

RAIMUNDO ALEXANDRE TAVARES DE LIMA

INFLUÊNCIA DE IMPUREZAS SOBRE A MASSA EFETIVA DO POLARON

T 530 HA  
L 732

T 61  
L 732

Tese de Mestrado a ser  
Defendida no Centro Bra  
sileiro de Pesquisas Fí  
sicas

## Í N D I C E

Agradecimentos .....	1
Resumo .....	2
Cap. I - Motivação	
1- Resultados Experimentais .....	3
2- Procedimento de Rodriguez no Tratamento do Problema ..	6
Cap. II - Polaron	
1- Introdução .....	11
2- Interação entre Elétron e Polarização da Rêde .....	11
3- Dedução da Hamiltoniana .....	14
Cap. III- Função de Green	
1- Introdução .....	23
2- Função de Green para $T = 0$ .....	24
3- Propriedades Analíticas da Função de Green .....	28
4- Significado Físico da Função de Green .....	33
5- Expansão de $G$ como Perturbação e Equação de Dyson ...	37
6- Função de Green Dependente da Temperatura .....	43
7- Função de Green Dependente do Tempo para $T \neq 0$ .....	49
Cap. IV - Resultados Teóricos	
1- Introdução .....	55
2- Cálculo da Massa Efetiva .....	55

Apêndice- Cálculo da Massa Efetiva Considerando um Cristal Puro

A-I- Introdução .....	77
A-II - Acoplamento com Fonons Acústicos .....	77
A-III- Acoplamento com Fonons Ópticos .....	83
Referências .....	87

## A G R A D E C I M E N T O S

- Ao Prof. Roberto Lôbo, pela sugestão e orientação deste trabalho, o qual me proporcionou novos e importantes conhecimentos sobre a natureza.
- Aos meus antigos orientadores no CBPF, Professores Luís Tauata, T. Kodama e Alfredo Marques.
- Aos colegas do Departamento de Física da UFSCAR, especialmente ao Lauro C. Santanna Filho e Gilmar Eugenio Marques, pelas proveitosas discussões.
- À Maria Teresa, pela dedicação com que datilografou este trabalho.
- À UFSCAR, pelas condições e facilidades proporcionadas a fim de que eu pudesse realizar esta tarefa.
- Ao CBPF, pela acolhida em seus cursos de Pós-Graduação.
- Ao Instituto de Física e Química da USP, de São Carlos, pela acolhida em cursos de Pós-Graduação e pelas proveitosas consultas à sua biblioteca.
- Ao CNPq, pelas condições fornecidas com a doação de bolsas de estudo, no início do curso de Pós-Graduação, no CBPF.
- Enfim, a todos aqueles que de forma indireta, e até inconsciente, colaboraram na execução desta obra; cabendo aqui um reconhecimento profundo aos trabalhadores humildes do meu país - estes heróis, que de uma forma tão árdua ajudam a construir a nação.

## R E S U M O

Apresentamos, no Cap. I desta Tese, os resultados experimentais obtidos por Baxter, referentes a variação da massa efetiva do polaron com a temperatura na presença de "traps". São indicados, também, as evidências que serviram de argumentos para o modelo de interação ressonante do elétron da banda de condução com o estado ligado da impureza, mediante emissão e reabsorção de fonons acústicos virtuais, sugerido por S. Rodríguez. Também é feita uma crítica a um artigo, publicado por Rodríguez, sobre o problema.

No Cap. II é apresentado o conceito de polaron, devido a Fröhlich, e a dedução de sua Hamiltoniana.

No Cap. III fizemos uma introdução formal do método das Funções de Green.

Finalmente, apresentamos no Cap. IV os cálculos em que o formalismo das Funções de Green é utilizado para verificar o modelo de Rodríguez no problema em questão, com a dependência da temperatura para massa efetiva sendo obtida. Complementando, fizemos um apêndice no qual o cálculo da massa efetiva é efetuado, também, para acoplamento com fonons acústicos e ópticos.

## C A P Í T U L O I

### Motivação

#### I - 1 RESULTADOS EXPERIMENTAIS

Os resultados experimentais que nos proporcionaram este trabalho foram obtidos por J. E. Baxter Jr. et al, em sua tese de Doutorado. Baxter verificou, então, por meio de ressonância ciclotrônica, que a massa efetiva do elétron em AgBr, com impurezas doadoras, apresenta um comportamento com a temperatura da forma mostrada na fig. 1. A linha cheia corresponde o ajustamento de uma expressão empírica dada por

$$\frac{m^*(T) - m^*(0)}{m^*(0)} = \frac{\mu}{m^*(0)} e^{-\theta/T} \quad 1-1$$

com  $\theta$  entre 70 e 85°K.

Os pontos experimentais visto no gráfico, fig. 1, correspondem os máximos da absorção observada nas curva de ressonância apresentadas na fig. 2.

Segundo Baxter, a energia correspondente ao valor observado de  $\theta$  (70°K a 85°K) é da mesma ordem da energia do estado ligado da impureza doadora, para o número quântico  $n = 2$ . Outro resultado importante obtido é que a dependência da temperatura varia de amostra para amostra, indicando que o fenômeno em questão não é uma característica de um cristal perfeito. Estas foram as evidências usadas por S. S. Rodriguez<sup>(1)</sup> para atribuir a forte dependência da temperatura observada à uma interação elétron-fonon ressonante, entre os elétrons da banda de condução e os fonons acústicos.

Admitindo, então, o processo acima, S. Rodriguez tratou o problema usando um método próprio de interação elétron-fonon ressonante<sup>(2)</sup>. Verificamos, entretanto, nos seus cálculos, uma passagem matemática que não é correta e que, portanto invalida o resultado obtido. Discutiremos, no próximo item, seu procedimento no tratamento do problema apontando o erro por ele cometido.

Desse modo, o propósito do atual trabalho é fazer uma abordagem correta do problema a fim de verificar o modelo sugerido. Com este objetivo tratamos o problema com o formalismo das funções de Green dependente da temperatura, que pode ser visto no cap. IV.

## I - 2 PROCEDIMENTO DE S. RODRIGUEZ NO TRATAMENTO DO PROBLEMA<sup>(1,2)</sup>

A interação em questão pode ser visto como uma captura ressonante, de um elétron da banda de condução, no estado  $|\vec{k}\rangle$ , num estado ligado da impureza doadora. Com isto um fonon virtual no estado  $|\vec{q}_\mu\rangle$  de vetor onda  $\vec{q}$  e polarização  $\mu$  é emitido. O elétron é reemitido imediatamente para o estado  $|\vec{k}\rangle$  com absorção do fonon  $|\vec{q}_\mu\rangle$ . Considerando  $E_b$  a energia do estado ligado, o efeito torna-se relevante quando a energia do fonon é comparável a esta energia,  $E_b$ . Este processo dá origem a uma renormalização da massa do elétron que apresenta algumas características com o do polaron num cristal puro.

A Hamiltoniana de um elétron se movendo no cristal na presença de uma impureza apresenta então um termo de interação elétron-fonon

$H_1$ . Se o estado  $|\vec{k}, n_{q\mu}\rangle$  representa o elétron na banda de condução no estado  $\vec{k}$  com  $n_{q\mu}$  fonons presente e  $|b, n_{q\mu}+1\rangle$  representa o elétron ligado à impureza no estado b com  $(n_{q\mu}+1)$  fonons, o elemento de matriz entre estes estados será

$$\langle b, n_{q\mu}+1 | H_1 | \vec{k}, n_{q\mu} \rangle = \beta_{q\mu} (n_{q\mu}+1)^{1/2} \quad 1-2$$

o fator  $(n_{q\mu}+1)^{1/2}$  surge porque  $H_1$  contém um termo no qual um fonon é criado no estado  $\vec{q}_\mu$ .

Os autovalores de  $H = H^0 + H_1$  são obtidos da solução de

$$H\Psi_E = E\Psi_E \quad 1-4$$

com

$$\Psi_E = A |\vec{k}, n_{q\mu}\rangle + \sum_{q\mu} B_{q\mu} |b, n_{q\mu}+1\rangle$$

dando então

$$w = \epsilon_k + \sum_{q\mu} \frac{|\beta_{q\mu}|^2 (n_{q\mu}+1)}{w + E_b - \hbar\omega_{q\mu} + \frac{i}{2}\Gamma} \quad 1-5$$

com o tempo de vida do estado  $|b\rangle$  sendo dado por

$$\tau = \hbar/\Gamma \quad 1-5$$

Quando em equilíbrio térmico o valor médio de  $w$  será

$$w_k = \epsilon_k + \sum_{q\mu} \frac{|\beta_q|^2 (\bar{n}_{q\mu}+1)}{w_k + E_b - \hbar\omega_{q\mu} + \frac{i}{2}\Gamma} \quad 1-6$$

onde

$$\bar{n}_{q\mu} = (e^{\hbar\omega_{q\mu}/kT} - 1)^{-1} \quad 1-7$$



Expandindo o membro direito de 1-6 em potência de  $w_k$  e tomando apenas a primeira potência fica

$$w_k \cong \frac{1}{1 + \sum_{q\mu} \frac{|\beta_{q\mu}|^2 (\bar{n}_{q\mu} + 1)}{(E_b - \hbar\omega_{q\mu} + \frac{i}{2}\Gamma)^2}} \left\{ \varepsilon_k + \sum_{q\mu} \frac{|\beta_{q\mu}|^2 (\bar{n}_{q\mu} + 1)}{E_b - \hbar\omega_{q\mu} + \frac{i}{2}\Gamma} \right\} \quad 1-8$$

de onde se tira

$$m^*(T) = m^*(0) \left[ 1 + \text{Re} \sum_{q\mu} \frac{|\beta_{q\mu}|^2 (\bar{n}_{q\mu} + 1)}{(E_b - \hbar\omega_{q\mu} + \frac{i}{2}\Gamma)} \right] \quad 1-9$$

Chegamos aqui no ponto questionado que é o cálculo da soma na expressão 1-9. Isto é feito transformando-se esta soma numa integral, assim

$$S = \sum_{q\mu} \frac{|\beta_{q\mu}|^2 (\bar{n}_{q\mu} + 1)}{(E_b - \hbar\omega_{q\mu} + \frac{i}{2}\Gamma)^2} = \int \frac{d\omega \rho(\omega) |\beta_{q\mu}(\omega)|^2}{(E_b - \hbar\omega_{q\mu} + \frac{i}{2}\Gamma)^2} + \frac{d\omega \rho(\omega) |\beta_{q\mu}(\omega)|^2}{(E_b - \hbar\omega_{q\mu} + \frac{i}{2}\Gamma)^2} e^{-\hbar\omega_{q\mu}/kT} \quad 1-10$$

onde se fez

$$\bar{n}_{q\mu} = e^{-\hbar\omega_{q\mu}/kT} \quad 1-11$$

a integração em  $\omega$  se estende sobre a região de frequência de vibração da rede e a densidade  $\rho(\omega)$  é zero fora dessa região.

Em seguida a função  $\rho(\omega) |\beta_{q\mu}|^2$  é estendida analiticamente ao semi-plano complexo superior e uma integração de contorno é efetuada

neste semi-plano. A contribuição vem então do resíduo devido o pólo em  $E_b + i\Gamma/2$ . Prosseguindo daí é obtido então uma expressão para mas sa efetiva, da forma

$$\frac{m(T)-m(0)}{m(0)} = \frac{\gamma}{T} \exp\left(-\frac{\theta}{T}\right) \quad 1-12$$

Ora, a função  $\rho(\omega)$  presente no integrando de 1-10 é nula para  $\omega < 0$  e para  $\omega > \omega_m$ , onde  $\omega_m$  é a frequência máxima de vibração da rede. Sendo também descontínua nos pontos  $\omega = 0$  e  $\omega = \omega_m$ , vemos que a condição de analiticidade para que a extensão analítica efetuada seja correta não é satisfeita. Logo a integração não pode ser feita desta maneira.

Por outro lado podemos verificar que  $\bar{n}_{q\mu} + 1$  está relacionado a cos secante hiperbólica por

$$\bar{n}_{q\mu} + 1 = \frac{1}{2} \frac{\hbar\omega_{q\mu}/2k_B T}{\cosh(\hbar\omega_{q\mu}/2k_B T)} \quad 1-13$$

e, por conseguinte o prolongamento analítico desta função nos conduz a singularidades nos pontos  $\omega = n\pi i$ , com  $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ . Daí ao ser feita a aproximação 1-12 foram descartados do interior do contorno de integração todos os pólos de 1-13.

Em resumo, vemos que devido o prolongamento analítico do integan do de 1-10 (que conforme vimos não é correto) a aproximação 1-11 é inoportuna. Logo nada se pode concluir do resultado 1-12 obtido por Rodriguez.

Conforme já dissemos o nosso objetivo aqui é verificar o modelo proposto por Rodriguez fazendo uso das funções de Green dependente da temperatura. A vantagem do uso da função de Green é que a dependência

da temperatura é introduzida naturalmente por seu intermédio, e goza de propriedades analíticas que nos permitem efetuar as integrações de contorno conveniente e, então, extrair as informações desejadas de uma forma correta e elegante.

## C A P Í T U L O    I I

### POLARON

#### I - 1    I N T R O D U Ç Ã O

O termo polaron é atribuído frequentemente ao elétron e fonons ópticos virtuais que o acompanham num cristal iônico. Por este motivo chamamos de polaron o elétron estudado por Baxter pois suas observações foram feitas no AgBr (que é um cristal iônico).

Por outro lado o problema da variação da massa efetiva do polaron com a temperatura, apresentada no cap. anterior, se deve a um processo cujo mecanismo tem as mesmas características daquele que define o próprio polaron. Devido esta semelhança achamos oportuno dedicar este capítulo a apresentação da teoria do polaron de Fröhlich<sup>(3)</sup>.

Para que se tenha um polaron é necessário que a energia do elétron não exceda  $\hbar\omega_0$ , onde  $\omega_0$  é a frequência natural do sistema à  $q \rightarrow 0$ , caso contrário haverá atenuação com emissão de fonons reais. Portanto a velocidade do elétron deve ser muito pequena possibilitando com isso excitação e reabsorção de fonons virtuais. Neste caso de elétrons se movimentando muito lentamente, a função de onda eletrônica muda muito pouco em relação ao parâmetro da rede. Deste modo a rede pode ser tratada como contínua com suas propriedades determinadas pela constante dielétrica  $\epsilon(\omega)$ .

#### I - 2    I N T E R A Ç Ã O   E N T R E   E L Ê T R O N   E   P O L A R I Z A Ç Ã O   D A   R E D E

Vamos descrever o efeito do elétron sobre a rede através da polarização elétrica  $\vec{P}(\vec{r})$ . Negligenciaremos a interação entre  $\vec{P}(\vec{r})$  e o campo magnético de um elétron lento, comparada a interação eletrostática

tica. Podemos impor, então, a condição

$$\nabla \times \vec{P} = 0 \quad 2-1$$

Daí, se o deslocamento elétrico  $\vec{D}(\vec{r})$  e o campo elétrico  $\vec{E}(\vec{r})$  forem inroduzidos da maneira usual por

$$\vec{D}(\vec{r}) = \vec{E}(\vec{r}) + 4\pi\vec{P}(\vec{r}) \quad 2-2$$

a única fonte de  $\vec{D}$  são as cargas livres, no nosso caso, de elétrons livres no cristal

$$\vec{D}(\vec{r}) = -\nabla \frac{e}{|\vec{r}-\vec{r}'|}, \text{ isto é, } \nabla \times \vec{D} = 0; \nabla \cdot \vec{D} = 4\pi e \delta(\vec{r}-\vec{r}') \quad 2-3$$

onde  $\vec{r}'$  é a coordenada eletrônica e  $e$  é a carga. Na ausência de elétrons  $\vec{D} = 0$ , portanto  $\vec{D}$  representa o campo externo atuando sobre a polarização do cristal. Por outro lado a condição 2-1 nos permite introduzir o potencial polarização  $\phi(\vec{r})$  definido por

$$4\pi\vec{P}(\vec{r}) = \nabla\phi(\vec{r}) \quad 2-4$$

com isso a densidade de energia de interação será dada por

$$-\vec{D}(\vec{r}) \cdot \vec{P}(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi} \nabla\phi(\vec{r}) \cdot \nabla \frac{e}{|\vec{r}-\vec{r}'|} \quad 2-5$$

integrando obtemos então a energia de interação

$$\begin{aligned} H_{\text{int}} &= -\int \vec{D} \cdot \vec{P} d^3r = \frac{1}{4\pi} \int \nabla\phi(\vec{r}) \nabla \left( \frac{e}{|\vec{r}-\vec{r}'|} \right) d^3r \\ H_{\text{int}} &= -\frac{e}{4\pi} \int \phi(\vec{r}) \nabla^2 \frac{1}{|\vec{r}-\vec{r}'|} d^3r = e\phi(\vec{r}') \end{aligned} \quad 2-6$$

aqui, integramos por parte e usamos a relação

$$\nabla \cdot \vec{D} = -\nabla^2 \frac{e}{|\vec{r}-\vec{r}'|} = 4\pi e \delta(\vec{r}-\vec{r}')$$

Já que a polarização da rede não deve fazer qualquer contribuição a  $\vec{D}$ , segue que  $4\pi\vec{P}$  representa o campo elétrico devido a polarização e  $\phi(\vec{r})$  o seu potencial.

Devemos enfatizar agora que a polarização  $\vec{P}$  é determinada pelas propriedades dinâmicas da rede. Deste modo, enquanto  $\vec{D}$  é sempre dado por 2-3, independente do estado de polarização da rede, o campo elétrico depende dele e pode ser obtido de 2-2 desde que  $\vec{P}$  tenha sido determinado das equações dinâmicas. Com razoável aproximação vamos considerar o campo de polarização como composto de duas contribuições, ou seja, uma correspondendo as oscilações das camadas eletrônicas dos íons, com frequências na região ultravioleta, e outra correspondendo ao movimento em que os íons positivos e negativos vibram em antifase, com frequência na região infravermelha, temos então

$$\vec{P}(\vec{r}) = \vec{P}_u(\vec{r}) + \vec{P}_i(\vec{r}) \quad 2-7$$

Devido a condição  $\nabla \times \vec{P} = 0$  podemos restringir nossa atenção a interação com modos longitudinais apenas.

Podemos assumir que  $\vec{P}_i(\vec{r})$  é mais importante que  $\vec{P}_u$  para descrição do polaron.  $\vec{P}_u$  pode ser apenas uma correção exceto para elétrons muito rápidos.

Vamos agora considerar um elétron em repouso, ou, pelo menos, localizado numa região finita, na rede. A constante dielétrica estática  $\epsilon$  é definida por

$$\vec{D}(\vec{r}) = \epsilon \vec{E}(\vec{r}) \quad 2-8$$

usando a relação 2-2 temos

$$\vec{P}(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi}(\vec{D}-\vec{E}) = \frac{1}{4\pi}\left(1-\frac{1}{\epsilon}\right)\vec{D}(\vec{r}) \quad 2-9$$

Por outro lado a frequência muito alta os íons não percebem a variação do campo, prevalece então a componente ultravioleta e neste caso escrevemos

$$\vec{D}(\vec{r}) = \vec{E}(\vec{r}) + 4\pi\vec{P}_u(\vec{r}) \quad 2-10$$

com constante dielétrica  $\epsilon_\infty$  definida analogamente a 2-8, por

$$\vec{D}(\vec{r}) = \epsilon_\infty \vec{E}(\vec{r}) \quad 2-11$$

por conseguinte, levando 2-11 na 2-10 obtemos

$$\vec{P}_u(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi}\left(1-\frac{1}{\epsilon_\infty}\right)\vec{D} \quad 2-12$$

substituindo agora as expressões 2-12 e 2-9 na 2-7, tiramos

$$\vec{P}_i(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi}\left(\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon}\right)\vec{D}(\vec{r}) \equiv \frac{1}{4\pi\bar{\epsilon}} \vec{D}(\vec{r}) \quad 2-13$$

Na equação 13 definimos a constante dielétrica efetiva  $\bar{\epsilon}$  para polarizabilidade da rede em termos das constantes dielétricas medidas experimentalmente para altas e baixas frequências.

### I - 3 DEDUÇÃO DA HAMILTONIANA

Vamos agora deduzir a Hamiltoniana para um elétron e seu campo de polarização associado a um cristal iônico. Consideremos primeiro a rede na ausência do elétron admitindo que a frequência de vibração da rede  $\omega/2\pi$  é independente do comprimento de onda da vibração.

