} \quad (3.3.21)$$

onde

$$\eta_-(w) = \frac{1}{(e^{\beta \hbar w} - 1)} \equiv \frac{1}{2} [\coth(\beta \hbar w / 2) - 1], \quad (3.3.22)$$

Finalmente, substituindo a expressão de $M''(w')$, eq.(3.3.17), e fazendo algumas mudanças de variáveis, obtemos para a parte real da Função Memória

$$\begin{aligned}
M'(w) = & \frac{l_0^7 w_c^5 y}{4\tau \hbar c_s^5} P \int_0^\infty \frac{dx}{(x-y)(x+y)} \frac{1}{x} \sum_{nm} \Theta(E_F - \epsilon_n) \Theta(\epsilon_{n+m} - E_F) \times \\
& \times \left\{ (m-x)^4 \frac{1}{(1 - e^{-\beta \hbar w_c (m-x)})} \frac{(e^{x\beta \hbar w_c} - 1)}{(e^{m\beta \hbar w_c} - 1)} C_{n,n+m} \left[\frac{w_c}{c_s} (m-x) \right] \Theta(m-x) + \right. \\
& \quad - (m+x)^4 \frac{1}{(1 - e^{-\beta \hbar w_c (m+x)})} \frac{(e^{-x\beta \hbar w_c} - 1)}{(e^{m\beta \hbar w_c} - 1)} C_{n,n+m} \left[\frac{w_c}{c_s} (m+x) \right] + \\
& \left. + (x-m)^4 \frac{1}{(1 - e^{-\beta \hbar w_c (x-m)})} \frac{(e^{-x\beta \hbar w_c} - 1)}{(e^{-m\beta \hbar w_c} - 1)} C_{n,n+m} \left[\frac{w_c}{c_s} (x-m) \right] \Theta(x-m) \right\}, \quad (3.3.23)
\end{aligned}$$

onde definimos as seguintes grandezas adimensionais: $x = w'/w_c$ e $y = w/w_c$.

De acordo com a equação acima, verificamos em nossos cálculos numéricos, um comportamento oscilatório da parte real da Função Memória, $M'(w)$, consistente com o resultado conhecido na literatura da oscilação da massa ciclotrônica (56) e a existência de picos ressonantes em ambos os espectros de absorção e de emissão de fônons, Leal et al. (64, 70).

Finalmente, utilizando as expressões de $M'(w)$ e $M''(w)$ podemos determinar a condutividade dinâmica $\sigma(w)$, eq.(3.1.19),

$$Re \sigma_{\pm}(w) = \frac{n_e e^2}{m_e} \frac{M''(w)}{[w \mp w_c + M'(w)]^2 + [M''(w)]^2}, \quad (3.3.24)$$

$$Im \sigma(w) = \frac{n_e e^2}{m_e} \frac{w \mp w_c + M'(w)}{[w \mp w_c + M'(w)]^2 + [M'(w)]^2}, \quad (3.3.25)$$

3.4 - Resultados numéricos

Nesta seção efetuamos um estudo sistemático das propriedades de $M'(w)$ e de $M''(w)$ em função da frequência, da temperatura e da intensidade do campo magnético, para um gás de elétrons bidimensional interagindo com fônons LA superficiais e comparamos com os resultados conflitantes obtidos no trabalho de Hu e O'Connell (60). Além disso, investigamos a contribuição do efeito de cada transição eletrônica, entre os níveis de Landau, no cálculo da Função Memória e discutimos a possibilidade do aparecimento de vários picos ressonantes no espectro de absorção e emissão da condutividade dinâmica, em acordo com o que tem sido observado experimentalmente por Schlesinger et al. (61).

Utilizamos em nossos cálculos numéricos efetuados para o caso do *Si-MOSFET*, o seguinte conjunto de parâmetros:

$$\begin{aligned} n_e &= 4.7 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2} \quad ; \quad c_s = 5 \times 10^5 \text{ cms}^{-1} \\ \Xi_d &= 17.78 \times 10^{-12} \text{ erg} \quad ; \quad m_e = 0.189m \\ \rho &= 2.33 \text{ gem}^{-3} \quad ; \quad d = 100 \text{ \AA}, \end{aligned} \tag{3.4.1}$$

tal que, com os valores de n_e e \mathbf{p} o número de níveis de Landau completamente ocupados é dado como sendo $n_{max} = 1, 2, 3$, para intensidades de campo magnético iguais a $B = 20, 10, 6.58$ T, respectivamente.

Neste sentido, apresentamos na Fig.(3.1) o comportamento, em função da frequência, das partes real e imaginária da Função Memória para diferentes valores de campo magnético, como por exemplo, $B = 6.58, 10, 20$ T, para uma temperatura fixa $T = 77$ K. Observamos que as magnitudes de ambas as funções de $M''(w)/w_c$ e $M'(w)/w_c$, refletindo, respectivamente, efeitos dissipativos e reativos no gás de elétrons, diminuem de magnitude a medida que o valor do campo magnético aumenta. Verificamos ainda, na Fig.(3.1), que o número de depressões na estrutura de $M''(w)$ aumenta para intensidades de campos magnéticos mais baixas.

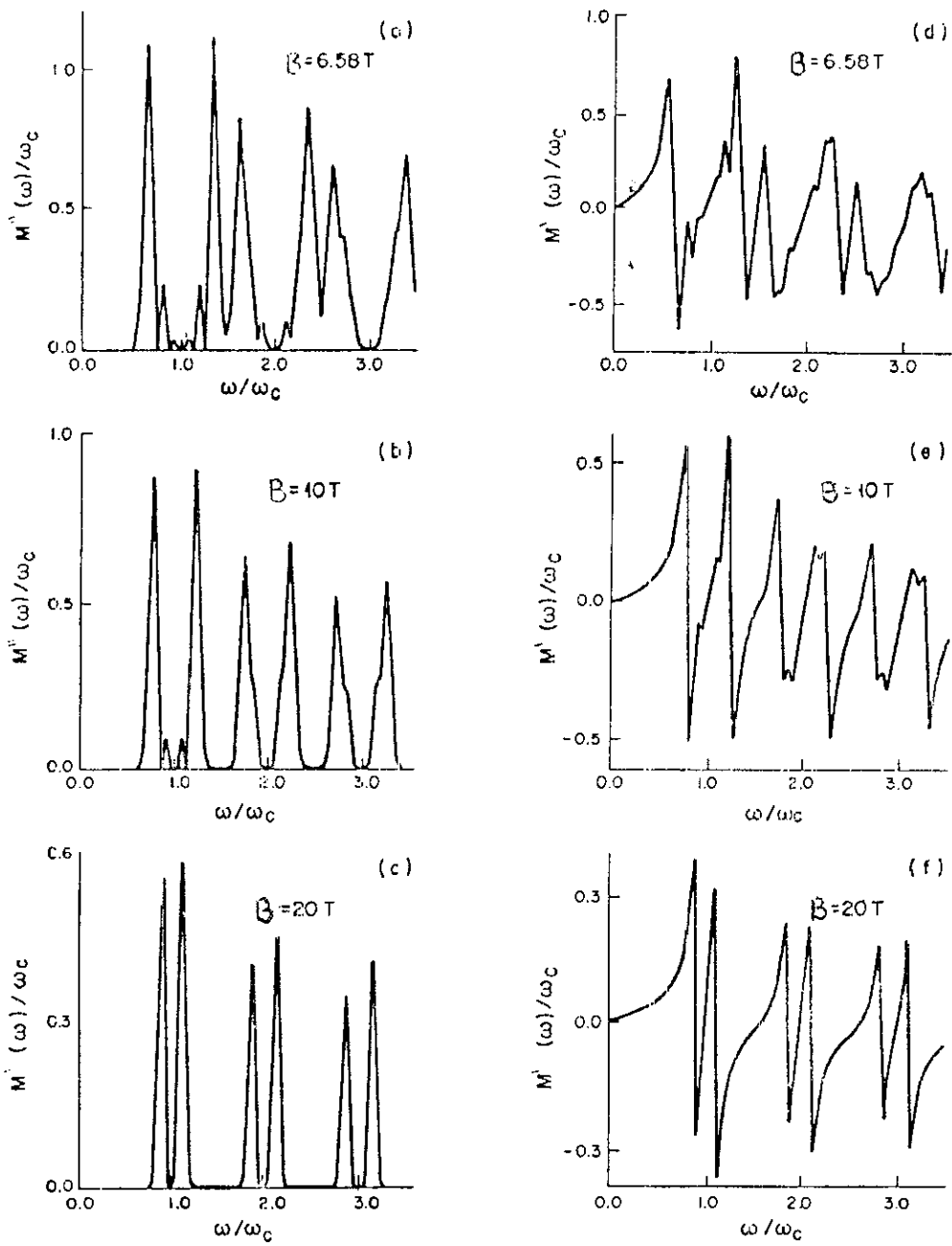


Fig. 3.1 - Comportamento de frequência de $M''(\omega)$ e $M'(\omega)$, em unidades de ω_c , para diferentes valores de campo magnético e $T = 77 \text{ K}$.

Este efeito do aumento do número de depressões na estrutura de $M''(\omega)$ é explicado pelo fato de se ter uma maior possibilidade de ocorrência de transições quando se tem um número maior de níveis de Landau ocupados. Isto ocorre a medida que tratamos nossos cálculos para campos magnéticos inferiores ao do regime de limite quântico ($B = 20$ T), isto é, um campo magnético bastante forte, tal que somente o primeiro nível de Landau ($n = 0$) esteja ocupado, sendo que neste caso nenhuma transição do tipo $(n \rightarrow n+m)$, com $m = 1, 2, 3, \dots$, é proibida pela função distribuição de Fermi-Dirac. Verificamos ainda, que o efeito de ocupação dos níveis de Landau dá origem a estruturas bastante complexas para $M'(\omega)$ e $M''(\omega)$ exibindo, em ambos os casos, picos ressonantes devido tanto a contribuições de absorção quanto a de emissão de fônons acústicos no espectro de ressonância ciclotrônica do 2 DEG. Além disso, temos que a medida que diminuimos a intensidade do campo magnético, verificamos o a existência de um "splitting" nesses picos ressonantes, em excelente acordo com o que tem sido observado por Schlesinger et al. (61). Resultados desta natureza foram apresentados recentemente por Leal et al. (64), em forte contraste com os cálculos obtidos em trabalhos anteriores, como por exemplo, Hu e O'Connell (60).

Nas Figs.(3.2) e (3.3) podemos analisar, em detalhes, as estruturas de $M'(\omega)$ e $M''(\omega)$ e suas respectivas relações de frequências, para os casos de $B = 20, 10$ T e $T = 77$ K. Além disso, verificamos o comportamento oscilatório de $M'(\omega)$, consistente com o resultado oscilatório da massa ciclotrônica (56) e o aumento do número de picos ressonantes, em torno de cada harmônico inteiro ($\omega = m\omega_c$), a medida que a intensidade do campo magnético diminui.

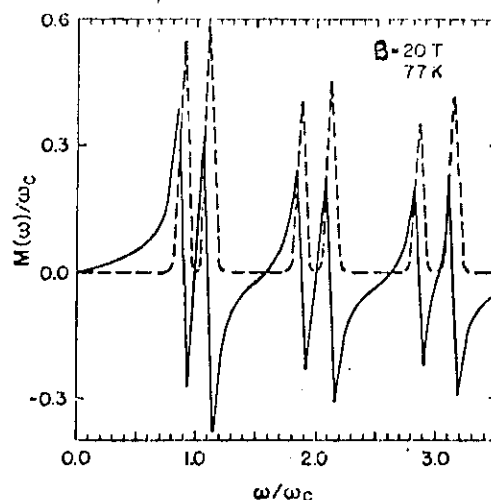
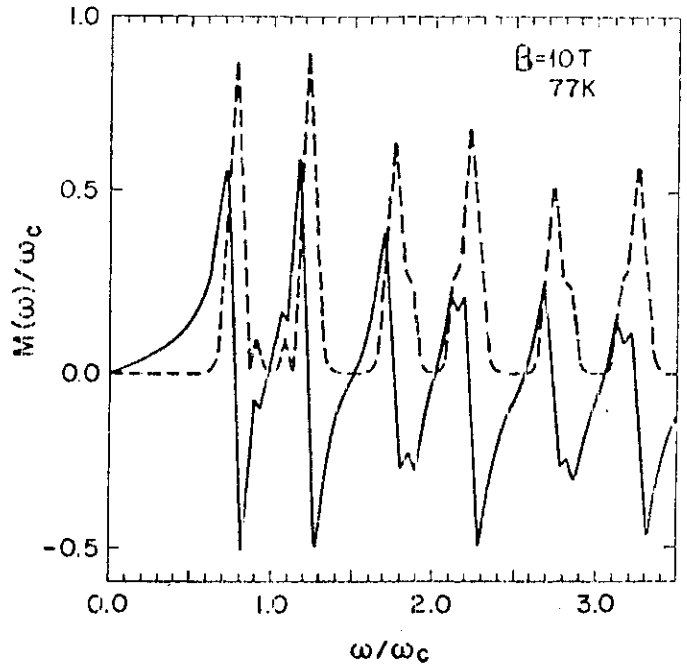


Fig. 3.2 - Relação de frequência entre a parte imaginária (linha tracejada) e a parte real (linha contínua) da Função Memória, $M(\omega)$, em unidades de ω_c , para $B = 20$ T e $T = 77$ K.

Fig. 3.3 - *Relação de frequência entre $M''(\omega)$ (linha tracejada) e $M'(\omega)$ (linha sólida) para $B = 10$ T e $T = 77$ K, em unidades de w_c . As magnitudes dos picos ressonantes decrescem para frequências mais altas.*



Descrevemos nas Figs.(3.4) e (3.5), a contribuição de cada transição eletrônica ($n \rightarrow n + m$) para o cálculo da parte imaginária da FM, assim como, o resultado total de $M''(\omega)$ devido ao efeito de todas essas contribuições, para os casos de $B = 10$ T e $B = 6.58$ T, respectivamente. Em particular, no caso de $B = 10$ T temos que as transições se efetuam a partir dos dois níveis de Landau inicialmente ocupados, $n = 0$ e $n = 1$, para um estado final $n + m$, com $m = 1, 2, 3$, onde m representa o número de transições efetuadas. Além disso, podemos observar a existência de dois picos ressonantes principais, devido aos processos de absorção e emissão de fônons, em torno dos pontos de ressonância em $\omega = m\omega_c$, assim como o aparecimento de picos de magnitudes menores, associados às transições específicas efetuadas a partir de estados iniciais $n > 0$. Em particular, observamos o aparecimento de duplos picos ressonantes de absorção e de emissão de fônons LA para transições efetuadas a partir do estado inicial $n = 1$ com $m = 1, 2, 3$, enquanto que, um único pico de ressonância para cada processo de absorção e emissão de fônons é verificado no caso de transições efetuadas a partir do primeiro nível de Landau ($n = 0$).

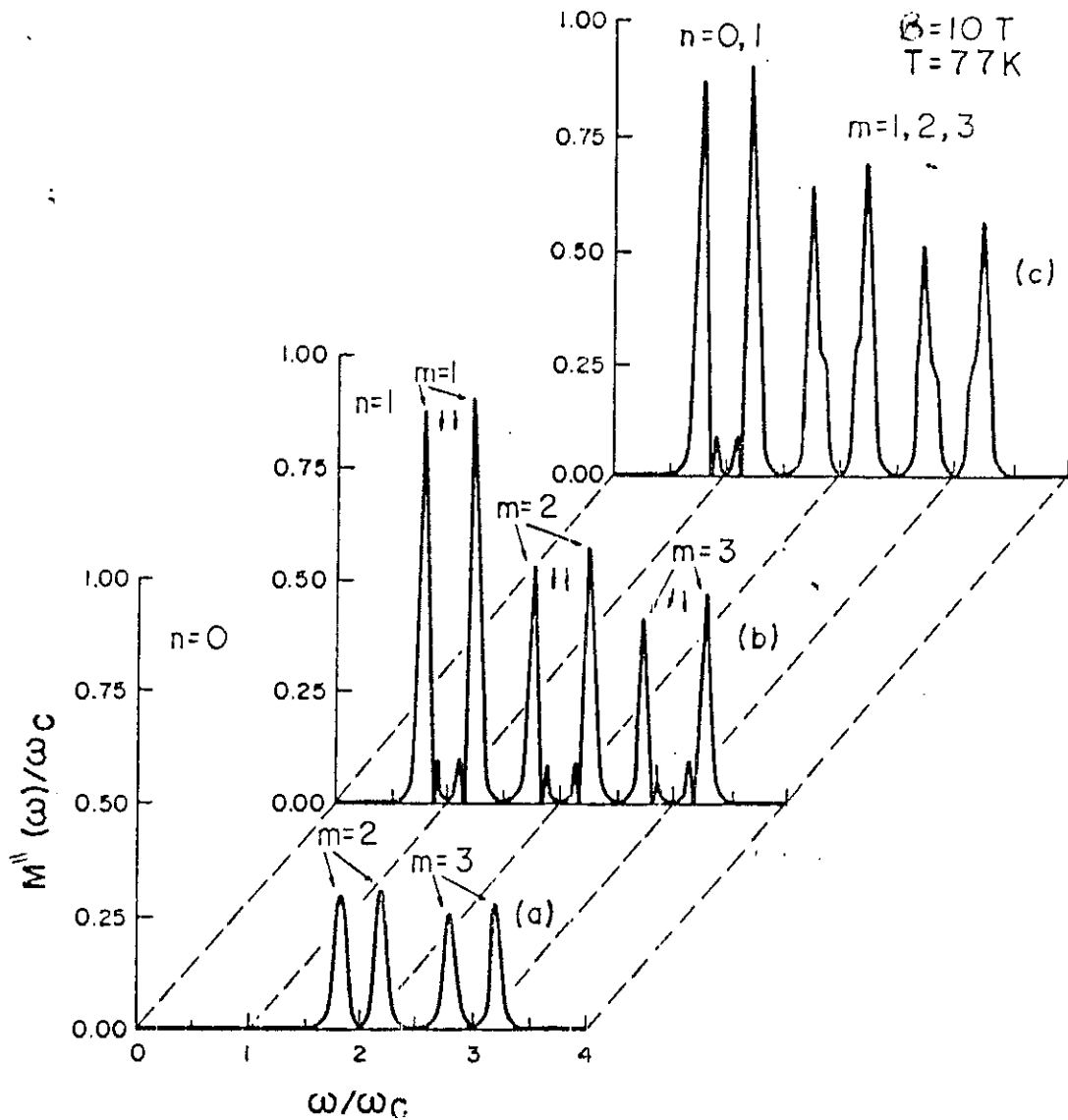


Fig. 3.4 - As contribuições para $M''(\omega)$ correspondendo a cada transição específica $(n, n+m)$. Observamos em (b) o aparecimento de duplos picos ressonantes devido a transições efetuadas a partir de $n=1$ com $m=1, 2, 3$. Enquanto que em (a) observamos um único pico de ressonância para transições a partir do primeiro nível de Landau ($n=0$) com $m=2, 3$. A contribuição total da parte imaginária de FM é exibida em (c), em unidades de ω_c .

Além disso, podemos verificar, que no caso de $B=10\text{ T}$, a transição $n=0, m=1$ não contribui para o cálculo de $M''(\omega)$.

As Figs. (3.5) e (3.6) descrevem, respectivamente, a contribuição de cada transição não nula e o comportamento total de $M''(\omega)$ para o caso de $B = 6.58$ T com $(n = 0, 1, 2)$.

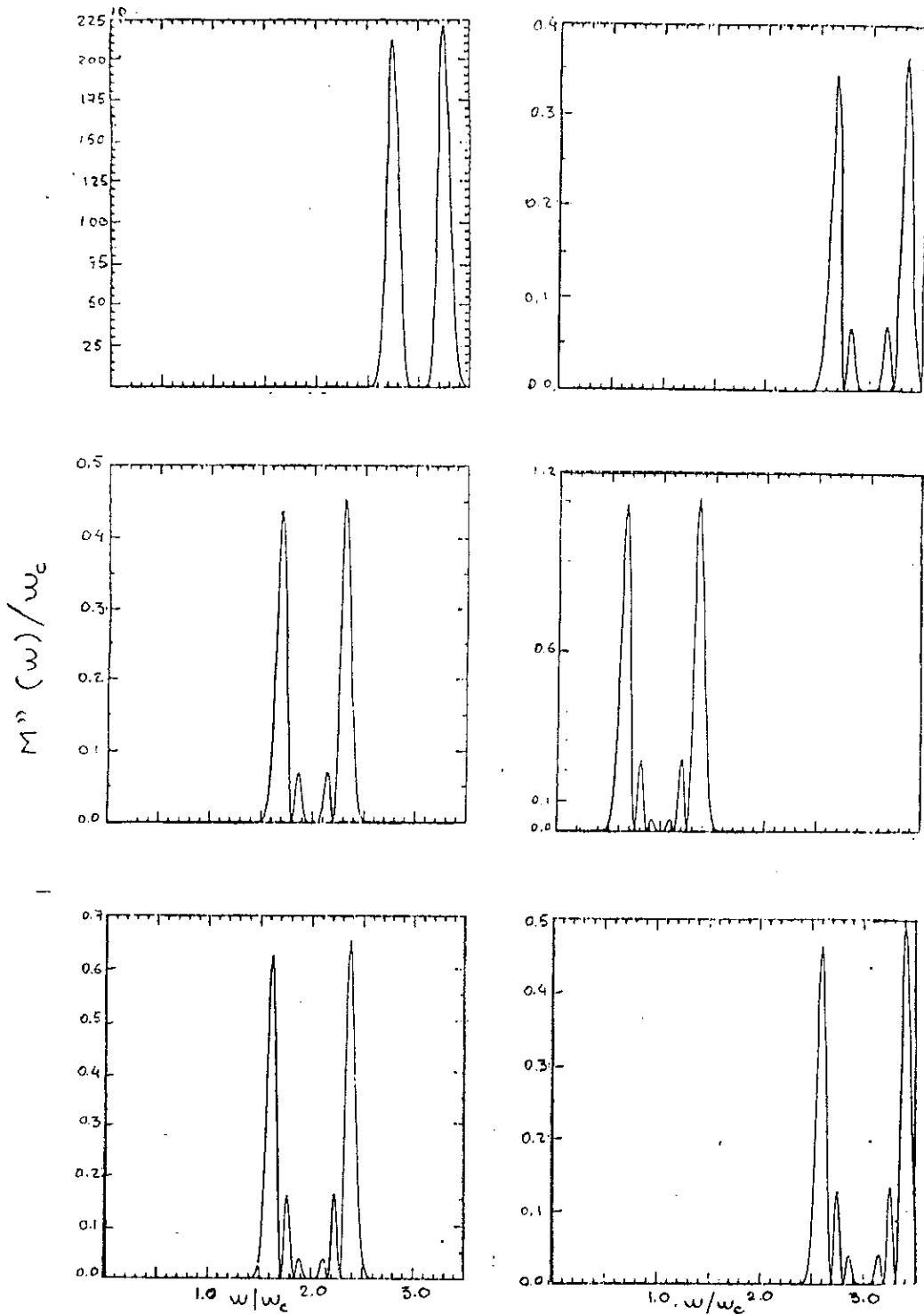


Fig. 3.5 - Contribuições para $M''(\omega)$ correspondendo a cada transição permitida ($n \rightarrow n + m$), com $B = 6.58$ T e $T = 77$ K.

Verificamos ainda na Fig.(3.5) que, no caso de $B = 6.58 \text{ T}$ e $n_{max} = 3$ ($n = 0, 1, 2$), algumas transições são restritas pela estatística de Fermi-Dirac através da condição: $n + m < n_{max}$, tais como, $(n = 0, m + 1)$; $(n = 0, m = 2)$ e $(n = 1, m = 1)$.

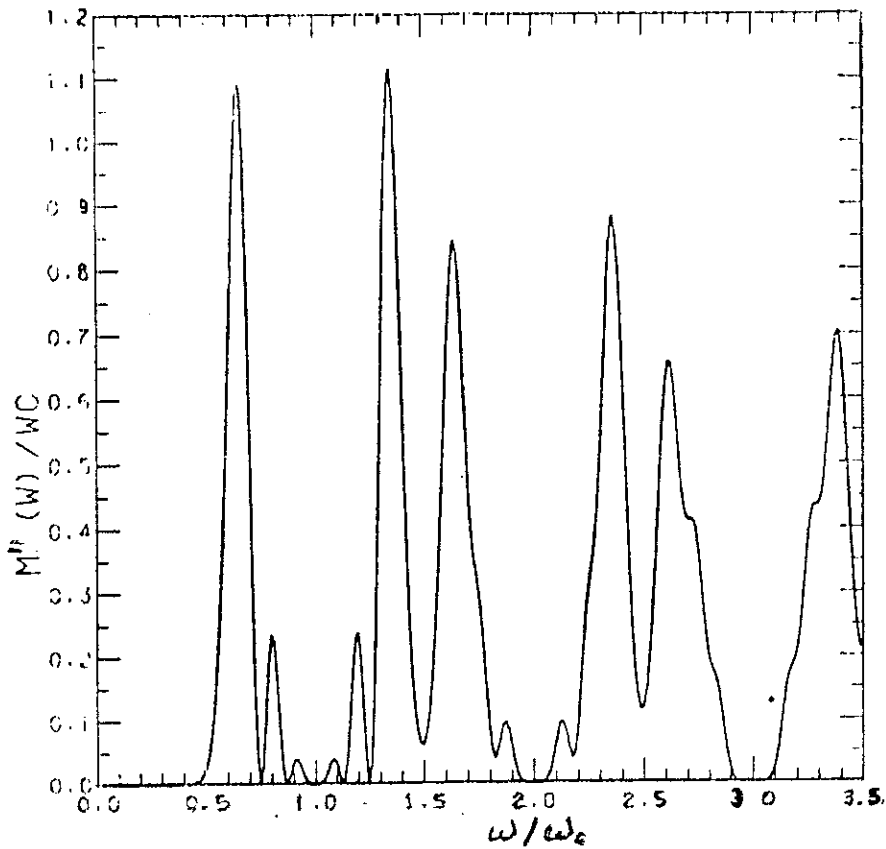


Fig. 3.6 - Comportamento de $M''(w)$ em função da frequência para $B = 6.58 \text{ T}$ e $T = 77 \text{ K}$, levando-se em conta as contribuições de cada transição permitida.