Isto significa que

$$v_g = \frac{\partial \omega}{\partial k} = 0$$

a velocidade de grupo é nula.

Na ausência de uma fonte de polarização, o campo de polarização longitudinal será descrita em primeira aproximação pela equação do oscilador harmônico simples

$$\ddot{\vec{P}}(\vec{r}) + \omega^2 \vec{P}(\vec{r}) = 0 \quad 2-14$$

com a condição  $\nabla \times \vec{P}(\vec{r}) = 0$ .

Podemos fazer análise de Fourier para  $\vec{P}(\vec{r})$  em termos de exponenciais complexas. Escrevemos então

$$\vec{P}(\vec{r}) = \sum_{\vec{w}} \vec{P}_{\vec{w}} e^{i(\vec{w} \cdot \vec{r} - \omega t)} \quad 2-15$$

Notemos que  $\vec{P}(\vec{r})$  é um campo real que requer uma condição subsidiária sobre as componentes de Fourier, isto é,

$$\vec{P}_{\vec{w}} = \vec{P}_{-\vec{w}}$$

Quando um elétron está presente na rede, temos que

$$\vec{P}(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi\epsilon} \vec{D}(\vec{r}) \quad 2-16$$

Desejamos adicionar ao membro direito da eq. 2-14, um termo devido a presença do elétron. Já que  $\vec{D}(\vec{r})$  é o campo externo aplicado e  $\vec{P}(\vec{r})$  o campo dipolar induzido, a densidade de energia de interação, como já vimos, é

$$-\vec{D}(\vec{r}) \cdot \vec{P}(\vec{r}) \quad 2-17$$



Usaremos agora a formulação Lagrangeana da teoria de campo para o campo  $\vec{P}(\vec{r})$  na presença de um elétron. Consideremos a densidade Lagrangeana

$$\tilde{L}' = \frac{\mu}{2} \{ \dot{\vec{P}}^2(\vec{r}) - \omega^2 \vec{P}^2(\vec{r}) \} + \vec{D}(\vec{r}) \cdot \vec{P}(\vec{r}) \quad 2-18$$

A Lagrangeana é definida por

$$L' = \int \tilde{L}'(\vec{r}) d^3\vec{r} \quad 2-19$$

Se tomarmos  $\vec{P}(\vec{r})$  como coordenada generalizada  $\vec{q}_r$  a cada ponto  $\vec{r}$ , então os momentos conjugados generalizados  $\vec{p}_r$  são

$$\vec{p}_r = \frac{\delta \tilde{L}'}{\delta \dot{\vec{q}}_r}$$

com  $\delta$  indicando a variação funcional.

A Hamiltoniana  $H'$  é definida como

$$H' = \int (\dot{\vec{q}}_r \cdot \vec{p}_r - \tilde{L}'(\vec{r})) d^3r$$

temos agora

$$\vec{p}_r = \frac{\delta \tilde{L}'(\vec{r})}{\delta \dot{\vec{P}}(\vec{r})} = \mu \dot{\vec{P}}(\vec{r})$$

daí

$$H' = \int \left[ \frac{\mu}{2} \{ \dot{\vec{P}}^2(\vec{r}) + \omega^2 \vec{P}^2(\vec{r}) \} - \vec{D}(\vec{r}) \cdot \vec{P}(\vec{r}) \right] d^3\vec{r} \quad 2-20$$

as equações do movimento são dadas em geral por

$$\dot{q} = \frac{\partial H'}{\partial p} \quad ; \quad \dot{p} = - \frac{\partial H'}{\partial q}$$

No nosso caso  $\vec{q}_r = \vec{P}(\vec{r})$  e  $\vec{p}_r = \dot{\vec{P}}(\vec{r})$ , com isso a expressão 2-20

fica

$$H' = \int \tilde{H}'(\vec{r}) d^3r = \int \left\{ \frac{1}{2} \left[ \frac{p_r^2}{\mu} + \mu\omega^2 q_r^2 \right] - \vec{D}(\vec{r}) \cdot \vec{q}_r \right\} d^3r$$

As equações do movimento são

$$\dot{q}_r = \frac{\delta \tilde{H}'(\vec{r})}{\delta p_r} = \frac{p_r}{\mu}$$

e

$$\dot{p}_r = - \frac{\delta \tilde{H}'(\vec{r})}{\delta q_r} = -\mu\omega^2 q_r + \vec{D}(\vec{r})$$

combinadas dão

$$\ddot{q}_r = \frac{\dot{p}_r}{\mu} = \{-\mu\omega^2 q_r + \vec{D}(\vec{r})\} \frac{1}{\mu} = -\omega^2 q_r + \frac{1}{4} \vec{D}(\vec{r})$$

ou

$$\ddot{\vec{P}} + \omega^2 \vec{P} = \frac{1}{\mu} \vec{D}(\vec{r}) \quad 2-21$$

Na ausência de fontes, quando  $\vec{D} = 0$ , essa expressão reduz-se a 2-14, isto indica que a Lagrangeana  $L'$ , que escolhemos, é aceitável para nosso problema. Além disso a Hamiltoniana  $H'$  é modificada ao introduzir-se  $\vec{D}(\vec{r}) \neq 0$  em 2-20 pela adição de um termo correspondente a energia de interação entre uma fonte caracterizada por  $\vec{D}(\vec{r})$  e um campo de polarização  $\vec{P}$ . Como a equação 2-16 dá a relação entre  $\vec{P}(\vec{r})$  e  $\vec{D}(\vec{r})$  para esse problema, podemos determinar o parâmetro  $\mu$  considerando 2-21 no limite estático onde  $\dot{\vec{P}} = 0$ . Portanto

$$\omega^2 = \frac{1}{\mu} 4\pi\bar{\epsilon}$$

Podemos agora obter a equação do movimento para o elétron. As

coordenadas do elétron aparecerão parametricamente na expressão para  $\vec{D}$ . Além de sua interação com a rede o elétron tem energia cinética. Modificamos então a Lagrangeana em 2-18 para

$$L = L' + \frac{1}{2} m \dot{\vec{r}}'^2$$

onde  $m$  pode ser tomado como a massa de banda do elétron. Se  $\vec{D}$  depende somente da coordenada  $\vec{r}'$  do elétron e não do momento  $\vec{p}'$  a nossa Hamiltoniana fica

$$H = \dot{\vec{r}}' \cdot \vec{p}' + \int \dot{\vec{q}}_r \cdot \vec{p}_r d^3r - L = \frac{1}{2m} \vec{p}'^2 + H' \quad 2-22$$

já que  $\vec{p}' = \frac{\partial L}{\partial \dot{\vec{r}}'} = m \dot{\vec{r}}'$ .

Finalmente com os resultados 2-6 e 2-22, podemos determinar a equação do movimento para o elétron

$$\dot{\vec{q}}' = \dot{\vec{r}}' = \frac{\partial H}{\partial \vec{p}'} = \frac{\partial}{\partial \vec{p}'} \left\{ \frac{1}{2m} \vec{p}'^2 + H' \right\} = \frac{\vec{p}'}{m}$$

$$\ddot{\vec{p}}' = - \frac{\partial H}{\partial \vec{q}'} = - \frac{\partial H'}{\partial \vec{q}'} = - e \nabla' \phi(\vec{r}') \quad \therefore \quad \ddot{\vec{r}}' = - \frac{e}{m} \nabla' \phi(\vec{r}')$$

Resumindo temos

$$H = H_{\vec{p}} + H_{el} + H_{int}$$

onde

$$H_{\vec{p}} = \frac{\mu}{2} \int \{ \dot{\vec{P}}(\vec{r}) + \omega^2 \vec{P}(\vec{r}) \} d^3r \quad \text{com} \quad \mu = \frac{4\pi\epsilon}{\omega^2} \quad 2-23$$

$$H_{el} = \frac{1}{2m} \vec{p}'^2 = - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla'^2 \quad 2-24$$

$$H_{int} = e\phi(\vec{r}'_e) \quad 2-25$$

Note que  $H_{int}$  depende das variáveis do campo assim como de  $\vec{r}'_e$ , embora essa dependência não esteja explicitamente mostrada em 2-25.

É matematicamente conveniente considerar uma região cúbica do volume do sólido  $V = L^3$ , que é grande comparada ao fenômeno em consideração. Para o polaron isto significa que o cristal todo é dividido em regiões adjacentes de volume  $V$ , cada um contendo um elétron extra. A condição periódica implica que o cristal é infinito em extensão. A repulsão Coulombiana entre esses elétrons introduz uma energia de interação infinita. Podemos eliminar explicitamente essa energia infinita fazendo uma modificação no modelo, escrevendo como em 2-15

$$\vec{P}(\vec{r}, t) = \sum_w \vec{P}_w(t) e^{i\vec{w} \cdot \vec{r}} \quad 2-26$$

onde a condição de contorno periódica sobre  $V$  requer  $w = \frac{2\pi n}{L}$  com  $n = (n_1; n_2; n_3) = (1, 2, \dots, \infty; 1, 2, \dots, \infty; 1, 2, \dots, \infty)$ . É costume quantizar um campo como  $\vec{P}(\vec{r})$  admitindo que as variáveis conjugadas  $\vec{Q}(\vec{r}) = \vec{P}(\vec{r})$  e  $\dot{\vec{P}}(\vec{r}) = \mu \dot{\vec{P}}(\vec{r})$  obedecem as regras de comutações

$$[\vec{Q}_j(\vec{r}), \vec{P}_j(\vec{r}')] = i\hbar \delta_{jj} \delta(\vec{r} - \vec{r}') \quad 2-27$$

Essas regras são usualmente transferidas às componentes de Fourier. Entretanto a realidade de  $\vec{P}$  e  $\dot{\vec{P}}$  impõe uma condição subsidiária conforme já vimos, portanto os  $\vec{P}_w$  não são todos independentes. Podemos, então, introduzir um campo complexo  $\vec{B}(\vec{r})$ , como combinação linear de  $\vec{Q}$  e  $\dot{\vec{P}}$ . Todos os coeficientes de Fourier de  $\vec{B}$  serão independentes, e podem portanto serem quantizados. Tomemos a transformação

$$\vec{B}(\vec{r}) = \sqrt{\frac{\mu\omega}{2\hbar}} (\vec{P}(\vec{r}) + \frac{i}{\omega} \dot{\vec{P}}(\vec{r}))$$

2-28

$$\vec{B}^+(\vec{r}) = \sqrt{\frac{\mu\omega}{2\hbar}} (\vec{P}(\vec{r}) - \frac{i}{\omega} \dot{\vec{P}}(\vec{r}))$$

observe que a 2-23 representa um conjunto infinito de osciladores harmônicos. Usando a condição  $\nabla \times \vec{P} = 0$ , escrevemos os coeficientes de Fourier de 2-28

$$\vec{B}(\vec{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{w}} \frac{\vec{w}}{|\vec{w}|} b_{\omega}(t) e^{i\vec{w} \cdot \vec{r}}$$

2-29

$$\vec{B}^+(\vec{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{w}} \frac{\vec{w}}{|\vec{w}|} b_{\omega}^+(t) e^{-i\vec{w} \cdot \vec{r}}$$

Da transformação 2-28 é possível mostrar que  $\vec{B}(\vec{r})$  e  $\vec{B}^+(\vec{r})$  obedecem a regra de comutação

$$[\vec{B}_j(\vec{r}), B_{j'}^+(\vec{r}')] = \delta_{jj'} \delta(\vec{r} - \vec{r}')$$

2-30

usando 2-27.

De 2-29 e 2-30 obtemos

$$[b_{\vec{w}}, b_{\vec{w}'}^+] = \delta_{\vec{w}, \vec{w}'}$$

22-31

$$[b_{\vec{w}}, b_{\vec{w}'}] = [b_{\vec{w}}^+, b_{\vec{w}'}^+] = 0$$

Invertendo agora as equações 2-28

$$\vec{P}(\vec{r}) = \sqrt{\frac{\hbar}{2\mu\omega}} (\vec{B}^+(\vec{r}) + \vec{B}(\vec{r}))$$

2-32

$$\dot{\vec{P}}(\vec{r}) = \sqrt{\frac{\hbar\omega}{2\mu}} (\vec{B}^+(\vec{r}) - \vec{B}(\vec{r}))$$

Essas expressões levadas na expressão dada para  $H_{\vec{P}}$  na 2-23 com

uso das 2-29 e 2-31 fornecem

$$H_{\vec{p}} = \sum \hbar \omega (b_{\vec{w}}^+ b_{\vec{w}} + \frac{1}{2}) \quad 2-33$$

O termo  $\sum_{\vec{w}} \frac{1}{2} \hbar \omega$  dá o ponto zero de energia infinita já mencionada. Esse termo deve ser negligenciado uma vez que não contribue a dinâmica do sistema, embora deva ser incluído nos cálculos que renormaliza a frequência  $\omega$  dos fonons.  $b_{\vec{w}}^+$  e  $b_{\vec{w}}$  é interpretado como operador criação e destruição, e  $b_{\vec{w}}^+ b_{\vec{w}}$  como operador número. Aqui, chamamos de "fonon" o quanta do campo.

Desejamos agora resolver  $H_{int}$  em termos dos operadores  $b_{\vec{w}}^+$  e  $b_{\vec{w}}$ . De 2-29 e 2-32 obtemos

$$\vec{P}(\vec{r}) = \sqrt{\frac{\hbar}{2\mu\omega v}} \sum_{\vec{w}} \frac{\vec{w}}{|\vec{w}|} [b_{\vec{w}}^+ e^{-i\vec{w} \cdot \vec{r}} + b_{\vec{w}} e^{i\vec{w} \cdot \vec{r}}]$$

e como  $\nabla \phi(\vec{r}) = 4\pi \vec{P}(\vec{r})$

$$\phi(\vec{r}) = 4\pi \sqrt{\frac{\hbar}{2\mu\omega v}} i \sum_{\vec{w}} \frac{1}{|\vec{w}|} [b_{\vec{w}}^+ e^{-i\vec{w} \cdot \vec{r}} - b_{\vec{w}} e^{i\vec{w} \cdot \vec{r}}] \quad 2-34$$

O termo em  $\phi$  com  $|\vec{w}| = 0$  é infinito. Pode-se mostrar que a introdução de uma densidade de carga uniforme positiva,  $|e|/v$ , cancela esse termo em  $\phi$ , e daí em  $H_{int}$ , devido sua interação Coulombiana com elétron.

Agora é útil introduzir variáveis adimensionais porque isso mostra que a Hamiltoniana do sistema depende essencialmente de um único parâmetro, isto é, da constante de acoplamento definida por

$$\alpha = \left( \frac{1}{\epsilon_{\infty}} - \frac{1}{\epsilon} \right) e^2 \sqrt{\frac{m}{2\omega \hbar^3}} \quad 2-35$$

Tomemos então as variáveis adimensionais

$$\vec{x} = u\vec{r}^1 \quad ; \quad s = u^3 v \quad ; \quad \vec{v} = \vec{w}/u \quad 2-36$$

onde  $u$  é o número de onda definido por

$$\frac{\hbar^2 u^2}{2m} = \hbar\omega \quad \text{ou} \quad u = \left(\frac{2m\omega}{\hbar}\right)^{1/2} \quad 2-37$$

com isso nossa Hamiltoniana será

$$\frac{H}{\hbar\omega} = -\nabla_x^2 + \sum_w (b_w^\dagger b_w) + i\sqrt{\frac{4\pi\alpha}{s}} \sum_v \frac{1}{|v|} (b_v^\dagger e^{-i\vec{v}\cdot\vec{x}} - b_v e^{i\vec{v}\cdot\vec{x}}) \quad 2-38$$

Embora várias constantes físicas ( $\omega$ ,  $\bar{\epsilon}$ ,  $m$  e  $e$ ), entrem em jogo, vemos de 2-38, que a energia do sistema, expressa em unidade de  $\hbar\omega$ , envolve somente uma combinação adimensional dessas constantes. Essa combinação é justamente a nossa constante de acoplamento definida em 2-35.

## CAPÍTULO III

### FUNÇÃO DE GREEN

#### III - 1 INTRODUÇÃO

A utilização do formalismo das funções de Green em nossos cálculos, torna conveniente uma apresentação formal desta técnica, para o que dedicaremos este capítulo. Desejando uma maior objetividade daremos ênfase aos aspectos que serviram de apoio à consecução de nosso trabalho.

Esta técnica tem se mostrado bastante eficaz no tratamento do problema de muitos corpos, motivo pelo qual ela é encontrada em numerosas publicações no campo da Física Teórica.

A função de Green carrega importantes informações sobre as propriedades que caracterizam o sistema, de forma que seu conhecimento nos permitirá extrair tais informações de uma forma simples e elegante.

Consideraremos, inicialmente, a função de Green  $G$  para temperatura igual a zero, que fornece a energia e o tempo de vida dos estados excitados. Depois introduziremos a função Green dependente da temperatura  $\bar{G}$  que descreve o sistema em equilíbrio termodinâmico, e para concluir, será visto a função de Green dependente do tempo  $G$  para  $T \neq 0$ , que nos dá informações sobre o estado excitado do sistema para temperatura diferente de zero.



III - 2 FUNÇÃO DE GREEN PARA  $T = 0$

Definimos a função de Green para uma partícula como

$$G_{\alpha\beta}(\vec{r}t, \vec{r}'t') = -i \langle \Psi_0 | T [\hat{\psi}_\alpha(\vec{r}t) \hat{\psi}_\beta^+(\vec{r}'t')] | \Psi_0 \rangle \quad 3-1$$

onde  $|\Psi_0\rangle$  é o estado fundamental do sistema de partículas na representação de Heisenberg satisfazendo

$$\hat{H}|\Psi_0\rangle = E|\Psi_0\rangle$$

e  $\hat{\psi}_\alpha(\vec{r}t)$  é um operador de Heisenberg com dependência temporal da forma

$$\hat{\psi}_\alpha(\vec{r}, t) = e^{iHt/\hbar} \hat{\psi}_\alpha(\vec{r}) e^{-iHt/\hbar}$$

os índices  $\alpha$  e  $\beta$  denotam o spin da partícula e o operador  $T$  é definido por

$$T[\hat{\psi}_\alpha(\vec{r}t) \hat{\psi}_\beta^+(\vec{r}'t')] = \begin{cases} \hat{\psi}_\alpha(\vec{r}t) \hat{\psi}_\beta^+(\vec{r}'t') & t > t' \\ \pm \hat{\psi}_\beta^+(\vec{r}'t') \hat{\psi}_\alpha(\vec{r}t) & t < t' \end{cases}$$

onde o sinal + e - referem-se a bosons e fermions respectivamente. Com isso podemos reescrever a função de Green dada em 3-1 por

$$iG_{\alpha\beta}(\vec{r}t, \vec{r}'t') = \begin{cases} \langle \Psi_0 | \hat{\psi}_\alpha(\vec{r}t) \hat{\psi}_\beta^+(\vec{r}'t') | \Psi_0 \rangle & t > t' \\ \pm \langle \Psi_0 | \hat{\psi}_\beta^+(\vec{r}'t') \hat{\psi}_\alpha(\vec{r}t) | \Psi_0 \rangle & t < t' \end{cases} \quad 3-2$$

Consideraremos por ora o caso em que

$$G_{\alpha\beta} = \delta_{\alpha\beta} G$$

que ocorre quando não temos campo magnético aplicado e na ausência

do ferromagnetismo. Vamos admitir também invariância temporal e espacial de modo que a função de Green depende somente da diferença das coordenadas  $\vec{r}-\vec{r}'$  e do intervalo de tempo  $t-t'$ . Se desejarmos  $G(\vec{p}, E)$ , podemos obtê-la, neste caso, a partir da transformada de Fourier

$$G(\vec{r}-\vec{r}', t-t') = \int G(\vec{p}, E) e^{i\vec{p}\cdot(\vec{r}-\vec{r}')/\hbar} e^{-E(t-t')/\hbar} \frac{d^3p dE}{(2\pi)^4} \quad 3-3$$

Tomando como exemplo o caso simples de um sistema de fermions não interagentes, veremos que  $G(\vec{r}-\vec{r}', t-t')$  pode ser obtido facilmente. Por outro lado a hamiltoniana para este sistema torna-se

$$\hat{H}_0 = \sum_{\vec{p}} E_0(\vec{p}) \hat{n}_{\vec{p}}$$

Visto que  $\hat{\psi}(\vec{r}, t)$  está relacionado a representação de Schrödinger por

$$\hat{\psi}(\vec{r}, t) = e^{iH_0 t/\hbar} \hat{\psi}(\vec{r}) e^{-iH_0 t/\hbar} \quad 3-4$$

onde

$$\begin{aligned} \hat{\psi}(\vec{r}) &= \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{p}} e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar} \hat{a}_{\vec{p}} \\ \hat{\psi}^+(\vec{r}) &= \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{p}} e^{-i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar} \hat{a}_{\vec{p}}^\dagger \end{aligned} \quad 3-5$$

fica

$$\begin{aligned} \hat{\psi}(\vec{r}, t) &= \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{p}} e^{iH_0 t/\hbar} \hat{c}_{\vec{p}} e^{-iH_0 t/\hbar} e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar} \\ \hat{\psi}(\vec{r}, t) &= \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{p}} \hat{c}_{\vec{p}} e^{i[\vec{p}\cdot\vec{r} - E(\vec{p})t]/\hbar} \end{aligned} \quad 3-6$$

Neste caso a função de Green dada em 3-2 fica

$$\begin{aligned}
 G^0(\vec{r}-\vec{r}', t-t') &= -i \langle \Psi_0 | T [\hat{\psi}(\vec{r}, t) \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}', t')] | \Psi_0 \rangle \\
 &= -\frac{i}{v} \sum_{\vec{p}} \langle \Psi_0 | T [\hat{c}_{\vec{p}} \hat{c}_{\vec{p}}^\dagger] | \Psi_0 \rangle e^{i [\vec{p} \cdot (\vec{r}-\vec{r}') - E(\vec{p})(t-t')] / \hbar}
 \end{aligned} \tag{3-7}$$

Aqui  $|\Psi_0\rangle$  representa o mar de Fermi.

Usando a regra de comutação  $[\hat{c}_{\vec{p}}, \hat{c}_{\vec{p}}^\dagger]_+ = 1$  e lembrando que os n\u00edveis com  $|\vec{p}| < p_f$  est\u00e3o ocupados, com  $\hat{n}_{\vec{p}} = \hat{c}_{\vec{p}}^\dagger \hat{c}_{\vec{p}} = 1$  e os n\u00edveis com  $|\vec{p}| > p_f$  est\u00e3o desocupados dando  $\hat{n}_{\vec{p}} = 0$ , obtemos

para  $t > t'$

$$G^0(\vec{r}-\vec{r}', t-t') = -\frac{i}{v} \sum_{\vec{p}} e^{i [\vec{p} \cdot (\vec{r}-\vec{r}') - E(\vec{p})(t-t')] / \hbar} \quad \text{para } |\vec{p}| > p_f \tag{3-8}$$

$$G^0(\vec{r}-\vec{r}', t-t') = 0 \quad \text{para } |\vec{p}| < p_f$$

para  $t < t'$

$$G^0(\vec{r}-\vec{r}', t-t') = \frac{i}{v} \sum_{\vec{p}} e^{i [\vec{p} \cdot (\vec{r}-\vec{r}') - E(\vec{p})(t-t')] / \hbar} \quad \text{para } |\vec{p}| < p_f \tag{3-9}$$

$$G^0(\vec{r}-\vec{r}', t-t') = 0 \quad \text{para } |\vec{p}| > p_f$$

Reunindo 3-8 e 3-9 a  $G^0$  fica

$$\begin{aligned}
 G^0(\vec{r}-\vec{r}', t-t') &= -\frac{i}{v} \sum_{\vec{p}} \{ \theta(t-t') \theta(|\vec{p}| - p_f) - \\
 &\quad - \theta(t'-t) \theta(p_f - |\vec{p}|) \} e^{i [\vec{p} \cdot (\vec{r}-\vec{r}') - E(\vec{p})(t-t')] / \hbar}
 \end{aligned} \tag{3-10}$$

no limite  $v \rightarrow \infty$  resulta

$$G^0(\vec{r}-\vec{r}', t-t') = - \frac{i}{(2\pi)^3} \int \{ \theta(t-t') \theta(|\vec{p}|-p_f) - \theta(t'-t) \theta(p_f-|\vec{p}|) \} e^{i[\vec{p} \cdot (\vec{r}-\vec{r}') - E(\vec{p})(t-t')]} / \hbar d^3p \quad 3-11$$

onde

$$\theta(x) = \begin{cases} 1 & \text{se } x > 0 \\ 0 & \text{se } x < 0 \end{cases} \quad 3-12$$

A representação integral da função  $\theta(t-t')$  é dada por

$$\theta(t-t') = - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi i} \frac{e^{-i\omega(t-t')}}{\omega + i\delta} \quad 3-13$$

note que se  $t-t' > 0$  esta integral deve ser efetuada sobre um semi-círculo no semi-plano  $\text{Im } \omega < 0$  tendo então resíduo -1 devido o polo em  $\omega = -i\delta$ , satisfazendo portanto  $\theta(t-t') = 1$ . Se por outro lado  $t-t' < 0$  então  $\theta(t-t') = 0$ , e isto nos sugere fazer a integração curvilínea sobre o semi-plano superior o que dá zero, porque nesta região o integrando não tem singularidades.

Daí substituindo a expressão 3-13 na 3-11 teremos

$$G^0(\vec{r}-\vec{r}', t-t') = \frac{1}{(2\pi)^4} \int d^3p dE \left\{ \frac{\theta(|\vec{p}|-p_f)}{E-E(\vec{p})+i\delta} + \frac{\theta(p_f-|\vec{p}|)}{E-E(\vec{p})-i\delta} \right\} e^{i[\vec{p} \cdot (\vec{r}-\vec{r}') - E(t-t')]} / \hbar$$

comparando com a transformada dada na expressão 3-3 temos

$$G^0(\vec{p}, E) = \frac{\theta(|\vec{p}| - p_f)}{E - E(\vec{p}) - i\delta} + \frac{\theta(p_f - |\vec{p}|)}{E - E(\vec{p}) + i\delta}$$

que pode ser escrita de outra forma

$$G^0(\vec{p}, E) = \frac{1}{E - E(\vec{p}) + i\delta \operatorname{sign}(|\vec{p}| - p_f)} \quad 3-14$$

observando que

$$\operatorname{sign}(|\vec{p}| - p_f) = \begin{cases} 1 & \text{para } |\vec{p}| > p_f \\ -1 & \text{para } |\vec{p}| < p_f \end{cases}$$

### III - 3 PROPRIEDADES ANALÍTICAS DA FUNÇÃO DE GREEN

Desejamos agora deduzir algumas propriedades da função de Green exata. No ítem anterior chegamos a uma expressão para  $G(\vec{p}, E)$  de uma partícula livre. Considerando ainda o caso de fermions tentaremos generalizar este resultado para a situação em que existe interação entre as partículas. Temos

$$G(\vec{r}t, \vec{r}'t') = -i \langle \Psi_0 | T [\hat{\psi}(\vec{r}t) \hat{\psi}^+(\vec{r}'t')] | \Psi_0 \rangle \quad 3-15$$

Inserindo um conjunto completo de estados de Heisenberg entre os operadores de campo teremos

$$G(\vec{r}t, \vec{r}'t') = -i \sum_n \{ \langle \Psi_0 | \hat{\psi}(\vec{r}t) | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | \hat{\psi}^+(\vec{r}'t') | \Psi_0 \rangle \theta(t-t') - \langle \Psi_0 | \hat{\psi}^+(\vec{r}'t') | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | \hat{\psi}(\vec{r}t) | \Psi_0 \rangle \theta(t'-t) \} \quad 3-16$$

Se o estado  $|\Psi_0\rangle$  contém  $N$  partículas, o estado  $|\Psi_n\rangle$  deve conter  $N \pm 1$  de modo conveniente para o operador  $\hat{\psi}(\vec{r}t)$  ou para  $\hat{\psi}^+(\vec{r}t)$ , caso

contrário seus elementos de matriz são nulos. Se considerarmos um sistema homogêneo podemos escrever a dependência espacial do operador  $\hat{\psi}(\vec{r})$  como

$$\hat{\psi}(\vec{r}) = e^{-i\hat{\vec{P}} \cdot \vec{r} / \hbar} \hat{\psi}(0) e^{i\hat{\vec{P}} \cdot \vec{r} / \hbar} \quad 3-17$$

que satisfaz

$$\hat{\vec{P}}|\Psi_0\rangle = 0 \quad \text{e} \quad \hat{\vec{P}}|\Psi_n\rangle = \vec{P}_n|\Psi_n\rangle \quad 3-18$$

Daí, usando 3-17, 3-18 e a transformação de representação dada por  $\psi(\vec{r}t) = e^{iHt/\hbar} \psi(\vec{r}) e^{-iHt/\hbar}$ , a expressão 3-16 fica

$$\begin{aligned} G(\vec{r}-\vec{r}'; t-t') &= -\sum_n \{ \theta(t-t') e^{-i(E_n - E_0)(t-t')/\hbar} e^{i\vec{P}_n \cdot (\vec{r}-\vec{r}')/\hbar} \times \\ &\times |\langle \Psi_0 | \hat{\psi}(0) | \Psi_n \rangle|^2 - \theta(t'-t) e^{i(E_n - E_0)(t-t')/\hbar} \times \\ &\times e^{-i\vec{P}_n \cdot (\vec{r}-\vec{r}')/\hbar} |\langle \Psi_n | \hat{\psi}(0) | \Psi_0 \rangle|^2 \} \end{aligned} \quad 3-19$$

Que nos mostra que  $G(\vec{r}t, \vec{r}'t')$  depende de  $\vec{r}-\vec{r}'$  e  $t-t'$  explicitamente.

Note que para  $t > t'$  a soma em 3-19 é feita sobre o estado com  $N + 1$  partículas e para  $t < t'$  para o estado com  $N - 1$  partículas. In troduziremos a seguir a seguinte notação

$$E_n(N+1) - E_0(N+1) + E_0(N+1) - E_0(N) = E_n + \mu \quad 3-20$$

onde

$$E_n = E_n(N+1) - E_0(N+1)$$

é a energia de excitação do sistema de  $N + 1$  partículas e

$$\mu = E_0(N+1) - E_0(N)$$

é a variação da energia do estado fundamental quando uma partícula é criada no sistema de N partículas.

Para  $t < t'$  adotaremos a mesma notação, assim

$$E_n(N-1) - E_0(N-1) + E_0(N-1) - E_0(N) = E'_n - \mu'$$

negligenciaremos entretanto a diferença entre  $E_n$  e  $E'_n$  e  $\mu$  e  $\mu'$ , no limite termodinâmico. Reescrevemos então a expressão 3-19

$$\begin{aligned} G(\vec{r}-\vec{r}', t-t') &= -i \sum_n [\theta(t-t') e^{-i(E_n + \mu)(t-t')/\hbar} e^{i\vec{P}_n \cdot (\vec{r}-\vec{r}')/\hbar} \\ &\times |\psi_{0n}(0)|^2 - \theta(t'-t) e^{i(E_n - \mu)(t-t')/\hbar} e^{-i\vec{P}_n \cdot (\vec{r}-\vec{r}')/\hbar} \\ &\times |\psi_{n0}(0)|^2] \end{aligned} \quad 3-21$$

A transformada de Fourier de  $G(\vec{r}, t)$  será

$$\begin{aligned} G(\vec{p}, E) &= \int d(\vec{r}-\vec{r}') \int_{-\infty}^{\infty} d(t-t') e^{-i\vec{p} \cdot (\vec{r}-\vec{r}')/\hbar} e^{iE(t-t')/\hbar} G(\vec{r}-\vec{r}', t-t') \\ &= -i \sum_n \{ |\psi_{0n}(0)|^2 \int_0^{\infty} d(t-t') e^{i(E - E_n - \mu)(t-t')/\hbar} \\ &\times e^{-i(\vec{p} - \vec{P}_n) \cdot (\vec{r}-\vec{r}')/\hbar} - |\psi_{n0}(0)|^2 \int_{-\infty}^0 d(t-t') \\ &\times e^{i(E + E_n - \mu)(t-t')/\hbar} e^{-i(\vec{p} + \vec{P}_n) \cdot (\vec{r}-\vec{r}')/\hbar} \} \\ G(\vec{p}, E) &= (2\pi)^3 \sum_n \left\{ \frac{|\psi_{0n}(0)|^2 \delta_{\vec{p}, \vec{P}_n}}{E - E_n - \mu + i\delta} + \frac{|\psi_{n0}(0)|^2 \delta_{\vec{p}, -\vec{P}_n}}{E + E_n - \mu - i\delta} \right\} \end{aligned}$$

A função  $\delta$  presente obriga o estado  $|\psi_n\rangle$  conter apenas momentum  $\vec{P}_n = \vec{p}$ , assim

$$G(\vec{p}, E) = (2\pi)^3 \sum_n \left\{ \frac{|\psi_{0n}^{\vec{p}}(0)|^2}{E - E_n - \mu + i\delta} + \frac{|\bar{\psi}_{n0}^{\vec{p}}(0)|^2}{E + E_n - \mu - i\delta} \right\} \quad 3-22$$

Definiremos a seguir a função espectral como algo da forma

$$A(\vec{p}, E') = (2\pi)^3 \sum_n |\psi_{0n}^{\vec{p}}(0)|^2 \delta(E' - E_n) \quad 3-23$$

$$B(\vec{p}, E') = (2\pi)^3 \sum_n |\bar{\psi}_{n0}^{\vec{p}}(0)|^2 \delta(E' - E_n)$$

que torna possível escrever  $G(\vec{p}, E)$  como

$$G(\vec{p}, E) = \int_0^\infty \left\{ \frac{A(\vec{p}, E')}{E - E' - \mu + i\delta} + \frac{B(\vec{p}, E')}{E + E' - \mu - i\delta} \right\} dE' \quad 3-24$$

convém notar que a energia de excitação  $E_n$ , é sempre positiva.

A forma dada a função de Green  $G(\vec{p}, E)$  na expressão 3-24 é bastante conveniente para o estudo de suas propriedades analíticas. Para separar a parte real e imaginária de  $G$  vamos usar a relação

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{F(x)}{x - x_0 \pm i\delta} = P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{F(x)}{x - x_0} \mp i\pi F(x_0)$$

Logo

$$G(\vec{p}, E) = P \int_0^\infty \left\{ \frac{A(\vec{p}, E')}{E - E' - \mu} + \frac{B(\vec{p}, E')}{E + E' - \mu} \right\} dE' - i\pi \{A(\vec{p}, E - \mu) - B(\vec{p}, \mu - E)\}$$

e portanto

$$\text{Re} G(\vec{p}, E) = P \int_0^\infty \left\{ \frac{A(\vec{p}, E')}{E - E' - \mu} + \frac{B(\vec{p}, E')}{E + E' - \mu} \right\} dE' \quad 3-25$$

$$\text{Im} G(\vec{p}, E) = \begin{cases} -\pi A(\vec{p}, E - \mu) & \text{para } E > \mu \\ \pi B(\vec{p}, \mu - E) & \text{para } E < \mu \end{cases} \quad 3-26$$



As partes real e imaginária acima estão relacionadas por

$$\operatorname{Re}G(\vec{p}, E) = \frac{P}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\operatorname{Im}G(\vec{p}, E') \operatorname{sinal}(E' - \mu)}{E' - E} dE' \quad 3-27$$

que pode ser facilmente checada pela substituição da 3-26.

A expressão 3-27 é a relação de dispersão dada de uma forma inconveniente visto que a função de Green  $G(\vec{p}, E)$  analisada no plano complexo  $E$  não é analítica nem no semi-plano inferior e nem no semi-plano superior. Os polos estão distribuídos neste plano conforme a fig. 3 abaixo

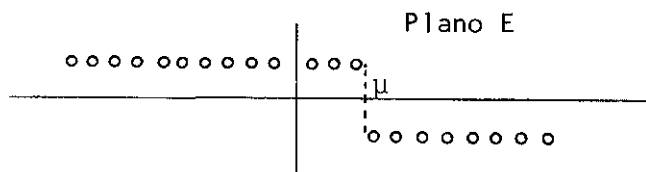


Figura 3

Uma função que é analítica no semi-plano superior é uma que tem a relação de dispersão como

$$\operatorname{Re}G(\vec{p}, E) = \frac{P}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\operatorname{Im}G(\vec{p}, E')}{E' - E} dE' \quad 3-28$$

e no semi-plano inferior

$$\operatorname{Re}G(\vec{p}, E) = - \frac{P}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\operatorname{Im}G(\vec{p}, E')}{E' - E} dE' \quad 3-29$$

Vamos etiquetar as funções definidas em 3-28 e 3-29 por  $G_R$  (retardada) e  $G_A$  (avançada) respectivamente. Estas funções estão relacionadas com  $G$  através de

$$\begin{aligned} \operatorname{Re}G &= \operatorname{Re}G_R = \operatorname{Re}G_A \\ \operatorname{Im}G_R &= \operatorname{Im}G \operatorname{sinal}(E - \mu) \\ \operatorname{Im}G_A &= -\operatorname{Im}G \operatorname{sinal}(E - \mu) \end{aligned} \quad 3-30$$



é fácil verificar daí que

$$G_R(\vec{p}, E) = \int_0^\infty \left\{ \frac{A(\vec{p}, E')}{E - E' - \mu + i\delta} + \frac{B(\vec{p}, E')}{E + E' - \mu + i\delta} \right\} dE' \quad 3-31$$

e

$$G_A(\vec{p}, E) = \int_0^\infty \left\{ \frac{A(\vec{p}, E')}{E - E' - \mu - i\delta} + \frac{B(\vec{p}, E')}{E + E' - \mu - i\delta} \right\} dE'$$

podemos escrever ainda a partir de 3-30

$$G_R(\vec{p}, E) = \begin{cases} G(\vec{p}, E) & \text{para } E > \mu \\ G^*(\vec{p}, E) & \text{para } E < \mu \end{cases} \quad 3-32$$

$$G_A(\vec{p}, E) = \begin{cases} G^*(\vec{p}, E) & \text{para } E > \mu \\ G(\vec{p}, E) & \text{para } E < \mu \end{cases}$$

Vimos que as funções complexas  $G_R$  e  $G_A$  são analíticas nos semi-planos superior e inferior respectivamente. As relações obtidas em 3-32 indicam então que  $G_R$  e  $G_A$  são prolongamentos analíticos de  $G$  a partir de  $E$  real maior que  $\mu$  e de  $E$  real menor que  $\mu$  respectivamente. De 3-32 podemos mostrar também que

$$G_R(\vec{p}, E) = G_A^*(\vec{p}, E) \quad 3-33$$

### III - 4 SIGNIFICADO FÍSICO DA FUNÇÃO DE GREEN

Consideremos um sistema de fermions no estado fundamental denotado na representação de interação por  $|\Phi_I^0(t')\rangle$ . Se uma partícula com momentum  $\vec{p}$  é criada no instante  $t'$  temos

$$\hat{C}_{Ip}^+(t') |\phi_I^0(t')\rangle \quad 3-34$$

após um intervalo de tempo  $t-t'$  o sistema evolue para um estado dado por

$$|\phi_I(t)\rangle = S(t,t') \hat{C}_{Ip}^+(t') |\phi_I^0(t')\rangle \quad 3-35$$

onde  $S(t,t')$  é o operador evolução no tempo.

Suponhamos agora que a partícula é colocada no estado fundamental, mas, no instante  $t$

$$|\phi_I^1(t)\rangle = \hat{C}_{Ip}^+(t) S(t,t') |\phi_I^0(t')\rangle = \hat{C}_{Ip}^+(t) |\phi_I^0(t)\rangle \quad 3-36$$

A superposição dos estados 3-35 com 3-36 será

$$\langle \phi_I^1(t) | \phi_I(t) \rangle = \langle \phi_I^0(t) | \hat{C}_{Ip}^+(t) S(t,t') \hat{C}_{Ip}^+(t') |\phi_I^0(t')\rangle \quad 3-37$$

Lembramos que

$$|\phi_I^0(t)\rangle = S(t,-\infty) |\phi_0\rangle = S(t,-\infty) |\phi_I^0(-\infty)\rangle$$

onde  $|\phi_I^0(-\infty)\rangle = |\phi_0\rangle$  representa o sistema sem interação, que o operador  $S$  faz evoluir com a interação crescendo lentamente até  $|\phi_I^0(t)\rangle$ .