Um estudo sistemático da dependência de temperatura de $M''(w)$, eq.(3.3.17), é descrito na Fig.(3.7), para o caso de $B = 10 \text{ T}$. Verificamos que de uma forma em geral, as magnitudes dos picos ressonantes de absorção e de emissão crescem a medida que a temperatura é aumentada.

Ambos os picos de ressonância em torno de $w = mw_c$ apresentam aproximadamente a mesma magnitude no regime de altas temperaturas. Por outro lado, o mesmo não ocorre no limite de baixas temperaturas onde a intensidade dos picos ressonantes correspondendo aos processos de emissão de fônons se tornam consideravelmente maiores do que as magnitudes dos picos do espectro de absorção. Este resultado, descreve de maneira clara, o fato de que à baixas temperaturas o número de fônons envolvidos nos processos de absorção, pelo gás de elétrons, diminui, Leal et al. (64).

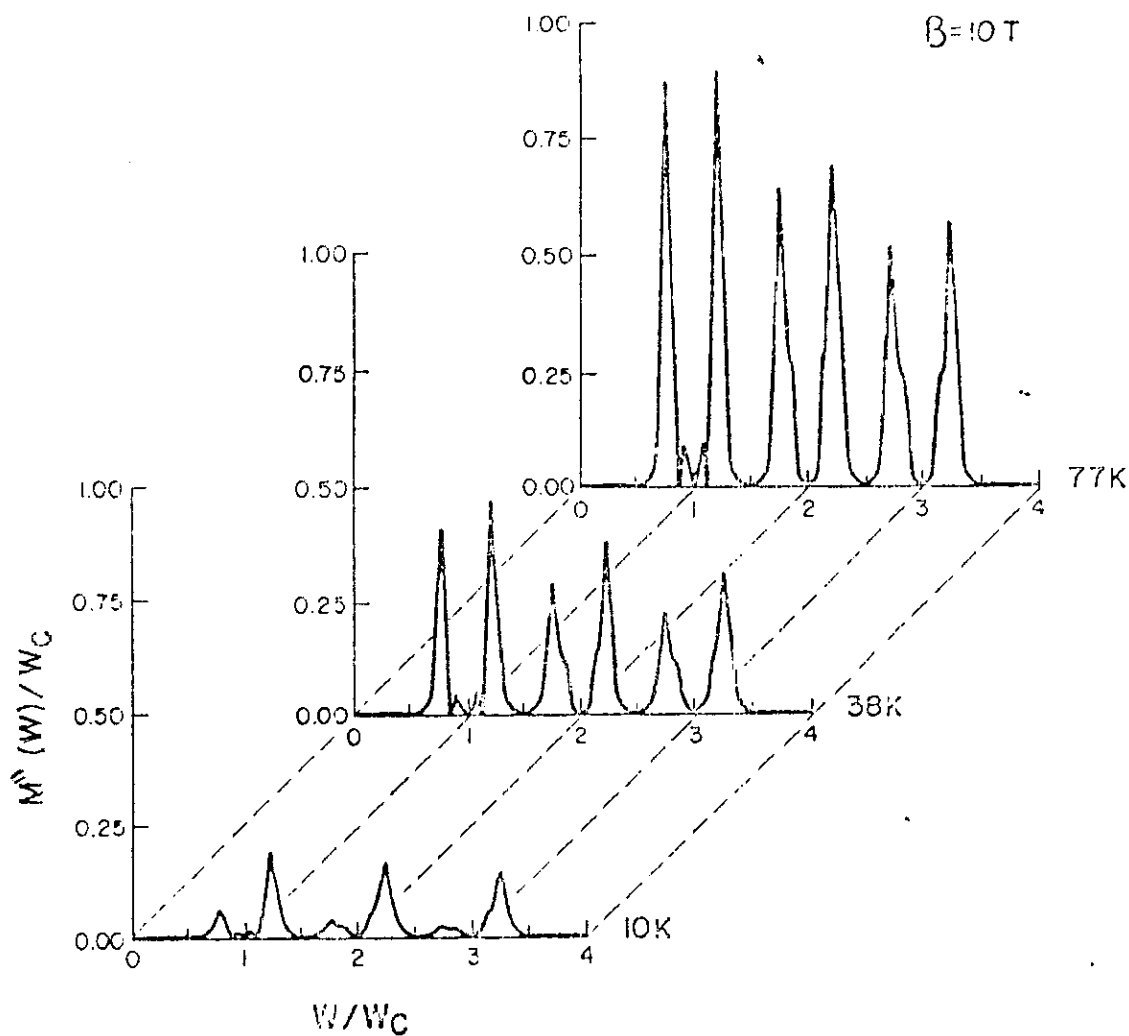


Fig. 3.7 - Comportamento de $M''(w)$ em função da temperatura, em unidades de w_c , para $B = 10 T$. Na região de baixas temperaturas os picos correspondendo a absorção de fônons diminui mais acentuadamente do que no caso de emissão, mas o "splitting" dos picos permanece.

Nas Figs.(3.8), (3.9), (3.10) e (3.11) exibimos, em detalhes, o comportamento da parte real da FM em termos das transições não-nulas, em função da frequência, para vários valores de campo magnético. Podemos observar, claramente, o comportamento oscilatório da estrutura de $M'(w)$, assim como a redução das magnitudes dos picos ressonantes a medida que a frequência aumenta.

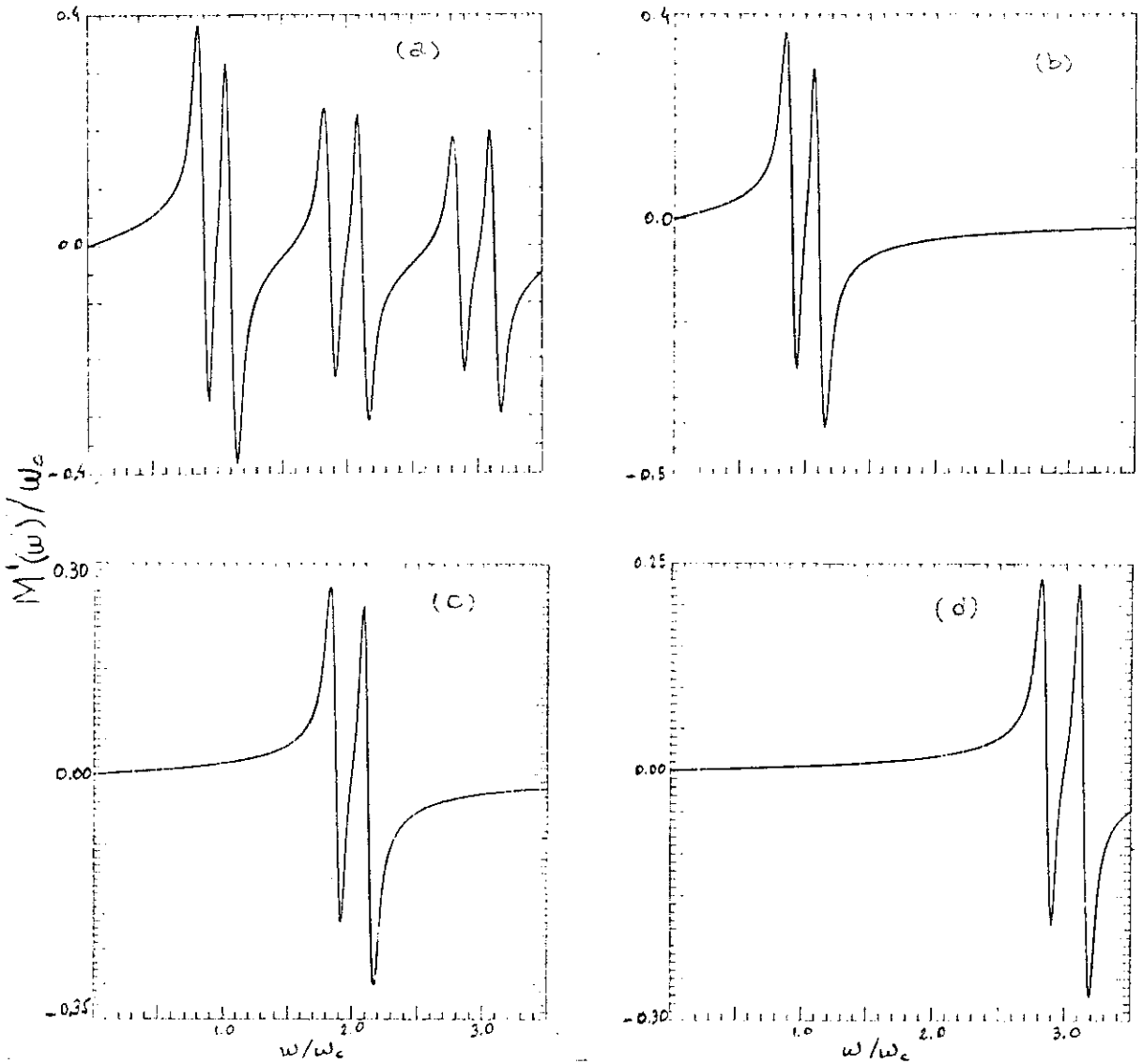


Fig. 3.8 - Exibimos em (a) o comportamento oscilatório de $M'(w)$ em função da frequência com $B = 20 T$ e $T = 77 K$, em unidades de w_c . As figuras (b), (c) e (d) representam as contribuições para $M'(w)$ associadas, respectivamente, às transições específicas a partir de $n = 0$, com $m = 1, 2, 3$.

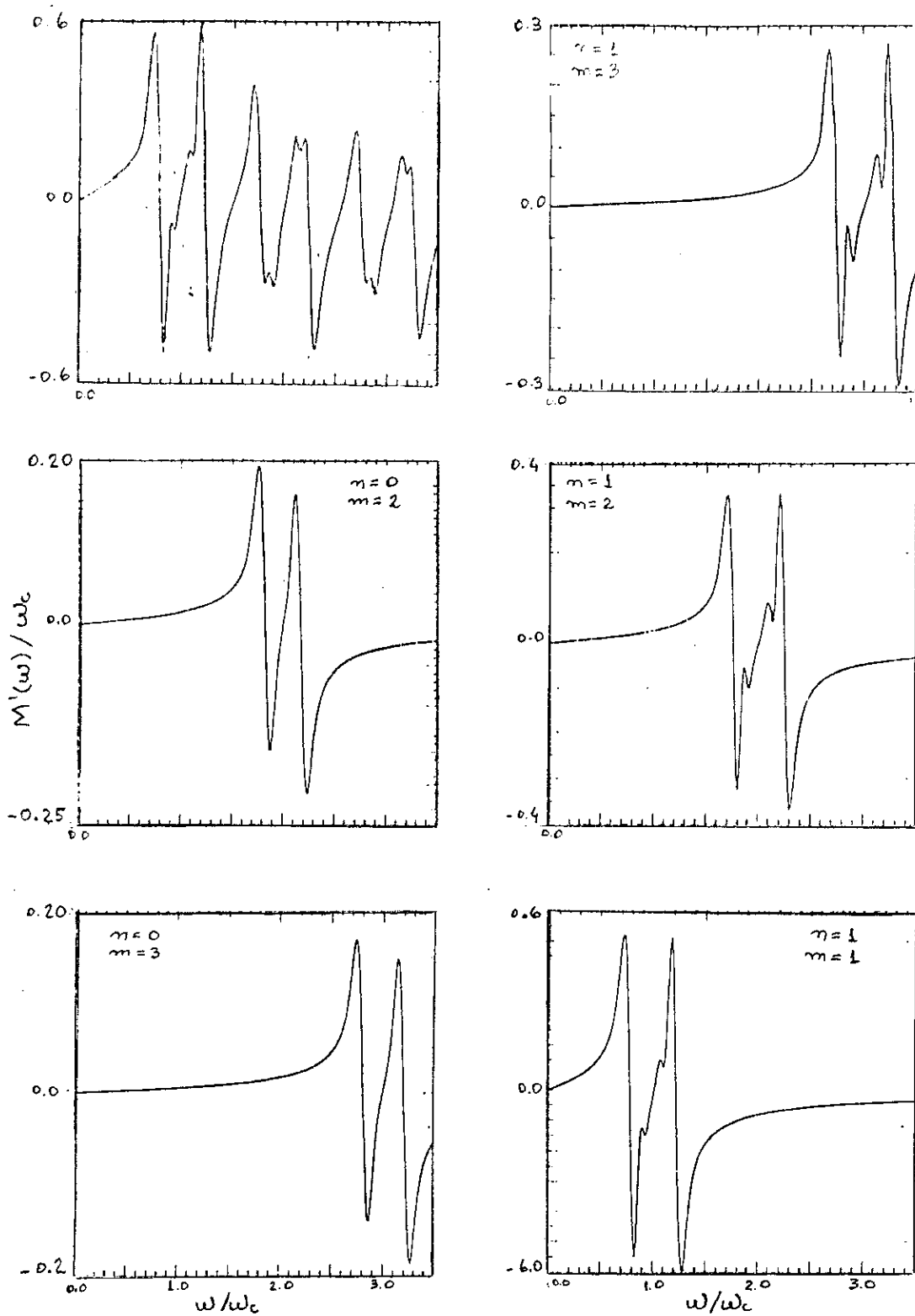


Fig. 3.9 - (a) comportamento de $M'(w)$, em função da frequência, para $B = 10 T$, em unidades de w_c . As demais figuras representam cada uma delas, a contribuição isolada de cada transição não-nula no cálculo de $M'(w)$. $T = 77 K$.

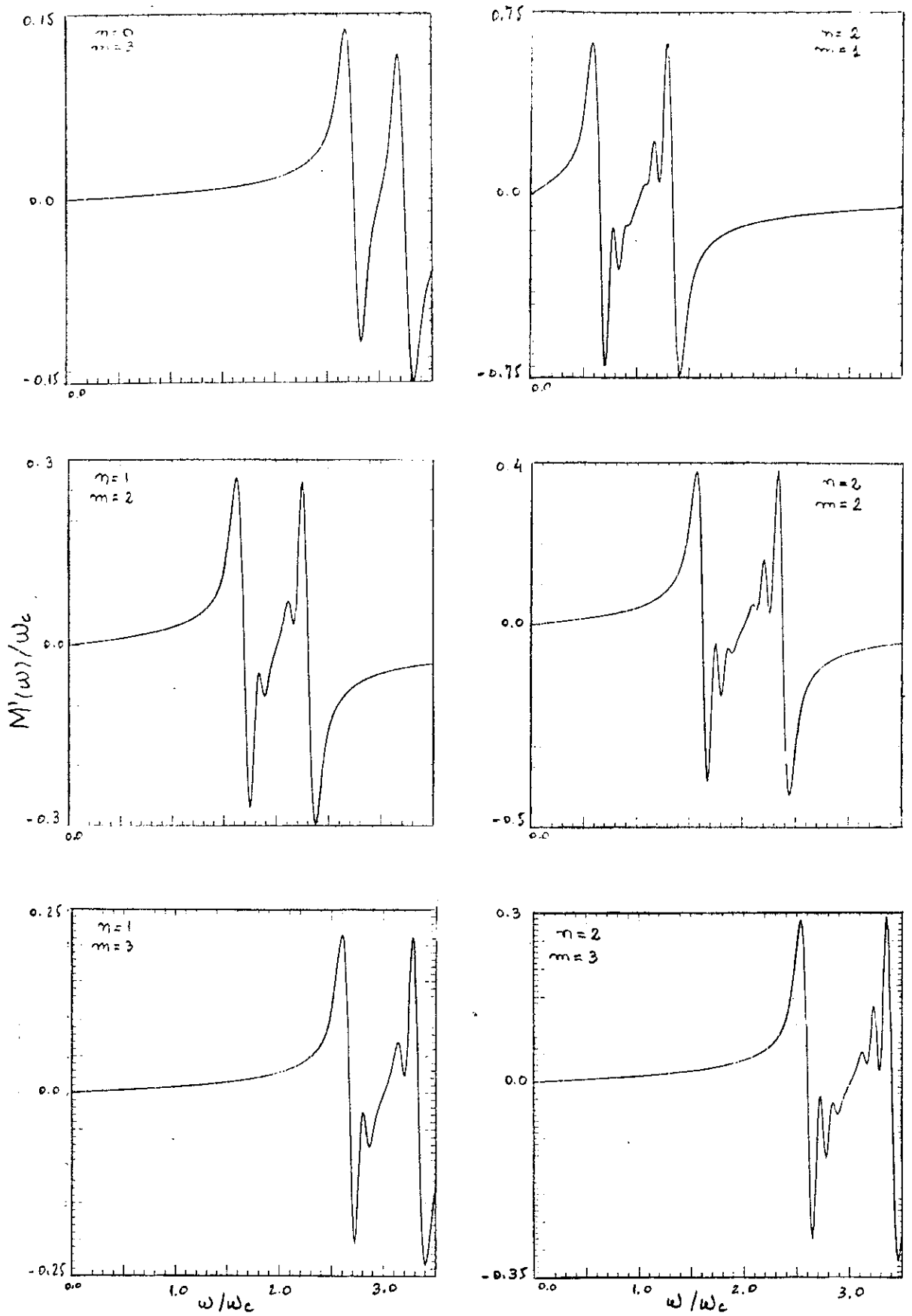


Fig. 3.10 - Resultados numéricos das contribuições de $M'(\omega)$ devido às transições não-nulas efetuadas a partir dos níveis de Landau inicialmente ocupados ($n = 0, 1, 2$) para $B = 6.58 T$.

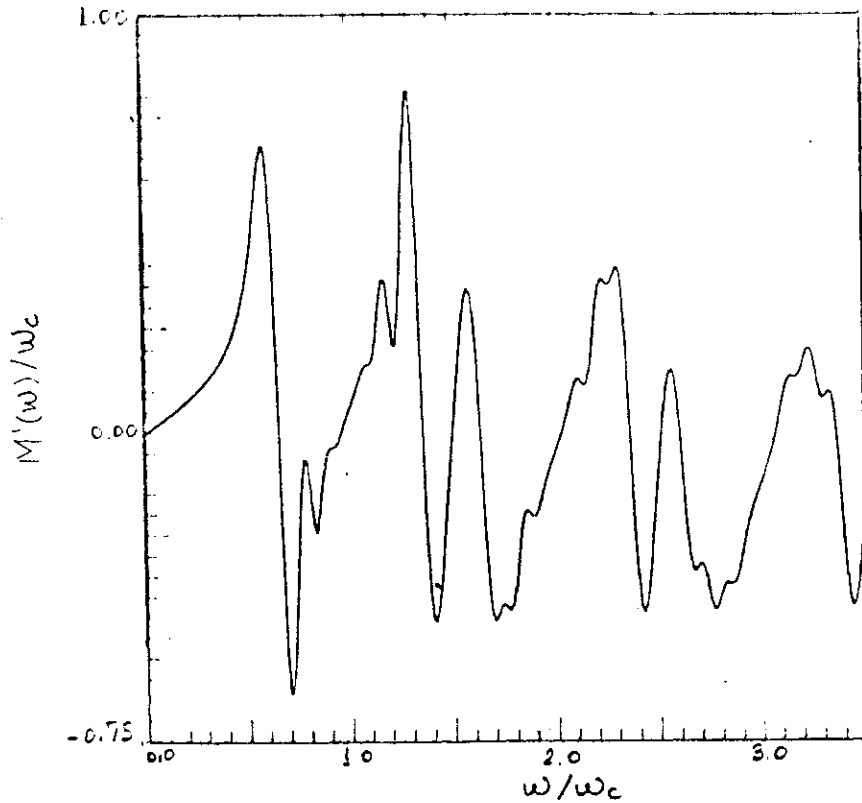


Fig. 3.11 - Comportamento de $M'(w)$ para $B = 6.58 T$ e $T = 77 K$ exibindo uma estrutura bastante peculiar, para ambos os processos de absorção e emissão de fônons, devido ao efeito de ocupação.

Finalmente, podemos usar as expressões de $M'(w)$ e $M''(w)$ nas eqs.(3.3.24) e (3.3.25) de modo a determinar a condutividade dinâmica $\sigma(w)$. A dependência de $\sigma(w)$ em função da frequência é ilustrada na Fig.(3.12), para ambos os processos de absorção e de emissão de fônons longitudinais acústicos. Descrevemos ainda, o comportamento da parte real e da parte imaginária de $\sigma_-(w)$, em função da temperatura e da intensidade do campo magnético, em unidades de σ_0 , definido como

$$\sigma_0 = \frac{n_e e^2}{m_e w_c}, \quad (3.4.2)$$

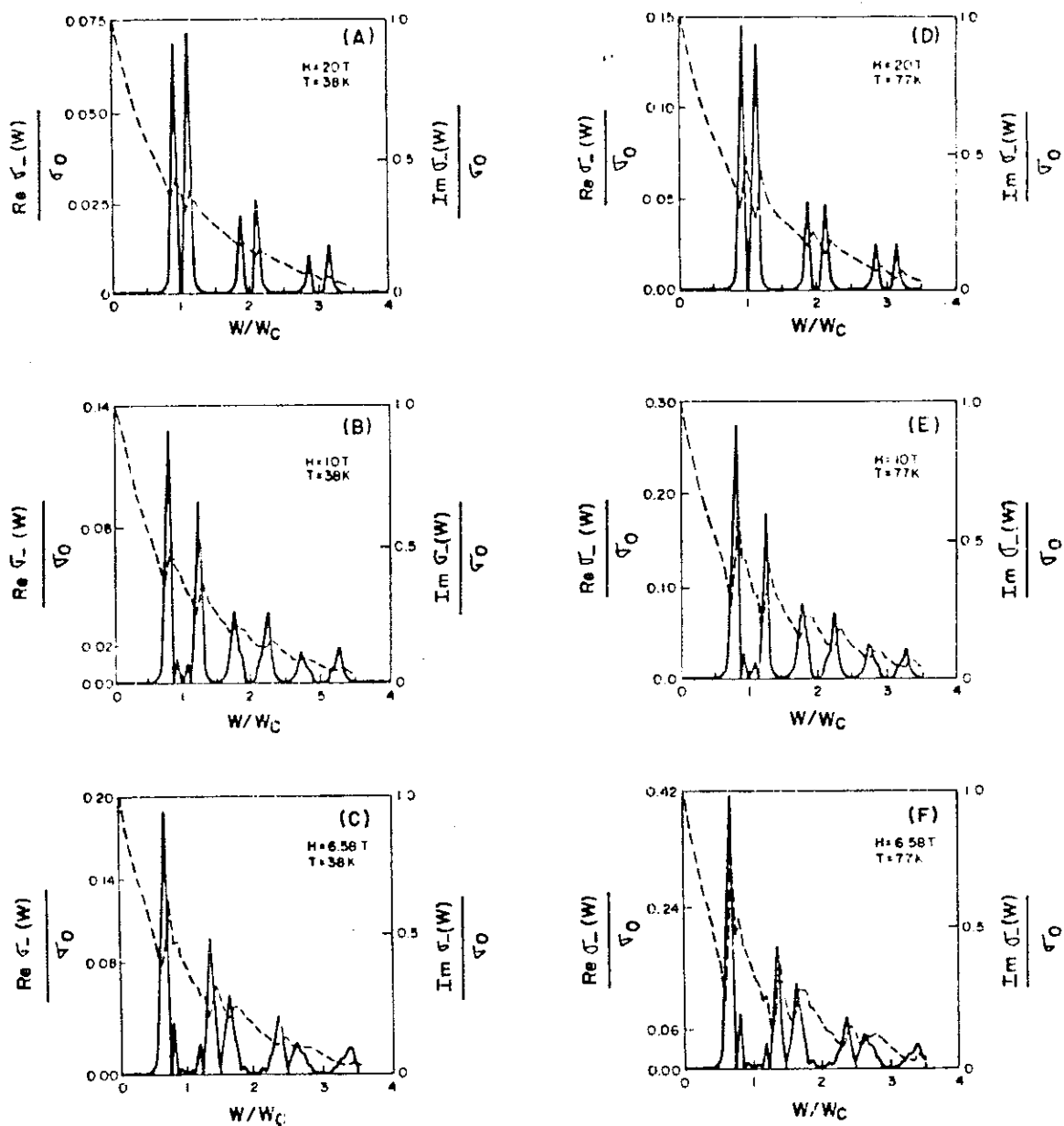


Fig. 3.12 - Parte real (linha cont nua) e parte imagin ria da condutividade din mica $\sigma_-(\omega)$, em unidades de σ_0 , para diferentes valores de campo magn tico ($B = 6.58T, 10T, 20T$) e temperaturas ($T = 38K, 77K$)

Observamos na Fig.(3.12) que a parte real da condutividade dinâmica exibe um "splitting" dos picos de ressonância para campos magnéticos baixos, em contraste com a estrutura de um único pico no limite de campo magnético muito forte. Em nossos cálculos, este resultado derivado do efeito de ocupação dos níveis de Landau e da contribuição das transições permitidas podem ser a base de uma descrição real dos resultados experimentais verificados por Schlesinger et al. (61), onde observou-se um "splitting" não esperado, da linha de ressonância ciclotrônica no gás de elétrons bidimensional.

Além disso, verificamos em nossos cálculos, Leal et al. (64, 70), em contraste com o trabalho de Hu e O'Connell (60), que a magnitude do pico de ressonância principal, isto é, em torno de $\omega = \omega_c$, exibe claramente uma dependência linear de temperatura e que a magnitude e a largura da linha de ressonância diminuem a medida que a intensidade do campo magnético aumenta. Neste sentido, obtemos, imediatamente, que a condutividade dinâmica derivada das excitações térmicas das transições dos elétrons entre os níveis de Landau diminui a medida que o campo magnético aumenta, visto que a separação entre os níveis de Landau aumenta proporcionalmente a ω_c . Este resultado reflete exatamente o fato de se ter um sistema de elétrons cada vez mais localizados a medida que se aplique campos magnéticos mais intensos. Além disso, temos ainda que a forma da linha de ressonância ciclotrônica é muito pouco sensível ao efeito de temperatura, tal que o "splitting" dos picos ressonantes permanece independentemente da faixa de temperatura que tenhamos efetuado nossos cálculos.

Desta forma, discutimos neste Capítulo o efeito do espalhamento do 2 DEG devido a fônons LA superficiais, através do formalismo de Função Memória, na aproximação de ordem mais baixa na função de correlação força-força, sobre o espectro de absorção (emissão) de fônons da magneto-condutividade do sistema. No Capítulo que se segue, investigamos o espalhamento de um gás de elétrons bidimensional por fônons longitudinais ópticos (2D), na presença de um campo magnético forte, onde verificamos a necessidade de se utilizar o formalismo de Função Memória em ordens superiores na função de correlação densidade-densidade.

CAPÍTULO 4

Neste capítulo investigaremos as propriedades magneto-óptica de um gás de elétrons bidimensional interagindo com fônons longitudinais ópticos (LO), em sistemas semicondutores polares, tais como super-redes de $Ga_{1-x}Al_xAs/GaAs$, heterojunções de $Ga_{1-x}In_xAs$, camadas de inversão de $InSb$, etc. Os efeitos polarônicos em sistemas 3 DEG tem sido objeto de grande número de estudos realizados nas últimas décadas (29), porém, somente recentemente é que estudos teóricos, por exemplo (31, 55, 68) e experimentais, por exemplo, (71, 72), têm sido realizados a fim de descrever efeitos polarônicos em sistemas 2 DEG. Na presença de um campo magnético os efeitos ressonantes dos polarons podem ser observados em experimentos de ressonância ciclôtrônica, como por exemplo, na determinação da renormalização da massa do elétron (53, 54). A ênfase principal tem sido na investigação da posição do pico das linhas de ressonância ciclôtrônica e no "splitting" da linha em torno da frequência de ressonância. Na ref.(31) Das Sarma e Madhukar, usando o formalismo de Função de Green, efetuaram cálculos de correção dos níveis de Landau e das anomalias magneto-óptica na região ressonante e mostraram que a influência do acoplamento elétron-fônon (3D) em sistemas 2 DEG pode levar a um "splitting" da linha de ressonância ciclôtrônica quando $w_c \cong w_{LO}$, tal como no caso dos polarons 3D (73, 74). Entretanto, na grande maioria desses trabalhos a interação elétron-fônon é descrita por um espalhamento do gás de elétrons 2D ou 3D devido a fônons LO tridimensionais ("bulk"). Recentemente, Brumell et al. (57) sugeriram que a dependência de temperatura observada no espectro de ressonância ciclôtrônica numa heteroestrutura de $GaAs/GaAlAs$ possa ser derivada

de um espalhamento do 2 DEG por fônons LO superficiais. Entretanto, ainda existe um número bastante reduzido de trabalhos na literatura que investiguem a interação do 2 DEG com fônons LO bidimensionais (58, 75).

Neste sentido, discutiremos neste trabalho o efeito deste tipo de interação entre o gás de elétrons bidimensional e fônons LO superficiais, na presença de um campo magnético aplicado perpendicularmente ao plano de movimento do 2 DEG. Nossa motivação reside no fato de que a absorção magneto-óptica é uma quantidade física mensurável, tal que, a frequência da ressonância ciclotrônica e a massa ciclotrônica possam ser obtidas a partir da posição de certos picos de ressonância. Efetuamos o cálculo das propriedades magneto-ópticas do espectro de absorção utilizando o formalismo de Função Memória em termos da função de correlação densidade-densidade para um gás de elétrons não-interagentes. Repetiremos ao longo deste capítulo algumas passagens já obtidas nos capítulos anteriores, pois é nosso objetivo desenvolver os cálculos deste trabalho da maneira mais autosuficiente possível. Assim sendo, este capítulo é organizado da seguinte maneira: na seção (4.1) investigamos as propriedades de transporte do 2DEG devido exclusivamente ao espalhamento por fônons LO em termos da função de polarização do gás de elétrons na aproximação de ordem mais baixa da função de correlação força-força. Verificamos contudo, que a parte imaginária da FM neste caso, é descrita por uma série de funções δ nos pontos das frequências ressonantes e que a parte real da FM diverge nesses pontos. Neste sentido, efetuamos na seção (4.2) o cálculo da função de polarização, para uma ordem superior, i.e., renormalizada devido a presença impurezas no material, onde introduzimos correções de vértice do tipo diagramas de escada ("ladder"), responsáveis pela origem de um comportamento difusivo na função de polarização. Finalmente, na seção (4.3) efetuamos o cálculo do tempo de relaxação do 2 DEG devido a interação com fônons LO superficiais e verificamos que o comportamento difusivo da função resposta densidade-densidade é responsável por remover divergências da FM e por um alargamento do espectro de ressonância magneto-óptica, sem a necessidade de se introduzir "ad-hoc" um alargamento no cálculo da FM dos níveis de Landau (30, 68).

4.1 - Interação elétron - fônon LO

Utilizamos a hamiltoniana de Fröhlich para descrever o sistema elétron-fônon LO sob a ação de um campo magnético, no referencial do centro de massa (17),

$$H = \left[\frac{\vec{P} + n_e \vec{A}(\vec{R})}{2M_e} \right]^2 + \sum_{\vec{q}} \hbar \omega_{LO} a_{\vec{q}}^\dagger a_{\vec{q}} + \sum_{\vec{q}} D_{op}(q) A_{\vec{q}} \rho(\vec{q}) \epsilon^{i\vec{q} \cdot \vec{R}} + H_{rel}, \quad (4.1.1)$$

onde $\vec{P}(\vec{R})$ é o vetor 2D momento (posição) do centro de massa do sistema de elétrons. $a_{\vec{q}}^\dagger(a_{\vec{q}})$ é o operador de criação (destruição) de fônons LO com vetor de onda 2D \vec{q} ($q_x, q_y, q_z = 0$) e energia $\hbar \omega_{LO}$. $\vec{A}(\vec{R}) = (0, xB, 0)$ é o potencial vetor descrevendo o campo magnético B_z perpendicular à camada bidimensional do gás de elétrons (plano xy), enquanto H_{rel} descreve a parte da hamiltoniana dependente apenas das coordenadas relativas dos elétrons. Na eq.(4.1.1) o acoplamento do potencial elétron-fônon LO, $D_{op}(q)$, é tal que

$$|D_{op}(q)|^2 = \frac{2\pi \hbar \alpha (\hbar \omega_{LO})^{3/2}}{q^2 (2m_e)^{1/2}}, \quad (4.1.2)$$

onde introduzimos a constante de acoplamento polar α , eq.(2.1.21).

Na presença do campo magnético os níveis de energia do gás de elétrons 2D são quantizados em níveis discretos de Landau ϵ_n , tal que a densidade de estados do sistema torna-se uma série de funções delta. Escrevemos a expressão da FM, no formalismo de operador de projeção, tal que

$$M_{\nu\mu}(z) = \frac{i\beta}{n_e m_e} \langle \pi_\nu | \mathbf{Q} \frac{i}{z - \mathbf{Q} \mathbf{L} \mathbf{Q}} \mathbf{Q} | \pi_\mu \rangle ; z = w + i0^+, \quad (4.1.3)$$

sendo

$$\pi_\nu = -\frac{i}{\hbar} [\pi_\nu, H], \quad (4.1.4)$$

com

$$\pi_x = P_x ; \quad \pi_y = P_y + n_e m_e w_c, \quad (4.1.5)$$

tal que,

$$\begin{aligned} \dot{\pi}_x &= -w_c \pi_y - U_x \\ \dot{\pi}_y &= w_c \pi_x - U_y, \end{aligned} \quad (4.1.6)$$

onde w_c representa a frequência ciclotrônica não perturbada, e U_ν é a componente- ν da força generalizada, devido ao espalhamento elétron-fônon, agindo sobre o centro de massa do sistema, eq.(1.3.2).

Efetuamos os cálculos da FM, em termos da função de correlação retardada força-força $\Pi_{\nu\mu}^R(w)$, eq.(1.2.15). Utilizamos a representação de temperatura finita de Matsubara para descrever a função de correlação força-força, na aproximação de ordem zero da interação elétron-fônon

$$\Pi_{\nu\mu}(\tau) = - \sum_{\vec{q}} q_\nu q_\mu |D_{oF}(q)|^2 D^0(\vec{q}, \tau) S(\vec{q}, \tau), \quad (4.1.7)$$

onde $D^0(\vec{q}, \tau)$ e $S(\vec{q}, \tau)$ representam, respectivamente, o propagador de fônons livres, eq.(1.4.19), e a função de polarização do gás de elétrons 2D não-interagentes, na presença de um campo magnético.

Escrevemos $S(\vec{q}, \tau)$ em termos de uma base de operadores de quase-partículas de Landau, tal que

$$S(\vec{q}, \tau) = \int d^2\vec{r}_1 \int d^2\vec{r}_2 e^{i\vec{q}\cdot(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)} S(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \tau), \quad (4.1.8)$$

onde por definição, temos

$$S(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \tau) = - \langle T_\tau \psi^\dagger(\vec{r}_2, \tau) \psi(\vec{r}_2, \tau) \psi^\dagger(\vec{r}_1, 0) \psi(\vec{r}_1, 0) \rangle, \quad (4.1.9)$$

com

$$\psi(\vec{r}, \tau) = \sum_{n, k_y} \psi_{n, k_y}(\vec{r}) c_{n, k_y}(\tau), \quad (4.1.10)$$

onde c_{n, k_y} representa o operador de destruição de elétrons no nível de Landau (n, k_y) , com energia do nível de Landau $\epsilon_n = \hbar w_c(n + 1/2)$, sendo $n = 0, 1, 2, \dots$ os índices dos níveis de Landau, enquanto a função de onda $\psi_{n, k_y}(\vec{r})$ é definida de acordo com a eq.(3.2.5).

Aplicando o teorema de Wick (9, 19) na equação acima, e considerando apenas o primeiro termo na expansão da matriz \tilde{S} , podemos escrever a função de correlação densidade-densidade, na aproximação de ordem zero, em termos de funções de Green de quase-partícula de Landau não perturbadas

$$S^0(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \tau) = G^0(\vec{r}_2, \vec{r}_1, -\tau) G^0(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \tau), \quad (4.1.11)$$

sendo

$$G^0(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \tau) = \sum_{n, k_y} \psi_{n, k_y}(\vec{r}_2) \psi_{n, k_y}^*(\vec{r}_1) G^0(n, k_y, \tau). \quad (4.1.12)$$

Transformando Fourier, obtemos

$$S^0(\vec{q}, ip_m) = \mathbf{P} \sum_{nn'} |J_{nn'}(q)|^2 \frac{1}{\beta} \sum_{i\epsilon_m} G^0(n', i\epsilon_m) G^0(n, i\epsilon_m - ip_m), \quad (4.1.13)$$

sendo $G^0(n, i\epsilon)$ definido na eq.(3.2.12).

Representamos diagramaticamente, na Fig.(4.1), a função de polarização do gás de elétrons na presença de campo magnético, eq.(3.2.18), em termos das funções de Green de quase-partículas de Landau na aproximação de ordem zero, através de um simples diagrama de bolha, onde possíveis correções de vértice foram desprezadas.

De volta a expressão da função de correlação força-força, podemos escrever

$$\Pi_{\nu\nu}(iw) = -2\pi\alpha\hbar \left(\frac{\hbar^3 w_{LO}^3}{2m_e}\right)^{1/2} \sum_{\vec{q}, ip_m} q_\nu^2 \frac{1}{q} \frac{1}{\beta} D^0(iw - ip_m) S^0(\vec{q}, ip_m), \quad (4.1.14)$$

onde devido a simetria do 2 DEG em relação a aplicação do campo magnético na direção z temos que $\Pi_{\nu\nu}(iw) = 0$ e $\Pi_{\nu\nu}(iw) = \Pi_{\mu\mu}(iw)$.

Agora, efetuando a soma de frequências de Matsubara e fazendo $\nu = x$ obtemos

$$\begin{aligned} \Pi_{xx}(iw) = & -\frac{\alpha\hbar}{l_0^2} \left(\frac{\hbar^3 w_{LO}^3}{2m_e}\right)^{1/2} \sum_{\vec{q}} q_x^2 \frac{1}{q} \sum_{nn'} |J_{nn'}(q)|^2 [\eta_+(\epsilon_{n'}) - \eta_+(\epsilon_n)] \times \\ & \times \left\{ \frac{[\eta_-(\hbar w_{LO}) - \eta_-(\epsilon_n - \epsilon_{n'})]}{(i\hbar w + \epsilon_n - \epsilon_{n'} - \hbar w_{LO})} - \text{termo}(w_{LO} \rightarrow -w_{LO}) \right\}, \end{aligned} \quad (4.1.15)$$

onde cada termo no somatório (n, n') corresponde a uma transição específica do polaron.

Desse modo, fazendo a extensão analítica $(iw \rightarrow w + i0^+)$ na eq.(4.1.15), obtemos para a parte imaginária de $\Pi_{xx}^R(w)$

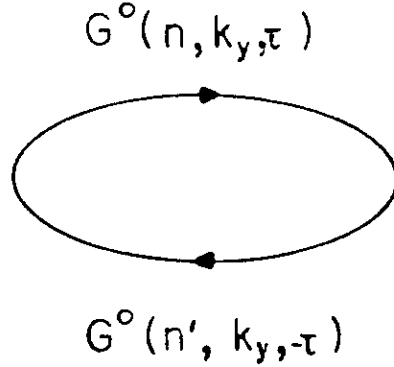
$$\begin{aligned} Im \Pi_{xx}^R(w) = & -\frac{\pi\alpha\hbar}{l_0^2} \left(\frac{\hbar^3 w_{LO}^3}{2m_e}\right)^{1/2} \sum_{\vec{q}} q_x^2 \frac{1}{q} \sum_{nn'} |J_{nn'}(q)|^2 [\eta_+(\epsilon_n) - \eta_+(\epsilon_{n'})] \times \\ & \times \left\{ [\eta_-(\hbar w_{LO}) - \eta_-(\hbar w_{LO} - \hbar w)] \delta(\epsilon_n - \epsilon_{n'} - \hbar w_{LO} + \hbar w) - \text{termo}(w_{LO} \rightarrow -w_{LO}) \right\}, \end{aligned} \quad (4.1.16)$$

onde verificamos imediatamente que $Im \Pi_{xx}^R(w = 0) = 0$, sendo que l_0 , eq.(3.2.8), representa o raio magnético da órbita do elétron.

Após algumas passagens algébricas, obtemos

$$\begin{aligned}
 \text{Im } \Pi_{xx}^R(w) = & -\frac{\pi\alpha\hbar}{l_0^2} \left(\frac{\hbar^3 w_{LO}^3}{2m_e}\right)^{1/2} \sum_{\vec{q}} q_x^2 \frac{1}{q} \sum_{nn'} |J_{nn'}(q)|^2 [\eta_+(\epsilon_n) - \eta_+(\epsilon_{n'})] \times \\
 & \times \frac{e^{\beta\hbar w_{LO}}}{(e^{\beta\hbar w_{LO}} - 1)} \left\{ \frac{(e^{\beta\hbar w} - 1)}{(e^{\beta\hbar(w_{LO}+w)} - 1)} \delta(\epsilon_n - \epsilon_{n'} + \hbar w_{LO} + \hbar w) - \text{termo}(w \rightarrow -w) \right\}, \quad (4.1.17)
 \end{aligned}$$

Fig. 4.1 - Representação diagramática da função de polarização do 2 DEG, na aproximação de ordem zero, na presença de um campo magnético.



Definindo $F_{nn'}(q)$ como sendo uma função do módulo de \vec{q} , vide eq.(2.2.12)

$$\begin{aligned}
 F_{nn'}(q) = & \sum_{\vec{q}} \frac{q_x^2}{q} |J_{nn'}(q)|^2 \rightarrow \frac{1}{8\pi^2} \int d^2q q |J_{nn'}(q)|^2 \\
 F_{nn'}(q) = & \frac{1}{8\pi^2} \frac{n!}{n'} \int d^2q q \left(\frac{l_0 q}{\sqrt{2}}\right)^{2(n'-n)} e^{-l_0^2 q^2/2} [L_n^{(n'-n)}(l_0^2 q^2/2)]^2, \quad (4.1.18)
 \end{aligned}$$

onde $L_n^{(n'-n)}(x)$ representa o polinômio associado de Laguerre, eq.(3.2.15).

Desde que,

$$M''(w) = -\frac{1}{n_e m_e w} \text{Im } \Pi_{xx}^R(w), \quad (4.1.19)$$

a solução para a parte imaginária da Função Memória é dada pela seguinte equação

$$\begin{aligned}
 M''(w) = & \frac{2\pi^2 \alpha \hbar}{l_0^2 n_e m_e} \left(\frac{\hbar^3 w_{LO}^3}{2m_e}\right)^{1/2} \sum_{nn'} F_{nn'}(q) [\eta_+(\epsilon_n) - \eta_+(\epsilon_{n'})] \times \\
 & \times \frac{1}{(1 - e^{-\beta\hbar w_{LO}})} \left\{ \frac{w^{-1} (e^{\beta\hbar w} - 1)}{(e^{\beta\hbar(w_{LO}+w)} - 1)} \delta(w_{nn'} + \hbar w_{LO} + \hbar w) + \text{termo}(w \rightarrow -w) \right\}, \quad (4.1.20)
 \end{aligned}$$

sendo $w_{nn'} = \epsilon_{n'} - \epsilon_n = m\hbar w_c$, onde $n' \rightarrow n + m$, com $m = 1, 2, 3, \dots$ representando as transições efetuadas pelo polaron.

No caso do limite estático, $w = 0$,

$$\Gamma^{-1} = M''(0) = \frac{\hbar^2 \alpha \beta}{4l_0^2 n_e m_e} \left(\frac{m \hbar w_c}{2m_e} \right)^{3/2} \sum_{nm} \frac{n!}{(n+m)!} [\eta_+(\epsilon_n) - \eta_+(\epsilon_{n+m})] \times \\ \times \frac{e^{m\beta\hbar w_c}}{(e^{m\beta\hbar w_c} - 1)^2} \int_0^\infty dq q^2 \left(\frac{l_0 q}{\sqrt{2}} \right)^{2m} e^{-l_0^2 q^2 / 2} [L_n^m(l_0^2 q^2 / 2)]^2 \delta(\hbar w_{LO} - m \hbar w_c), \quad (4.1.21)$$

onde verificamos imediatamente que $M''(0)$ só apresenta valores não-nulos nos pontos de ressonância $w_{LO} = m w_c$ e cujas magnitudes nesses pontos são determinadas através do cálculo da integral acima.

Avaliando o efeito de ocupação em nossos cálculos obtemos,

$$M''(w) = \frac{2\pi^2 \alpha \hbar}{l_0^2 n_e m_e} \left(\frac{\hbar^3 w_{LO}^3}{2m_e} \right)^{1/2} \sum_{nm} F_{n,n+m}(q) \Theta(E_F - \epsilon_n) \Theta(\epsilon_{n+m} - E_F) \times \\ \times \left\{ \frac{e^{\beta\hbar(mw_c - w)}}{(e^{\beta\hbar(mw_c - w)} - 1)} \frac{w^{-1} (e^{\beta\hbar w} - 1)}{(e^{m\beta\hbar w_c} - 1)} \delta(\hbar w_{LO} - (m\hbar w_c - \hbar w)) \Theta(m\hbar w_c - \hbar w) + \right. \\ \left. - \frac{e^{\beta\hbar(mw_c + w)}}{(e^{\beta\hbar(mw_c + w)} - 1)} \frac{w^{-1} (e^{-\beta\hbar w} - 1)}{(e^{m\beta\hbar w_c} - 1)} \delta(\hbar w_{LO} - (m\hbar w_c + \hbar w)) + \right. \\ \left. + \frac{e^{\beta\hbar(w - mw_c)}}{(e^{\beta\hbar(w - mw_c)} - 1)} \frac{w^{-1} (e^{-\beta\hbar w} - 1)}{(e^{-m\beta\hbar w_c} - 1)} \delta(\hbar w_{LO} - (\hbar w - m\hbar w_c)) \Theta(\hbar w - m\hbar w_c) \right\}, \quad (4.1.22)$$

tal que, introduzindo as seguintes grandezas adimensionais: $y = w/w_c$; $w_0 = w_{LO}/w_c$, podemos escrever

$$M''(w) = \frac{2\pi^2 \alpha}{l_0^2 n_e m_e w_c^2} \left(\frac{\hbar w_c w_0^3}{2m_e} \right)^{1/2} \frac{1}{y} \sum_{nm} F_{n,n+m}(q) \Theta(E_F - \epsilon_n) \Theta(\epsilon_{n+m} - E_F) \times \\ \times \left\{ \frac{(e^{y\beta\hbar w_c} - 1)}{(e^{m\beta\hbar w_c} - 1)} \frac{e^{\beta\hbar w_c(m-y)}}{(e^{\beta\hbar w_c(m-y)} - 1)} \delta(w_0 - (m - y)) \Theta(m - y) + \right. \\ \left. - \frac{(e^{-y\beta\hbar w_c} - 1)}{(e^{m\beta\hbar w_c} - 1)} \frac{e^{\beta\hbar w_c(m+y)}}{(e^{\beta\hbar w_c(m+y)} - 1)} \delta(w_0 - (m + y)) + \right. \\ \left. + \frac{(e^{-y\beta\hbar w_c} - 1)}{(e^{-m\beta\hbar w_c} - 1)} \frac{e^{\beta\hbar w_c(y-m)}}{(e^{\beta\hbar w_c(y-m)} - 1)} \delta(w_0 - (y - m)) \Theta(y - m) \right\}, \quad (4.1.23)$$

Na equação acima o primeiro e o último termo correspondem respectivamente, aos processos de absorção de fônons LO ($m > y$) e emissão de fônons LO ($y > m$), enquanto o segundo termo advém do processo de emissão de fônons com grande vetor de onda. Verificamos ainda, que as funções δ que aparecem em cada um dos tres termos de $M''(w)$, implicam que apenas nas frequências de ressonância, esses termos serão diferentes de zero. Além disso, temos que as

posições desses picos ressonantes, em função da frequência ω , são determinadas em função do valor de $w_0 = w_{LO}/w_c$ e das contribuições devido às transições $(n, n + m)$, para ambos os processos de absorção e de emissão de fônons.

A parte real da FM, $M'(w)$, é obtida diretamente de $M''(w)$, eq.(4.1.23), através da relação de Kramers-Kronig

$$M'(w) = \frac{2w}{\pi} P \int_0^\infty dw' \frac{M''(w')}{(w'^2 - w^2)}, \quad (4.1.24)$$

mas que diverge entretanto, nos pontos das frequências ressonantes.

Desse modo, verificamos que, sob a ação de um campo magnético forte, o espalhamento do 2 DEG por fônons LO, na aproximação de ordem mais baixa na função de polarização, implica numa descrição da parte imaginária da FM em termos de uma série de funções δ e que devido a essa estrutura especial de $M''(w)$ o espectro de absorção magneto-óptico é descrito da mesma forma por uma série de δ -picos ressonantes, que não são verificados experimentalmente. Neste sentido, introduzimos na seção seguinte, correções de vértices responsáveis por um comportamento difusivo na função de polarização, capaz de remover divergências no cálculo da Função Memória.

4.2 - Função de Polarização: efeito de difusão

Verificamos na seção anterior que o cálculo da função de correlação força-força, devido a interação elétron-fônon LO, na aproximação de ordem zero da função de correlação densidade-densidade, leva a uma estrutura de δ -picos ressonantes no espectro de absorção magneto-óptico. Nesta seção discutiremos o cálculo da função de polarização do 2 DEG, na presença de um campo magnético, a partir de uma renormalização no propagador de partícula, devido aos efeitos de espalhamento por impurezas. Desse modo, temos que o tempo de relaxação Γ do sistema de elétrons, eq.(1.4.31), é descrito em termos de uma contribuição devido o espalhamento por impurezas, Γ_{imp} , e uma contribuição, Γ'_{fon} , devido ao espalhamento por fônons, renormalizada

pela presença de impurezas, tal que

$$\frac{1}{\Gamma} = \frac{1}{\Gamma'_{fon}} + \frac{1}{\Gamma_{imp}}, \quad (4.2.1)$$

sendo que ao longo deste trabalho, estaremos interessados unicamente na contribuição Γ'_{fon} .