Para  $t' = -\infty$  o estado  $|\phi_I^0(-\infty)\rangle$  coincide com  $|\phi_0\rangle$  na representação de Heisenberg, adiantamos ainda a transformação

$$\hat{C}_{Ip}^+(t) = S(t,-\infty) \hat{C}_p^+(t) S^{-1}(t,-\infty) \quad 3-38$$

que leva o operador  $\hat{C}_p^+(t)$  de Heisenberg para o operador  $\hat{C}_{Ip}^+(t)$  na representação de interação. Com isso a expressão 3-37 fica

$$\begin{aligned}
 \langle \phi_I^{\dagger}(t) | \phi_I(t) \rangle &= \langle \phi_0 | S^{-1}(t, -\infty) S(t, -\infty) \hat{C}_p(t) S^{-1}(t, -\infty) S(t, -\infty) \\
 &\quad S^{-1}(t', -\infty) S(t', -\infty) \hat{C}_p^{\dagger}(t') S^{-1}(t', -\infty) S(t', -\infty) | \phi_0 \rangle \\
 &= \langle \phi_0 | \hat{C}_p(t) \hat{C}_p^{\dagger}(t') | \phi_0 \rangle = iG(\vec{p}, t-t') \quad 3-39
 \end{aligned}$$

podemos dizer que a função de Green  $G(\vec{p}, t-t')$  corresponde a amplitude de probabilidade da partícula com momentum  $\vec{p}$  criada no instante  $t'$  se encontrar no instante  $t > t'$  ainda no estado  $\vec{p}$ .

Devemos estudar agora como esta propagação no tempo, dada por  $G(\vec{p}, t)$ , está relacionada com a função  $G(\vec{p}, E)$ . Por definição temos a integral

$$G(\vec{p}, t) = \int_{-\infty}^{\infty} G(\vec{p}, E) e^{-iEt/\hbar} \frac{dE}{2\pi} \quad 3-40$$

Vimos que  $G(\vec{p}, E)$  não é uma função analítica, porém vimos que  $G_R$  e  $G_A$  são suas continuações analíticas para  $E > \mu$  e para  $E < \mu$  respectivamente. Por isso vamos dividir a integral em duas partes, uma de  $-\infty$  a  $\mu$  e outra de  $\mu$  a  $\infty$ . Como  $t-t' > 0$  a integral será efetuada sobre o contorno no semi-plano inferior, conforme a fig. 4.

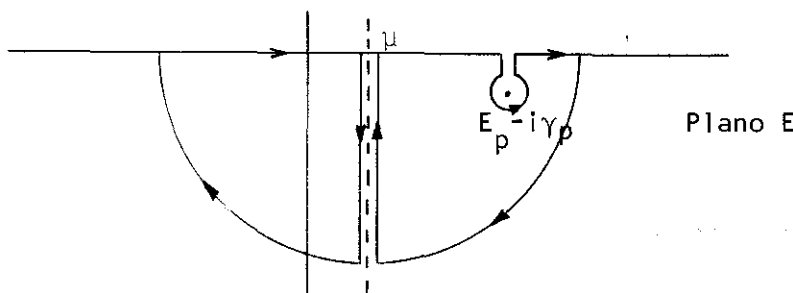
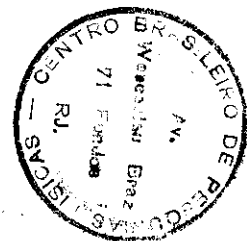


Figura 4

e a integral 3-40 fica

$$G(\vec{p}, t) = \int_{-\infty}^{\mu} G_A(\vec{p}, E) e^{-iEt/\hbar} \frac{dE}{2\pi} + \int_{\mu}^{\infty} G_R(\vec{p}, E) e^{-iEt/\hbar} \frac{dE}{2\pi} \quad 3-41$$



É fácil mostrar, a partir de 3-24, que  $G(\vec{p}, E)$  tem um comportamento assintótico para  $E \rightarrow \infty$  da forma  $G(\vec{p}, E) \rightarrow \frac{1}{E}$  e o lema de Jordan assegura que a integral sobre o arco se anula para  $E \rightarrow \infty$ , então a primeira integral resulta

$$\int_{-\infty}^{\mu} G_A(\vec{p}, E) e^{-iEt/\hbar} \frac{dE}{2\pi} = \int_{\mu-i\infty}^{\mu} G_A(\vec{p}, E) e^{-iEt/\hbar} \frac{dE}{2\pi} \quad 3-42$$

Na segunda integral a função  $G_R$ , em geral apresenta singularidades no semi-plano inferior. Para simplificar vamos admitir a existência de somente um polo simples no ponto  $E = E_p - i\gamma_p$ , tão próximo do eixo real que valha a relação  $E_p - \mu \gg \gamma_p$  de modo que se tenha uma atenuação lenta. Segue então

$$\int_{\mu}^{\infty} G_R(\vec{p}, E) e^{-iEt/\hbar} \frac{dE}{2\pi} = \int_{\mu}^{\mu-i\infty} G_R(\vec{p}, E) e^{-iEt/\hbar} \frac{dE}{2\pi} - \underset{-iae}{-ie} \frac{e^{-iE_p t/\hbar - \gamma t/\hbar}}{p} \quad 3-43$$

onde  $a$  é o resíduo de  $G_R$  no polo.

Substituindo 3-42 e 3-43 na 3-41

$$G(\vec{p}, t) = \int_{\mu-i\infty}^{\mu} [G_A(\vec{p}, E) - G_R(\vec{p}, E)] e^{-iEt/\hbar} \frac{dE}{2\pi} - \underset{-iae}{-ie} \frac{e^{-iE_p t/\hbar - \gamma t/\hbar}}{p} \quad 3-44$$

Se a partícula fosse criada num sistema não interagente a função  $G(\vec{p}, t)$  seria

$$G(\vec{p}, t) = -ie^{iE_0(\vec{p})t/\hbar}$$

porém em nosso caso a partícula sofre interação daí seu estado deverá decair no tempo. Espera-se então que a amplitude de probabilidade apresente um comportamento do tipo

$$G(\vec{p}, t) = A e^{-iE(\vec{p})t/\hbar - \gamma t/\hbar} \quad 3-45$$

neste caso a probabilidade de encontrar a partícula no estado  $\vec{p}$  após o tempo  $t$  será  $A^2 e^{-2\gamma t/\hbar}$ .

Pode-se mostrar que se

$$t \gg \frac{1}{E(\vec{p}) - \mu} \quad \text{e} \quad t\gamma \ll 1$$

a integral na expressão 3-44 torna-se negligenciável frente à

$$-i a e^{-iE(\vec{p})t/\hbar} e^{-\gamma t/\hbar}$$

e daí

$$G(\vec{p}, t) \approx -i a e^{-iE(\vec{p})t/\hbar} e^{-\gamma t/\hbar}$$

comparável, portanto, a expressão 3-45 discutida.

Notamos desta análise, que a energia e o decaimento do estado do sistema, com a partícula adicional, são determinados pela parte real e pela parte imaginária do polo da função de Green  $G_R$ .

### III - 5 EXPANSÃO DE $G(\vec{r}t, \vec{r}'t')$ COMO PERTURBAÇÃO E EQUAÇÃO DE DYSON

#### A) Descrição Diagramática de $G$

A função de Green na representação de interação pode ser escrita como

$$G(\vec{r}t, \vec{r}'t') = -i \frac{\langle \phi_0 | \hat{\psi}(\vec{r}t) \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}'t') S(\infty) | \phi_0 \rangle}{\langle \phi_0 | S(\infty) | \phi_0 \rangle} \quad 3-46$$

onde

$$S(\infty) = T \exp \left\{ - \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} H_{int}(t) dt \right\} \quad 3-47$$

Usando a expressão 3-47 no numerador da 3-46 obtemos

$$G(\vec{r}t, \vec{r}'t') = \frac{-i}{\langle \phi_0 | S(\infty) | \phi_0 \rangle} \sum_0^{\infty} \frac{(-i/\hbar)^n}{n!} \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \dots dt_n \langle \phi_0 | T [\hat{\psi}(\vec{r}t) \hat{\psi}^+(\vec{r}'t') \hat{H}_{int}(t_1) \dots \hat{H}_{int}(t_n)] | \phi_0 \rangle \quad 3-48$$

A Hamiltoniana é uma integral que contém pares dos operadores  $\hat{\psi}$  e  $\hat{\psi}^+$  e por conseguinte, cada termo da série 3-48 apresenta uma média do produto cronológico destes operadores. O "Teorema de Wick" nos mostra que essa média pode ser escrita como uma soma de produtos das médias do tipo  $\langle \phi_0 | T [\hat{\psi} \hat{\psi}^+] | \phi_0 \rangle$  onde essa última é justamente a função de Green para partícula livre. Portanto, em síntese, a aplicação deste teorema nos permite escrever a função de Green exata, como uma combinação de funções de Green livre.

Para ilustrar esta técnica com um exemplo, vamos tomar um sistema de fermions com potencial de interação do tipo  $V(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)$  e aplicá-la aos dois primeiros termos da série 3-48. Segue então de 3-48

$$iG(\vec{r}t, \vec{r}'t') = \frac{\langle \phi_0 | T [\hat{\psi}(\vec{r}t) \hat{\psi}^+(\vec{r}'t')] | \phi_0 \rangle}{\langle \phi_0 | S(\infty) | \phi_0 \rangle} - \frac{i/\hbar}{\langle \phi_0 | S(\infty) | \phi_0 \rangle} \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \langle \phi_0 | T [\hat{\psi}(\vec{r}t) \hat{\psi}(\vec{r}'t') \hat{H}_{int}(t_1)] | \phi_0 \rangle + \dots \quad 3-49$$

onde o primeiro termo é a função de Green para partículas sem

interação. O segundo termo contém  $H_{int}$  que é dado por

$$H_{int}(t_1) = \frac{1}{2} \int \hat{\psi}^+(\vec{r}_1 t_1) \hat{\psi}^+(\vec{r}_2 t_1) v(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|) \hat{\psi}(\vec{r}_2 t_1) \hat{\psi}(\vec{r}_1 t_1) d^3 r_1 d^3 r_2 \quad 3-50$$

introduzindo por uma questão de simetria a função

$$w(x_1 - x_2) = v(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|) \delta(t_1 - t_2)$$

poderemos escrever  $\int H_{int}(t') dt'$  na notação tetradimensional, segue em tão

$$\begin{aligned} \int H_{int}(t_1) dt_1 &= \frac{1}{2} \int \hat{\psi}^+(\vec{r}_1 t_1) \hat{\psi}^+(\vec{r}_2 t_2) v(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|) \delta(t_1 - t_2) \\ &\quad \hat{\psi}(\vec{r}_2 t_2) \hat{\psi}(\vec{r}_1 t_1) d^3 r_1 dt_1 d^3 r_2 dt_2 = \frac{1}{2} \int \hat{\psi}^+(x_1) \\ &\quad \hat{\psi}^+(x_2) w(x_1 - x_2) \hat{\psi}(x_2) \hat{\psi}(x_1) d^4 x_1 d^4 x_2 \end{aligned} \quad 3-51$$

onde fizemos  $x \equiv (rt)$  e  $d^4 x \equiv d^3 r dt$ .

Usando 3-51 o termo de primeira ordem fica

$$\begin{aligned} G^{(1)}(x, x') &= - \frac{1/\hbar}{2 \langle \phi_0 | S(\infty) | \phi_0 \rangle} \int d^4 x_1 d^4 x_2 \langle \phi_0 | T [\hat{\psi}(x) \hat{\psi}^+(x') \hat{\psi}^+(x_1) \\ &\quad \hat{\psi}^+(x_2) \hat{\psi}(x_2) \hat{\psi}(x_1)] | \phi_0 \rangle w(x_1 - x_2) \end{aligned} \quad 3-52$$

e o teorema de Wick nos permite escrever a média do produto cronológico no integrando como

$$\begin{aligned} &\langle \phi_0 | T [\hat{\psi}(x) \hat{\psi}^+(x_1)] | \phi_0 \rangle \langle \phi_0 | \hat{\psi}^+(x_2) \hat{\psi}(x_2) | \phi_0 \rangle \langle \phi_0 | T [\hat{\psi}(x_1) \hat{\psi}(x')] | \phi_0 \rangle - \\ &- \langle \phi_0 | T [\hat{\psi}(x) \hat{\psi}^+(x_1)] | \phi_0 \rangle \langle \phi_0 | \hat{\psi}^+(x_2) \hat{\psi}(x_1) | \phi_0 \rangle \langle \phi_0 | T [\hat{\psi}(x_2) \hat{\psi}^+(x')] | \phi_0 \rangle + \\ &+ \langle \phi_0 | T [\hat{\psi}(x) \hat{\psi}^+(x_2)] | \phi_0 \rangle \langle \phi_0 | \hat{\psi}^+(x_1) \hat{\psi}(x_1) | \phi_0 \rangle \langle \phi_0 | T [\hat{\psi}(x_2) \hat{\psi}^+(x')] | \phi_0 \rangle - \end{aligned}$$



$$\begin{aligned}
 & -\langle \phi_0 | T[\hat{\psi}(x)\hat{\psi}^+(x_2)] | \phi_0 \rangle \langle \phi_0 | \hat{\psi}^+(x_1)\hat{\psi}(x_2) | \phi_0 \rangle \langle \phi_0 | T[\hat{\psi}(x_1)\hat{\psi}^+(x')] | \phi_0 \rangle + \\
 & + \langle \phi_0 | T[\hat{\psi}(x)\hat{\psi}^+(x')] | \phi_0 \rangle \langle \phi_0 | \hat{\psi}^+(x_1)\hat{\psi}(x_1) | \phi_0 \rangle \langle \phi_0 | \hat{\psi}^+(x_2)\hat{\psi}(x_2) | \phi_0 \rangle - \\
 & - \langle \phi_0 | T[\hat{\psi}(x)\hat{\psi}^+(x')] | \phi_0 \rangle \langle \phi_0 | \hat{\psi}^+(x_1)\hat{\psi}(x_2) | \phi_0 \rangle \langle \phi_0 | \hat{\psi}^+(x_2)\hat{\psi}(x_1) | \phi_0 \rangle
 \end{aligned}$$

Pela definição da função de Green 3-1 podemos escrever então 3-52 co  
mc

$$\begin{aligned}
 G^{(1)}(x, x') &= \frac{(i/\hbar)}{2\langle \phi_0 | S(\infty) | \phi_0 \rangle} \iint d^4x_1 d^4x_2 \{ G^0(x, x_1) G^0(x_2, x_2) G^0(x_1, x') - \\
 & - G^0(x, x_1) G^0(x_2, x_1) G^0(x_2, x') + G^0(x, x_2) G^0(x_1, x_1) G^0(x_2, x') - \\
 & - G^0(x, x_2) G^0(x_1, x_2) G^0(x_1, x') + G^0(x, x') G^0(x_1, x_1) G^0(x_2, x_2) - \\
 & - G^0(x, x') G^0(x_1, x_2) G^0(x_2, x_1) \} w(x_1 - x_2) \quad 3-53
 \end{aligned}$$

Feynman estabeleceu que de acordo com certas regras podemos as  
sociar à cada termo da série um diagrama, tornando possível descrever  
diagramaticamente qualquer ordem de interação. Representaremos então  
a função de Green livre por uma linha cheia no espaço-tempo, ligando  
os pontos presente no seu argumento. Os pontos  $x_1$  e  $x_2$  em  $w(x_1 - x_2)$  se  
rão ligados por linhas tracejadas e os pontos  $x$  e  $x'$  serão mantidos  
externos.

Com esta convenção a descrição diagramática correspondente aos  
termos em 3-53 serão dos tipos apresentados na fig. 5

Os diagramas de Feynman estão divididos em dois grupos: os diagrama  
mas conexos e os diagramas desconexos. No exemplo apresentado na  
fig. 5 são desconexos os diagramas 3-e e 3-f e são conexos os demais.  
Pode-se mostrar que os diagramas desconexos não contribuem, noutras

palavras, uma expressão do tipo

$$\langle \phi_0 | T[\hat{\psi}(x)\hat{\psi}(x')S(\infty)] | \phi_0 \rangle = \langle \phi_0 | T[\hat{\psi}(x)\hat{\psi}^+(x')S(\infty)] | \phi_0 \rangle_{\text{con}} \langle S(\infty) \rangle$$

pode ser encontrada onde  $\langle \phi_0 | T[\hat{\psi}(x)\hat{\psi}^+(x')S(\infty)] | \phi_0 \rangle_{\text{con}}$  corresponde, agora, apenas os diagrama conexos. Portanto de 3-46 tiramos

$$G(x, x') = -i \langle \phi_0 | T[\hat{\psi}(x)\hat{\psi}^+(x')S(\infty)] | \phi_0 \rangle_{\text{con}} \quad 3-54$$

Vemos de 3-54, que descartar os diagramas desconexos implica em simplificar o fator  $\langle \phi_0 | S(\infty) | \phi_0 \rangle$  do denominador de 3-46. Podemos observar também na fig. 5, que os diagramas a e c são equivalentes, assim como os diagramas b e d, e isso se verifica porque as variáveis  $x_1$  e  $x_2$  são variáveis de integração. Devemos então omitir o fator  $\frac{1}{2}$  na expressão para  $\hat{H}_{\text{int}}$  e considerar somente os diagramas topologicamente equivalentes.

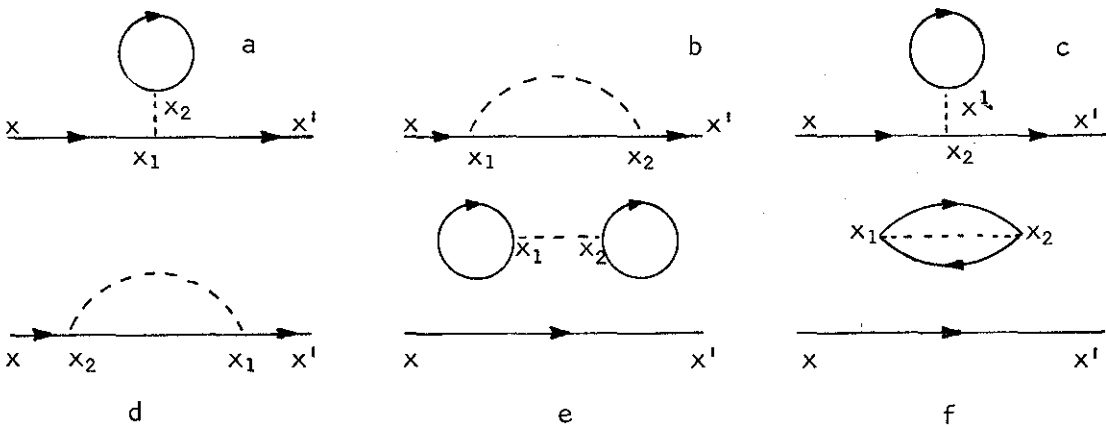


Figura 5

### B) Equação de Dyson

Vimos que a função de Green exata pode ser expandida numa soma de várias séries infinitas de termos e que cada termo pode ser descrito por um diagrama. Veremos a seguir que com essa descrição

diagramática podemos obter uma expressão compacta representando as séries de perturbação.

Chamaremos de "parte de auto-energia" qualquer parte de um diagrama, ligado ao resto do diagrama por duas linhas  $G_0$  (uma chegando e outra saindo).

Diremos que uma parte de auto-energia é irreduzível quando não apresenta partes ligadas entre si por apenas uma linha  $G_0$ .

Seja então a função de Green exata descrita como uma soma de séries infinitas de diagramas. Tomemos uma série de partes redutíveis, que contêm uma dada "parte de auto-energia irreduzível" que a representaremos por  $\Sigma_j$ . Podemos, formalmente, fatorar a "parte de auto-energia irreduzível" da série. A soma restante continuará sendo uma série de termos que reproduzem ainda a função de Green exata  $G$ . Isto feito para cada parte irreduzível nos conduzirá a "equação de Dyson"

$$G = G_0 + G_0 \Sigma G \quad 3-55$$

ou

$$G = \frac{1}{G_0^{-1} - \Sigma} \quad 3-56$$

onde  $\Sigma$  é a "parte de auto-energia irreduzível exata" obtida a partir da soma de todas partes de auto-energia irreduzíveis diferentes.