Discutimos os efeitos de uma distribuição randômica de impurezas sobre a função de correlação densidade-densidade de um gás de elétrons não-interagentes sob a ação de um campo magnético, que seja responsável por um comportamento difusivo na função de polarização no limite de q e w pequenos. Neste sentido, escrevemos a função densidade-densidade na representação de Matsubara

$$S(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \tau) = - \langle T_\tau \psi^\dagger(\vec{r}_2, \tau) \psi(\vec{r}_2, \tau) \psi^\dagger(\vec{r}_1, 0) \psi(\vec{r}_1, 0) \rangle, \quad (4.2.2)$$

com

$$\psi(\vec{r}, \tau) = \sum_{n, k_y} \phi_n(x/l_0 + l_0 k_y) e^{-ik_y y} c_{n, k_y}(\tau), \quad (4.2.3)$$

onde $\phi_n(x)$ representa a n -ésima autofunção de um oscilador harmônico, eq.(3.2.6). Usando o teorema de Wick (19) e a definição da função de Green de uma partícula, eq.(4.1.12), podemos escrever

$$S(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \tau) = G(\vec{r}_2, \vec{r}_1, -\tau) G(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \tau), \quad (4.2.4)$$

Agora, transformando Fourier, encontramos

$$S(\vec{r}_1, \vec{r}_2, ip_m) = \frac{1}{\beta} \sum_{i\epsilon_m} G(\vec{r}_2, \vec{r}_1, i\epsilon_m - ip_m) G(\vec{r}_1, \vec{r}_2, i\epsilon_m), \quad (4.2.5)$$

onde $i\epsilon_m$ e ip_m são, respectivamente, frequências de Fermi e de Bose e efetuamos a soma de frequência de Matsubara (Apêndice A.6), tal que

$$I = \frac{1}{2\pi i} \lim_{R \rightarrow \infty} \int_C \eta_+(z) G(\vec{r}_1, \vec{r}_2, z - ip_m) G(\vec{r}_1, \vec{r}_2, z) dz, \quad (4.2.5)$$

As funções de Green apresentam singularidades sobre as linhas horizontais em $Im z = 0$ e $Im(z - ip_m) = 0$. Nesse caso a integral I é não nula no limite em que $R \rightarrow \infty$, isto é, ela é dada exatamente pelas contribuições ao longo dos "branch cuts", $z - ip_m = \epsilon \rightarrow \text{real}$, (9).

$$I = \frac{1}{2\pi i} \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon \eta_+(\epsilon + ip_m) G(\vec{r}_2, \vec{r}_1, \epsilon + i0^+) G(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \epsilon + ip_m) + \right.$$

$$\begin{aligned}
& + \int_{\infty}^{-\infty} d\epsilon \eta_+(\epsilon + ip_m) G(\vec{r}_2, \vec{r}_1, \epsilon - i0^+) G(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \epsilon + ip_m) + \\
& + \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon \eta_+(\epsilon) G(\vec{r}_2, \vec{r}_1, \epsilon - ip_m) G(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \epsilon + i0^+) + \\
& + \int_{\infty}^{-\infty} d\epsilon \eta_+(\epsilon) G(\vec{r}_2, \vec{r}_1, \epsilon - ip_m) G(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \epsilon - i0^+) \}. \tag{4.2.6}
\end{aligned}$$

Fazendo as seguintes definições:

$$\begin{aligned}
G(\epsilon + i0^+) &= G^R(\epsilon) \\
G(\epsilon - i0^+) &= G^A(\epsilon), \tag{4.2.7}
\end{aligned}$$

onde $G^R(\epsilon)$ ($G^A(\epsilon)$) representa a função de Green Retardada (Avançada) (19) e desde que $\eta_+(\epsilon - ip_m) = \eta_+(\epsilon)$, podemos escrever

$$\begin{aligned}
1 &= \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon \eta_+(\epsilon) \times \\
&\times \{ G^R(\vec{r}_2, \vec{r}_1, \epsilon) G^R(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \epsilon + p_m) + \\
&- G^A(\vec{r}_2, \vec{r}_1, \epsilon) G^R(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \epsilon + p_m) + \\
&+ G^A(\vec{r}_2, \vec{r}_1, \epsilon - p_m) G^R(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \epsilon) + \\
&- G^A(\vec{r}_2, \vec{r}_1, \epsilon - p_m) G^A(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \epsilon) \}, \tag{4.2.8}
\end{aligned}$$

efetuando uma mudança de variáveis nos dois últimos termos, temos

$$\begin{aligned}
S(\vec{r}_1, \vec{r}_2, p_m) &= \frac{1}{2\pi i} \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon [\eta_+(\epsilon + p_m) - \eta_+(\epsilon)] G^A(\vec{r}_2, \vec{r}_1, \epsilon) G^R(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \epsilon + p_m) + \right. \\
&+ \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon \eta_+(\epsilon) G^R(\vec{r}_2, \vec{r}_1, \epsilon) G^R(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \epsilon + p_m) + \\
&\left. - \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon \eta_+(\epsilon + p_m) G^A(\vec{r}_2, \vec{r}_1, \epsilon) G^A(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \epsilon + p_m) \right\}, \tag{4.2.9}
\end{aligned}$$

Efetuamos uma média configuracional sobre as possíveis posições que as impurezas possam ter no material. Usualmente supõe-se que as impurezas estejam distribuídas randômicamente no sistema e que não existe correlação entre suas posições. Desse modo, a função retardada de polarização fica da seguinte forma (76)

$$\begin{aligned} \chi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, p_m) = & \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon \{ [\eta_+(\epsilon + p_m) - \eta_+(\epsilon)] \chi^{RA}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \epsilon + p_m, \epsilon) + \\ & + [\eta_+(\epsilon) \chi^{RR}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \epsilon + p_m, \epsilon) - \eta_+(\epsilon + p_m) \chi^{AA}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \epsilon + p_m, \epsilon)] \}, \end{aligned} \quad (4.2.10)$$

onde por definição,

$$\chi^{ij} = \langle\langle G^i(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \epsilon + p_m) G^j(\vec{r}_2, \vec{r}_1, \epsilon) \rangle\rangle \quad ; (i, j = R \text{ ou } A) , \quad (4.2.11)$$

onde $\langle\langle \rangle\rangle$ significa uma média configuracional. A média do produto das funções de Green conecta as funções $G(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \epsilon + p_m)$ e $G(\vec{r}_2, \vec{r}_1, \epsilon)$ através de linhas de impurezas (9).

Na Fig.(4.2) exibimos alguns típicos diagramas que contribuem como correções de vértices na determinação de $\langle\langle G^i G^j \rangle\rangle$. Todos os diagramas na Fig.(4.2) podem ser classificados como redutíveis ou irredutíveis, dependendo se o diagrama pode ou não ser separado em duas partes através de uma simples quebra numa linha de elétron (9). Uma subclasse de diagramas (redutíveis) para correções de vértices são os chamados diagramas de escada ("ladders") Fig.(4.3), responsáveis por um comportamento difusivo na função de polarização no limite em que $q, w \rightarrow 0$ (77).

Na aproximação de diagramas de escada χ^{ij} satisfaz a equação de Dyson (76)

$$\chi^{ij}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \epsilon + p_m, \epsilon) = \chi_0^{ij}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \epsilon + p_m, \epsilon) + n_i u^2 \int d^2 \vec{r}_2 \chi_0^{ij}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \epsilon + p_m, \epsilon) \chi^{ij}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \epsilon + p_m, \epsilon), \quad (4.2.12)$$

onde n_i representa a densidade de impurezas, u é a magnitude do potencial de espalhamento e χ_0^{ij} é o produto das médias de duas funções de Green G^i e G^j , com

$$\begin{aligned} G^{R,A}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \epsilon + p_m) &= \sum_{n, k_y} \psi_{n, k_y}(\vec{r}_1) \psi_{n, k_y}^*(\vec{r}_2) G_{n, k_y}^{R,A}(\epsilon + p_m) \\ G^{R,A}(\vec{r}_2, \vec{r}_1, \epsilon) &= \sum_{n', p_y} \psi_{n', p_y}(\vec{r}_2) \psi_{n', p_y}^*(\vec{r}_1) G_{n', p_y}^{R,A}(\epsilon), \end{aligned} \quad (4.2.13)$$

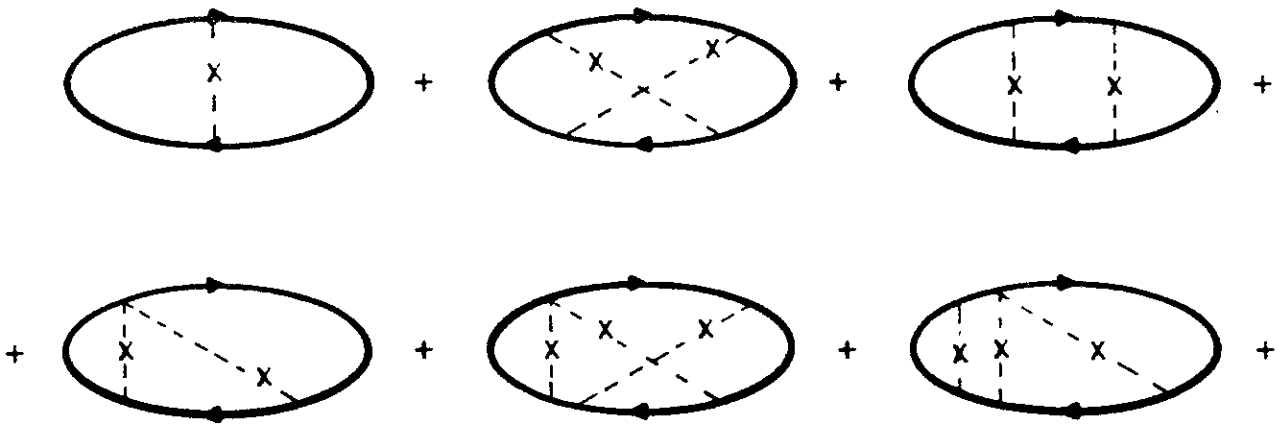


Fig. 4.2 - Típicos diagramas de correções de vértices para $\langle\langle G^i G^j \rangle\rangle$.

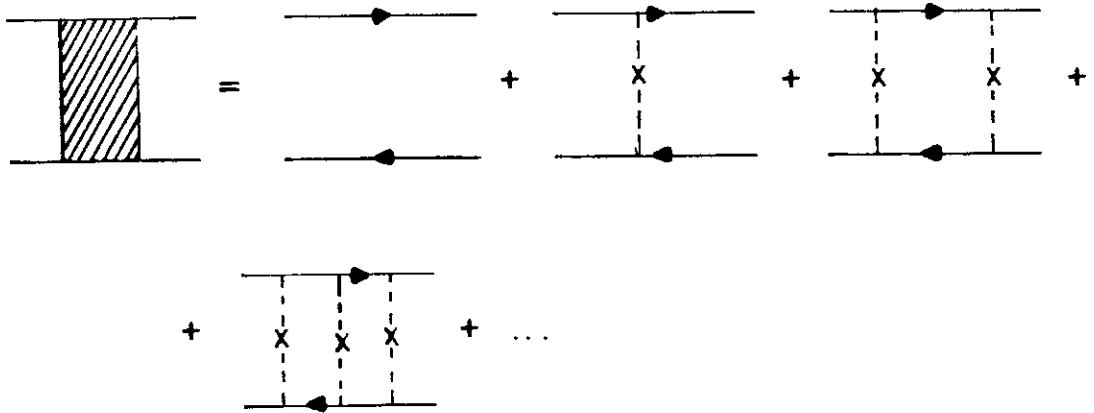


Fig. 4.3 - Correções de vértices na série infinita de diagramas do tipo escada. A linha tracejada com \times representa espalhamentos por impurezas

Desta forma, podemos escrever

$$\chi_0^{ij}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \epsilon + p_m, \epsilon) = \sum_{n, n', k_y, p_y} \psi_{n, k_y}(\vec{r}_1) \psi_{n, k_y}^*(\vec{r}_2) \psi_{n', p_y}(\vec{r}_2) \psi_{n', p_y}^*(\vec{r}_1) G_{n, k_y}^i(\epsilon + p_m) G_{n', p_y}^j(\epsilon)$$

$$\begin{aligned} \lambda_0^{ij}(\bar{r}_1, \bar{r}_2, \epsilon + p_m, \epsilon) &= \sum_{n, n', k_y, r_y} e^{i(k_y - r_y)(y_1 - y_2)} G_{n, k_y}^i(\epsilon + p_m) G_{n', r_y}^j(\epsilon) \times \\ &\times \phi_n(x_1 + l_0^2 k_y) \phi_n^*(x_2 + l_0^2 k_y) \phi_{n'}(x_2 + l_0^2 p_y) \phi_{n'}^*(x_1 + l_0^2 p_y). \end{aligned} \quad (4.2.14)$$

Os efeitos de impurezas são descritos na aproximação SCBA ("self consistent Born approximation") (78), através do propagador "vestido" $G^{i,j}(\epsilon)$, satisfazendo a equação de Dyson

$$G_{n', p_y}^{i,j}(\epsilon) = \frac{1}{\epsilon - \epsilon_{n'} - \Sigma^{i,j}(\epsilon)} = G_{n'}^{i,j}(\epsilon), \quad (4.2.15)$$

independente do momento p_y e cuja "self energy", $\Sigma^{i,j}(\epsilon)$ é dada por (76)

$$\Sigma^{i,j}(\epsilon) = n_i u^2 \sum_{n', p_y} G_{n', p_y}^{i,j}(\epsilon). \quad (4.2.16)$$

Escrevendo $p_y = (k_y + q_y)$ e efetuando um deslocamento de k_y em $(x_1 + l_0^2 k_y) \rightarrow l_0^2 k_y$, verificamos facilmente que $\lambda_0^{ij}(\bar{r}_1, \bar{r}_2, \epsilon + p_m, \epsilon)$ pode ser escrito como $\lambda_0^{ij}(\bar{r}_1 - \bar{r}_2, \epsilon + p_m, \epsilon)$, exibindo desta forma uma invariância translacional, também verificada em $\chi^{i,j}$. Desta forma, podemos efetuar a transformada de Fourier no espaço dos momentos, tal que

$$\chi(\bar{q}, \bar{q}', \epsilon + p_m, \epsilon) = \int d^2 \bar{r}_1 \int d^2 \bar{r}_2 e^{-i\bar{q} \cdot \bar{r}_1} e^{i\bar{q}' \cdot \bar{r}_2} \chi(\bar{r}_1, \bar{r}_2, \epsilon + p_m, \epsilon) = \chi(\bar{q}, \epsilon + p_m, \epsilon) \delta(\bar{q} - \bar{q}'), \quad (4.2.17)$$

No limite de \bar{q}, p_m pequenos, podemos verificar que $\chi^{RR,AA}$ são finitos e não nulos. Desta forma, temos que

$$\begin{aligned} \chi^{RR,AA}(\bar{q} = 0, \epsilon, \epsilon) &= \int d^2 \bar{r}_1 \int d^2 \bar{r}_2 \chi^{RR,AA}(\bar{r}_1, \bar{r}_2, \epsilon, \epsilon) = \\ &= \int d^2 \bar{r}_1 \int d^2 \bar{r}_2 \langle\langle G^{R,A}(\bar{r}_1, \bar{r}_2, \epsilon) G^{R,A}(\bar{r}_2, \bar{r}_1, \epsilon) \rangle\rangle, \end{aligned} \quad (4.2.18)$$

onde

$$\begin{aligned} G^{R,A}(\bar{r}_1, \bar{r}_2, \epsilon) &= \sum_n \frac{\psi_n(\bar{r}_1) \psi_n^*(\bar{r}_2)}{\epsilon - \epsilon_n \pm i/2\tau} \\ G^{R,A}(\bar{r}_2, \bar{r}_1, \epsilon) &= \sum_{n'} \frac{\psi_{n'}(\bar{r}_2) \psi_{n'}^*(\bar{r}_1)}{\epsilon - \epsilon_{n'} \pm i/2\tau}, \end{aligned} \quad (4.2.19)$$

Substituindo na eq.(4.2.18), encontramos

$$\chi^{RR,AA}(\bar{q} = 0, \epsilon, \epsilon) = \int d^2 \bar{r}_1 \langle\langle \sum_n \frac{\psi_n(\bar{r}_1) \psi_n^*(\bar{r}_2)}{(\epsilon - \epsilon_n \pm i/2\tau)^2} \rangle\rangle =$$

$$= - \int d^2 \vec{r}_1 \frac{\partial}{\partial \epsilon} \langle \langle \sum_n \frac{\psi_n(\vec{r}_1) \psi_n^*(\vec{r}_1)}{(\epsilon - \epsilon_n \pm i0^+)} \rangle \rangle, \quad (4.2.20)$$

tal que,

$$\begin{aligned} \chi^{RR,AA}(\vec{q} = 0, \epsilon, \epsilon) &= - \int d^2 \vec{r}_1 \frac{\partial}{\partial \epsilon} \langle \langle G^{R,A}(\vec{r}_1, \vec{r}_1, \epsilon) \rangle \rangle = \\ &= - \frac{\partial}{\partial \epsilon} \text{tr} \langle \langle G^{RR,AA}(\vec{r}_1, \vec{r}_1, \epsilon) \rangle \rangle. \end{aligned} \quad (4.2.21)$$

A densidade de estados $N(\epsilon)$ pode ser escrita como sendo

$$N(\epsilon) = -\frac{1}{\pi} \text{Im tr } G^R(\epsilon), \quad (4.2.22)$$

além disso,

$$[G^R(\epsilon) - G^A(\epsilon)] = 2i \text{Im } G^R(\epsilon). \quad (4.2.23)$$

Desta forma, podemos escrever no limite em que $p_m \rightarrow 0$

$$\frac{1}{2\pi i} \int d\epsilon \eta_+(\epsilon) [\chi^{RR}(\vec{q} = 0, \epsilon, \epsilon) - \chi^{AA}(\vec{q} = 0, \epsilon, \epsilon)] = \int d\epsilon \eta_+(\epsilon) \frac{\partial}{\partial \epsilon} N(\epsilon), \quad (4.2.24)$$

ou ainda,

$$\frac{1}{2\pi i} \int d\epsilon \eta_+(\epsilon) [\chi^{RR}(\vec{q} = 0, \epsilon, \epsilon) - \chi^{AA}(\vec{q} = 0, \epsilon, \epsilon)] = - \int d\epsilon \frac{\partial}{\partial \epsilon} \eta_+(\epsilon) N(\epsilon) = N(E_F), \quad (4.2.25)$$

onde $N(E_F)$ é a densidade de estados na energia de Fermi. Além disso, temos que $[\eta_+(\epsilon + p_m) - \eta_+(\epsilon)] \cong -p_m \delta(E_F - \epsilon)$ para $p_m \rightarrow 0$ e $T = 0$, tal que

$$\chi(\vec{q}, p_m) = -\frac{p_m}{2\pi i} \chi^{RA}(\vec{q}, E_F + p_m, E_F) + N(E_F) + O(p_m, q^2). \quad (4.2.26)$$

Sendo a polarização relacionada com a variação na densidade de partículas devido a um potencial externo, por exemplo tipo elétron-fônon, temos que no caso de $\vec{q} = 0$, limite de comprimento de onda infinito, a função resposta densidade-densidade $\chi(\vec{q}, p_m)$ é nula, devido a conservação de partículas.

$$\chi(\vec{q} = 0, p_m) = 0, \quad (4.2.27)$$

assim sendo,

$$\chi^{RA}(\vec{q} = 0) = \frac{2\pi i N(E_F)}{p_m}. \quad (4.2.28)$$

e desde que χ^{RA} satisfaz a equação de Dyson, eq.(4.2.12), podemos escrever

$$\chi^{RA}(\vec{q}, E_F + p_m, E_F) = \frac{\chi_0^{RA}(\vec{q}, E_F + p_m, E_F)}{(1 - n_i u^2 \chi_0^{RA}(\vec{q}, E_F + p_m, E_F))} \rightarrow \lim_{\vec{q}, p_m \rightarrow 0} \frac{2\pi N(E_F)}{-ip_m + O(q^2)}. \quad (4.2.29)$$

Neste sentido, efetuamos agora uma expansão de $\chi_0^{RA}(\vec{q}, E_F + p_m, E_F)$ em termos do parâmetro q capaz de determinar um comportamento de pólo difusivo na função de polarização. De volta à eq.(4.2.14) e efetuando a transformada de Fourier, temos

$$\chi_0^{RA}(\vec{q}, \epsilon + p_m, \epsilon) = \sum_{n, n', k_y, p_y} \langle n', p_y | \epsilon^{i\vec{q} \cdot \vec{r}_1} | n, k_y \rangle \langle n, k_y | \epsilon^{i\vec{q} \cdot \vec{r}_2} | n', p_y \rangle G_n^R(\epsilon + p_m) G_{n'}^A(\epsilon), \quad (4.2.30)$$

onde definimos

$$J_{nn'}(q) = \int d^2 \vec{r}_1 \psi_{n' p_y}^*(\vec{r}_1) e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}_1} \psi_{n k_y}(\vec{r}_1) \equiv \langle n', p_y | \epsilon^{i\vec{q} \cdot \vec{r}_1} | n, k_y \rangle, \quad (4.2.31)$$

tal que,

$$\chi_0^{RA}(\vec{q}, \epsilon + p_m, \epsilon) = \mathbf{p} \sum_{nn'} |J_{nn'}(q)|^2 G_n^R(\epsilon + p_m) G_{n'}^A(\epsilon), \quad (4.2.32)$$

onde \mathbf{p} é a degenerescência do nível de Landau e $|J_{nn'}(q)|^2$ é obtido no Apêndice A.12, como sendo

$$|J_{nn'}(q)|^2 = \delta_{nn'} + \frac{q^2 l_0^2}{2} \left[\left(\frac{n+1}{2}\right) \delta_{n', n+1} + \left(\frac{n}{2}\right) \delta_{n', n-1} \right] - q^2 l_0^2 \left[\left(\frac{n+1}{2}\right) \delta_{n', n} + \left(\frac{n}{2}\right) \delta_{n', n} \right]. \quad (4.2.33)$$

De volta à expressão de χ_0^{RA} , eq.(4.2.32), e fazendo algumas manipulações algébricas, encontramos

$$\begin{aligned} \chi_0^{RA}(\vec{q}, \epsilon + p_m, \epsilon) = \mathbf{p} \sum_n \{ & G_n^R(\epsilon + p_m) G_n^A(\epsilon) + q^2 l_0^2 \left[\left(\frac{n+1}{2}\right) G_n^R(\epsilon + p_m) G_n^A(\epsilon) + \right. \\ & \left. - \left(\frac{n+1}{2}\right) G_{n+1}^R(\epsilon + p_m) G_n^A(\epsilon) - \left(\frac{n+1}{2}\right) G_n^R(\epsilon + p_m) G_{n+1}^A(\epsilon) \right] \}, \end{aligned} \quad (4.2.34)$$

onde as somas são obtidas através de integrações de contorno (vide Apêndice A.13) tal que

$$\chi_0^{RA}(\vec{q}, \epsilon + p_m, \epsilon) = \frac{1}{n_i u^2} (1 + ip_m \tau - D_H q^2 \tau), \quad (4.2.35)$$

onde D_H é a constante de difusão na presença de campo magnético, cujo valor é definido no Apêndice A.13, como

$$D_H = \frac{(E_F' + 1/\tau') \tau}{m_e (1 + w_c^2 \tau^2)}, \quad (4.2.36)$$

sendo

$$\begin{aligned}\frac{1}{\tau(\epsilon)} &= 2\pi n_i u^2 N(\epsilon) \\ \frac{2\pi}{\tau'} &= m_e n_i u^2 \\ \epsilon' &= \epsilon - \Sigma(\epsilon).\end{aligned}\tag{4.2.37}$$

Desta forma, substituindo a expressão de $\chi_0^{RA}(\vec{q}, \epsilon + p_m, \epsilon)$, na eq.(4.2.29) obtemos

$$\chi^{RA}(\vec{q}, p_m) = \frac{2\pi N(E_F)}{-ip_m + D_H q^2}.\tag{4.2.38}$$

Finalmente, temos que a função de polarização $\chi(\vec{q}, p_m)$, eq.(4.2.26), é dada por

$$\chi(\vec{q}, p_m) = N(E_F) \frac{D_H q^2}{-ip_m + D_H q^2},\tag{4.2.39}$$

onde verificamos facilmente a formação de um pólo difusivo na estrutura da função de polarização.

Este resultado obtido anteriormente por Senna (76) para o caso de um gás de elétrons 2D sob a ação de um campo magnético tem sido obtido na literatura de maneira similar na ausência de campo magnético (77, 79, 80) no estudo da localização de Anderson em sistemas de baixa dimensionalidade ou através de considerações mais gerais a partir da suposição de que a flutuação na função densidade-densidade satisfaça uma equação de difusão (6).

Podemos ainda comparar os cálculos efetuados nesta seção com os resultados utilizados por Hu e O'Connell (81) para a determinação de uma forma difusiva para a função de polarização do gás de elétrons na presença de um campo magnético. Em nossos cálculos o aparecimento de um pólo difusivo em $\chi(\vec{q}, p_m)$ deriva de correções de vértices na função densidade-densidade, através da renormalização do propagador de elétrons, devido a espalhamentos por impurezas, enquanto que na ref.(81) os autores introduzem "a priori" um termo iDq^2 a fim de descrever um efeito de amortecimento ("damping") na resposta do gás de elétrons devido aos efeitos de auto-difusão do centro de massa do sistema e a interação elétron - fônon acústico. Neste sentido, Hu e O'Connell, levando em conta efeitos de flutuações nas coordenadas do C.M., reescrevem simplesmente a função original de Stern para a função de polarização, na aproximação RPA, eq.(3.3.4), substituindo o termo $i\delta$ pelo termo de pólo difusivo iDq^2 , caracterizando desta

forma um resultado completamente diferente do resultado aqui apresentado. Na seção seguinte investigamos o efeito do comportamento difusivo da estrutura da função densidade-densidade, eq.(4.2.39), no cálculo do tempo de relaxação do sistema via Função Memória.

4.3 - Cálculo do tempo de relaxação Γ'_{fon}

Introduzimos a expressão da função de polarização, eq.(4.2.39), no formalismo de temperatura finita de Matsubara (79, 80), como

$$\chi(\vec{q}, ip_m) = N(E_F) \frac{iD_H q^2}{ip_m + iD_H q^2}, \quad (4.3.1)$$

sendo $ip_m = 2\pi m\beta^{-1}$ frequência de Matsubara.

De volta à expressão da função de correlação força-força, eq.(4.1.14), temos

$$\Pi_{xx}(iw) = -C' \sum_{\vec{q}} q_x^2 \frac{1}{q^2} \frac{1}{\beta} \sum_{ip_m} D^0(iw - ip_m) \chi(\vec{q}, ip_m), \quad (4.3.2)$$

com

$$C' = 2\pi\hbar\alpha \left(\frac{2\hbar^3 w_{LO}^3}{m_e}\right)^{1/2}. \quad (4.3.3)$$

Na Fig.(4.4) descrevemos diagramaticamente a expressão da função de correlação força - força em ordens superiores, eq.(4.3.2), na interação elétron - fônons LO, levando-se em conta correções de vértices do tipo diagramas de escada na função densidade - densidade do 2 DEG.