Substituindo na 3-56 a expressão para  $G_0$ , dada na 3-14 temos

$$G(p, E) = \frac{1}{E - E_p^0 - \Sigma(p, E)} \quad 3-57$$

a equação de Dyson nos permite então escrever a função de Green exata

numa forma matemática semelhante aquela obtida para  $G_0$ .

Sendo  $\Sigma$  uma quantidade complexa, vemos então que sua parte real determina uma correção à energia da partícula e sua parte imaginária o tempo de vida, portanto

$$E_p = E_p^0 + \text{Re}\Sigma(p, E)$$

e

3-58

$$\tau = \frac{\hbar}{\text{Im}\Sigma(p, E)}$$

### III - 6 FUNÇÃO DE GREEN DEPENDENTE DA TEMPERATURA

Neste ítem introduziremos a função de Green para  $T \neq 0$ . Mostraremos as modificações que se tornaram necessárias a construção de um formalismo que desse uma descrição por meio de diagrama de Feynman, a exemplo do que foi feito para função de Green a  $T = 0$ .

De início, notaremos na definição desta função de Green uma dependência de  $\tau = it$  ao invés de  $t$  real. A razão disto se deve ao fato de definirmos a média nos operadores não mais sobre o estado fundamental e sim sobre um conjunto estatístico. Por conveniência, escolheremos o conjunto grande canônico para esta finalidade. Temos então o valor médio de um certo operador  $\hat{O}$  dado por

$$\langle \hat{O} \rangle = \text{Tr}(\rho_G \hat{O}) \quad 3-59$$

onde

$$\hat{\rho}_G = Z_G^{-1} e^{-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})} = e^{-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})} e^{\Omega\beta} \quad 3-60$$

é o operador estatístico, com  $\beta = 1/k_B T$ .

A nova função de Green definida com uma dependência temporal da forma  $\tau = it$  torna possível uma expansão diagramática da mesma maneira que a obtida para  $T = 0$ . Porém com a diferença que neste caso a integração no tempo  $\tau$  será de 0 a  $\hbar\beta$  ao invés de  $-\infty < t < \infty$  visto para  $T = 0$ .

Definiremos, então, a função de Green para uma partícula como

$$\bar{G}_{\alpha\beta}(\vec{r}_1\tau_1, \vec{r}_2\tau_2) = -\text{Tr}\{\hat{\rho}_G T[\hat{\psi}_\alpha(\vec{r}_1\tau_1)\hat{\psi}_\beta^+(\vec{r}_2\tau_2)]\} \quad 3-61$$

e a transformação de um operador de Schrödinger para um operador de Heisenberg será

$$\hat{O}(\vec{r}\tau) = e^{(\hat{H}-\mu\hat{N})\tau/\hbar} \hat{O}(\vec{r}) e^{-(\hat{H}-\mu\hat{N})\tau/\hbar}$$

e em particular

$$\begin{aligned} \hat{\psi}_\alpha(\vec{r}\tau) &= e^{(\hat{H}-\mu\hat{N})\tau/\hbar} \hat{\psi}_\alpha(\vec{r}) e^{-(\hat{H}-\mu\hat{N})\tau/\hbar} \\ \hat{\psi}_\beta(\vec{r}\tau) &= e^{(\hat{H}-\mu\hat{N})\tau/\hbar} \hat{\psi}_\beta(\vec{r}) e^{-(\hat{H}-\mu\hat{N})\tau/\hbar} \end{aligned} \quad 3-62$$

Substituindo 3-62 na 3-61 e usando a propriedade cíclica do traço obtemos

$$\bar{G}_{\alpha\beta}(\vec{r}_1\tau_1, \vec{r}_2\tau_2) = \begin{cases} -\text{Tr}\{e^{(\Omega+\mu\hat{N}-\hat{H})\beta} e^{(\hat{H}-\mu\hat{N})(\tau_1-\tau_2)} \psi_\alpha(\vec{r}_1) \cdot e^{-(\hat{H}-\mu\hat{N})(\tau_1-\tau_2)} \psi_\beta^+(\vec{r}_2)\} & \tau_1-\tau_2 > 0 \\ \pm\text{Tr}\{e^{(\Omega+\mu\hat{N}-\hat{H})\beta} e^{-(\hat{H}-\mu\hat{N})(\tau_1-\tau_2)} \psi_\beta^+(\vec{r}_2) \cdot e^{(\hat{H}-\mu\hat{N})(\tau_1-\tau_2)} \psi_\alpha(\vec{r}_1)\} & \tau_1-\tau_2 < 0 \end{cases} \quad 3-63$$

Vemos daí que a função de Green  $\bar{G}$  depende de  $\tau_1$  e  $\tau_2$  através de  $\tau_1 - \tau_2$  e como consequência é definida no intervalo  $-\beta\hbar$  a  $\beta\hbar$ . Podemos mostrar que neste intervalo  $\bar{G}$  é periódica, propriedade esta relevante na construção do formalismo.

Considerando então a expressão 3-63 para  $\tau < 0$  com  $\tau_1 - \tau_2 = \tau$ , segue

$$\bar{G}_{\alpha\beta}(\tau < 0) = \pm \text{Tr} \{ e^{\Omega\beta} e^{-(\hat{H}-\mu\hat{N})\beta} e^{-(\hat{H}-\mu\hat{N})\tau/\hbar} \hat{\psi}_{\beta}^{\dagger}(\vec{r}_2) e^{(\hat{H}-\mu\hat{N})\tau/\hbar} \hat{\psi}_{\alpha}(\vec{r}_1) \}$$

Usando a propriedade cíclica do traço segue

$$\bar{G}_{\alpha\beta}(\tau < 0) = \pm \text{Tr} \{ e^{\Omega\beta} e^{(\hat{H}-\mu\hat{N})\tau/\hbar} \hat{\psi}_{\alpha}(\vec{r}_1) e^{-(\hat{H}-\mu\hat{N})\beta} e^{-(\hat{H}-\mu\hat{N})\tau/\hbar} \hat{\psi}_{\beta}^{\dagger}(\vec{r}_2) \}$$

introduzindo  $I = e^{-(\hat{H}-\mu\hat{N})\beta} e^{(\hat{H}-\mu\hat{N})\beta}$  à esquerda do segundo membro

$$\bar{G}_{\alpha\beta}(\tau < 0) = \pm \text{Tr} \{ e^{(\Omega+\mu N-\hat{H})\beta} e^{(\hat{H}-\mu\hat{N})(\tau+\beta\hbar)} \hat{\psi}_{\alpha}(\vec{r}_1) e^{-(\hat{H}-\mu\hat{N})(\tau+\beta\hbar)/\hbar} \hat{\psi}_{\beta}^{\dagger}(\vec{r}_2) \} \quad 3-64$$

comparando 3-64 com  $\bar{G}(\tau > 0)$  dada em 3-63 e observando que

$$0 < \tau + \beta\hbar < \beta\hbar$$

para  $-\beta\hbar < \tau < 0$  obtemos

$$\bar{G}(\tau < 0) = \mp \bar{G}(\tau + \beta\hbar) \quad 3-65$$

Isto nos mostra que  $\bar{G}$  é periódica para bosons e antiperiódica para fermions com periodicidade  $\beta\hbar$ .

Para expandirmos  $\bar{G}$  em termos contendo a função de Green para partícula livre,  $\bar{G}^0$ , analogamente ao que foi feito para  $G$  a zero absoluto

to, algumas modificações devem ser feitas. Neste sentido, uma nova matriz  $S(\tau)$  é definida por

$$e^{-(\hat{H}-\mu\hat{N})\tau/\hbar} = e^{-(\hat{H}_0-\mu\hat{N})\tau/\hbar} S(\tau) \quad 3-66$$

onde

$$0 < \tau < \beta\hbar$$

e os operadores  $\hat{\psi}$  e  $\hat{\psi}^+$  na representação de interação são definidos por

$$\hat{\psi}(\vec{r}, \tau) = e^{(\hat{H}_0-\mu\hat{N})\tau/\hbar} \hat{\psi}(\vec{r}) e^{-(\hat{H}_0-\mu\hat{N})\tau/\hbar} \quad 3-67$$

$$\hat{\psi}^+(\vec{r}, \tau) = e^{(\hat{H}_0-\mu\hat{N})\tau/\hbar} \hat{\psi}^+(\vec{r}) e^{-(\hat{H}_0-\mu\hat{N})\tau/\hbar}$$

Diferenciando 3-66 em relação a  $\tau$  obtemos

$$-(\hat{H}-\mu\hat{N})e^{-(\hat{H}-\mu\hat{N})\tau/\hbar} = e^{-(\hat{H}_0-\mu\hat{N})\tau/\hbar} \frac{\partial S(\tau)}{\partial \tau} e^{-(\hat{H}_0-\mu\hat{N})\tau/\hbar} S(\tau)$$

usando novamente 3-66 fica

$$e^{-(\hat{H}_0-\mu\hat{N})\tau/\hbar} \frac{\partial S(\tau)}{\partial \tau} = -\hat{H}_{int} e^{-(\hat{H}_0-\mu\hat{N})\tau/\hbar} S(\tau)$$

ou

$$\frac{\partial S(\tau)}{\partial \tau} = -\hat{H}_{int}(\tau) S(\tau) \quad 3-68$$

onde, analogamente a 3-67, fizemos

$$\hat{H}_{int}(\tau) = e^{(\hat{H}_0-\mu\hat{N})\tau/\hbar} \hat{H}_{int} e^{-(\hat{H}_0-\mu\hat{N})\tau/\hbar}$$

A equação 3-68 tem uma solução formal dada por

$$S(\tau) = T \exp\left\{-\frac{1}{\hbar} \int_0^\tau H_{int}(\tau') d\tau'\right\} \quad 3-69$$

onde T ordena  $\tau$  em ordem crescente da esquerda para direita.

Devemos ainda considerar a matriz  $S(\tau_1, \tau_2)$  definida por

$$S(\tau_1, \tau_2) = T \exp\left\{-\frac{1}{\hbar} \int_{\tau_1}^{\tau_2} H_{int}(\tau') d\tau'\right\} \quad 3-70$$

$$S(\tau) = S(\tau, 0)$$

e que tem as propriedades

$$S(\tau_1, \tau_3) = S(\tau_1, \tau_2) S(\tau_2, \tau_3) \quad \tau_1 > \tau_2 > \tau_3 \quad 3-71$$

$$S(\tau_1, \tau_2) = S(\tau_1) S^{-1}(\tau_2) \quad \tau_1 > \tau_2$$

Com uso das definições 3-62, 3-66 e 3-67 a função de Green dada em 3-61 pode ser escrita na representação de interação como

$$\bar{G}_{\alpha\beta}(\vec{r}_1, \tau_1, \vec{r}_2, \tau_2) = - \frac{\text{Tr}\{e^{-(\hat{H}_0 - \mu\hat{N})\beta} T_T [\psi_\alpha(\vec{r}_1, \tau_1) \psi_\beta^\dagger(\vec{r}_2, \tau_2)] S(\beta\hbar)\}}{\text{Tr}\{e^{-(\hat{H}_0 - \mu\hat{N})\beta} S(\beta\hbar)\}} \quad 3-72$$

que é a generalização da função de Green para  $T = 0$  na representação de interação, dada em 3-46, para função de Green dependente de T.

O teorema de Wick (modificado por Matsubara) para este caso, pode ser usado para descrever a função de Green dada na equação 3-72. Isto possibilita, então, uma expansão diagramática para  $T \neq 0$ , da mesma maneira que foi possível para  $T = 0$ , a partir da equação 3-46.

Pode-se mostrar aqui que o denominador de 3-72 deve ser simplificado resultando com isso a exclusão dos diagramas desconexos da expansão



são.

A equação de Dyson introduzida para função de Green a zero absoluto, também se aplica para  $\bar{G}$  a  $T \neq 0$  porque as expansões por diagramas de Feynman são idênticas em ambos casos.

Se desejarmos transformar a função  $\bar{G}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \tau_1 - \tau_2)$  para o espaço dos momentuns por meio da integral de Fourier veremos que é impossível pois o intervalo de variação para  $\tau$  é finito. Entretanto a sua periodicidade no intervalo  $-\hbar\beta \leq \tau_1 - \tau_2 \leq \hbar\beta$  nos permite expandir numa série de Fourier, assim

$$\bar{G}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \tau_1 - \tau_2) = \frac{1}{\hbar\beta} \sum_n e^{-i\omega_n \tau} \bar{G}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \omega_n) \quad 3-73$$

onde

$$\omega_n = \frac{n\pi}{\hbar\beta} \quad 3-74$$

e o coeficiente de Fourier é dado por

$$\bar{G}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \omega_n) = \frac{1}{2} \int_{-\hbar\beta}^{\hbar\beta} d\tau e^{i\omega_n \tau} \bar{G}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \tau) \quad 3-75$$

Separando a equação 3-75 em duas partes teremos

$$\bar{G}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \omega_n) = \frac{1}{2} \int_{-\hbar\beta}^0 d\tau e^{i\omega_n \tau} \bar{G}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \tau) + \frac{1}{2} \int_0^{\hbar\beta} d\tau e^{i\omega_n \tau} \bar{G}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \tau)$$

que com uso de 3-65 fica

$$\bar{G}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \omega_n) = \pm \frac{1}{2} \int_{-\hbar\beta}^0 d\tau e^{i\omega_n \tau} \bar{G}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \tau + \hbar\beta) + \frac{1}{2} \int_0^{\hbar\beta} d\tau e^{i\omega_n \tau} \bar{G}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \tau)$$

fazendo agora  $\tau' = \tau + \hbar\beta$  obtemos

$$\bar{G}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \omega_n) = \frac{1}{2} (1 \pm e^{-i\omega_n \beta \hbar}) \int_0^{\beta \hbar} d\tau e^{i\omega_n \tau} \bar{G}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \tau) \quad 3-76$$

ou

$$\bar{G}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \omega_n) = \int_0^{\beta \hbar} d\tau e^{i\omega_n \tau} \bar{G}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \tau) \quad 3-77$$

onde

$$\omega_n = \begin{cases} 2n(\beta \hbar)^{-1} \pi & \text{para bosons} \\ (2n+1)(\beta \hbar)^{-1} \pi & \text{para fermions} \end{cases} \quad 3-78$$

A diferença entre os diagramas para temperatura igual a zero e aqueles para temperatura diferente de zero está no fato de que, no primeiro caso a frequência é uma variável contínua dando uma integral, ao passo que, no segundo caso a integral é substituída por uma soma sobre as frequências discretas  $i\omega_n$ . Daí existir uma correspondência entre um caso e outro nas expressões de um certo diagrama. Portanto para passar por exemplo de  $T = 0$  para  $T \neq 0$  basta fazer

$$\frac{1}{2\pi} \int d\omega \rightarrow \frac{i}{\beta \hbar} \sum \omega_n \quad 3-79$$

### III - 7 FUNÇÃO DE GREEN DEPENDENTE DO TEMPO (REAL) PARA $T \neq 0$

Para concluir nossa descrição a temperatura diferente de zero, definiremos a função de Green dependente do tempo real para uma partícula como

$$G_{\alpha\beta}(\vec{r}_1 - \vec{r}_2, t_1 - t_2; E_n, N_n) = -i \langle n | T [\hat{\psi}_\alpha(\vec{r}_1 t_1) \hat{\psi}_\beta^\dagger(\vec{r}_2 t_2)] | n \rangle \quad 3-80$$

que é uma generalização da função de Green dada em 3-1. Os operadores  $\psi$  e  $\psi^+$  são de Heisenberg e a média é tomada sobre o estado do sistema com energia  $E_n$  e com  $N_n$  partículas. Convém transformar a equação 3-80 para uma distribuição grande canônica, logo

$$G_{\alpha\beta}(\vec{r}_1 - \vec{r}_2, t_1 - t_2; \mu, T) = \sum_n e^{(\Omega + \mu N_n - E_n)\beta} G_{\alpha\beta}(\vec{r}_1 - \vec{r}_2, t_1 - t_2; E_n, N_n) =$$

$$= -i \text{Tr} \{ e^{(\Omega + \mu \hat{N} - \hat{H})\beta} T [\hat{\psi}(\vec{r}_1 t_1) \hat{\psi}^+(\vec{r}_2 t_2)] \} \quad 3-81$$

Para sistemas homogêneos podemos escrever

$$\hat{\psi}_\alpha(\vec{r}, t) = e^{-i\hat{P} \cdot \vec{r} / \hbar} e^{i(\hat{H} - \mu \hat{N})t / \hbar} \hat{\psi}_\alpha(0) e^{-i(\hat{H} - \mu \hat{N})t / \hbar} e^{i\hat{P} \cdot \vec{r} / \hbar}$$

Levando esta expressão na 3-81, considerando que

$$(\hat{H} - \mu \hat{N}) |n\rangle = (E_n - \mu N_n) |n\rangle$$

e

$$\hat{P} |n\rangle = \vec{P}_n |n\rangle$$

e inserindo por sua vez  $I = \sum_m |m\rangle \langle m|$  entre  $\psi_\alpha$  e  $\psi_\beta$  encontramos

$$G_{\alpha\beta}(\vec{r}, t > 0) = -i \sum_{n,m} e^{(\Omega + \mu N_n - E_n)\beta} e^{i\omega_{nm} t} e^{-i\vec{P}_{nm} \cdot \vec{r} / \hbar} (\hat{\psi}_\alpha(0))_{nm} (\hat{\psi}_\beta^+(0))_{mn}$$

$$G_{\alpha\beta}(\vec{r}, t < 0) = \pm i \sum_{n,m} e^{(\Omega + \mu N_m - E_m)\beta} e^{-i\omega_{mn} t} e^{i\vec{P}_{mn} \cdot \vec{r} / \hbar} (\hat{\psi}_\alpha(0))_{nm} (\hat{\psi}_\beta^+(0))_{mn}$$

3-82

onde

$$\omega_{nm} = [E_n - E_m - \mu(N_n - N_m)] / \hbar$$

e

$$N_n = N_m \pm 1$$

Desejando obter  $G(\vec{p}, \omega)$  devemos usar a transformada de Fourier

$$G(\vec{p}, \omega) = \int G(r, t) e^{-i\vec{p} \cdot \vec{r} + i\omega t} d^3r dt$$

De 3-82 resulta então

$$\begin{aligned} G_{\alpha\beta}(\vec{p}, \omega) &= (2\pi)^3 \sum_{n,m} e^{(\Omega + \mu N_n - E_n)\beta} (\hat{\psi}_\alpha(0))_{nm} (\hat{\psi}_\beta^+(0))_{mn} \delta(\vec{p} + \vec{p}_{nm}/\hbar) \cdot \\ &\cdot \left\{ \frac{1}{\omega + \omega_{nm}} - i\pi \delta(\omega + \omega_{nm}) \right\} \pm (2\pi)^3 \sum_{n,m} e^{(\Omega + \mu N_m - E_m)\beta} (\hat{\psi}_\alpha(0))_{nm} \cdot \\ &\cdot (\hat{\psi}_\beta^+(0))_{mn} \delta(\vec{p} - \vec{p}_{mn}/\hbar) \left\{ \frac{1}{-\omega - \omega_{mn}} + i\pi \delta(\omega - \omega_{mn}) \right\} \end{aligned} \quad 3-83$$

fazendo no segundo termo de 3-83

$$e^{(\Omega + \mu N_m - E_m)\beta} = e^{(\Omega + \mu N_n - E_n)\beta} e^{(\mu N_n - E_n)\beta} e^{-(\mu N_n - E_n)\beta} = e^{(\Omega + \mu N_n - E_n)\beta} e^{\omega_{nm}\beta}$$

e lembrando que

$$\vec{p}_{nm} = -\vec{p}_{mn}$$

$$\omega_{nm} = -\omega_{mn}$$

a 3-83 pode ser reescrito como

$$\begin{aligned} G_{\alpha\beta}(\vec{p}, \omega) &= -(2\pi)^3 \sum_{n,m} e^{(\Omega + \mu N_n - E_n)\beta} (\hat{\psi}_\alpha(0))_{nm} (\hat{\psi}_\beta^+(0))_{mn} \delta(\vec{p} - \vec{p}_{mn}/\hbar) \cdot \\ &\cdot \left\{ \frac{1}{\omega - \omega_{mn}} [1 \pm e^{-\omega_{mn}\beta\hbar}] + i\pi(\omega - \omega_{mn}) [1 \mp e^{-\omega_{mn}\beta\hbar}] \right\} \end{aligned} \quad 3-84$$

Na ausência de ferromagnetismo e campo magnético externo

$$G_{\alpha\beta}(\vec{p}, \omega) = \delta_{\alpha\beta} G(\vec{p}, \omega)$$

portanto

$$G(\vec{p}, \omega) = - \frac{(2\pi)^3}{2s+1} \sum_{n, m, e} \frac{(\Omega + \mu N_n - E_n)^\beta}{|(\psi_\alpha(0))_{nm}|^2 \delta(\vec{p} - \vec{p}_{mn} / \hbar)} \cdot \left[ \frac{1}{\omega_{mn} - \omega} (1 \pm e^{-\omega_{mn} \beta \hbar}) + i\pi \delta(\omega - \omega_{mn}) (1 \mp e^{-\omega_{mn} \beta \hbar}) \right] \quad 3-85$$

onde  $s$  é o spin da partícula.

Analizando a expressão 3-85 descobrimos a seguinte relação entre sua parte imaginária e sua parte real

$$\text{Re}G(\vec{p}, \omega) = \frac{P}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\text{Im}G(\vec{p}, \omega')}{\omega' - \omega} \text{cotgh}\left(\frac{\omega' \beta \hbar}{2}\right) d\omega' \quad 3-86$$

para fermions, e

$$\text{Re}G(\vec{p}, \omega) = \frac{P}{\pi} \int_{\infty}^{\infty} \frac{\text{Im}G(\vec{p}, \omega')}{\omega' - \omega} \text{tgh}\left(\frac{\omega' \beta \hbar}{2}\right) d\omega'$$

para bosons.

As relações 3-86 indicam que  $G$  não é analítica no plano complexo. Entretanto a exemplo do que foi feito para  $T = 0$ , podemos introduzir duas funções,  $G^R$  e  $G^A$  que são analíticas nos semi-planos inferior e superior respectivamente. As funções  $G^R$  e  $G^A$  satisfazem então as relações de dispersão

$$\text{Re}G^R(\omega) = \frac{P}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\text{Im}G^R(\omega')}{\omega' - \omega} d\omega' \quad 3-87$$

$$\text{Re}G^A(\omega) = -\frac{P}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\text{Im}G^A(\omega')}{\omega' - \omega} d\omega' \quad 3-87$$

e estão relacionadas a  $G$  por

$$G^{RA}(\mathbf{p}, \omega) = \text{Re}G(\mathbf{p}, \omega) \pm i \text{Im}G(\mathbf{p}, \omega) \coth \frac{\omega \beta \hbar}{2} \quad 3-88$$

para fermions, e

$$G^{RA}(\mathbf{p}, \omega) = \text{Re}G(\mathbf{p}, \omega) \pm i \text{Im}G(\vec{\mathbf{p}}, \omega) \tanh \frac{\omega \beta \hbar}{2}$$

para bosons.

É fácil verificar agora de 3-85 e 3-88 que  $G^R$  e  $G^A$  podem ser da das por

$$G^{RA}(\vec{\mathbf{p}}, \omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\rho(\vec{\mathbf{p}}, \omega')}{\omega' - \omega \mp i \delta} d\omega' \quad 3-89$$

onde

$$\rho(\vec{\mathbf{p}}, \omega) = -(2\pi)^3 \sum_{n,m} e^{(\Omega + \mu N_n - E_n)\beta} |(\hat{\psi}(0))_{nm}|^2 (1 \pm e^{-\omega_{mn} \beta \hbar}) \delta(\vec{\mathbf{p}} - \vec{\mathbf{p}}_{mn} / \hbar) \delta(\omega - \omega_{mn}) \quad 3-90$$

O conhecimento da função de Green dependente do tempo (real) para  $T \neq 0$  é, em geral, de maior interesse. Ela nos permite, por exemplo, determinar as propriedades de transporte do sistema (viscosidade, con dutividade térmica, etc), descrever processos de espalhamento inelás tico de partículas por matéria condensada, etc. Vemos daí a importân cia de estabelecermos a relação entre  $G$  e  $\bar{G}$  para a qual uma expansão diagramática é possível. Com este objetivo usamos

$$\bar{G}(\vec{p}, \omega_n) = \int_0^{\beta\hbar} d\tau \int d^3\vec{r} e^{i\omega_n \tau - i\vec{p} \cdot \vec{r}} \bar{G}(\vec{r}, \tau)$$

para  $\bar{G}(\vec{r}, \tau > 0)$  obtendo

$$\bar{G}(\vec{p}, \omega_n) = -(2\pi)^3 \sum_{n,m} e^{(\Omega + \mu N_n - E_n)\beta} |(\hat{\psi}(0))_{nm}|^2 \delta(\vec{p} - \vec{P}_{mn}/\hbar) \frac{1 \pm e^{-\omega_{mn}\beta\hbar}}{\omega_{mn} - i\omega_n} \quad 3-91$$

Podemos escrever 3-91 na forma integral

$$\bar{G}(\vec{p}, \omega_n) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\rho(\vec{p}, \omega')}{\omega' - i\omega_n} d\omega' \quad 3-92$$

onde  $\rho(\vec{p}, \omega)$  é o mesmo de 3-89.

Daí encontramos a relação

$$\bar{G}(\omega_n) = G^R(i\omega_n) \quad \text{para } \omega_n > 0 \quad 3-93$$

como consequência verificamos que se conhecermos  $\bar{G}$  para todas frequências  $\omega_n$  e que se uma função  $F(\omega)$ , analítica no semi-plano superior, também é conhecida, satisfazendo a propriedade

$$F(i\omega_n) = \bar{G}(\omega_n) \quad \text{para } \omega_n > 0$$

poderemos dizer, então, que  $G^R(\omega)$  coincide com  $F(\omega)$  no semi-plano todo. Deste modo vemos que o problema de construir  $G^R$  se reduz ao problema de fazer a continuação analítica de  $\bar{G}(\omega_n)$ , a partir de um conjunto de pontos discretos, em todo semi-plano superior.

## CAPÍTULO IV

### RESULTADOS TEÓRICOS

#### IV - 1 INTRODUÇÃO

Conforme já vimos, o conceito de polaron serve para descrever a excitação que consiste do elétron acompanhado por sua polarização produzida na rede cristalina. Em muitos casos, em particular para elétrons lentos na banda de condução, a energia eletrônica apresenta uma dependência quadrática do momentum

$$E = \hbar^2 k^2 / 2m^*$$

como para o elétron livre. O efeito observado da polarização, aparece portanto, sobre sua massa. Desta maneira a massa do elétron  $m$  efetivamente medida (quer dizer do polaron) em geral difere da massa  $m_e$  do elétron livre.

Abordaremos neste trabalho o problema da variação da massa efetiva com temperatura, para o caso específico discutido no capítulo I. Adotaremos, então, como ponto de partida, o modelo proposto por S. Rodriguez de interação elétron-fonon ressonante, com intuito de explicar a dependência da temperatura observada por J. E. Baxter, conforme a fig. 1. No apêndice, como complementação, efetuaremos o cálculo de  $m^*(T)$  admitindo um cristal puro.

#### IV - 2 MASSA EFETIVA PARA $AgBr$ COM IMPUREZAS

Conforme anunciamos na introdução deste capítulo, o nosso problema



ma é obter uma expressão para massa efetiva do polaron. Admitiremos, então, como ponto de partida que o efeito observado se deve a um estado ressonante da impureza com os fonons acústicos da rede, ou seja, consiste dum processo de captura ressonante de elétrons da banda de condução, no estado  $|k\rangle$ , para um estado ligado  $|b\rangle$  da impureza com emissão de um fonon virtual  $|\vec{q}, \mu\rangle$ , onde  $\vec{q}$  é o vetor onda e  $\mu$  a polarização.

Trataremos este problema usando o formalismo das funções de Green dependentes da temperatura introduzido no capítulo anterior. Vimos, nesta ocasião, que a função de Green  $\bar{G}(k, \omega_n; T)$  podia ser representada por uma série infinita de diagramas de Feynman. Introduzimos também a equação de Dyson e o conceito de auto-energia (ou operador massa) que agora usaremos.

Neste formalismo o diagrama que representa o processo descrito acima é mostrado na fig. 6.

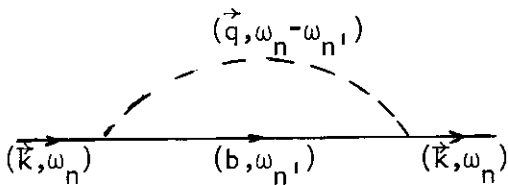


Figura 6

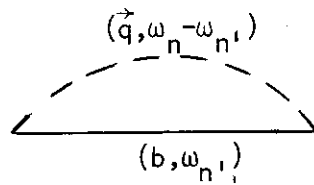


Figura 7

onde a linha tracejada representa o fonon virtual emitido. A linha cheia assinalada com  $(\vec{k}, \omega_n)$ , representa o elétron da banda de condução, enquanto a linha cheia, assinalada com  $(b, \omega_{n1})$ , representa o elétron no estado ligado a impureza.

A parte de auto-energia correspondente ao diagrama da fig. 6 é de finida então pela parte deste diagrama conforme a fig. 7 acima.

A expressão analítica associada ao diagrama de auto-energia, para este caso, é dada então por

$$\Sigma(\vec{k}, \omega_n) = - \frac{k_B T}{h} \sum_{\substack{q, \mu \\ \omega_{n'}, b}} n_b |g_\mu(\vec{k}, \vec{q}, b)|^2 \bar{G}^0(b, i\omega_n) \bar{D}^0(\vec{q}, i\omega_n - i\omega_{n'}) \quad 4-1$$

O nosso problema agora é calcular  $\Sigma(\vec{k}, \omega_n)$  de modo que usando a equação de Dyson dada em 3-55 se obtenha

$$\epsilon = \epsilon_k + \text{Re}\Sigma(k, \omega)$$

e daí a massa efetiva do elétron.

Em 4-1 temos que  $g_\mu(\vec{k}, \vec{q}, b)$  é a interação elétron-fonon definida por

$$g_\mu(\vec{k}, \vec{q}, b) = \langle b \vec{q}_\mu | H_1 | \vec{k}, 0 \rangle \quad 4-2$$

$k_B$  é a constante de Boltzman e T a temperatura. As funções de Green para o elétron no estado ligado e para os fonons virtuais estão definidas por  $\bar{G}^0(b, i\omega_{n'})$  e  $\bar{D}^0(\vec{q}, i\omega_n - i\omega_{n'})$  respectivamente. Representamos ainda a densidade de impurezas por  $n_b$ .

A fim de calcular a expressão para  $\Sigma$  dada em 4-1 faremos as seguintes hipóteses simplificadoras.

- a)  $g_\mu(\vec{k}, \vec{q}, b)$  é constante devido o fato dos estados ligados serem localizados.
- b) Tomamos somente um nível b, admitindo que existe acoplamento somente com o estado  $n = 2$  da impureza. A energia correspondente ao nível  $n = 1$  não é ressonante com os fonons acústicos.
- c) Consideraremos a aproximação de Debye para os fonons, porque as frequências dos fonons ressonantes estão numa região intermediária do espectro onde esta aproximação é boa.

Vimos no cap. III que a função de Green dependente da temperatura pode ser representada na forma integral por

$$\bar{G}(k, \omega_n) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\rho(x, \vec{k})}{x - i\omega_n} dx \quad 4-3$$

e que a função de Green dependente do tempo (real) pode ser dada na forma

$$G^{RA}(\vec{k}, \omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\rho(x, \vec{k})}{x - \omega \mp i\delta} dx \quad 4-4$$

Das expressões 4-3 e 4-4 acima tiramos

$$\begin{aligned} \bar{G}(\omega_n) &= G^R(i\omega_n) \quad \text{para } \omega_n > 0 \\ \bar{G}(\omega_n) &= G^A(i\omega_n) \quad \text{para } \omega_n < 0 \end{aligned} \quad 4-5$$

e

$$\begin{aligned} \bar{G}(\omega_n) &= \bar{G}^*(-\omega_n) \\ G^A(\omega) &= [G^R(\omega)]^* \end{aligned} \quad 4-6$$

lembrando que  $\rho(x, \vec{k})$  é uma função real.

Por outro lado sabemos que  $G^A$  e  $G^R$  são analíticas nos semi-planos inferior e superior respectivamente. Podemos dizer, então, a partir de 4-5, que elas são justamente os prolongamentos analíticos de  $\bar{G}$  nestes semi-planos.

Desejamos agora transformar a soma 4-1 numa integral de contorno no plano complexo. Isto é feito a partir das considerações acima sobre as propriedades analíticas de  $G^R$  e  $G^A$  tomadas como extensões ana

líticas de  $\bar{G}$  (isto também vale para  $\bar{D}$ ). Devemos considerar ainda que em virtude das frequências  $\omega_{n^i}$  se referirem ao elétron temos

$$\omega_{n^i} = \frac{k_B T}{\hbar} (2n^i + 1)\pi$$

que conforme vimos no capítulo III, vale para fermions. Daí, a soma em  $\omega_{n^i}$  pode ser representada pela integral de contorno<sup>(4)</sup>

$$\begin{aligned} \Sigma(\vec{k}, \omega_n) = & - \frac{ng^2}{2(2\pi i)} \sum_q \int_c G_{RA}^0(b, \omega') D_{RA}^0(\vec{q}, i\omega_n - \omega') \operatorname{tgh} \frac{\hbar\omega'}{2k_B T} d\omega' - \\ & - \frac{nk_B T}{\hbar} g^2 \sum_q \bar{G}^0(b, i\omega_n) \bar{D}^0(\vec{q}, 0) \end{aligned} \quad 4-7$$

onde para simplificar fizemos  $n_b = n$ , a  $\operatorname{tgh} \frac{\hbar\omega'}{2k_B T}$  presente no integrando contém singularidades no eixo imaginário nos pontos

$$\omega' = \omega_{n^i} i = \frac{k_B T}{\hbar} (2n^i + 1)\pi i$$

conforme indicamos na fig. 8. O contorno de integração também é indicado nesta figura.

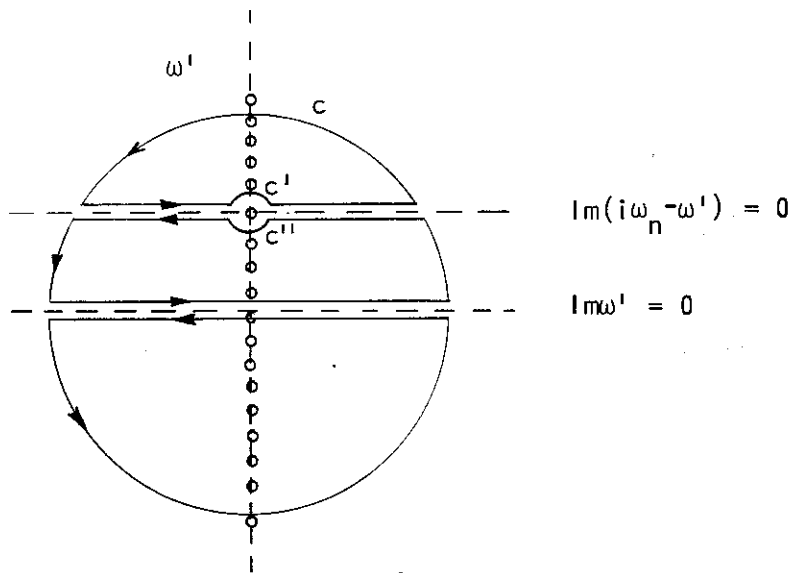


Figura 8

O segundo termo em 4-7 se deve a exclusão do polo  $\omega^i = i\omega_n$  do interior do contorno de integração. A integral ao longo do círculo se anula quando seu raio é grande, resultando daí que somente as integrais ao longo de  $\text{Im}\omega^i = 0$  e  $\text{Im}(i\omega_n - \omega^i) = 0$  contribuem.

A seguir vamos efetuar a integração acima e abaixo da linha  $\text{Im}\omega^i = 0$ .

Com uso das relações dada em 4-5 e 4-6 obtemos então

$$\begin{aligned}
 & - \frac{ng^2}{2(2\pi i)} \sum_{\vec{q}} \int_{-\infty}^{\infty} G_R^0(b, \omega') D_{RA}^0(\vec{q}, i\omega_n - \omega') \text{tgh } \hbar\omega'/2k_B T d\omega' + \\
 & + \frac{ng^2}{2(2\pi i)} \sum_{\vec{q}} \int_{-\infty}^{\infty} G_A^0(b, \omega') D_{RA}^0(\vec{q}, i\omega_n - \omega') \text{tgh } \hbar\omega'/2k_B T d\omega'
 \end{aligned}$$

que resulta na integral

$$- \frac{ng^2}{2\pi} \sum_{\vec{q}} \int_{-\infty}^{\infty} \text{Im}G_R^0(b, \omega') D_{RA}^0(\vec{q}, i\omega_n - \omega') \text{tgh } \hbar\omega'/2k_B T d\omega' \quad 4-8$$

Para realizar a integração sobre  $\text{Im}(i\omega_n - \omega') = 0$  vamos antes mudar a variável na expressão 4-7, fazendo  $i\omega_n - \omega' \rightarrow \omega''$

$$- \frac{ng^2}{2(2\pi i)} \sum_{\vec{q}} \int_{-\infty}^{\infty} G_{RA}^0(b, i\omega_n - \omega'') D_{RA}^0(\vec{q}, \omega'') \text{cotgh } \hbar\omega''/2k_B T d\omega'' \quad 4-9$$

onde

$$\text{tgh} \frac{(i\omega_n - \omega'')\hbar}{2k_B T} = \text{tgh} \left[ (2n+1) \frac{\pi}{2} - i\pi \frac{\hbar\omega''}{2k_B T} \right] = -\text{cotgh } \hbar\omega''/2k_B T \quad 4-10$$

daí, procedendo analogamente a  $\text{Im}\omega' = 0$  tiramos a integral acima e abaixo de  $\text{Im}\omega'' = 0$

$$\begin{aligned}
 & - \frac{ng^2}{2(2\pi i)} \Sigma \int_{-\infty}^{\infty} G_{RA}^0(b, i\omega_n - \omega') D_R^0(\vec{q}, \omega') \cotgh \frac{\hbar\omega'}{2k_B T} + \frac{ng^2}{2(2\pi i)} \Bigg\} \dots + \\
 & + \frac{ng^2}{2(2\pi i)} \Sigma \int_{-\infty}^{\infty} G_{RA}^0(b, i\omega_n - \omega') D_A^0(\vec{q}, \omega') \cotgh \hbar\omega'/2k_B T d\omega' + \frac{ng^2}{2(2\pi i)} \Bigg\} \dots
 \end{aligned}$$

que resulta

$$\begin{aligned}
 & - \frac{ng^2}{2\pi} \Sigma \int_{-\infty}^{\infty} G_{RA}^0(b, i\omega_n - \omega') \text{Im} D_R^0(\vec{q}, \omega') \cotgh \hbar\omega'/2k_B T d\omega' + \\
 & + \frac{ng^2}{2(2\pi i)} \Bigg\} \dots + \frac{ng^2}{2(2\pi i)} \Bigg\} \dots
 \end{aligned} \tag{4-11}$$

$c'$  e  $c''$  são semicírculos envolvendo o polo  $\omega' = 0$ , onde temos

$$\frac{ng^2}{2(2\pi i)} \left\{ \int_{c'} + \int_{c''} \dots \right\} = \frac{ng^2 k_B T}{\hbar} \sum_{\vec{q}} \bar{G}^0(b, i\omega_n) \bar{D}^0(\vec{q}, 0)$$

que vai cancelar o 2º termo na equação 4-7.