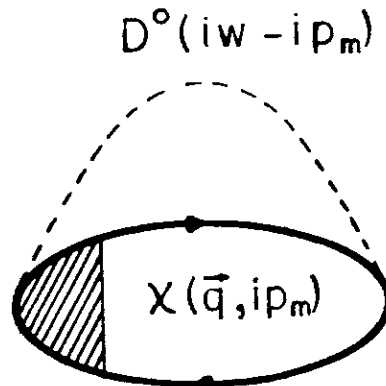


Fig. 4.4 - Representação diagramática da função força - força na interação elétron - fónon LO, incluindo correções de vértices do tipo escada.

Fazendo as substituições e efetuando a soma de frequência de Matsubara, com $ip_n = -ip_n$, (vide Apêndice A.6), encontramos

$$\begin{aligned} \Pi_{xx}(iw) = C^t N(E_F) \sum_{\bar{q}} \frac{1}{q^2} q_x^2 (iD_H q^2) \times \\ \left\{ \frac{[\eta_-(iD_H q^2) + \eta_-(w_{LO} - iw)]}{(iw + iD_H q^2 - w_{LO})} - \text{termo } w_{LO} = -w_{LO} \right\}, \end{aligned} \quad (4.3.4)$$

e desde que iw é uma frequência de Bose, temos $\eta_-(\pm w_{LO} - iw) = \eta_-(\pm w_{LO})$, onde $\eta_-(w)$ é a função distribuição de Bose - Einstein.

Efetuando a extensão analítica, $iw \rightarrow w + i0^+$, obtemos a expressão da função de correlação retardada força - força

$$\begin{aligned} \Pi_{xx}^R(w) = C^t N(E_F) \sum_{\bar{q}} \frac{1}{q^2} q_x^2 (iD_H q^2) \times \\ \left\{ \frac{[\eta_-(iD_H q^2) + \eta_-(w_{LO})]}{(w - w_{LO} + iD_H q^2)} - \frac{[\eta_-(iD_H q^2) + \eta_-(w_{LO})]}{(w + w_{LO} + iD_H q^2)} \right\}, \end{aligned} \quad (4.3.5)$$

e daí,

$$\begin{aligned} \text{Im} \Pi_{xx}^R(w) = C^t N(E_F) \sum_{\bar{q}} \frac{1}{q^2} q_x^2 (iD_H q^2) \times \\ \left\{ \text{Im} \frac{[\eta_-(iD_H q^2) + \eta_-(w_{LO})]}{(w - w_{LO})^2 + (D_H q^2)^2} (w - w_{LO} - iD_H q^2) + \right. \\ \left. - \text{Im} \frac{[\eta_-(iD_H q^2) + \eta_-(w_{LO})]}{(w + w_{LO})^2 + (D_H q^2)^2} (w + w_{LO} - iD_H q^2) \right\}. \end{aligned} \quad (4.3.6)$$

Entretanto, desde que o pólo difusivo se verifica para $q \rightarrow 0$, podemos expandir a função de Bose

$$\eta_-(iD_H q^2) \cong (i\hbar\beta D_H q^2)^{-1}, \quad (4.3.7)$$

com isso,

$$\begin{aligned} \text{Im} \Pi_{xx}^R(w) = C^t N(E_F) D_H \sum_{\bar{q}} q_x^2 \times \\ \left\{ \frac{[\eta_-(w_{LO}) (w - w_{LO}) - (\hbar\beta)^{-1}]}{(w - w_{LO})^2 + (D_H q^2)^2} + \frac{[-\eta_-(w_{LO}) (w + w_{LO}) + (\hbar\beta)^{-1}]}{(w + w_{LO})^2 + (D_H q^2)^2} \right\}. \end{aligned} \quad (4.3.8)$$

Da equação acima, verificamos imediatamente que,

$$\begin{aligned}
\text{Im } \Pi_{xx}^R(0) &= -C'N(E_F)D_H w_{LO} \sum_{\vec{q}} q_x^2 \frac{[\eta_-(w_{LO}) + \eta_-(-w_{LO})]}{[w_{LO}^2 + (D_H q^2)^2]} = \\
\text{Im } \Pi_{xx}^R(0) &= C'N(E_F)D_H w_{LO} \sum_{\vec{q}} q_x^2 \frac{1}{[w_{LO}^2 + (D_H q^2)^2]}. \quad (4.3.9)
\end{aligned}$$

De volta à expressão da Função Memória, temos

$$M(w) = -\frac{1}{n_e m_e w} [\Pi_{xx}^R(w) - \Pi_{xx}^R(0)], \quad (4.3.10)$$

tal que, no limite estático ($w \rightarrow 0$) podemos escrever o tempo de relaxação do sistema como sendo,

$$(\Gamma'_{for.})^{-1} = M''(0) = -\frac{1}{n_e m_e} \lim_{w \rightarrow 0} \frac{1}{w} [\text{Im } \Pi_{xx}^R(w) - \text{Im } \Pi_{xx}^R(0)]. \quad (4.3.11)$$

Substituindo os resultados das eqs.(4.3.8) e (4.3.9) na equação acima obtemos

$$(\Gamma'_{for.})^{-1} = -\frac{2C'N(E_F)D_H}{n_e m_e} [1/2 + \eta_-(w_{LO})] \sum_{\vec{q}} \frac{q_x^2}{(w_{LO}^2 + (D_H q^2)^2)}. \quad (4.3.12)$$

e de acordo com a eq.(2.2.12), temos

$$(\Gamma'_{fon})^{-1} = -\frac{C'N(E_F)D_H}{2\pi n_e m_e} [1/2 + \eta_-(w_{LO})] \int_0^{q_\phi} dq \frac{q^3}{((w_{LO})^2 + (D_H q^2)^2)}, \quad (4.3.13)$$

onde introduzimos um momento de corte ("cutoff"), q_ϕ . Desta forma, obtemos finalmente, Leal et al. (82)

$$(\Gamma'_{fon})^{-1} = \frac{\hbar \alpha N(E_F)}{4n_e m_e D_H} \left(\frac{2\hbar^3 w_{LO}^3}{m_e} \right)^{1/2} \left[1/2 + \frac{1}{(e^{\hbar\beta w_{LO}} - 1)} \right] \ln \left(\frac{w_{LO}^2/D_H^2}{q_\phi^4 + w_{LO}^2/D_H^2} \right). \quad (4.3.14)$$

A equação acima descreve o tempo de relaxação do 2 DEG interagindo com fônons superficiais LO, obtido a partir de correções de vértices na função de correlação densidade - densidade, na presença de campo magnético forte. Observa-se na eq.(4.3.14) a existência de duas contribuições: a primeira devido ao efeito de espalhamento por fônons LO, cuja dependência de temperatura se dá em termos da função distribuição de Bose - Einstein e uma segunda, independente da

temperatura, que deve sua origem à presença de impurezas no material, responsáveis pelo comportamento difusivo na função de polarização do gás de elétrons (82).

Finalmente, podemos ainda utilizar as eqs.(4.3.8),(4.3.9) e (4.3.10) a fim de investigar o efeito do pólo difusivo sobre as propriedades dinâmicas, como por exemplo o espectro de absorção magneto-óptico numa interação 2 DEG - fônon LO superficiais. Cálculos nessa direção estão em progresso e esperamos que no futuro, os resultados experimentais possam refletir a validade de nosso modelo e que permitam a comparação com cálculos anteriores (68).

CAPÍTULO 5

Neste Capítulo revisitaremos de maneira breve os pontos básicos e os resultados fundamentais obtidos ao longo de todo este trabalho de tese, onde investigamos o efeito da interação elétron - fônons LA e LO em sistemas semicondutores de baixa dimensionalidade, tais como poços e fios quânticos. Utilizamos o formalismo de Função Memória, via método de operador de projeção, a fim de discutir as propriedades dinâmicas e estáticas de transporte eletrônico nesses sistemas. Avaliamos o efeito da dimensionalidade do sistema de fônons LA interagindo com o gás de elétrons de dimensionalidade efetiva reduzida, através da dependência de temperatura das propriedades de transporte, tais como a condutividade "d.c" e o tempo de relaxação do sistema, obtida via o cálculo da função de correlação força - força, devido a interação elétron - fônons na aproximação de ordem zero.

Estendemos o formalismo da Função Memória de modo a incluir efeitos da ação de um campo magnético forte aplicado sobre um gás de elétrons bidimensional interagindo com fônons LA superficiais. Desta forma, investigamos os efeitos de muitos - corpos no espectro de ressonância ciclotrônica e o comportamento da magnetocondutividade em função da temperatura e da intensidade do campo magnético, em termos dos efeitos reativos e dissipativos no gás de elétrons. Observamos o aparecimento de um "splitting" nos picos de ressonância da magnetocondutividade no espectro de absorção (emissão) de fônons LA à medida que o campo magnético diminui, em contraste com a estrutura de um único pico no limite de campo magnético forte, ou seja no limite quântico, tal que apenas o primeiro nível de Landau esteja ocupado.

Investigamos ainda, as propriedades magneto-ópticas do 2 DEG interagindo com fônons LO em termos da função de polarização do gás de elétrons na aproximação de ordem mais baixa e verificamos que nesse caso a FM apresenta divergências que são removidas a partir da introdução de correções de vértices do tipo diagramas de escada, devido a espalhamento por impurezas, na função de correlação densidade - densidade. Verificamos que essas correções de vértices são responsáveis pela origem de um pólo difusivo na função de polarização e conseqüentemente por um alargamento no espectro de absorção de fônons e por um comportamento finito para o tempo de relaxação do sistema.

Por outro lado, resultados recentes revelaram que efeitos de confinamento de fônons LO em heteroestruturas de $GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs$, Rudin e Reinecke (83), devam ser levados em conta a fim de se obter uma estimativa mais realística para o espalhamento elétron - fônon e para a taxa de espalhamento de elétrons. Desde que o confinamento de fônons nessas estruturas seja capaz de gerar mudanças nas regras de seleção de transições envolvendo sub-bandas de elétrons e mudanças na magnitude da interação elétron - fônon, acreditamos que um cálculo do ponto de vista microscópico envolvendo o confinamento dos fônons se faça necessário para uma melhor descrição dos fenômenos físicos nesses sistemas. Neste sentido, cálculos nesta direção estão agora em progresso.

Finalmente, vale apenas ressaltarmos que o formalismo de Função Memória desenvolvido neste trabalho de modo a descrever propriedades de transporte, na aproximação de ordem zero em termos da função de correlação força - força, pode ainda ser aplicado a hamiltoniana Ramirez - Falicov - Kimball, em vários níveis de aproximação, a fim de descrever o espectro de fotoemissão das energias de quase - partícula dos estados $4f$ - em intermetálicos de terras - raras (84).

APÊNDICE A.1

Teorema de Flutuação - Dissipação

Seja a flutuação de uma grandeza dinâmica $A(t)$:

$$S_{ij}(t) = \langle A_i^\dagger(t) A_j(0) \rangle_{eq} - \langle A_i^\dagger(t) \rangle_{eq} \langle A_j(0) \rangle_{eq}, \quad (A.1.1)$$

quando $t \rightarrow \infty$, $S_{ij} \rightarrow 0$, de modo que $S_{ij}(w)$ existe. Realizando a média termodinâmica usando o "ensemble" canônico,

$$\rho = e^{-\beta H} / \text{tr} [e^{-\beta H}], \quad (A.1.2)$$

$$\text{tr} [e^{-\beta H} A_i^\dagger(t) A_j(0)] = \text{tr} [A_i^\dagger(t + i\beta) e^{-\beta H} A_j(0)] = \text{tr} [e^{-\beta H} A_j(0) A_i^\dagger(t + i\beta)], \quad (A.1.3)$$

onde foi usada a propriedade cíclica do traço. Sendo,

$$\langle A_i^\dagger(t) A_j(0) \rangle = \langle A_i^\dagger(0) A_j(-t) \rangle, \quad (A.1.4)$$

logo

$$\begin{aligned} S_{ij}(-t) &= \langle A_j^\dagger(-t) A_i(0) \rangle = \langle A_j(0) A_i^\dagger(t) \rangle = \\ &= \text{tr} [e^{-\beta H} A_j(0) A_i^\dagger(t)] = \text{tr} [e^{-\beta H} A_i^\dagger(t - i\beta) A_j(0)] = \\ S_{ij}(t - i\beta) &= e^{-i\beta\theta_t} S_{ij}(t). \end{aligned} \quad (A.1.5)$$

Agora, levando esses resultados em $\chi''_{ij}(t)$, temos

$$2 \chi''_{ij}(t) = \langle [A_i^\dagger(t), A_j(0)]_- \rangle = S_{ij}(t) - S_{ij}(-t), \quad (A.1.6)$$

daí,

$$2 \chi''_{ij}(t) = (1 - e^{-i\beta\theta_t}) S_{ij}(t), \quad (A.1.7)$$

e transformando Fourier, ($\partial_t \rightarrow -iw$),

$$2 \chi''_{ij}(w) = (1 - \epsilon^{-\beta w}) S_{ij}, \quad (A.1.8)$$

Tratamos agora, da flutuação correspondente à função de correlação momento-momento, tal que

$$S_{\nu\mu}(t) = \langle \pi_\nu(t) \pi_\mu(0) \rangle_{eq} - \langle \pi_\nu(t) \rangle_{eq} \langle \pi_\mu(0) \rangle_{eq}. \quad (A.1.9)$$

Usando o teorema da flutuação - dissipação,

$$\chi''_{\nu\mu}(w) = \frac{1 - \epsilon^{-\beta w}}{2} S_{\nu\mu}(w). \quad (A.1.10)$$

Agora, estabelecemos a definição do produto escalar:

$$\langle A; B \rangle = \beta^{-1} \int_0^\beta d\lambda (\langle A^\dagger B(i\lambda) \rangle_{eq} - \langle A^\dagger \rangle_{eq} \langle B(i\lambda) \rangle_{eq}), \quad (A.1.11)$$

onde $B(i\lambda) = \epsilon^{-\lambda H} B \epsilon^{\lambda H}$.

Desta forma, a função de correlação pode ser escrita como :

$$\begin{aligned} C_{\nu\mu}(t) &= \langle \pi_\nu(t) | \pi_\mu(0) \rangle = \\ &= \beta^{-1} \int_0^\beta d\lambda (\langle \pi_\nu(t) \pi_\mu(i\lambda) \rangle_{eq} - \langle \pi_\nu(t) \rangle_{eq} \langle \pi_\mu(i\lambda) \rangle_{eq}), \end{aligned} \quad (A.1.12)$$

e daí,

$$i\partial_t C_{\nu\mu}(t) = i\beta^{-1} \int_0^\beta d\lambda (\langle \dot{\pi}_\nu(t) \pi_\mu(i\lambda) \rangle_{eq} - \langle \dot{\pi}_\nu(t) \rangle_{eq} \langle \pi_\mu(i\lambda) \rangle_{eq}), \quad (A.1.13)$$

onde

$$i\partial A(t) = [A(t), H]_-. \quad (A.1.14)$$

Além disso,

$$\langle [\pi_\nu(t), H]_- \pi_\mu(i\lambda) \rangle_{eq} = -\frac{\partial}{\partial \lambda} \langle \pi_\nu(t - i\lambda) \pi_\mu(0) \rangle_{eq}, \quad (A.1.15)$$

sendo π Hermiteano e usando a definição de $S_{\nu\mu}$,

$$i\beta C_{\nu\mu}(t) = -\frac{1}{2} [S_{\nu\mu}(t - i\beta) - S_{\nu\mu}(t)]. \quad (A.1.16)$$

Agora, fazendo a transformada de Fourier, temos

$$C_{\nu\mu}(w) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{iwt} C_{\nu\mu}(t) dt, \quad (\text{A.1.17})$$

$$\frac{\beta w}{2} C_{\nu\mu}(w) = \frac{1 - e^{-\beta w}}{2} S_{\nu\mu}(w), \quad (\text{A.1.18})$$

ou ainda,

$$\frac{\beta w}{2} C_{\nu\mu}(w) = \chi''_{\nu\mu}(w). \quad (\text{A.1.19})$$

Usando a relação entre as transformadas de Fourier e Laplace, isto é,

$$C_{\nu\mu}(z) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{C_{\nu\mu}(w)}{w - z} dw, \quad (\text{A.1.20})$$

obtemos finalmente,

$$C_{\nu\mu}(z) = (i\pi\beta)^{-1} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\chi''_{\nu\mu}(w)}{w(w - z)} dw. \quad (\text{A.1.21})$$

APÊNDICE A.2

Relação entre $C_{\nu\mu}(z)$, $\chi_{\nu\mu}(z)$ e $\chi_{\nu\mu}(0)$

A transformada de Laplace da função espectral $\chi_{\nu\mu}(t)$ é dada por

$$\chi_{\nu\mu}(z) = 2i \int_0^{\infty} e^{izt} \chi_{\nu\mu}(t) dt, \quad \text{Im } z > 0, \quad (\text{A.2.1})$$

além disso, a transformada de Fourier de $\chi''_{\nu\mu}(w)$ é definida como

$$\chi''_{\nu\mu}(w) = \int_0^{\infty} e^{iwt} \chi''_{\nu\mu}(t) dt, \quad (\text{A.2.2})$$

de modo que,

$$\chi_{\nu\mu}(z) = \frac{i}{\pi} \int_0^{\infty} dw \chi''_{\nu\mu}(w) \int_0^{\infty} e^{it(z-w)} dt. \quad (\text{A.2.3})$$

Como $\text{Im } z > 0$, a integral em t converge,

$$\int_0^{\infty} e^{it(z-w)} dt = -\frac{1}{i(z-w)}. \quad (\text{A.2.4})$$

Então,

$$\chi_{\nu\mu}(z) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{\chi''_{\nu\mu}(w)}{w-z} dw. \quad (\text{A.2.5})$$

Agora, de volta à eq.(A.1.21) e usando a seguinte identidade algébrica,

$$\frac{1}{w(w-z)} = \frac{1}{z} \left[\frac{1}{(w-z)} - \frac{1}{w} \right], \quad (\text{A.2.6})$$

obtemos,

$$C_{\nu\mu}(z) = \frac{(i\pi\beta)^{-1}}{z} \int_{-\infty}^{\infty} dw \frac{\chi''_{\nu\mu}}{(w-z)} - \frac{(i\pi\beta)^{-1}}{z} \int_{-\infty}^{\infty} dw \frac{\chi''_{\nu\mu}(w)}{w}, \quad (\text{A.2.7})$$

e a partir da definição de $\chi_{\nu\mu}(z)$, eq.(A.2.5), temos

$$C_{\nu\mu}(z) = -\frac{i\beta^{-1}}{z} \chi_{\nu\mu}(z) + \frac{i\beta^{-1}}{z} \chi_{\nu\mu}(z=0), \quad (\text{A.2.8})$$

e finalmente, podemos escrever

$$C_{\nu\mu}(z) = -\frac{i\beta^{-1}}{z} [\lambda_{\nu\mu}(z) - \lambda_{\nu\mu}(0)], \quad (\text{A.2.9})$$

onde

$$\lambda_{\nu\mu}(z=0) \equiv \chi_{\nu\mu} = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} du \frac{\lambda''_{\nu\mu}(u)}{u}. \quad (\text{A.2.10})$$

De acordo com a eq.(A.1.19), onde $C_{\nu\mu}(w) = 2\chi''_{\nu\mu}(w)/\beta w$, temos

$$C_{\nu\mu}(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \epsilon^{-iut} C_{\nu\mu}(w) dw = \frac{\beta^{-1}}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \epsilon^{-iut} du \frac{\lambda''_{\nu\mu}(u)}{u}, \quad (\text{A.2.11})$$

tal que, fazendo o limite $t \rightarrow 0$, obtemos

$$\chi_{\nu\mu} = \beta C_{\nu\mu}(0). \quad (\text{A.2.12})$$

APÊNDICE A.3

Equação da Função Memória

A equação de movimento de um observável $A(t)$, representação de Heisenberg, é dada por, ($\hbar = 1$),

$$\dot{A} = -i[A, H], \quad (A.3.1)$$

e que significa que dada a Hamiltoniana, H , existe uma relação linear entre $\dot{A}(t)$ e $A(t)$, que pode ser escrita na forma

$$\dot{A}(t) = -i [A(t), H] \equiv i \mathbf{L}A(t), \quad (A.3.2)$$

onde \mathbf{L} é o operador Liouvilleano, um operador diferencial hermiteano, A e H são operadores lineares num espaço de Hilbert e a solução formal da equação acima pode ser escrita como,

$$A(t) = e^{iHt} A e^{-iHt} = e^{i\mathbf{L}t} A, \quad A \equiv A(t=0). \quad (A.3.3)$$

Definindo um produto escalar entre dois vetores (propriedades dinâmicas) A e B e substituindo o resultado da eq.(A.3.3) na definição da função de correlação $C_{AB}(t)$, temos

$$C_{AB}(t) = \langle A(t) | B \rangle = \langle A | e^{-i\mathbf{L}t} | B \rangle. \quad (A.3.4)$$

A transformada de Laplace da auto-função de correlação, $C_{AA}(t)$, é dada por

$$C_{AA}(z) = \langle A | \frac{i}{z - \mathbf{L}} | A \rangle. \quad (A.3.5)$$

Na eq.(A.3.4) o operador $e^{-i\mathbf{L}t}$ gera um "rotação" no vetor $|A(t)\rangle$ e exceto por uma constante de normalização, a função de correlação $C(t)$ é exatamente a componente do vetor "girado" paralela ao vetor original. Isto sugere definirmos um operador hermiteano, \mathbf{P} , de projeção sobre o vetor $|A\rangle$,

$$\mathbf{P} \equiv |A\rangle \langle A| A \rangle^{-1} \langle A| = 1 - \mathbf{Q}, \quad (A.3.6)$$

que satisfaz as seguintes propriedades:

$$\mathbf{P}^2 = \mathbf{P}, \quad (A.3.7.a)$$

e

$$\mathbf{P} \mathbf{Q} = \mathbf{Q} \mathbf{P} = 0. \quad (A.3.7.b)$$

Usando a seguinte identidade algébrica,

$$\frac{1}{X+Y} = \frac{1}{X} - \frac{1}{X} Y \frac{1}{X+Y}, \quad (A.3.8)$$

e escrevendo $\mathbf{L} = \mathbf{L} \mathbf{Q} + \mathbf{L} \mathbf{P}$ na eq.(A.3.5), obtemos

$$C_{AA}(z) = \langle A | \left[\frac{i}{z - \mathbf{L} \mathbf{Q}} + \frac{1}{z - \mathbf{L} \mathbf{Q}} \mathbf{L} \mathbf{P} \frac{i}{z - \mathbf{L}} \right] | A \rangle. \quad (A.3.9)$$

Expandindo o operador $(z - \mathbf{L} \mathbf{Q})^{-1}$ no primeiro termo, teremos

$$\frac{i}{(z - \mathbf{L} \mathbf{Q})} = \frac{i}{z} \left[1 + \frac{1}{z} \mathbf{L} \mathbf{Q} + \frac{1}{z^2} \mathbf{L} \mathbf{Q} \mathbf{L} \mathbf{Q} + \dots \right]. \quad (A.3.10)$$

Com isso,

$$\langle A | \frac{i}{z - \mathbf{L} \mathbf{Q}} | A \rangle = \frac{i}{z} \langle A | A \rangle = \frac{i}{z} C_{AA}(t=0), \quad (A.3.11)$$

desde que,

$$\mathbf{P} | A \rangle = | A \rangle \quad e \quad \mathbf{Q} | A \rangle = 0. \quad (A.3.12)$$

Introduzindo o operador \mathbf{P} no segundo termo da eq.(A.3.9), tal que

$$\mathbf{P} \frac{i}{z - \mathbf{L}} | A \rangle = | A \rangle \frac{1}{\langle A | A \rangle} \langle A | \frac{i}{z - \mathbf{L}} | A \rangle = | A \rangle C_{AA}^{-1}(t=0) C_{AA}(z), \quad (A.3.13)$$

obtemos,

$$C_{AA}(z) = \frac{i}{z} C_{AA}(0) + \langle A | \frac{1}{z - \mathbf{L} \mathbf{Q} \mathbf{L}} | A \rangle C_{AA}^{-1}(0) C_{AA}(z). \quad (A.3.14)$$

Multiplicando por z e usando novamente a identidade algébrica, eq.(A.3.8),

$$\langle A | \frac{z}{z - \mathbf{L} \mathbf{Q} \mathbf{L}} | A \rangle = \langle A | \left[1 + \mathbf{L} \mathbf{Q} \frac{1}{z - \mathbf{L} \mathbf{Q}} \right] \mathbf{L} | A \rangle, \quad (A.3.15)$$

obtemos,

$$z C_{AA}(z) = i C_{AA}(0) + [\Omega - i \Sigma(z)] C_{AA}(z), \quad (A.3.16)$$

onde por definição:

$$\Omega = \langle A | L | A \rangle C_{AA}^{-1}(0), \quad (A.3.17)$$

e

$$\Sigma(z) = \langle A | L Q \frac{i}{z - L Q} L | A \rangle C_{AA}^{-1}(0), \quad (A.3.18)$$

ou ainda, $\Omega = \varpi \chi^{-1}$ e $\Sigma(z) = \Upsilon(z) \chi^{-1}$, onde

$$\varpi = i\beta \langle \dot{A} | A \rangle, \quad (A.3.19)$$

e

$$\Upsilon(z) = \beta \langle \dot{A} | Q \frac{i}{z - Q L Q} Q | \dot{A} \rangle, \quad (A.3.20)$$

e introduzindo esses resultados na eq.(A.3.16), obtemos a relação fundamental entre a função de correlação e a Função Memória. $M(z)$, como sendo

$$C_{AA}(z) = \frac{i\beta\chi_{AA}}{z - \Omega + M(z)}, \quad (A.3.21)$$

onde usamos o fato de que $C_{AA}(0) = \beta^{-1}\chi_{AA}$, (vide apêndice A.2), e $M(z)$ sendo dada por,

$$M(z) = i\Upsilon(z)\chi^{-1} = i\beta \langle \dot{A} | Q \frac{i}{z - Q L Q} Q | \dot{A} \rangle \chi^{-1}. \quad (A.3.22)$$

APÊNDICE A.4

Relação entre $\langle \dot{\pi}_\nu | \pi_\mu \rangle = \epsilon \langle [\pi_\nu, \pi_\mu]_- \rangle_{eq}$

A partir da definição de $C_{\nu\mu}(t)$, eq.(A.1.13), temos que

$$\langle \dot{\pi}_\nu | \pi_\mu \rangle = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{d}{dt} C_{\nu\mu}(t), \quad (A.4.1)$$

ou ainda,

$$\begin{aligned} \langle \dot{\pi}_\nu | \pi_\mu \rangle &= \lim_{t \rightarrow 0} \frac{d}{dt} \left[\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dw e^{-i\omega t} C_{\nu\mu}(w) \right] = \\ &= \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} w C_{\nu\mu}(w) dw. \end{aligned} \quad (A.4.2)$$

Como $C_{\nu\mu}(w) = 2 \chi''_{\nu\mu}(w) / \beta w$,

$$\langle \dot{\pi}_\nu | \pi_\mu \rangle = (i\pi\beta)^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} \chi_{\nu\mu}(w) dw = \frac{2\beta^{-1}}{i} \chi''_{\nu\mu}(t=0), \quad (A.4.3)$$

Finalmente, substituindo a definição de $\chi''_{\nu\mu}(t)$, eq.(A.1.6), na equação acima, obtemos

$$i\beta \langle \dot{\pi} | \pi_\mu \rangle = \langle [\pi_\nu, \pi_\mu]_- \rangle_{eq}. \quad (A.4.4)$$

APÊNDICE A.5

Frequências de Fermi e de Bose

Os números de ocupação térmica para bósons, $\eta_-(w_q)$, e férmions, $\eta_+(\epsilon_{\vec{k}})$, podem ser expandidos em séries, como um somatório sobre seus pólos e os resíduos nesses pólos (19)

$$\eta_-(w_q) = \frac{1}{e^{\beta w_q} - 1} = -\frac{1}{2} + \frac{1}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{1}{2ni\pi/\beta - w_q}, \quad (A.5.1)$$

$$\eta_+(\epsilon_{\vec{k}}) = \frac{1}{e^{\beta \epsilon_{\vec{k}}} + 1} = \frac{1}{2} + \frac{1}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{1}{(2n+1)i\pi/\beta - \epsilon_{\vec{k}}}. \quad (A.5.2)$$

Desta forma, o fator de ocupação de bósons, $(e^{\beta w_q} - 1)^{-1}$, apresenta pólos em $w_q = 2ni\pi/\beta$, enquanto o fator de ocupação de férmions, $(e^{\beta \epsilon_{\vec{k}}} + 1)^{-1}$, tem pólos em $\epsilon_{\vec{k}} = (2n+1)i\pi/\beta$. É conveniente definirmos as frequências nos pólos:

$$w_n = (2n+1)\pi/\beta, \quad \text{Fermi}, \quad (A.5.3)$$

e

$$w_n = 2n\pi/\beta, \quad \text{Bose}, \quad (A.5.4)$$

onde os férmions têm pólos múltiplos ímpares de π/β , enquanto os bósons têm pólos múltiplos pares, incluindo o zero. Assim sendo, ambos os somatórios acima podem ser escritos como:

$$\sum_n \frac{1}{iw_n - w_q}, \quad (A.5.5)$$

ou

$$\sum_n \frac{1}{iw_n - \epsilon_{\vec{k}}}, \quad (A.5.6)$$

onde para férmions devemos somar somente sobre os números inteiros ímpares e para os bósons sobre os inteiros pares. Além disso, as frequências complexas de Matsubara, iw_n , são sempre quantidades discretas.

Soma de Frequências de Matsubara

Considerando, de uma forma em geral, que os somatórios sobre séries de bósons e/ou férmions são escritos da seguinte maneira:

$$A = -\frac{1}{\beta} \sum_n f(iw_n), \quad (A.6.1)$$

onde $f(iw_n)$ representa algum tipo de função de Green ou um produto de funções de Green. O somatório é resolvido em termos de uma integração de contorno do tipo:

$$I = \lim_{R \rightarrow \infty} \int_C \frac{dz}{2\pi i} f(z) \eta_{\pm}(z), \quad (A.6.2)$$

onde o contorno é um grande círculo de raio R no limite em que $R \rightarrow \infty$. A função $\eta(z)$ é escolhida de modo a gerar pólos múltiplos pares de $i\pi/\beta$, $\eta_+(z)$, no caso de férmions ou pólos múltiplos ímpares de $i\pi/\beta$, $\eta_-(z)$, no caso de séries de bósons, sendo que nesses pólos os resíduos valem $\mp \frac{1}{\beta}$. Além disso, devemos encontrar os pólos de $f(z)$ e nesses pólos z_j encontrar os respectivos resíduos r_j de $f(z)$.

Desta forma, a solução da integral se faz a partir da soma de todos os resíduos e desde que se tenha apenas pólos simples, no limite em que $R \rightarrow \infty$, a integral desaparece, $I = 0$, tal que,

$$A = \sum_j R_j$$

$$R_j = r_j \eta_{\pm}(z_j). \quad (A.6.3)$$

Seja agora, o caso particular, de um somatório de frequências de Matsubara devido à interação elétron-fônon, descrito em termos da combinação das funções de Green não perturbadas, G^o e D^o , correspondendo a elétrons e fônons, respectivamente,

$$A(\vec{k}, \vec{q}, iw) = \frac{1}{\beta} \sum_{ip_n} \left[\frac{1}{\beta} \sum_{ik_n} D^o(\vec{q}, iw - ip_n) G^o(\vec{k} + \vec{q}, ik_n - ip_n) G^o(\vec{k}, ik_n) \right], \quad (A.6.4)$$

onde as frequências complexas ik_n e ip_n são respectivamente frequências de Fermi e de Bose.

Fazemos inicialmente o somatório em ik_n , para as séries de férmions, tal que

$$\chi(\vec{k}, \vec{q}, ip_n) = \frac{1}{\beta} \sum_{ik_n} G^\circ(\vec{k} + \vec{q}, ik_n - ip_n) G^\circ(\vec{k}, ik_n). \quad (A.6.5)$$

O somatório é então, resolvido por uma integração de contorno da forma,

$$I = \lim_{R \rightarrow \infty} \int_C \frac{dz}{2\pi i} f(z) \eta_+(z), \quad (A.6.6)$$

A função de Fermi, $\eta_+(z) = (\epsilon^{\beta z} + 1)^{-1}$ apresenta pólos nos pontos ik_n , que são múltiplos ímpares de $i\pi/\beta$ e cujos resíduos valem $-\frac{1}{\beta}$ nesses pontos. Além disso, neste caso, $f(z)$ é dada por,

$$f(z) = G^\circ(\vec{k}, z) G^\circ(\vec{k} + \vec{q}, z - ip_n), \quad (A.6.7)$$

onde

$$G^\circ(\vec{k}, z) = \frac{1}{z - \epsilon_{\vec{k}}}, \quad (A.6.8)$$

e

$$G^\circ(\vec{k} + \vec{q}, z - ip_n) = \frac{1}{(z - ip_n - \epsilon_{\vec{k} + \vec{q}})}. \quad (A.6.9)$$

Efetuada a substituição dos resíduos em seus respectivos pólos e tomando o limite em que $I \rightarrow 0$, obtemos de acordo com as eq.(A.6.3),

$$I = 2\pi i \sum_{\text{resíduos}} = 0, \quad (A.6.10)$$

e finalmente, obtemos

$$\chi(\vec{k}, \vec{q}, ip_n) = \frac{\eta_+(\epsilon_{\vec{k}}) - \eta_+(\epsilon_{\vec{k} + \vec{q}})}{-ip_n + \epsilon_{\vec{k}} - \epsilon_{\vec{k} + \vec{q}}}, \quad (A.6.11)$$

que representa a função de Polarização do gás de elétrons, na ausência de campo magnético, na aproximação de ordem zero, ou seja calculada em termos das funções de Green não perturbadas.

Agora, substituindo esse resultado na eq.(A.6.4), tal que o somatório seja efetuado sobre uma frequência de Bose, ip_n , e levando em conta a definição do propagador de fônons não-perturbado (19),

$$A(\vec{k}, \vec{q}, iw - w_q) = \frac{1}{\beta} \sum_{ip_n} \left\{ \frac{1}{iw + ip_n - w_q} \frac{\eta_+(\epsilon_{\vec{k}}) - \eta_+(\epsilon_{\vec{k} + \vec{q}})}{ip_n + \epsilon_{\vec{k}} - \epsilon_{\vec{k} + \vec{q}}} + \right.$$

$$- \frac{1}{iw + ip_n + w_q} \frac{\eta_+(\epsilon_{\bar{k}}) - \eta_+(\epsilon_{\bar{k}+\bar{q}})}{ip_n + \epsilon_{\bar{k}} - \epsilon_{\bar{k}+\bar{q}}} \}. \quad (A.6.12)$$

Resolvemos o primeiro termo da equação acima da seguinte forma:

$$I_1 = \frac{1}{2\pi i} \int_C \eta_-(z) \frac{1}{iw + z - w_q} \frac{\eta_+(\epsilon_{\bar{k}}) - \eta_+(\epsilon_{\bar{k}+\bar{q}})}{z + \epsilon_{\bar{k}} - \epsilon_{\bar{k}+\bar{q}}} dz. \quad (A.6.13)$$

Calculando os resíduos nos pólos de I_1 , obtemos

$$I_1 = \frac{[\eta_-(w_q) - \eta_-(\epsilon_{\bar{k}+\bar{q}} - \epsilon_{\bar{k}})] [\eta_+(\epsilon_{\bar{k}}) - \eta_+(\epsilon_{\bar{k}+\bar{q}})]}{iw + \epsilon_{\bar{k}+\bar{q}} - \epsilon_{\bar{k}} - w_q}, \quad (A.6.14)$$

De maneira análoga ao cálculo de I_1 , encontramos após algumas passagens algébricas que o segundo termo da eq.(A.6.12), I_2 , por ser escrito como

$$I_2 = -I_1, \text{ com } (w_q \rightarrow -w_q), \quad (A.6.15)$$

e assim, obtemos finalmente

$$A(\bar{k}, \bar{q}, iw - w_q) = \left\{ \frac{[\eta_-(w_q) - \eta_-(\epsilon_{\bar{k}+\bar{q}} - \epsilon_{\bar{k}})] [\eta_+(\epsilon_{\bar{k}}) - \eta_+(\epsilon_{\bar{k}+\bar{q}})]}{\epsilon_{\bar{k}+\bar{q}} - \epsilon_{\bar{k}} + iw - w_q} - \text{termo}(w_q \rightarrow -w_q) \right\}. \quad (A.6.16)$$

APÊNDICE A.7

Aproximação de Lindhard (RPA)

Um método para se obter a função constante dielétrica, $\epsilon(\vec{q}, w)$, na aproximação de Lindhard ou RPA, é descrito a partir de uma análise diagramática, usando o formalismo de função de Green. A definição da constante dielétrica, no formalismo de temperatura finita, é dada na representação das interações, $H = H_0 + V$, como sendo

$$\frac{1}{\epsilon(\vec{q}, iw)} = 1 - v_q \int_0^\beta d\tau e^{iw\tau} \frac{\langle T_\tau \tilde{S}(\beta) \rho(\vec{q}, \tau) \rho(-\vec{q}, 0) \rangle}{\langle \tilde{S}(\beta) \rangle}, \quad (\text{A.7.1})$$

onde o operador densidade de elétrons tem a sua dependência temporal determinada pela parte da Hamiltoniana não-perturbada, H_0 , enquanto a matriz \tilde{S} é definida por

$$\tilde{S}(\tau_1, \tau_2) = T_\tau \exp\left[-\int_{\tau_1}^{\tau_2} d\tau V(\tau)\right], \quad (\text{A.7.2})$$

onde $V(\tau)$ representa as interações.

A matriz \tilde{S} , definida de acordo com a eq.(A.7.2), pode ser expandida termo a termo, sendo que o somatório de alguns desses termos, em particular, dá origem à constante dielétrica na aproximação RPA, $\epsilon_{RPA}(\vec{q}, w)$. Calculando o primeiro termo na expansão da matriz \tilde{S} encontramos

$$\begin{aligned} \chi^0(\vec{q}, iw) &= -\int_0^\beta d\tau e^{iw\tau} \langle T_\tau \rho(\vec{q}, \tau) \rho(-\vec{q}, 0) \rangle, \quad (\text{A.7.3}) \\ &= -\sum_{\vec{k}, \vec{p}} \int_0^\beta d\tau e^{iw\tau} \langle T_\tau c_{\vec{p}+\vec{q}}^\dagger(\tau) c_{\vec{p}}(\tau) c_{\vec{k}-\vec{q}}^\dagger(0) c_{\vec{k}}(0) \rangle, \\ &= \sum_{\vec{k}} \int_0^\beta d\tau e^{iw\tau} G^0(\vec{k}, \tau) G^0(\vec{k} + \vec{q}, -\tau) \end{aligned}$$

$$\chi^0(\vec{q}, iw) = \sum_{\vec{k}} \frac{[\eta_+(\epsilon_{\vec{k}}) - \eta_+(\epsilon_{\vec{k}+\vec{q}})]}{\epsilon_{\vec{k}} - \epsilon_{\vec{k}+\vec{q}} - iw}, \quad (A.7.3)$$

cujo resultado é o mesmo já obtido no Apêndice (A.6), e que pode ser representado diagramaticamente através de um simples diagrama de bolha, Fig.(2.1.a).

O próximo termo na expansão da matriz \hat{S} é dado pela seguinte expressão

$$\sum_{\vec{k}, \vec{p}, \vec{q}} \int_0^\beta d\tau e^{iw\tau} \int_0^\beta d\tau_1 < T_\tau \rho(\vec{q}, \tau) V(\tau_1) \rho(-\vec{q}, 0) >, \quad (A.7.4)$$

sendo neste caso a interação elétron-elétron, V , dada por

$$V = \sum_{\vec{k}, \vec{p}, \vec{q}} v_{q'} c_{\vec{k}+\vec{q}}^\dagger c_{\vec{p}-\vec{q}}^\dagger c_{\vec{k}} c_{\vec{p}}. \quad (A.7.5)$$

Aplicando o teorema de Wick na expressão acima, encontramos quatro contribuições para a função de correlação, cada uma delas com quatro funções de Green de um elétron e uma interação de Coulomb, $v_{q'}$, correspondendo a correções de vértices. Calculando os demais termos da expansão verificamos que a função de correlação densidade-densidade pode ser escrita exatamente na forma de uma equação de Dyson

$$- \int_0^\beta d\tau e^{iw\tau} < T_\tau \rho(\vec{q}, \tau) \rho(-\vec{q}, 0) > = \frac{\chi(\vec{q}, iw)}{1 - v_q \chi(\vec{q}, iw)}, \quad (A.7.6)$$

sendo que o operador densidade tem agora a sua dependência temporal governada por H e não somente por H_0 como no caso de χ^0 , eq.(A.7.3). O diagrama de polarização, $\chi(\vec{q}, w)$, é o somatório de todos os termos "diferentes" de polarização, onde diagramas não "diferentes" são aqueles em que algumas de suas partes são ligadas por uma única linha de interação Coulombiana.

A aproximação RPA consiste na substituição do diagrama de polarização calculado exatamente, $\chi(\vec{q}, w)$, pelo diagrama representado pelo primeiro termo, $\chi^0(\vec{q}, iw)$, tal que

$$\frac{1}{\epsilon_{RPA}} = 1 + \frac{v_q \chi^0}{1 - v_q \chi^0} = \frac{1}{1 - v_q \chi^0}. \quad (A.7.7)$$

A função dielétrica retardada, $\epsilon_{RPA}(\vec{q}, w)$, é uma grandeza complexa, sendo obtida a partir da eq.(A.7.7) fazendo-se a continuação analítica, $iw \rightarrow w + i\delta$, tal que

$$\varepsilon_{RPA}(\vec{q}, w) = \varepsilon_1(\vec{q}, w) + i \varepsilon_2(\vec{q}, w). \quad (A.7.8)$$

onde $\varepsilon_1(\vec{q}, w), \varepsilon_2(\vec{q}, w)$, são respectivamente, a parte real e a parte imaginária da função dielétrica.

Finalmente, podemos expressar a parte imaginária da função constante dielétrica diretamente em termos da função de polarização, na aproximação RPA, como sendo

$$\begin{aligned} \varepsilon_2(\vec{q}, w) &= -v_q \text{Im} [\chi^0(\vec{q}, w)] \\ \varepsilon_2(\vec{q}, w) &= 2\pi v_q \sum_{\vec{k}} [\eta_+(\epsilon_{\vec{k}}) - \eta_+(\epsilon_{\vec{k}+\vec{q}})] \delta(\epsilon_{\vec{k}} - \epsilon_{\vec{k}+\vec{q}} + w). \end{aligned} \quad (A.7.9)$$

APÊNDICE A.8

Cálculo da Constante Dielétrica em 2DEG

Iniciamos o cálculo da parte imaginária da constante dielétrica, $\epsilon_2(\vec{q}, w)$, em sistemas de elétrons bidimensionais (2 DEG), a partir da eq.(A.7.9)

$$\epsilon_2(\vec{q}, w) = 2\pi v_q \sum_{\vec{k}} [\eta_+(\epsilon_{\vec{k}}) - \eta_+(\epsilon_{\vec{k}+\vec{q}})] \delta(\epsilon_{\vec{k}} - \epsilon_{\vec{k}+\vec{q}} + w), \quad (A.8.1)$$

sendo \vec{k} um vetor bidimensional. Efetuando uma mudança de variável, $\vec{k} + \vec{q} \rightarrow \vec{k}$ no termo $\eta_+(\epsilon_{\vec{k}+\vec{q}})$, temos que

$$\epsilon_2(\vec{q}, w) = 2\pi v_q \sum_{\vec{k}} \eta_+(\epsilon_{\vec{k}}) [\delta(\epsilon_{\vec{k}+\vec{q}} - \epsilon_{\vec{k}} - w) - \text{termo}(w \rightarrow -w)]. \quad (A.8.2)$$

Assumindo um gás de elétrons bidimensional podemos transformar o somatório em \vec{k} na seguinte integral dupla

$$\sum_{\vec{k}}^{2D} \rightarrow \frac{1}{(2\pi)^2} \int d^2k = \frac{1}{(2\pi)^2} \int d\theta dk k, \quad (A.8.3)$$

onde

$$\epsilon_{\vec{k}+\vec{q}} - \epsilon_{\vec{k}} = \epsilon_q + \frac{kq \cos\theta}{m_e}, \quad (A.8.4)$$

e

$$\epsilon_q = \frac{q^2}{2m_e}, \quad (A.8.5)$$

Dessa forma, efetuando uma mudança de variáveis podemos escrever a seguinte equação integral

$$\epsilon_2(\vec{q}, w) = \frac{m_e v_q}{2\pi} \int d\epsilon \int d\theta \eta_+(\epsilon) [\delta(\epsilon_q + q\sqrt{\frac{2\epsilon}{m_e}} \cos\theta - w) - \text{termo}(w \rightarrow -w)]. \quad (A.8.6)$$

Efetuamos inicialmente a integração angular, eliminando desta forma a função δ , tal que

$$\int_0^{2\pi} d\theta \delta(a\cos\theta + b) = \Theta(|a| - |b|) \frac{2}{\sqrt{a^2 + b^2}}, \quad (A.8.7)$$

onde

$$a = q \sqrt{\frac{2\epsilon}{m_\epsilon}}, \quad (A.8.8a)$$

e

$$b = \epsilon_q \mp w, \quad (A.8.8b)$$

satisfazem a condição $|a| \geq |b|$ que fixa, para o primeiro termo, o limite inferior de integração em ϵ como sendo

$$\epsilon \geq \frac{(\epsilon_q - w)^2}{4\epsilon_q} \equiv \epsilon_1, \quad (A.8.9)$$

e para o termo $w \rightarrow -w$

$$\epsilon \geq \frac{(\epsilon_q + w)^2}{4\epsilon_q} \equiv \epsilon_2. \quad (A.8.10)$$

Então

$$\epsilon_2(\vec{q}, w) = \frac{m_\epsilon v_q}{2\pi \epsilon_q^{1/2}} \left\{ \int_{\epsilon_1}^{\infty} d\epsilon \eta_+(\epsilon) [\epsilon - \epsilon_1]^{-1/2} - \int_{\epsilon_2}^{\infty} d\epsilon \eta_+(\epsilon) [\epsilon - \epsilon_2]^{-1/2} \right\}. \quad (A.8.11)$$

Resolvemos inicialmente a primeira integral no limite de baixas temperaturas, i.e., $k_B T \ll \mu = E_F$, de acordo com a ref.(26). Nesse sentido, definimos a seguinte função

$$\psi(\epsilon) = \int_{\epsilon_1}^{\epsilon} \phi(\epsilon') d\epsilon' ; \quad \phi(\epsilon) = (\epsilon - \epsilon_1)^{-1/2}, \quad (A.8.12)$$

e integrando por partes, temos

$$\int_{\epsilon_1}^{\infty} \eta_+(\epsilon) \phi(\epsilon) d\epsilon = - \int_{\epsilon_1}^{\infty} \eta_+'(\epsilon) \psi(\epsilon) d\epsilon, \quad (A.8.13)$$

onde $\eta_+'(\epsilon) = \partial\eta_+/\partial\epsilon$ e cujas condições de contorno são: $\eta_+(\infty) = \psi(\epsilon_1) = 0$.