Reunindo então 4-8 e 4-11 temos

$$\begin{aligned}
 \Sigma(\vec{k}, \omega_n) &= - \frac{ng^2}{2\pi} \sum_{\vec{q}} \int_{-\infty}^{\infty} \text{Im} G_R^0(b, \omega') D_{RA}^0(q, i\omega_n - \omega') \text{tgh} \hbar\omega'/2k_B T d\omega' \\
 & - \frac{ng^2}{2\pi} \sum_{\vec{q}} \int_{-\infty}^{\infty} G_{RA}^0(b, i\omega_n - \omega') \text{Im} D_R^0(\vec{q}, \omega') \cotgh \hbar\omega'/2k_B T d\omega'
 \end{aligned} \tag{4-12}$$

Se desejarmos uma continuação analítica para  $\Sigma$  retardada, assumimos  $\text{Im}\omega > 0$ . A expressão 4-12 será escrita então como

$$\begin{aligned}
 \Sigma_R(\vec{k}, \omega) &= - \frac{ng^2}{2\pi} \sum_{\vec{q}} \int_{-\infty}^{\infty} \text{Im} G_R^0(b, \omega') D_R^0(\vec{q}, \omega - \omega') \text{tgh} \hbar\omega'/2k_B T d\omega' + \\
 & - \frac{ng^2}{2\pi} \sum_{\vec{q}} \int_{-\infty}^{\infty} G_R^0(b, \omega - \omega') \text{Im} D_R^0(\vec{q}, \omega') \cotgh \hbar\omega'/2k_B T d\omega'
 \end{aligned} \tag{4-13}$$

por outro lado temos as relações

$$D_R^0(\vec{q}, \omega - \omega') = \text{Re}D_R^0(\vec{q}, \omega - \omega') + i \text{Im}D_R^0(\vec{q}, \omega - \omega')$$

que com a relação de dispersão

$$\text{Re}D_R^0(\vec{q}, \omega - \omega') = \frac{P}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\text{Im}D_R^0(\vec{q}, x) dx}{x - (\omega - \omega')}$$

fica

$$\begin{aligned} D_R^0(\vec{q}, \omega - \omega') &= \frac{P}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\text{Im}D_R^0(\vec{q}, x) dx}{x - \omega + \omega'} + i \text{Im}D_R^0(\vec{q}, \omega - \omega') = \\ &= \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\text{Im}D_R^0(\vec{q}, x) dx}{x - \omega + \omega' - i\delta} \end{aligned} \quad 4-14$$

onde representamos por  $\delta$  uma infinitesimal positiva. O mesmo procedimento para  $G_R$  nos fornece

$$G_R^0(b, \omega - \omega') = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\text{Im}G_R^0(b, x) dx}{x - \omega + \omega' - i\delta} \quad 4-15$$

Substituindo 4-14 e 4-15 na 4-13 segue

$$\begin{aligned} \Sigma_R(\vec{k}, \omega) &= - \frac{ng^2}{2\pi^2} \sum_q \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\text{Im}G_R^0(b, \omega') \text{Im}D_R^0(\vec{q}, x) \text{tgh} \hbar\omega'/2k_B T}{x - \omega + \omega' - i\delta} d\omega' dx - \\ &- \frac{ng^2}{2\pi^2} \sum_q \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\text{Im}G_R^0(b, x) \text{Im}D_R^0(\vec{q}, \omega') \text{cotgh} \hbar\omega'/2k_B T}{x - \omega + \omega' - i\delta} d\omega' dx \end{aligned}$$

Fazendo a mudança de variáveis no segundo termo de modo que  $x \neq \omega'$  fica

$$\begin{aligned} \Sigma_R(\vec{k}, \omega) &= - \frac{ng^2}{2\pi^2} \sum_q \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\text{Im}G_R^0(b, \omega') \text{Im}D_R^0(\vec{q}, x)}{x - \omega + \omega' + i\delta} \cdot \\ &(\text{tgh} \hbar\omega'/2k_B T + \text{cotgh} \hbar x/2k_B T) d\omega' dx \end{aligned} \quad 4-16$$

As funções de Green  $G_R$  e  $D_R$  podem ser dadas na forma

$$G_R^0(b, \omega') = \frac{1}{\omega' - \hbar^{-1} \epsilon_b + i\Gamma/2}$$

$$D_R^0(\vec{q}, x) = \frac{\omega_q}{2} \left\{ \frac{1}{x - \omega_q + i\delta} - \frac{1}{x + \omega_q + i\delta} \right\}$$

Admitindo um tempo de vida muito grande para o estado ligado  $\epsilon_b$  do elétron, de modo que  $\Gamma \rightarrow 0$ , temos

$$\text{Im}G_R^0(b, \omega') = \frac{1}{2i} \left\{ \frac{1}{\omega' - \hbar^{-1} \epsilon_b + i\Gamma/2} - \frac{1}{\omega' - \hbar^{-1} \epsilon_b - i\Gamma/2} \right\} = - \frac{\Gamma/2}{(\omega' - \hbar^{-1} \epsilon_b)^2 + \Gamma^2/4}$$

$$\lim_{\Gamma \rightarrow 0} \text{Im}G_R^0(b, \omega') \rightarrow -\pi \delta(\omega' - \hbar^{-1} \epsilon_b) \quad 4-17$$

e a parte imaginária de  $D_R$  fica

$$\text{Im}D_R^0(\vec{q}, x) = \frac{\omega_q}{2 \cdot (2i)} \left\{ \frac{1}{x - \omega_q + i\delta} - \frac{1}{x - \omega_q + i\delta} - \frac{1}{x - \omega_q - i\delta} + \frac{1}{x - \omega_q - i\delta} \right\}$$

$$= \frac{\omega_q}{2(2i)} \left\{ \frac{-2i\delta}{(x - \omega_q)^2 + \delta^2} + \frac{2i\delta}{(x + \omega_q)^2 + \delta^2} \right\}$$

$$= \frac{\omega_q \pi}{2} \{ \delta(x + \omega_q) - \delta(x - \omega_q) \} \quad 4-18$$

onde levamos em conta que  $\delta \rightarrow 0$ .

Substituindo 4-17 e 4-18 na 4-16 teremos

$$\Sigma_R(\vec{k}, \omega) = - \frac{ng^2}{2\pi^2} \sum_q \int_{-\infty-\infty}^{\infty} \frac{(-\pi) \delta(\omega' - \hbar^{-1} \epsilon_b) \omega_q \pi/2 \{ \delta(x + \omega_q) - \delta(x - \omega_q) \}}{x - \omega + \omega' - i\delta} \cdot$$

$$(tgh \hbar\omega'/2k_B T + cotgh \hbar x/2k_B T) d\omega' dx \quad 4-19$$



$$\Sigma_R(\vec{k}, \omega) = \frac{ng^2}{4} \sum_q \int_{-\infty}^{\infty} \frac{g \{ \delta(x+\omega_q) - \delta(x-\omega_q) \}}{x - \omega + \hbar^{-1} \epsilon_b - i\delta} (\text{tgh} \epsilon_b / 2k_B T + \text{cotgh} \hbar x / 2k_B T) dx$$

$$\Sigma_R(\vec{k}, \omega) = \frac{ng^2}{4} \sum_q \omega_q \left\{ \frac{\text{tgh} \epsilon_b / 2k_B T - \text{cotgh} \hbar \omega_q / 2k_B T}{-\omega_q - \omega + \hbar^{-1} \epsilon_b - i\delta} - \frac{\text{tgh} \epsilon_b / 2k_B T + \text{cotgh} \hbar \omega_q / 2k_B T}{\omega_q - \omega + \hbar^{-1} \epsilon_b - i\delta} \right\}$$

4-20

Da equação de Dyson, dada por

$$G_R(\vec{k}, \omega) = G_R^0(\vec{k}, \omega) + G_R^0(\vec{k}, \omega) \hbar^{-1} \Sigma_R(k, \omega) G_R(k, \omega)$$

tiramos a função de Green para o polaron

$$G_R(\vec{k}, \omega) = \frac{1}{G_R^{0-1}(\vec{k}, \omega) - \hbar^{-1} \Sigma_R(k, \omega)} =$$

onde

$$G_R^{0-1}(\vec{k}, \omega) = \omega - \omega_k^0 + i\delta$$

assim

$$G(\vec{k}, \omega) = \frac{1}{\omega - \omega_k^0 - \text{Re}[\hbar^{-1} \Sigma(\vec{k}, \omega)] - i \text{Im}[\hbar^{-1} \Sigma(\vec{k}, \omega)]}$$

4-21

excluimos do denominador o termo imaginário  $i\delta$  devido a presença da parte imaginária de  $\Sigma_R$  que é finita.

Por intermédio do polo de 4-21 podemos obter o espectro de energia para o polaron, isto é,

$$\epsilon = \epsilon_k^0 + \text{Re} \Sigma_R(\vec{k}, \omega)$$

4-22

A parte real de  $\Sigma_R(\vec{k}, \omega)$  é calculada, então, a partir da expressão 4-20, logo

$$\text{Re}\Sigma_R(\vec{k}, \omega) = \frac{ng^2\hbar}{4} P \sum_q \left\{ \text{tgh}\epsilon_b / 2k_B T \left( \frac{1}{-\hbar\omega_q - \hbar\omega + \epsilon_b} - \frac{1}{\hbar\omega_q - \hbar\omega + \epsilon_b} \right) - \right. \\ \left. - \text{cotgh}\hbar\omega_q / 2k_B T \left( \frac{1}{-\hbar\omega_q - \hbar\omega + \epsilon_b} + \frac{1}{\hbar\omega_q - \hbar\omega + \epsilon_b} \right) \right\} \omega_q$$

onde  $\hbar^{-1}$  foi posto em evidência.

Estendendo a soma para uma integral na primeira zona de Brillouin e fazendo  $\hbar\omega = \epsilon$ , fica

$$\text{Re}\Sigma_R(\vec{k}, \epsilon) = - \frac{ng^2\hbar}{4} \cdot \frac{V}{(2\pi)^3} P \int \left\{ \text{tgh}\epsilon_b / 2k_B T \left( \frac{1}{\hbar\omega_q + \epsilon - \epsilon_b} + \frac{1}{\hbar\omega_q - \epsilon + \epsilon_b} \right) + \right. \\ \left. + \text{cotgh}\hbar\omega_q / 2k_B T \left( \frac{1}{\hbar\omega_q - \epsilon + \epsilon_b} - \frac{1}{\hbar\omega_q + \epsilon - \epsilon_b} \right) \right\} \omega_q d^3q \quad 4-23$$

Com a aproximação de Debye podemos escrever

$$\text{Re}\Sigma_R(\vec{k}, \epsilon) = - \frac{ng^2\hbar}{4} \frac{V}{(2\pi)^3} 4\pi P \int_0^{q_D} \left\{ \text{tgh}\epsilon_b / 2k_B T \left( \frac{1}{\hbar\omega_q + \epsilon - \epsilon_b} + \frac{1}{\hbar\omega_q - \epsilon + \epsilon_b} \right) \right. \\ \left. + \text{cotgh}(\hbar\omega_q / 2k_B T) \left( \frac{1}{\hbar\omega_q - \epsilon + \epsilon_b} - \frac{1}{\hbar\omega_q + \epsilon - \epsilon_b} \right) \right\} \omega_q q^2 d_q \quad 4-24$$

Na região de temperatura de interesse admitiremos que a maior contribuição à integral 4-24 é proveniente da região de integração para a qual se tem  $\hbar\omega_q \gg k_B T$ . Com isso podemos fazer a aproximação

$$\text{cotgh}\hbar\omega_q / 2k_B T = 1 + 2e^{-\hbar\omega_q / k_B T} \quad 4-25$$

Sabemos também que a densidade de elétrons de condução na

amostra usada é da ordem de  $10^8 \text{ cm}^{-3}$  e a de impurezas da ordem  $10^{16} \text{ cm}^{-3}$ . É apresentado, portanto, um número muito grande de estados disponíveis para captura elétron-fonon ressonante. Com isso um comportamento clássico é considerado, implicando que o potencial químico  $\mu$ , tende para  $-\infty$ . Como temos feito  $\varepsilon_b = \varepsilon'_b - \mu$ , onde  $\varepsilon'_b$  e  $\mu$  são tomados em relação à base da banda de condução, podemos fazer a aproximação

$$\text{tgh} \varepsilon_b / 2k_B T \rightarrow 1 \tag{4-26}$$

portanto usando 4-25 e 4-26 na 4-24 esta se reduz para

$$\text{Re} \Sigma_R(\vec{k}, \varepsilon) = - \frac{n \hbar g^2 V}{4\pi^2} P \int_0^{q_D} \left\{ \frac{1}{\hbar \omega_q - \varepsilon - |\varepsilon_b|} + e^{-\hbar \omega_q / k_B T} \left( \frac{1}{\hbar \omega_q - \varepsilon - |\varepsilon_b|} - \frac{1}{\hbar \omega_q + \varepsilon + |\varepsilon_b|} \right) \right\} \omega_q q^2 d q$$

$$\text{Re} \Sigma_R(\vec{k}, \varepsilon) = - \frac{n \hbar g^2 V}{4\pi^2 s^3 \hbar^3} P \int_0^{\hbar \omega_D} \left\{ \frac{1}{\hbar \omega_q - \varepsilon - |\varepsilon_b|} + e^{-\hbar \omega_q / k_B T} \left( \frac{1}{\hbar \omega_q - \varepsilon - |\varepsilon_b|} - \frac{1}{\hbar \omega_q + \varepsilon + |\varepsilon_b|} \right) \right\} (\hbar \omega_q)^3 d(\hbar \omega) \tag{4-27}$$

onde fizemos  $q = s^{-1} \omega_q$ ,  $s$  é a velocidade do som, e as energias  $\varepsilon$  e  $\varepsilon_b$  tomadas, agora, em relação à base da banda de condução. Fazendo a seguir

$$x = \hbar \omega_q / k_B T$$

resulta

$$\text{Re}\Sigma_R(\vec{k}, \epsilon) = - \frac{ng^2V(k_B T)^3}{4\pi^2\hbar^3s^3} p \int_0^{x_D} \left\{ \frac{1}{\frac{x - (\epsilon + |\epsilon_b|)}{k_B T}} + e^{-x} \left( \frac{1}{\frac{x - (\epsilon + |\epsilon_b|)}{k_B T}} - \frac{1}{\frac{x + (\epsilon + |\epsilon_b|)}{k_B T}} \right) \right\} x^3 dx$$

Fazendo agora

$$a = \frac{ng^2V}{4\pi^2\hbar^3s^3} \quad e \quad b = \frac{\epsilon + |\epsilon_b|}{k_B T}$$

fica

$$\text{Re}\Sigma_R(\vec{k}, \epsilon) = -a(k_B T)^3 p \int_0^{x_D} \left\{ \frac{1}{x-b} + e^{-x} \left( \frac{1}{x-b} - \frac{1}{x+b} \right) \right\} x^3 dx \quad 4-28$$

Temos as identidades

$$\frac{x^3 - b^3}{x-b} = x^2 + bx + b^2 ; \quad \frac{x^3}{x-b} = x^2 + bx + b^2 + \frac{b^3}{x-b}$$

4-29

$$\frac{x^3 + b^3}{x+b} = x^2 - bx + b^2 ; \quad \frac{x^3}{x+b} = x^2 - bx + b^2 - \frac{b^3}{x+b}$$

levando 4-29 na 4-28 obtemos

$$\begin{aligned} \text{Re}\Sigma_R(\vec{k}, \epsilon) = & -a(k_B T)^3 \left\{ \frac{x_D^3}{3} + \frac{bx_D^2}{2} + b^2 x_D + b^3 \ln \left| \frac{x_D - b}{b} \right| + \right. \\ & \left. + \int_0^{x_D} e^{-x} \left[ 2bx + \frac{b^3}{x-b} + \frac{b^3}{x+b} \right] dx \right\} \end{aligned} \quad 4-30$$

onde o primeiro termo de 4-28 foi integrado. Resta-nos agora efetuar a segunda integral. Segue então

$$I = \int_0^{\infty} e^{-x} \left[ 2bx + \frac{b^3}{x-b} + \frac{b^3}{x+b} \right] dx = 2b + b^3 \int_0^{\infty} \frac{e^{-x}}{x-b} dx + b^3 \int_0^{\infty} \frac{e^{-x}}{x+b} dx$$

onde o limite de integração foi estendido a  $+\infty$  porque a presença da exponencial no integrando garante sua convergência. Prossequimos, fazendo  $x \mp b = y$

$$I = 2b + b^3 \left[ e^{-b} \int_{-b}^{\infty} \frac{e^{-y} dy}{y} + e^b \int_b^{\infty} \frac{e^{-y} dy}{y} \right]$$

$$I = 2b + b^3 \left[ -E_i(b) e^{-b} + E_1(b) e^b \right] \quad 4-31$$

A função  $E_i(b)$  introduzida em 4-31 é a exponencial integral definida por

$$E_i(b) = - \int_{-b}^{\infty} \frac{e^{-y} dy}{y} \quad 4-32$$

e a função  $E_1(b)$ , também usada, está relacionada à  $E_i(b)$  por

$$E_1(b) = -E_i(-b) \quad 4-33$$

Tomemos a seguir a expansão assintótica de  $E_i(b)$  para  $b \rightarrow \infty$

$$E_i(b) = \frac{e^b}{b} \left( 1 + \frac{1}{b} + \frac{2!}{b^2} + \frac{3!}{b^3} + \dots \right) \quad 4-34$$

que de 4-33 nos dá também

$$E_1(b) = \frac{e^{-b}}{b} \left( 1 - \frac{1}{b} + \frac{2!}{b^2} - \frac{3!}{b^3} + \dots \right) \quad 4-35$$

Substituindo então 4-34 e 4-35 na 4-31, resulta

$$I = 2b + b^2 \left[ - \left( 1 + \frac{1}{b} + \frac{2!}{b^2} + \frac{3!}{b^3} \right) + \left( 1 - \frac{1}{b} + \frac{2!}{b^2} - \frac{3!}{b^3} \right) \right]$$

$$I = 2b + b^2 \left[ -\frac{2}{b} - \frac{2 \cdot 3!}{b^3} \right] = -\frac{12}{b} \quad 4-36$$

Consideramos apenas os quatro primeiros termos das expansões 4-34 e 4-35. Com este resultado a expressão 4-30 fica

$$\text{Re}\Sigma_R(\vec{k}, \epsilon) = -a(k_B T)^3 \left\{ -\frac{x_D^3}{3} + \frac{bx_D^2}{2} + b^2 x_D + b^3 \ln \left| \frac{x_D}{b} - 1 \right| - \frac{12}{b} \right\} \quad 4-37$$

Lembrando agora que  $x_D = \hbar\omega_D/k_B T$  e  $b = (\epsilon + |\epsilon_b|)/k_B T$ , notamos que finalmente uma expressão para  $\text{Re}\Sigma(\vec{k}, \epsilon; T)$ , explicitamente dependente da temperatura, é obtida. Com isso a 4-37 fica

$$\begin{aligned} \text{Re}\Sigma_R(\vec{k}, \epsilon; T) = & -a(k_B T)^3 \left\{ -\frac{1}{3} \frac{(\hbar\omega_D)^3}{(k_B T)^3} + \frac{1}{2} \frac{(\hbar\omega_D)^2 (\epsilon + |\epsilon_b|)}{(k_B T)^3} + \frac{\hbar\omega_D (\epsilon + |\epsilon_b|)^2}{(k_B T)^3} + \right. \\ & \left. + \frac{(\epsilon + |\epsilon_b|)^3}{(k_B T)^3} \ln \left| \frac{\hbar\omega_D}{\epsilon + |\epsilon_b|} - 1 \right| - \frac{12k_B T}{\epsilon + |\epsilon_b|} \right\} \end{aligned}$$

e daí

$$\begin{aligned} \text{Re}\Sigma_R(\vec{k}, \epsilon; T) = & -a \left\{ \frac{(\hbar\omega_D)^3}{3} + \frac{(\hbar\omega_D)^2 (\epsilon + |\epsilon_b|)}{2} + \hbar\omega_D (\epsilon + |\epsilon_b|)^2 + \right. \\ & \left. + (\epsilon + |\epsilon_b|)^3 \ln \left| \frac{\hbar\omega_D}{\epsilon + |\epsilon_b|} - 1 \right| - \left( \frac{12k_B^4}{\epsilon + |\epsilon_b|} \right) T^4 \right\} \end{aligned}$$