Efetuamos uma mudança de variável, $(\epsilon - \epsilon_1) \rightarrow \epsilon$, tal que a solução da eq.(A.8.11) se dá da seguinte forma

$$\frac{\varepsilon_2(\bar{q}, u)}{v_q} = \frac{\eta_{\epsilon}}{2\pi\epsilon_q^{1/2}} \left\{ \int_0^{\infty} d\epsilon \eta_+(\epsilon + \epsilon_1) \epsilon^{-1/2} - \int_0^{\infty} d\epsilon \eta_+(\epsilon + \epsilon_1) \epsilon^{-1/2} \right\}, \quad (A.8.14)$$

além disso, redefinimos

$$\eta_+(\epsilon + \epsilon_1) = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon - \mu)} + 1} = \eta_+(\epsilon) ; \text{ onde } \mu = \mu - \epsilon_1, \quad (A.8.15)$$

Em virtude do comportamento de $\eta_+(\epsilon)$, temos que a contribuição para a integral na eq.(A.8.14) se dá numa estreita região de temperatura $k_B T$, em torno de $\epsilon = \mu$. Desse podemos expandir a função $\psi(\epsilon)$ em uma série de potências nessa região,

$$\psi(\epsilon) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m!} \left[\frac{\partial^m \psi}{\partial \epsilon^m} \right]_{\mu} (\epsilon - \mu)^m, \quad (A.8.16)$$

e assim,

$$\int_0^{\infty} \eta_+(\epsilon) \phi(\epsilon) d\epsilon = - \int_0^{\infty} \eta_+(\epsilon) \psi(\epsilon) d\epsilon = - \sum_m \frac{1}{m!} \left[\frac{\partial^m \psi}{\partial \epsilon^m} \right]_{\mu} \int_0^{\infty} \eta_+(\epsilon) (\epsilon - \mu)^m d\epsilon, \quad (A.8.17)$$

onde

$$\int_0^{\infty} \eta_+(\epsilon) (\epsilon - \mu)^m d\epsilon = - \int_0^{\infty} \beta \frac{e^{\beta(\epsilon - \mu)}}{(e^{\beta(\epsilon - \mu)} + 1)^2} (\epsilon - \mu)^m d\epsilon. \quad (A.8.18)$$

Efetuada uma nova mudança de variável: $\beta(\epsilon - \mu) \rightarrow x$,

$$\int_0^{\infty} \eta_+(\epsilon) \phi(\epsilon) d\epsilon = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m!} \left[\frac{\partial^m \psi}{\partial \epsilon^m} \right]_{\mu} \beta^{-m} \int_{-\beta\mu}^{\infty} x^m \frac{e^x}{(e^x + 1)^2} dx. \quad (A.8.19)$$

Desde que o integrando tenha um valor máximo em $\epsilon = \mu$, isto é, $x = 0$, e desde que $\beta\mu \gg 1$, o limite inferior da integral do lado direito da eq.(A.8.19) pode ser substituído por $-\infty$ com um erro desprezível. Assim sendo, podemos escrever

$$\int_0^{\infty} \eta_+(\epsilon) (\epsilon - \mu)^m d\epsilon = -\beta^{-m} I_m, \quad (A.8.20)$$

onde definimos

$$I_m = \int_{-\infty}^{\infty} x^m \frac{e^x}{(e^x + 1)^2} dx. \quad (A.8.21)$$

Nota-se que I_m é uma função par de x e que no caso de se ter m ímpar, a integral, na eq.(A.8.20), desaparece,

$$I_m = 0 \text{ para } m \text{ ímpar,} \quad (\text{A.8.22})$$

além disso, temos imediatamente que

$$I_0 = 1, \quad I_2 = \frac{\pi^2}{3}, \quad \dots, \quad (\text{A.8.23})$$

Desse modo, fazendo uma aproximação, podemos escrever

$$\begin{aligned} \int_0^\infty \eta_+(\epsilon) \phi(\epsilon) d\epsilon &= \sum_{m=0}^\infty I_m \frac{\beta^{-m}}{m!} \left[\frac{\partial^m \psi}{\partial \epsilon^m} \right]_\mu = \\ &\cong \psi(\mu) + I_2 \frac{\beta^{-2}}{2} \left[\frac{\partial^2 \psi}{\partial \epsilon^2} \right]_\mu + \dots \end{aligned} \quad (\text{A.8.24})$$

Tal que, de acordo com a equação acima e substituindo o valor de $\psi(\epsilon)$, eq.(A.8.12), obtemos a seguinte solução para o primeiro termo da eq.(A.8.11)

$$\int_{\epsilon_1}^\infty \eta_+(\epsilon) (\epsilon - \epsilon_1)^{-1/2} d\epsilon \cong 2(E_F - \epsilon_1)^{-1/2} - \frac{\pi^2}{12} \beta^{-2} (E_F - \epsilon_1)^{-3/2} + O(T^4) \dots, \quad (\text{A.8.25})$$

Efetando um cálculo análogo para o segundo termo da eq.(A.8.11) encontramos finalmente, que a parte imaginária da função constante dielétrica para um gás de elétrons bidimensionais, 2 DEG, na distribuição de Fermi-Dirac, pode ser escrita da seguinte forma

$$\begin{aligned} \varepsilon_2(\vec{q}, \omega) &\cong \frac{m_e v_q}{2\pi \epsilon_q^{1/2}} \left\{ \left[2(E_F - \epsilon_1)^{1/2} - \frac{\pi^2}{12} \beta^{-2} (E_F - \epsilon_1)^{-3/2} \right] \Theta(E_F - \epsilon_1) \right. \\ &\left. - \left[2(E_F - \epsilon_2)^{1/2} - \frac{\pi^2}{12} \beta^{-2} (E_F - \epsilon_2)^{-3/2} \right] \Theta(E_F - \epsilon_2) \right\} + O(T^4), \end{aligned} \quad (\text{A.8.26})$$

APÊNDICE A.9

Cálculo da Constante Dielétrica em 1 DEG

Efetuamos o cálculo da parte imaginária da constante dielétrica, $\varepsilon_2(\vec{q}, w)$ para um gás de elétrons unidimensional, interagindo com fônons com energia $\hbar w_q$, no limite estático, i.e., $w \rightarrow 0$, a partir da definição

$$\frac{\varepsilon_2(\vec{q}, w_q)}{v_q} = 2\pi \sum_{\vec{k}} \delta(\epsilon_{\vec{k}} - \epsilon_{\vec{k}+\vec{q}} + \hbar w_q) [\eta_+(\epsilon_{\vec{k}}) - \eta_+(\epsilon_{\vec{k}+\vec{q}})], \quad (A.9.1)$$

ou ainda,

$$\frac{\varepsilon_2(\vec{q}, w_q)}{v_q} = 2\pi \sum_{\vec{k}} \eta_+(\epsilon_{\vec{k}}) [\delta(\epsilon_{\vec{k}} - \epsilon_{\vec{k}+\vec{q}} + \hbar w_q) - \delta(\epsilon_{\vec{k}} - \epsilon_{\vec{k}+\vec{q}} - \hbar w_q)], \quad (A.9.2)$$

onde definimos,

$$\epsilon_k = \epsilon_{\vec{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} \quad \epsilon_q = \epsilon_{\vec{q}} = \frac{\hbar^2 q^2}{2m_e}, \quad (A.9.3)$$

e

$$\epsilon_{\vec{k}+\vec{q}} = \frac{\hbar^2 (\vec{k} + \vec{q})^2}{2m_e} = \epsilon_k + \epsilon_q + \frac{\hbar^2 \vec{k} \cdot \vec{q}}{m_e} = \epsilon_k + \epsilon_q \pm 2\sqrt{\epsilon_k \epsilon_q}, \quad (A.9.4)$$

além disso, efetuando uma mudança de variáveis, $k \rightarrow \epsilon_k$, temos

$$\sum_{\vec{k}}^{1D} \rightarrow \frac{1}{2\pi} \int dk = \frac{1}{2\pi\hbar} \left(\frac{m_e}{2}\right)^{1/2} \int d\epsilon_k \epsilon_k^{-1/2}, \quad (A.9.5)$$

daí após nova mudança de variáveis, $\epsilon_k^{1/2} \rightarrow \epsilon$, e fazendo as substituições, obtemos

$$\begin{aligned} \frac{\varepsilon_2(\vec{q}, w_q)}{v_q} = & \frac{2}{\hbar} \sqrt{\frac{m_e}{2}} \int d\epsilon \eta_+(\epsilon^2) \{ [\delta(\epsilon_q + 2\epsilon_q^{1/2}\epsilon - \hbar w_q) + \delta(\epsilon_q - 2\epsilon_q^{1/2}\epsilon - \hbar w_q)] + \\ & - [\delta(\epsilon_q + 2\epsilon^{1/2}\epsilon + \hbar w_q) + \delta(\epsilon_q - 2\epsilon_q\epsilon + \hbar w_q)] \}, \end{aligned} \quad (A.9.6)$$

Desse modo, efetuando cada uma das 4 integrais da seguinte maneira:

$$I_1 = \int_0^{\infty} d\epsilon \eta_+(\epsilon^2) \delta(\epsilon_q + 2\epsilon_q^{1/2}\epsilon - \hbar w_q) = \frac{1}{2\epsilon_q^{1/2}} \eta_+ \left[\frac{(\epsilon_q - \hbar w_q)^2}{4\epsilon_q} \right], \quad (A.9.7a)$$

$$I_2 = \int_{-\infty}^0 d\epsilon \eta_+(\epsilon^2) \delta(\epsilon_q - 2\epsilon_q^{1/2}\epsilon - \hbar w_q) = \frac{1}{2\epsilon_q^{1/2}} \eta_+ \left[\frac{(\epsilon_q - \hbar w_q)^2}{4\epsilon_q} \right]. \quad (A.9.7b)$$

$$I_3 = - \int_0^{\infty} d\epsilon \eta_+(\epsilon^2) \delta(\epsilon_q - 2\epsilon_q^{1/2}\epsilon + \hbar w_q) = - \frac{1}{2\epsilon_q^{1/2}} \eta_+ \left[\frac{(\epsilon_q + \hbar w_q)^2}{4\epsilon_q} \right], \quad (A.9.7c)$$

$$I_4 = - \int_{-\infty}^0 d\epsilon \eta_+(\epsilon^2) \delta(\epsilon_q + 2\epsilon_q^{1/2}\epsilon + \hbar w_q) = - \frac{1}{2\epsilon_q^{1/2}} \eta_+ \left[\frac{(\epsilon_q + \hbar w_q)^2}{4\epsilon_q} \right], \quad (A.9.7d)$$

Finalmente, encontramos a seguinte expressão analítica para a parte imaginária da constante dielétrica estática, para um gás de elétrons 1D interagindo com fônons

$$\frac{\varepsilon_2(\vec{q}, w_q)}{v_q} = \frac{(2m_e)^{1/2}}{\hbar\epsilon_q^{1/2}} [\eta_+(\epsilon_-) - \eta_+(\epsilon_+)], \quad (A.9.8)$$

onde por definição, temos

$$\epsilon_{\pm} = \frac{(\epsilon_q \pm \hbar w_q)^2}{4\epsilon_q}. \quad (A.9.9)$$

Cálculo de $I(\beta)$

Definimos uma integral $I(\beta)$ da seguinte forma

$$I(\beta) = \int_a^b d\epsilon g(\epsilon) \eta_+(\epsilon), \quad (\text{A.10.1})$$

onde $\eta_+(\epsilon)$ é a função distribuição de Fermi-Dirac. Além disso, podemos ainda escrever, na aproximação de Sommerfeld

$$\int_a^b d\epsilon g(\epsilon) \eta_+(\epsilon) = \int_a^\infty d\epsilon g(\epsilon) \eta_+(\epsilon) - \int_b^\infty d\epsilon g(\epsilon) \eta_+(\epsilon), \quad (\text{A.10.2})$$

onde

$$\int_a^\infty d\epsilon g(\epsilon) \eta_+(\epsilon) \cong \eta_+(\epsilon) G(a; \epsilon)|_a^\infty - \int_a^\infty d\epsilon G(a; \epsilon) \eta'_+(\epsilon), \quad (\text{A.10.3})$$

sendo que

$$\eta'_+(\epsilon) = \partial \eta_+(\epsilon) / \partial \epsilon = -\delta(\epsilon - E_F), \quad (\text{A.10.4})$$

representa a derivada da função de Fermi. Além disso, sendo o primeiro termo do lado da eq.(A.10.3) nulo, obtemos que

$$\int_a^\infty d\epsilon G(a; \epsilon) \delta(\epsilon - E_F) = G(a; \epsilon) \Theta(E_F - a), \quad (\text{A.10.5})$$

onde

$$G(a; \epsilon) = \int_a^\epsilon d\epsilon' g(\epsilon'). \quad (\text{A.10.6})$$

Neste sentido, de uma forma em geral, podemos escrever

$$\begin{aligned} G(a; \epsilon) &= \int_a^\epsilon d\epsilon' g(\epsilon') = \int_0^\epsilon d\epsilon' g(\epsilon') - \int_0^a d\epsilon' g(\epsilon') = \\ &G(a; \epsilon) = G(\epsilon) - G(a), \end{aligned} \quad (\text{A.10.7})$$

onde obtemos finalmente,

$$I(\beta) = [G(E_F) - G(a)] \Theta(E_F - a) - [G(E_F) - G(b)] \Theta(E_F - b). \quad (\text{A.10.8})$$

APÊNDICE A.11

2 DEG num campo magnético

Consideremos um gás de elétrons bidimensional (2 DEG), cujo movimento está confinado ao plano $x-y$, sob a ação de um campo magnético uniforme B_z aplicado na direção perpendicular ao plano de movimento dos elétrons. A hamiltoniana que descreve o gás de elétrons não-interagentes na presença de um campo magnético é dada por

$$H = \sum_i \frac{1}{2m_i} (\vec{p}_i + e \vec{A}(\vec{r}_i))^2, \quad (\text{A.11.1})$$

onde \vec{p}_i (\vec{r}_i) representa o momento (posição) do i -ésimo elétron no plano $x-y$, $\vec{A}(\vec{r}_i)$ é o potencial vetor associado ao campo magnético \vec{B} .

A equação de Schrödinger para um único elétron num campo magnético é dada por

$$\frac{1}{2m} (-i\vec{\nabla} + e \vec{A}(\vec{r}))^2 \psi = \epsilon \psi(\vec{r}), \quad (\text{A.11.2})$$

cujos auto-estados estão associados com a escolha dos possíveis "gauge". Escolhemos para os nossos cálculos, o "gauge" de Landau, tal que

$$\begin{aligned} \vec{B} &= \vec{\nabla} \times \vec{A} = (0, 0, B_z) \\ \vec{\nabla} \cdot \vec{A} &= 0 \\ \vec{A}(\vec{r}) &= (0, B_z x, 0), \end{aligned} \quad (\text{A.11.3})$$

Substituindo a eq.(A.11.3) na eq.(A.11.2) obtemos

$$\left[-\frac{1}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\partial^2}{\partial y^2} - \frac{ieB_z}{m} \frac{\partial}{\partial y} + \frac{e^2 B_z^2 x^2}{2m} \right] \psi(x, y) = \epsilon \psi(x, y), \quad (\text{A.11.4})$$

Fazendo uma separação de variáveis, podemos escrever

$$\psi(x, y) = e^{ik_y y} \phi(x), \quad (\text{A.11.5})$$

tal que,

$$-\frac{1}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{m \omega_c^2}{2} (x + k_y l_0^2) \psi(x) = \epsilon \psi(x), \quad (A.11.6)$$

No análogo clássico, o movimento se verifica no plano $x - y$ em torno de um círculo de centro fixo em $x_0 = -k_y l_0^2$ com uma frequência ciclotrônica ω_c , sendo l_0 o raio magnético, dado por

$$l_0^2 = \left(\frac{\hbar}{m\omega_c}\right)^{1/2}, \quad (A.11.7)$$

Da equação anterior podemos escrever os auto - estados que satisfazem a eq.(A.11.2). como sendo

$$\psi_{nk_y}(x, y) = e^{ik_y y} \phi_n(x + k_y l_0^2), \quad (A.11.8)$$

onde $\phi_n(x + k_y l_0^2)$ é a n -ésima auto-função de um oscilador harmônico de frequência ω_c e cujos auto - valores são dados por

$$\epsilon_n = (n + 1/2) \hbar \omega_c, \quad (A.11.9)$$

onde ϵ_n representa a energia dos n -ésimo nível de Landau. Além disso, verificamos que a estrutura da densidade de estados do 2 DEG sob à ação de um campo magnético é descrita por uma série de funções δ espaçadas de $\hbar \omega_c$

$$N(\epsilon) = \sum_{n, k_y} \delta(\epsilon - \epsilon_n) = \mathbf{p} \sum_n \delta(\epsilon - (n + 1/2)\hbar \omega_c), \quad (A.11.10)$$

onde $\mathbf{p} = 1/2\pi l_0^2$ é a degenerescência de cada nível de Landau.

APÊNDICE A.12

Cálculo de $|J_{nn'}(q)|^2$

Partimos da seguinte definição

$$J_{nn'}(q) = \langle n, k_y | e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} | n', p_y \rangle \equiv \int d^2\vec{r} \psi_{n, k_y}^*(\vec{r}) e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} \psi_{n', p_y}(\vec{r}), \quad (\text{A.12.1})$$

sendo

$$\vec{r} = x\hat{i} + y\hat{j}, \quad (\text{A.12.2})$$

e

$$\psi_{n, k_y}(\vec{r}) = e^{ik_y y} \phi_n(x + k_y l_0^2). \quad (\text{A.12.3})$$

Integrando a eq.(A.12.1) na variável y , obtemos

$$\langle n, k_y | e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} | n', p_y \rangle \equiv \delta(q_y - k_y + p_y) \int dx \phi_n^*(x + k_y l_0^2) e^{iq_x x} \phi_{n'}(x + (k_y - q_y)l_0^2), \quad (\text{A.12.4})$$

e efetuando um deslocamento na variável $(x + k_y l_0^2) \rightarrow x$, podemos escrever

$$J_{nn'}(q) = \delta(q_y - k_y + p_y) e^{-iq_x k_y l_0^2} \int dx \phi_n^*(x) e^{iq_x x} \phi_{n'}(x - q_y l_0^2), \quad (\text{A.12.5})$$

Introduzimos a seguir os operadores de abaixamento \hat{a} e de levantamento \hat{a}^\dagger de energia do oscilador harmônico, com

$$\hat{x} = \frac{l_0}{\sqrt{2}} (\hat{a}^\dagger + \hat{a}) \quad ; \quad \hat{p} = \frac{i\hbar}{l_0\sqrt{2}} (\hat{a}^\dagger - \hat{a}), \quad (\text{A.12.6})$$

onde \hat{x} e \hat{p} são operadores hermiteanos.

Desta forma podemos escrever,

$$J_{nn'}(q) = \delta(q_y - k_y + p_y) e^{-iq_x k_y l_0^2} \int dx e^{iq_x \hat{x}} e^{-i\frac{q_y l_0^2}{\hbar} \hat{p}} \phi_{n'}(x), \quad (\text{A.12.7})$$

e fazendo uso da fórmula de Glauber:

$$e^{\hat{A}} e^{\hat{B}} = e^{(\hat{A} + \hat{B} + \frac{1}{2}[\hat{A}, \hat{B}]_-)}, \quad (A.12.8)$$

obtemos,

$$J_{nn'}(q) = \delta(q_y - k_y + p_y) e^{-iq_x l_0^2(k_y - q_y/2)} \langle n | e^{(\hat{a}^\dagger q_+ - \hat{a} q_-)} | n' \rangle, \quad (A.12.9)$$

onde definimos

$$q_{\pm} = (q_y \pm iq_x) \frac{l_0}{\sqrt{2}}. \quad (A.12.10)$$

Expandimos o termo exponencial dentro do "bracket", tal que

$$J_{nn'}(q) = \delta(q_y - k_y + p_y) e^{-iq_x l_0^2(k_y - q_y/2)} \langle n | (1 + \hat{a}^\dagger q_+ - \hat{a} q_- + \frac{1}{2}(\hat{a}^\dagger q_+ - \hat{a} q_-)^2) | n' \rangle, \quad (A.12.11)$$

onde

$$\hat{a}^\dagger | n \rangle = \sqrt{n+1} | n+1 \rangle ; \quad \hat{a} | n \rangle = \sqrt{n} | n-1 \rangle, \quad (A.12.12)$$

Assim, temos que

$$\begin{aligned} J_{nn'}(q) &= \delta(q_y - k_y + p_y) e^{-iq_x l_0^2(k_y - q_y/2)} \times \\ &\times \{ \delta_{nn'} [1 - (n' + 1/2) \frac{l_0^2 q^2}{2}] + q_+ \sqrt{n'+1} \delta_{n, n'+1} + \\ &- q_- \sqrt{n'} \delta_{n, n'-1} + \frac{1}{2} q_+^2 \sqrt{n'+1} \sqrt{n'+2} \delta_{n, n'+2} + \\ &+ \frac{1}{2} q_-^2 \sqrt{n'} \sqrt{n'-1} \delta_{n, n'-2} \}. \end{aligned} \quad (A.12.13)$$

Analogamente,

$$\begin{aligned} J_{n'n}(q) &= \delta(q_y - k_y + p_y) e^{iq_x l_0^2(k_y - q_y/2)} \times \\ &\times \{ \delta_{n'n} [1 - (n + 1/2) \frac{l_0^2 q^2}{2}] + q_- \sqrt{n} \delta_{n', n-1} - q_+ \sqrt{n+1} \delta_{n', n+1} + \\ &+ \frac{1}{2} q_-^2 \sqrt{n} \sqrt{n-1} \delta_{n', n-2} + \frac{1}{2} q_+^2 \sqrt{n+1} \sqrt{n+2} \delta_{n', n+2} \}, \end{aligned} \quad (A.12.14)$$

Finalmente,

$$\begin{aligned} |J_{nn'}(q)|^2 &= \{ \delta_{nn'} - (\frac{n+1}{2}) \frac{q^2 l_0^2}{2} \delta_{n', n+1} + (\frac{n}{2}) \frac{q^2 l_0^2}{2} \delta_{n', n-1} + \\ &- (\frac{n+1}{2}) q^2 l_0^2 \delta_{n', n} - (\frac{n}{2}) q^2 l_0^2 \delta_{n', n} \}. \end{aligned} \quad (A.12.15)$$

Cálculo de $\lambda_0^{RA}(\bar{q}, E_F + p_m, E_F)$

Definimos a função λ_0^{RA} , eq.(4.2.34), como sendo

$$\begin{aligned} \lambda_0^{RA}(\bar{q}, \epsilon + p_m, \epsilon) = \mathbf{p} \sum_n \{ & G_n^R(\epsilon + p_m) G_n^A(\epsilon) + q^2 l_0^2 [(\frac{n+1}{2}) G_n^R(\epsilon + p_m) G_{n+1}^A(\epsilon) + \\ & + (\frac{n}{2}) G_n^R(\epsilon + p_m) G_{n-1}^A(\epsilon) - (n+1/2) G_n^R(\epsilon) G_n^A(\epsilon)] \}, \end{aligned} \quad (A.13.1)$$

ou,

$$\begin{aligned} \lambda_0^{RA}(\bar{q}, \epsilon + p_m, \epsilon) = \mathbf{p} \sum_n \{ & G_n^R(\epsilon + p_m) G_n^A(\epsilon) - q^2 l_0^2 [(\frac{n+1}{2}) G_n^R(\epsilon + p_m) G_n^A(\epsilon) + \\ & + (\frac{n}{2}) G_n^R(\epsilon + p_m) G_n^A(\epsilon) - (\frac{n+1}{2}) G_n^R(\epsilon + p_m) G_{n+1}^A(\epsilon) - (\frac{n}{2}) G_n^R(\epsilon + p_m) G_{n-1}^A(\epsilon)] \}, \end{aligned} \quad (A.13.2)$$

Fazendo algumas definições, tendo $\hbar = 1$, podemos escrever

$$\lambda_0^{RA}(\bar{q}, \epsilon + p_m, \epsilon) = \mathbf{p} [A_0 - q^2 l_0^2 (A_1 + A_2 - A_3 - A_4)], \quad (A.13.3)$$

onde,

$$\begin{aligned} A_0 &= \sum_n G_n^R(\epsilon + p_m) G_n^A(\epsilon) \\ A_1 &= \sum_n (\frac{n+1}{2}) G_n^R(\epsilon + p_m) G_n^A(\epsilon) \\ A_2 &= \sum_n (\frac{n}{2}) G_n^R(\epsilon + p_m) G_n^A(\epsilon) \\ A_3 &= \sum_n (\frac{n+1}{2}) G_n^R(\epsilon + p_m) G_{n+1}^A(\epsilon) \\ A_4 &= \sum_n (\frac{n}{2}) G_n^R(\epsilon + p_m) G_{n-1}^A(\epsilon), \end{aligned} \quad (A.13.4)$$

De uma forma geral, temos que

$$A = \sum_{n=0}^{n_{max}} f(\epsilon_n) G_n^R(\epsilon_2) G_{n\pm 1}^A(\epsilon_1) = \sum_{n=0}^{n_{max}} f(\epsilon_n) \frac{1}{\epsilon_2' - \epsilon_n + i/2\tau(\epsilon_2)} \frac{1}{\epsilon_1' - \epsilon_n \mp w_c - i/2\tau(\epsilon_1)}, \quad (A.13.5)$$

onde a "self - energy", pode ser escrita na aproximação "SCBA", como

$$\Sigma^{RA}(\epsilon) = R\epsilon \Sigma(\epsilon) \mp i/2\tau(\epsilon) = \sum_{n p \nu} G_n^{RA}(\epsilon) n_i u^2, \quad (A.13.6)$$

com

$$\frac{1}{\tau(\epsilon)} = 2\pi n_i u^2 N(\epsilon), \quad (A.13.7)$$

e

$$\epsilon' = \epsilon - R\epsilon \Sigma(\epsilon), \quad (A.13.8)$$

e conseqüentemente,

$$\sum_{n=0}^{n_{max}} G_n^{RA}(\epsilon) = \frac{1}{n_i u^2 p} [R\epsilon \Sigma(\epsilon) \mp i/2\tau(\epsilon)]. \quad (A.13.9)$$

Efetuamos as somas descritas acima, através de integrações de contorno, com $z = \epsilon_n$.

$$I = \frac{1}{2\pi i} \sum_{n=0}^{n_{max}} \int_{-\infty}^{\infty} dz \frac{f(z)}{z - \epsilon_n - i\delta} \frac{1}{\epsilon'_2 - z + i/2\tau(\epsilon_2)} \frac{1}{\epsilon'_1 - z \mp w_c - i/2\tau(\epsilon_1)}, \quad (A.13.10)$$

Após algumas passagens algébricas, encontramos

$$A = \sum_n f(\epsilon_n) G_n^R(\epsilon_2) G_{n\pm 1}^A(\epsilon_1) = \frac{1}{(\epsilon'_2 - \epsilon'_1 \pm i/2\tau(\epsilon_1) + i/2\tau(\epsilon_2))} \times \\ \times [f(\epsilon'_1 \mp w_c - i/2\tau(\epsilon_1)) \sum_{n=0}^{n_{max}} G_{n\pm 1}^A(\epsilon_1) - f(\epsilon'_2 + i/2\tau(\epsilon_2)) \sum_{n=0}^{n_{max}} G_n^R(\epsilon_2)], \quad (A.13.11)$$

e substituindo $\epsilon_2 \rightarrow E_F + p_m$ e $\epsilon_1 \rightarrow E_F$, obtemos

$$\sum_n f(\epsilon_n) G_n^R(E_F + p_m) G_{n\pm 1}^A(E_F) = \frac{1}{(p_m \pm w_c + i/\tau)} \times \\ \times [f(E'_F \mp w_c - i/2\tau) \sum_{n=0}^{n_{max}} G_{n\pm 1}^A(E_F) - f(E'_F + i/2\tau) \sum_{n=0}^{n_{max}} G_n^R(E_F)], \quad (A.13.12)$$

Além disso, temos

$$\sum_{n=0}^{n_{max}} G_{n+1}^A(E_F) = \sum_{n=0}^{n_{max}} G_n^A(E_F) - G_0^A(E_F) + G_{n_{max}+1}^A(E_F), \quad (A.13.13a)$$

e

$$\sum_{n=0}^{n_{max}} G_{n-1}^A(E_F) = \sum_{n=0}^{n_{max}} G_n^A(E_F) + G_{-1}^A(E_F) - G_{n_{max}}^A(E_F), \quad (A.13.13b)$$

Calculamos separadamente cada uma das somas da eq.(A.13.4), tal que fazendo uso da eq.(4.2.24), obtemos

$$A_0 = \sum_{n=0}^{n_{max}} G_n^R(E_F + p_m) G_n^A(E_F) = -\frac{1}{(p_m + i/\tau)} \sum_n [G_n^R(E_F) - G_n^A(E_F)] =$$

$$A_0 = \frac{i\tau'/\tau}{w_c(p_m + i/\tau)} = \frac{\tau'}{w_c} \frac{1}{(1 - ip_m\tau)}, \quad (A.13.14)$$

com

$$\sum_n \text{Im} G_n^R(E_F) = -\frac{\pi}{p} N(E_F), \quad (A.13.15)$$

e

$$\frac{\tau'}{w_c} = \frac{1}{n_i u^2 p}, \quad (A.13.16)$$

Desta forma, encontramos

$$A_1 = \sum_{n=0} \left(\frac{n+1}{2}\right) G_n^R(E_F + p_m) G_n^A(E_F) \cong \sum_{n=0} \left(\frac{n+1}{2}\right) G_n^R(E_F) G_n^A(E_F) [1 + O(\frac{p_m}{E_F})] =$$

$$A_1 = \frac{1}{(i/\tau)} \left\{ \left(\frac{E'_F + w_c/2 - i/2\tau}{2w_c}\right) \sum_{n=0} G_n^A(E_F) - \left(\frac{E'_F + w_c + i/2\tau}{2w_c}\right) \sum_{n=0} G_n^R(E_F) \right\}, \quad (A.13.17)$$

e analogamente,

$$A_2 = \frac{1}{(i/\tau)} \left\{ \left(\frac{E'_F - w_c/2 - i/2\tau}{2w_c}\right) \sum_{n=0} G_n^A(E_F) - \left(\frac{E'_F - w_c/2 + i/2\tau}{2w_c}\right) \sum_{n=0} G_n^R(E_F) \right\}, \quad (A.13.18)$$

$$A_3 = \frac{1}{(w_c + i/\tau)} \left\{ \left(\frac{E'_F - w_c/2 - i/2\tau}{2w_c}\right) \sum_{n=0} G_{n+1}^A(E_F) - \left(\frac{E'_F + w_c/2 + i/2\tau}{2w_c}\right) \sum_{n=0} G_n^R(E_F) \right\}, \quad (A.13.19)$$

$$A_4 = \frac{1}{(-w_c + i/\tau)} \left\{ \left(\frac{E'_F + w_c/2 - i/2\tau}{2w_c}\right) \sum_{n=0} G_{n-1}^A(E_F) - \left(\frac{E'_F - w_c/2 + i/2\tau}{2w_c}\right) \sum_{n=0} G_n^R(E_F) \right\}. \quad (A.13.20)$$

Assim, podemos escrever

$$[A_1 + A_2 - A_3 - A_4] = \sum_{n=0} [G_n^A(E_F) - G_n^R(E_F)] \frac{E'_F}{2w_c} \left[\frac{1}{(i/\tau)} - \frac{1}{(w_c + i/\tau)} - \frac{1}{(-w_c + i/\tau)} \right] +$$

$$\begin{aligned}
& - \frac{1}{(w_c + i/\tau)} \left(\frac{E'_F - w_c/2 - i/2\tau}{2w_c} \right) \{ G_{n_{max}}^A(E_F) - G_0^A(E_F) \} + \\
& - \frac{1}{(-w_c + i/\tau)} \left(\frac{E'_F + w_c/2 - i/2\tau}{2w_c} \right) \{ G_{-1}^A(E_F) - G_{n_{max}}^A \}, \tag{A.13.21}
\end{aligned}$$

então,

$$\begin{aligned}
[A_1 + A_2 - A_3 - A_4] &= \sum_{n=0} [G_n^A(E_F) - G_n^R(E_F)] \frac{i\tau E'_F}{w_c} \frac{w_c^2 \tau^2}{(1 + w_c^2 \tau^2)} + \\
& + \frac{1}{2w_c} \left[\frac{1}{(w_c + i/\tau)} - \frac{1}{(-w_c + i/\tau)} \right] + \\
& - \left[\frac{(E'_F - w_c/2 - i/2\tau)}{2w_c (w_c + i/\tau)} G_{n_{max}+1}^A(E_F) - \frac{(E'_F + w_c/2 - i/2\tau)}{2w_c (-w_c + i/\tau)} G_{n_{max}}^A(E_F) \right], \tag{A.13.22}
\end{aligned}$$

ou ainda,

$$\begin{aligned}
[A_1 + A_2 - A_3 - A_4] &= \frac{E'_F \tau' \tau^2}{(1 + w_c^2 \tau^2)} + \frac{\tau^2}{(1 + w_c^2 \tau^2)} + \\
& - \frac{(E'_F - w_c/2)}{2w_c} \left[\frac{G_{n_{max}+1}^A}{(w_c + i/\tau)} - \frac{G_{n_{max}}^A}{(-w_c + i/\tau)} \right] + (i/2\tau) \left[\frac{G_{n_{max}+1}^A}{(w_c + i/\tau)} + \frac{G_{n_{max}}^A}{(-w_c + i/\tau)} \right]. \tag{A.13.23}
\end{aligned}$$

Finalmente,

$$[A_1 + A_2 - A_3 - A_4] \cong \frac{(E'_F + 1/\tau') \tau}{m_e (1 + w_c^2 \tau^2)} m_e \tau \tau' = D_H m_e \tau \tau', \tag{A.13.24}$$

onde definimos a constante de difusão na presença de campo magnético, como sendo

$$D_H = \frac{(E'_F + 1/\tau') \tau}{m_e (1 + w_c^2 \tau^2)}. \tag{A.13.25}$$

De volta à eq.(A.13.3) e fazendo as devidas substituições, obtemos

$$\chi_0^{RA}(\vec{q}, E_F + p_m, E_F) = \mathbf{p} \frac{1}{n_i u^2 \mathbf{p}} (1 + ip_m \tau) - \mathbf{p} q^2 l_0^2 \frac{D_H m_e w_c \tau}{n_i u^2 \mathbf{p}}$$

$$\chi_0^{RA}(\vec{q}, E_F + p_m, E_F) = \frac{1}{n_i u^2} (1 + ip_m \tau - q^2 D_H \tau). \tag{A.13.26}$$

BIBLIOGRAFIA

- 1 - M. Herman & H. Sitter, " Molecular Beam Epitaxy, Fundamentals and Current Status ", vol.7, ed. M. B. Panish, Springer Series in Materials Science, Berlin, (1989).
- 2 - E.H.C. Parker, " The Technology and Physics of Molecular Beam Epitaxy ", Plenum Press, N.Y. (1985).
- 3 - H.M. Manasevit, " ", Appl. Phys. Lett. 12, (1968) 156.
- 4 - A.H. Wilson, " The Theory of Metals ", Cambridge University Press, London, (1953).
- 5 - J.M. Ziman, " Electrons and Phonons ", Oxford University Press, Oxford, (1979).
- 6 - D. Forster, " Hydrodynamic Fluctuations, Broken Symmetry, and Correlation Functions ", Frontiers in Physics: A Lecture Note and Reprint Series, vol.47, ed. D. Pines, W.A. Benjamin Inc., Massachusetts, (1975).
- 7 - R. Zwanzig, " Lectures in Theoretical Physics ", vol.3, eds. W.E. Brittin, B.W. Downs & J. Downs, Interscience, New York, (1961).
- 8 - H. Mori, " Transport, Collective Motion and Brownian Motion " , Prog. Theor. Phys. 33, (1965) 423 ; " A Continued-Fraction Representation of the Time-Correlation Functions " , Prog. Theor. Phys. 34, (1965) 399 .
- 9 - A.A. Abrikosov, L.P. Gorkov & I.E. Dzyaloshinski, " Methods of Quantum Field Theory in Statistical Physics ", Dover Pub. Inc., New York, (1963).
- 10 - I.C. da Cunha Lima & S.C. Ying, " Resistivity of a 2D Electron Gas under a Strong Magnetic Field using a Memory Function Formalism ", J. Phys. C 18, (1985) 2887.
- 11 - W. Götze & P. Wölfle, "Dynamical Impurity Spin Susceptibility in Metals", J. Low Temp. Phys. 5, (1971), 575.
- 12 - W. Götze & P. Wölfle, " Homogeneous Dynamical Conductivity of Simple Metals ", Phys. Rev. B 6, (1972) 1226.
- 13 - B.J. Berne, J.P. Boon & S.A. Rice, " On the Calculation of Autocorrelation Functions of

- Dynamical Variables ", J. Chem. Phys. 45, (1966) 1086.
- 14 - B.J. Berne & G.D. Harp, "On the calculation of time correlation functions", Advan. Chem. Phys. XVII, (1970) 63.
- 15 - R. Kubo, " Lectures in Theoretical Physics ", vol.1 , Wiley-Interscience, New York, (1959) p.120-203 ; "Statistical-Mechanical Theory of Irreversible Process I : General Theory and Simple Applications to Magnetic and Conduction Problems ", J. Phys. Soc. Japan 12, (1957) 570.
- 16 - T. Holstein, " Optical and Infrared Volume Absorption of Metals " , Phys. Rev. 96, (1954) 535 ; " Theory of Transport Phenomena in an Electron-Phonon Gas ", Ann. Phys. (N.Y.) 29, (1964) 410.
- 17 - C.S. Ting, S.C. Ying & J.J. Quinn, " Theory of Dynamical Conductivity of Interacting Electrons ", Phys. Rev. B 14, (1976) 4439 ; X.L. Lei & C.S. Ting, " Green's Function Approach to Nonlinear Electronic Transport for an Electron - Impurity - Phonon System in a Strong Electric Field ", Phys. Rev. B 32, (1985) 1112.
- 18 - T. Matsubara, " A New Approach to Quantum - Statistical Mechanics ", Prog. Theor. Phys. (Kyoto) 14, (1955) 351.
- 19 - G.D. Mahan, " Many - Particle Physics ", Plenum Press, N.Y., (1981) .
- 20 - A.C. Gossard, " Two-Dimensional Electron Gas Systems at Semiconductor Interfaces ", Surface Science 152/ 153, (1985) 1153.
- 21 - K. von Klitzing, G. Dorda & M. Pepper, " New Method for High-Accuracy Determination of the Fine-Structure Constant Based on Quantized Hall Resistance ", Phys. Rev. Lett. 45, (1980) 494.
- 22 - D.C. Tsui, H.L. Stormer & A.C. Gossard, " Two-Dimensional Magnetotransport in the Extreme Quantum Limit ", Phys. Rev. Lett. 48, (1982) 1559.
- 23 - H. Sakaki, " Scattering Suppression and High - Mobility Effect of Size - Quantized Electrons in Ultrafine Semiconductor Wire Structures ", Jpn. J. Appl. Phys. 19, (1980) L 735.
- 24 - I.C. da Cunha Lima, C.E. Leal & A. Troper, " Transport Lifetime for Electron-Phonon Systems: Exploring the Dimensionality ", in " Leite Lopes Festschrift ", eds. N. Fleury, S.

- Joffly, J.A. Martins Simões & A. Troper, World Scientific, Singapore, (1988) p.191-215.
- 25 - I.C. da Cunha Lima, J.R. Senna & S. Das Sarma, " Memory Function - Projection Operator Formalism to Treat the Fröhlich Hamiltonian ", (não publicado).
- 26 - F. Reif, " Fundamentals of Statistical and Thermal Physics ", McGraw-Hill Kogakusha, Tokyo, (1965).
- 27 - I.S. Gradshteyn & I.M. Ryzhik, " Table of Integrals, Series, and Products ", Academic Press, New York, (1980).
- 28 - V. Gurevich, I. Lang & Yu. Firsov, " On the Part Played by Optical Phonons in Infrared Absorption by Free Carriers in Semiconductors ", Sov. Phys. Solid State 4, (1962) 918.
- 29 - J.T Devreese, in " Polarons in Ionic Crystals and Polar Semiconductors ", North-Holland, Amsterdam, (1972) ; J.T. Devreese & F.M. Peeters, in " Polarons and Excitons in Polar Semiconductors and Ionic Crystals ", Plenum Press, New York, (1984) ; C. Kupper & G. Whitfield, in " Polarons and Excitons ", Edinburg, (1963).
- 30 - T. Ando, A. Fowler & F. Stern, " Electronic Properties of Two-Dimensional Systems ", Rev. Modern Phys. 54, (1982) 437.
- 31 - S. Das Sarma & A. Madhukar, " Study of Electron-Phonon Interaction and Magneto-Optical Anomalies in Two-Dimensionally Confined Systems ", Phys. Rev B 22, (1980) 2823.
- 32 - S. Das Sarma & B.A. Mason, " Screening of Polar Interaction in Quasi-Two-Dimensional Semiconductor Microstructures ", Phys. Rev. B 31, (1985) 5536 ; B.A. Mason & S. Das Sarma, " Quasiparticle Spectrum of a Fröhlich Polaron in Two Dimensions ", Phys. Rev. B 31, (1985) 5523.
- 33 - S. Das Sarma, " Polaron Effective Mass in GaAs Heterostructure ", Phys. Rev. B 27, (1983) 2590.
- 34 - A. Wixforth, J.P. Kotthaus & G. Weimann, " Quantum Oscillations in the Surface-Acoustic-Wave Attenuation Caused by a Two-Dimensional Electron System ", Phys. Rev. Letters 56, (1986) 2104.
- 35 - C.E. Leal, I.C. da Cunha Lima, A. Troper & S. Das Sarma, " Transport Relaxation Time of a Two-Dimensional Electron Gas due to Scattering by Surface Acoustic Waves ", Phys.

- Rev. B 35, (1987) 4095.
- 36 - C.E. Leal, I.C. da Cunha Lima, A. Troper & S. Das Sarma, "Relaxation Time for Electrons in Quantum Wells due to Scattering by Surface Longitudinal Acoustic Waves", in "Current Topics on Semiconductor Physics", eds. O. Hipólito, G.E. Marques & A. Fazio, World Scientific, Singapore, (1988) p. 67-72.
- 37 - P.J. Price, "Heterolayer Mobility in the Bloch-Grüneisen Range", *Solid State Commun.* 51, (1984) 607.
- 38 - K. Hirakawa & H. Sakaki, "Mobility of the Two-Dimensional Electron Gas at Selectively Doped n-Type $Al_xGa_{1-x}As/GaAs$ Heterojunctions with Controlled Electron Concentration", *Phys. Rev. B* 33 (1986) 8291.
- 39 - H. Fröhlich, "On the Theory of Superconductivity: the One-Dimensional Case", *Proc. Royal Soc. London, A* 223, (1953) 296.
- 40 - R.E. Peierls, "Quantum Theory of Solids", Oxford University Press, New York, (1955) p. 108.
- 41 - E.M. Conwell, "Band Transport in Quasi-One-Dimensional Conductors in the Phonon - Scattering Regime and Application to Tetrathiofulvalene - Tetracyanoquinodimethane", *Phys. Rev. B* 22, (1980) 1761.
- 42 - J.P. Pouget, G. Shirane, J.M. Hastings, A.J. Heeger, N.D. Miro & A.G. MacDiarmid, "Elastic Neutron Scattering of the "Phase-Ordering" Phase Transition in $Hg_{3-\delta}AsF_6$ ", *Phys. Rev. B* 18, (1978) 3645 ; D.L. Peebles, C.K. Chiang, M.J. Choen, A.J. Heeger, N.D. Miro and A.G. MacDiarmid, "Optical Properties of Linear-Chain Mercury Compounds", *Phys. Rev. B* 15, (1977) 4607.
- 43 - T.M. Rice, "Physics in One-Dimension", eds. J. Bernasconi & T. Schneider, Springer - Verlag, Berlin, (1981) p. 229.
- 44 - H. Sakaki, "High Mobility Effect of Electrons in Ultrafine Semiconductor Wire Structures", *J. Vac. Sci. Technol.* 19, (1981) 148.
- 45 - P.M. Petroff, A.C. Gossard, R.A. Logan & W. Wiegman, "Toward Quantum Well Wires: Fabrication & Optical Properties", *Appl. Phys. Lett.* 41, (1982) 635.

- 46 - P. Lee, " Variable - Range Hopping in Finite One-Dimensional Wires ", Phys. Rev. Lett. 53, (1984) 2042.
- 47 - S. Das Sarma & We-yan Lai, " Screening and Elementary Excitations in Narrow - Channel Semiconductor Microstructures ", Phys. Rev. B 32, (1985) 1401.
- 48 - C.E. Leal, I.C. da Cunha Lima, E.A. de Andrada e Silva & A. Troper, " Electron Mobility in Quasi-One-Dimensional Conductors : A Theoretical Study ", Phys. Rev. B 38, (1988) 3525.
- 49 - C. Kittell, " Introduction to the Solid State Physics ", ed. John Wiley and Sons, N.Y. (1976).
- 50 - E.M. Conwell & C.S. Jacobsen, " Lattice Scattering Mobility at Low Temperatures in Quasi-One-Dimensional Metals ", Solid State Commun. 40, (1981) 203.
- 51 - M.R. Baldan, C.E. Leal & I.C. da Cunha Lima, " Resistivity in Quasi-One-Dimensional Wire ", (submet. p/ publicação Superlatt. Microstruct.)
- 52 - P. Vasilopoulos, P. Warmenbol, F.M. Peeters & J.T. Devreese, " Magnetophonon Resonances in Quasi-One-Dimensional Wires ", Phys. Rev. B 40 (1989) 1810 ; P. Vasilopoulos & F.M. Peeters, " Electrical Transport in a Quantum Wire : Influence of One- and Two-Body Interactions ", Phys. Rev. B 40, (1989) 10079.
- 53 - Wu Xiaoguang, F.M. Peeters & J.T. Devreese, " Influence of Many - Body Effects on the Cyclotron Resonance Mass of Two - Dimensional Polarons with Application to $GaAsAl_{1-x} / Ga_xAs$ Heterostructures ", Phys. Stat. Sol. (b) 143, (1987) 581.
- 54 - Wu Xiaoguang, F.M. Peeters & J.T. Devreese, " Temperature Dependence of the Polaron Mass in a $GaAsAl_x / Ga_{1-x}As$ Heterostructure ", Phys. Rev. B 36, (1987) 9765 ; J.T. Devreese & F.M. Peeters, " Polaron Cyclotron Mass: Validity of Second - Order Perturbation Theory ", Solid State Commun. 58, (1986) 861.
- 55 - D.M. Larsen, " Cyclotron resonance of polarons confined to a surface", Phys. Rev. B 30, (1984) 4595 ; A. Gold, " Transport and Cyclotron Resonance Theory for $GaAs/AlGaAs$ Heterostructures ", Z. Phys. B - Condensed Matter 63, (1986) 1.
- 56 - B. Horovitz & A. Mandhukar, " Electron-Phonon Interaction and Cyclotron Resonance in

- Two-Dimensional Electron Gas ", Solid State Commun. 32, (1979) 695.
- 57 - M.A Brummell, R.J. Nicholas, M.A. Hopkins, J.J. Harris & C.T. Foxon, " Modification of the Electron-Phonon Interactions in *GaAs - GaAlAs* Heterojunctions ", Phys. Rev. Lett. 58, (1987) 77.
- 58 - Wu Xiaoguang, F.M. Peeters & J.T. Devreese, " Exact and Approximate Results for the Ground - State Energy of a Fröhlich Polaron in Two Dimensions ", Phys. Rev. B 31, (1985) 3420.
- 59 - M.H. Degani & O. Hipólito, " Competition Between Interface and Bulk Phonons in *GaAs/AlAs* and *InAs/GaSb* Quantum Wells ", Superlatt. Microstruct. 5, (1989) 141.
- 60 - G.Y. Hu & R.F. O'Connell, " Phonon Effects on the Cyclotron Resonance for a Many-Body System: A Generalized Quantum Langevin Equation Approach ", Phys. A 151, (1988) 33.
- 61 - Z. Schlesinger, S.J. Allen, J.C.M. Hwang & P.M. Platzman, " Cyclotron Resonance in Two Dimensions ", Phys. Rev. B 30, (1984) 435.
- 62 - C.S. Ting, S.C. Ying & J.J. Quinn, " Theory of Cyclotron Resonance of Interacting Electrons in a Semiconducting Surface Inversion Layer ", Phys. Rev. B 16, (1977) 5394.
- 63 - K.W. Chiu & J.J. Quinn, " Plasma Oscillations of a Two-Dimensional Electron Gas in Strong Magnetic Field ", Phys. Rev. B 9, (1974) 4724.
- 64 - C.E. Leal, I.C. da Cunha Lima & A. Troper, " Resonance of the Magnetophonon Conductivity in Two-Dimensional Systems ", Phys. Rev. B 41, (1990) 8372.
- 65 - N.P. Mermin & E. Canal, " Long Wavelength Oscillations of a Quantum Plasma in a Uniform Magnetic Field ", Ann. Phys. (N.Y) 26, (1964) 247.
- 66 - G. Arfken, " Mathematical Methods for Physicists ", Academic Press, New York, (1970).
- 67 - S. Kawaji, " The Two-Dimensional Lattice Scattering Mobility in a Semiconductor Inversion Layer ", J. Phys. Soc. Jpn. 27, (1969) 906.
- 68 - Wu Xiaoguang, F.M. Peeters & J.T. Devreese, " Theory of the Cyclotron Resonance Spectrum of a Polaron in two Dimensions ", Phys. Rev. B 34, (1986) 8800 ; F.M. Peeters, Wu Xiaoguang & J.T. Devreese, " ", Physica Scripta 13, (1986) 282.
- 69 - T.A. Kennedy, B.D. McCombe, D.C. Tsui & R.J. Wagner, " ", Surf. Science 73, (1978)

- 70 - C.E. Leal, I.C. da Cunha Lima & A. Troper, " Theory of the Magnetophonon Resonance in two Dimensional Systems ", (submetido p/ publicação Superlatt. Microstruct.).
- 71 - M. Horst, O. Merkt & J.P. Kotthaus, "Magneto-Polarons in a Two-Dimensional Electron Inversion Layer on InSb", Phys. Rev. Lett. 50, (1983) 754.
- 72 - M.A. Hopkins, R.J. Nicholas, M.A. Brummell, J.J. Harris & C.T. Foxon, " Cyclotron-Resonance Study of Nonparabolicity and Screening in $GaAs - Ga_{1-x}Al_xAs$ Heterojunctions ", Phys. Rev. B 36, (1987) 46, 4789 ; " ", Superlatt. Microstruct. 2, (1986) 319.
- 73 - J. Van Royen, J. de Sitter, L.F. Lemmens & J.T. Devreese, " ", Phys. Rev. B 18, (1977) 101 ; J.P. Vigneron, R. Evrard & E. Kartheuser, " Theory of Intraband Magnetoabsorption in Weakly Polar Semiconductors ", Phys. Rev. B 18, (1978) 6930.
- 74 - J. Van Royen, J. de Sitter & J.T. Devreese, " Calculation of the Cyclotron-Resonance Spectrum in the Quantum Limit for Semiconductors (Lowest-Order Born Approximation) ", Phys. Rev. B 30, (1984) 7154 ; F.M. Peeters & J.T. Devreese, "Cyclotron Resonance of Polarons", Physica 127 B, (1984) 408-410.
- 75 - G.A. Farias, N. Studart & O. Hipólito, " Self-Trapping of an Electron by the Surface Modes ", Solid State Commun. 43, (1982) 95 ; E.L. Bodas & O. Hipólito, " Surface-Polaron First-Order Phase-Transition-Like Behavior ", Phys. Rev. B 27, (1983) 6110.
- 76 - J.R. Senna, " Magnetoresistance and Hall Effect of a Disordered Interacting Two Dimensional Electron Gas ", Ph.D Thesis, Brown University (1983) ; A. Houghton, J.R. Senna & S.C. Ying, " Magnetoresistance and Hall Effect of a Disordered Interacting Two - Dimensional Electron Gas ", Phys. Rev. B 25, (1982) 2196.
- 77 - D. Vollhardt & P. Wölfle, " Diagrammatic Self-Consistent Treatment of the Anderson Localisation Problem in $d \leq 2$ Dimensions ", Phys. Rev. B 22, (1980) 4666.
- 78 - T. Ando, & Y. Uemura, " Theory of Quantum Transport in a Two-Dimensional Electron System under Magnetic Fields. I. Characteristics of Level Broadening and Transport under Strong Fields ", J. Phys. Soc. Japan 36, No.4, (1974) 959 ; T. Ando, "Theory of Quantum Transport in a Two-Dimensional Electron System under Magnetic Fields. IV. Oscillatory


- Conductivity", J. Phys. Soc. Japan 37, No. 5, (1974) 1233.
- 79 - P. Lee & T.V. Ramakrishnan, " Disordered Electronic Systems ", Rev. Mod. Phys. 57, (1987) 287.
- 80 - B.L. Altshuler & A.G. Aronov, " Electron - Electron Interaction in Disordered Conductors ", in " Electron - Electron Interactions in Disordered Systems ", ed. A.L. Efros and M. Pollak, Elsevier Science Publishers B.V., (1985) p. 1-153.
- 81 - G.Y. Hu & R.F. O'Connell, " Polarisability of a Two - Dimensional Electron Gas Including Fluctuation Effects ", J. Phys. C: Solid State Phys. 21, (1988) 4325 ; G.Y. Hu & R.F. O'Connell, " Fluctuation Effects on the Cyclotron Resonance Spectrum for a Two - Dimensional Electron Gas ", Phys. Rev. B 37, (1988) 10391.
- 82 - C.E. Leal, I.C. da Cunha Lima & A. Troper, " Diffusive Pole Effect on the Magnetophonon Cyclotron Resonance in Two - Dimensional Systems ", (submetido p/ publicação Superlatt. Microstruct.)
- 83 - S. Rudin & T.L. Reinecke, " Electron - LO - Phonon Scattering Rates in Semiconductor Quantum Wells ", Phys. Rev. B 41, (1990) 7713.
- 84 - I.C. da Cunha Lima, C.E. Leal, E.A. de Andrada e Silva & A.Troper, " Quasi Particle Energy of 4f-States in the Ramirez - Falicov - Kimball (RFK) Model: Memory Function Formalism ", J. de Physique Colloque C8, Tome 49, (1988) 699.

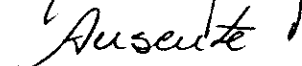
"PROPRIEDADES DE TRANSPORTE EM SISTEMAS SEMICONDUTORES DE
BAIXA DIMENSIONALIDADE VIA FORMALISMO DE FUNÇÃO MEMÓRIA"

CARLOS EDUARDO DOS SANTOS LEAL

Tese de Doutorado apresentada ao Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas do Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico, fazendo parte da Banca Examinadora os seguintes professores:


Amos Troper (Presidente/Orientador)


Ivan Costa da Cunha Lima (Orientador)


José Roberto Sbragia Senna


Mucio Amado Continentino


Constantino Tsallis


Evaldo Mendonça Fleury Curado


Affonso Augusto Guidão Gomes

Rio de Janeiro, 23 de agosto de 1990