Escrevendo numa forma compacta temos

$$\text{Re}\Sigma_R(\vec{k}, \epsilon; T) = -a \{ A_k - B_k T^4 \} \quad 4-38$$

com

$$A_k = \frac{(\hbar\omega_D)^3}{3} + \frac{(\hbar\omega_D)^2}{2} (\epsilon + |\epsilon_b|) + \hbar\omega_D (\epsilon + |\epsilon_b|)^2 + (\epsilon + |\epsilon_b|)^3 \ln \left| \frac{\hbar\omega_D}{\epsilon + |\epsilon_b|} - 1 \right| \quad 4-39$$

$$B_k = \frac{12k_B^4}{\epsilon + |\epsilon_b|} \quad 4-40$$

Temos de 4-22

$$\epsilon = \epsilon_k^0 + \text{Re}\Sigma_R(\vec{k}, \epsilon; T)$$

onde  $\epsilon_k^0$  é a energia do polaron na ausência de "traps"

Admitindo uma banda parabólica segue

$$\Delta + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_p} + \text{Re}\Sigma_R(\vec{k}, \epsilon; T) \quad 4-41$$

com  $m_p$  representando a massa efetiva do polaron e  $m^*$  sua massa renormalizada devido o efeito das impurezas. A correção da energia,  $\text{Re}\Sigma_R$ , pode ser expandida em série de Taylor em torno de ( $k = 0$ ,  $\epsilon = \Delta$ )

$$\begin{aligned} \text{Re}\Sigma_R(\vec{k}, \epsilon; T) &= \text{Re}\Sigma_R(0, \Delta; T) + \left. \frac{\partial \text{Re}\Sigma_R(\vec{k}, \epsilon; T)}{\partial \vec{k}} \right|_{\substack{\vec{k}=0 \\ \epsilon=\Delta}} \cdot \vec{k} + \left. \frac{\partial \text{Re}\Sigma_R(\vec{k}, \epsilon; T)}{\partial \epsilon} \right|_{\substack{\vec{k}=0 \\ \epsilon=\Delta}} \cdot \epsilon + \\ &+ \frac{1}{2} \left. \frac{\partial^2 \text{Re}\Sigma_R(\vec{k}, \epsilon; T)}{\partial k^2} \right|_{\substack{k=0 \\ \epsilon=\Delta}} k^2 + \left. \frac{\partial^2 \text{Re}\Sigma_R(\vec{k}, \epsilon; T)}{\partial \epsilon^2} \right|_{\substack{k=0 \\ \epsilon=\Delta}} \epsilon^2 + \dots \end{aligned}$$

Negligenciando os termos em  $\epsilon$  e tomando apenas até os termos de segunda ordem em  $k$  temos

$$\Delta + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_p} + \frac{1}{2} \left. \frac{\partial^2 \text{Re}\Sigma_R(\vec{k}, \epsilon; T)}{\partial k^2} \right|_{\substack{k=0 \\ \epsilon=\Delta}} k^2 + \text{Re}\Sigma_R(0, \Delta; T)$$

de onde tiramos

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_p} + \frac{k^2}{2} \left. \frac{\partial^2 \text{Re}\Sigma_R(\vec{k}, \epsilon; T)}{\partial k^2} \right|_{\substack{k=0 \\ \epsilon=\Delta}}$$

e portanto

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{m_p} + \frac{1}{\hbar^2} \left. \frac{\partial^2 \text{Re}\Sigma_R(\vec{k}, \epsilon; T)}{\partial k^2} \right|_{\substack{k=0 \\ \epsilon=\Delta}} \quad 4-42$$

Usando as expressões 4-38, 4-39 e 4-40 calculamos a derivada segunda de  $\text{Re}\Sigma$ , segue então

$$\left. \frac{\partial^2 \text{Re}\Sigma_R}{\partial k^2} \right|_{\substack{k=0 \\ \epsilon=\Delta}} = -a \left\{ \frac{\partial^2 A_k}{\partial k^2} - \frac{\partial B_k}{\partial k^2} T^4 \right\} \Big|_{\substack{k=0 \\ \epsilon=\Delta}} \quad 4-43$$

como

$$B_k = \frac{12k_B^4}{\epsilon + |\epsilon_b|} \quad \text{e} \quad \epsilon = \Delta + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$$

teremos

$$\begin{aligned} \frac{\partial B_k}{\partial k} &= \left( \frac{\partial B}{\partial \epsilon} \right) \left( \frac{\partial \epsilon}{\partial k} \right) = - \frac{\hbar^2 k}{m^*} \frac{12k_B^4}{(\epsilon + |\epsilon_b|)^2} \\ \left. \frac{\partial^2 B_k}{\partial k^2} \right|_{\substack{k=0 \\ \epsilon=\Delta}} &= - \frac{\hbar^2}{m^*} \left\{ \frac{12k_B^4}{(\epsilon + |\epsilon_b|)^2} - k \left( \frac{\hbar^2 k}{m^*} \right) \frac{24k_B^4}{(\epsilon + |\epsilon_b|)^3} \right\} \Big|_{\substack{k=0 \\ \epsilon=\Delta}} \\ &= - \frac{\hbar^2}{m^*} \frac{12k_B^4}{(\Delta + |\epsilon_b|)^2} = - \frac{\hbar^2}{m^*} B \quad 4-44 \end{aligned}$$

Para derivada segunda de  $A_k$  faremos

$$\begin{aligned} \frac{\partial A_k}{\partial k} &= \left( \frac{\partial A_k}{\partial \epsilon} \right) \left( \frac{\partial \epsilon}{\partial k} \right) = \frac{\hbar^2 k}{m^*} \left( \frac{\partial A_k}{\partial \epsilon} \right) \\ \left. \frac{\partial^2 A_k}{\partial k^2} \right|_{\substack{k=0 \\ \epsilon=\Delta}} &= \frac{\hbar^2}{m^*} \left\{ \frac{\partial A_k}{\partial \epsilon} + k \left( \frac{\hbar^2 k}{m^*} \right) \frac{\partial^2 A_k}{\partial \epsilon^2} \right\} \Big|_{\substack{k=0 \\ \epsilon=\Delta}} = \frac{\hbar^2}{m^*} \frac{\partial A_k}{\partial \epsilon} \Big|_{\substack{k=0 \\ \epsilon=\Delta}} = \frac{\hbar^2}{m^*} A \quad 4-45 \end{aligned}$$



onde fizemos

$$B = \frac{12k_B^4}{(\Delta + |\epsilon_b|)^2} \quad \text{e} \quad A = \left. \frac{\partial A_k}{\partial \epsilon} \right|_{\substack{k=0 \\ \epsilon=\Delta}} \quad 4-46$$

Substituindo, por sua vez, 4-44 e 4-45 na 4-43 obtemos

$$\left. \frac{\partial^2 \text{Re} \Sigma_R(\vec{k}, \epsilon; T)}{\partial k^2} \right|_{\substack{k=0 \\ \epsilon=\Delta}} = -a \frac{\hbar^2}{m^*} \{A + BT^4\} \quad 4-47$$

que levada na 4-42 fornece

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{m_p} - \frac{a}{m^*} \{A + BT^4\}$$

ou

$$\frac{m^*}{m_p} = (1 + aA) + aBT^4$$

Expressando a massa efetiva em unidade de massa do elétron livre, fica

$$\frac{m^*}{m_e} = 0,27(1 + aA) + 0,27aBT^4 \quad 4-48$$

onde usamos o valor experimental da massa do polaron medida a  $18^\circ\text{K}$ ,  $m_p = (0,27 \pm 0,01)m_e^{(5)}$ .

Desejamos agora confrontar este resultado com os dados experimentais mostrados na fig. 1. Com este intuito, lançaremos num gráfico  $\frac{m^*(T)}{m_e} \times T^4$ , os dados lá apresentados.

Segue, então, na fig. 9 a curva obtida

Daí notamos que é possível um bom ajustamento para uma reta do tipo

$$\frac{m^*(T)}{m_e} = A' + B'T^4 \quad 4-49$$

Isto indica, portanto, que o nosso resultado está correto. É desejável, entretanto, comparar os valores de  $A'$  e  $B'$ , medidos graficamente a partir da fig. 9, com os valores das constantes  $A$  e  $B$  presentes na 4-48. Para isto encontramos, comparando 4-48 e 4-49

$$A' = 0,27(1 + aA) \quad 4-50$$

$$B' = 0,27 aB$$

de onde tiramos

$$\frac{B}{A} = \frac{B'}{A' - 0,27} \quad 4-51$$

Note que relacionando  $B$  e  $A$  desta maneira eliminamos a constante  $a$  dada por

$$a = \frac{ng^2V}{4\pi^2\hbar^3s^3}$$

que contém grandezas que não são bem conhecidas, tais como  $n$ ,  $g$  e  $V$ .

Os valores encontrados para  $A'$  e  $B'$  foram

$$A' = 0,287$$

$$B' = 1,25 \times 10^{-7}/^\circ\text{K}^4$$

que resulta a partir de 4-51

$$\frac{B}{A} = 74,0 \times 10^{-7}/^\circ\text{K}^4 \quad 4-52$$

De 4-46 temos, considerando que  $\Delta \approx 0$

$$B = \frac{12k_B^4}{|\epsilon_b|^2} \quad \text{e} \quad A = \left. \frac{\partial A_k}{\partial \epsilon} \right|_{\substack{k=0 \\ \epsilon=0}}$$

por outro lado de 4-39 tiramos

$$\left. \frac{\partial A_k}{\partial \epsilon} \right|_{\substack{k=0 \\ \epsilon=0}} = \frac{(\hbar\omega_D)^2}{2} + 2\hbar\omega_D |\epsilon_b| + 3|\epsilon_b|^3 \ln \left| \frac{\hbar\omega_D}{|\epsilon_b|} - 1 \right| - \frac{\hbar\omega_D |\epsilon_b|}{\hbar\omega_D - |\epsilon_b|}$$

e, portanto,

$$\begin{aligned} \frac{B}{A} &= \frac{12k_B^4}{|\epsilon_b|^2 \left\{ \frac{(\hbar\omega_D)^2}{2} + 2\hbar\omega_D |\epsilon_b| + 3|\epsilon_b|^3 \ln \left| \frac{\hbar\omega_D}{|\epsilon_b|} - 1 \right| - \frac{\hbar\omega_D |\epsilon_b|}{\hbar\omega_D - |\epsilon_b|} \right\}} = \\ &= 74,0 \times 10^{-7} / \text{O}k^4 \end{aligned} \quad 4-53$$

A expressão acima depende de  $\hbar\omega_D$  que, para o AgBr, é  $\approx 13\text{meV}$ , e depende também de  $|\epsilon_b|$ . O valor de  $|\epsilon_b|$  que a satisfaz é  $\approx 8,2\text{meV}$ . Ora, o valor estimado para a energia do estado ligado das impurezas, com  $n = 2$ , para o qual foi previsto a interação elétron-fonon ressonante é de  $\approx 8\text{meV}$ <sup>(1,7)</sup>. Dessa forma, estamos convencidos, diante destes resultados, que a interação ressonante proposta por S. Rodriguez é o processo responsável pela dependência da temperatura observada por Baxter.

Neste ponto, queremos deixar como sugestão, um outro aspecto importante que ainda pode ser abordado. É o cálculo da largura da linha. Como sabemos esta pode ser obtida também da Função de Green e, para o problema em questão, poderá ser determinada a partir da parte imaginária da expressão 4-20. O conhecimento de  $\text{Im}\Sigma_R(\vec{k}, \epsilon; T)$  obtido, então,

poderã ser comparado com resultados experimentais da fig. 2 , com atençãõ especial voltada ã acentuada assimetria observada para baixas temperaturas.

A P Ê N D I C E

CÁLCULO DA MASSA EFETIVA, CONSIDERANDO UM CRISTAL PURO

A - I INTRODUÇÃO

No capítulo IV encontramos uma expressão para massa efetiva do elétron levando-se em conta o efeito de impurezas. Da concordância do resultado obtido com o observado experimentalmente pudemos concluir que, na verdade, o efeito observado por Baxter não é uma característica de um cristal perfeito. Para termos de comparação resolvemos apresentar, neste apêndice, o cálculo da massa efetiva, supondo um cristal puro. Inicialmente, veremos a contribuição devida aos fonons acústicos e depois devido aos fonons ópticos. O diagrama que representa este processo é do mesmo tipo apresentado na fig. 6 porém com a diferença que, ao invés do estado ligado  $|b\rangle$ , vamos ter agora o estado  $|\vec{k}-\vec{q}\rangle$ , na banda de condução.

A - II ACOPLAMENTO COM FONONS ACÚSTICOS

Considerando que a interação elétron-fonon  $g(\vec{q})$ , também é constante neste caso<sup>(8)</sup>, e que as aproximações 4-24 e 4-25, são ainda admitidas, poderemos calcular  $Re\Sigma_R(\vec{k}, \epsilon)$ , a partir de 4-20. Segue, então,

$$Re\Sigma_R(\vec{k}, \epsilon) = - \frac{\hbar g^2}{2V} P \sum_q \left\{ \frac{1}{\hbar\omega_q - \epsilon_k + \epsilon_{k-q}} + \right.$$

$$\left. \mp e^{-\frac{\hbar\omega_q}{k_B T}} \left[ \frac{1}{\hbar\omega_q - \epsilon_k + \epsilon_{k-q}} - \frac{1}{\hbar\omega_q + \epsilon_k - \epsilon_{k-q}} \right] \right\} \omega_q^{-1} \quad A-1$$

Note que levamos em conta que  $\epsilon_b \rightarrow \epsilon_{\vec{k}-\vec{q}}$ .

Transformando a soma A-1 numa integral e fazendo  $\epsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ ,  $\epsilon_{\vec{k}-\vec{q}} = \frac{\hbar^2 (\vec{k}-\vec{q})^2}{2m}$ , fica

$$\begin{aligned} \text{Re}\Sigma_R(\vec{k}) = & -\frac{\hbar g^2 s}{2(2\pi)^2} \int_0^\pi \sin\theta \, d\theta \int_0^{q_D} \left\{ \frac{1}{\hbar(s-v\cos\theta) + \frac{\hbar^2 q}{2m}} + \right. \\ & \left. + e^{-\frac{\hbar s q}{k_B T}} \left[ \frac{1}{\hbar(s-v\cos\theta) + \frac{\hbar^2 q}{2m}} - \frac{1}{\hbar(s+v\cos\theta) - \frac{\hbar^2 q}{2m}} \right] \right\} q^2 dq \quad \text{A-2} \end{aligned}$$

onde a aproximação de Debye foi considerada.

Fazendo

$$a = \frac{2m}{\hbar}(s-v\cos\theta) \quad \text{e} \quad a' = \frac{2m}{\hbar}(s+v\cos\theta) \quad \text{A-3}$$

fica

$$\text{Re}\Sigma_R(\vec{k}) = -\frac{mg^2 s}{(2\pi)^2 \hbar} \int_0^\pi \sin\theta \, d\theta \int_0^{q_D} \frac{1}{q+a} + e^{-\frac{\hbar s q}{k_B T}} \left( \frac{1}{q+a} + \frac{1}{q+a'} \right) q^2 dq \quad \text{A-4}$$

Segue agora o cálculo da 1a. integral. Temos

$$\int_0^{q_D} \frac{q^2}{q+a} dq = \frac{q_D^2}{2} - a q_D + a^2 \ln \frac{q_D+a}{a}$$

e daí

$$\begin{aligned} & -\int_1^{-1} d(\cos\theta) \left\{ \frac{q_D^2}{2} - a q_D + a^2 \ln \frac{q_D+a}{a} \right\} = \\ & = q_D^2 - \frac{4msq_D}{\hbar} - \int_1^{-1} d(\cos\theta) a^2 \ln \frac{q_D+a}{a} \quad \text{A-5} \end{aligned}$$

Aquí nós temos  $q_D \gg a$  logo

$$\int_1^{-1} a^2 \ln \frac{q_D + a}{a} d(\cos\theta) = - \int_1^{-1} a^2 \ln \left( \frac{a}{q_D} \right) d(\cos\theta) \quad A-6$$

de A-3 fazemos

$$d(\cos\theta) = - \frac{\hbar}{2mv} da$$

portanto usando esta transformação em A-6, fica

$$\begin{aligned} \frac{\hbar}{2mv} \int_{a(1)}^{a(-1)} a^2 \ln \left( \frac{a}{q_D} \right) da &= \frac{\hbar}{2mv} \left[ \frac{a(-1)^3}{3} \cdot \right. \\ &\cdot \left. \left[ \ln(a(-1)/q_D) - \frac{1}{3} \right] - \frac{a(1)^3}{3} \left[ \ln(a(1)/q_D) - \frac{1}{3} \right] \right] \\ &= - \frac{\hbar}{2mv} \left[ \frac{1}{3} \left( \frac{2m}{\hbar} \right)^3 \left[ s^3 \ln \left( \frac{a(1)}{a(-1)} \right) + 3sv^2 \ln \left( \frac{a(1)}{a(-1)} \right) - 3s^2v \ln(a(1)a(-1)) - \right. \right. \\ &\left. \left. - v^3 \ln(a(1)a(-1)) + 2s^2v + \frac{2}{3} v^3 \right] \right] \quad A-7 \end{aligned}$$

onde fizemos uso novamente de A-3.

Seja as expansões

$$\ln \left( \frac{a(1)}{a(-1)} \right) = \ln \frac{s-v}{s+v} = - 2 \frac{v}{s} - \frac{2}{3} \left( \frac{v}{s} \right)^3$$

$$\ln \left( \frac{a(1)a(-1)}{q_D} \right) = \ln \left( \frac{2m}{\hbar q_D} \right)^2 (s^2 - v^2) = \ln \left( \frac{2ms}{\hbar q_D} \right)^2 \left( 1 - \frac{v^2}{s^2} \right) = \ln \left( \frac{2ms}{\hbar q_D} \right)^2 - \left( \frac{v}{s} \right)^2$$

levadas na A-7 resulta

$$\frac{\hbar}{2mv} \left[ \frac{1}{3} \left( \frac{2m}{\hbar} \right)^2 \left[ 3v^3 + v^3 \ln \left( \frac{2ms}{\hbar q_D} \right)^2 + 3s^2v \ln \left( \frac{2ms}{\hbar q_D} \right)^2 \right] \right] \quad A-8$$

Substituindo agora A-8 na A-5 obtemos a primeira integral de A-4.

$$\int_0^\pi \sin\theta \, d\theta \int_0^{q_D} \frac{q^2 dq}{q+a} = q_D^2 - \frac{4msq_D}{\hbar} - \left(\frac{2ms}{\hbar}\right)^2 \ln\left(\frac{2ms}{\hbar q_D}\right)^2 - \frac{1}{3}\left(\frac{2m}{\hbar}\right)^2 \left[3 + \ln\left(\frac{2ms}{\hbar q_D}\right)^2\right] v^2 \quad \text{A-9}$$

Cálculo do termo dependente da temperatura na expressão A-4. Temos

$$\int_0^\pi \sin\theta \, d\theta \int_0^{q_D} e^{-\hbar s q / k_B T} \left(\frac{1}{q+a} + \frac{1}{q-a'}\right) q^2 dq = -\left(\frac{k_B T}{\hbar s}\right)^2 \int_1^{-1} d(\cos\theta) \int_0^\infty e^{-x} \left(\frac{1}{x+\alpha} + \frac{1}{x-\alpha'}\right) x^2 dx \quad \text{A-10}$$

onde fizemos  $q = \frac{k_B T}{\hbar s} x$ ,  $\alpha = \frac{\hbar s}{k_B T} a$  e  $\alpha' = \frac{\hbar s}{k_B T} a'$

Usando as identidades

$$\frac{x^2}{x+\alpha} = x - \alpha + \frac{\alpha}{x+\alpha} \quad \text{A-11}$$

$$\frac{x^2}{x-\alpha'} = x + \alpha' + \frac{\alpha'}{x-\alpha'}$$

obtemos

$$-\left(\frac{k_B T}{\hbar s}\right)^2 \int_1^{-1} d(\cos\theta) \left\{ 2 + \alpha' - \alpha + \alpha^2 \int_0^\infty \frac{e^{-x} dx}{x+\alpha} + \alpha'^2 \int_0^\infty \frac{e^{-x} dx}{x-\alpha'} \right\} = \left(\frac{k_B T}{\hbar s}\right)^2 \left\{ 4 - \int_1^{-1} d(\cos\theta) \left[ \alpha^2 e^\alpha E_1(\alpha) - \alpha'^2 e^{\alpha'} E_1(\alpha') \right] \right\} \quad \text{A-12}$$

Tomando as expansões

$$E_1(\alpha) = c + \ln|\alpha| + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\alpha^n}{n n!}$$



$$E_1(\alpha) = -E_1(-\alpha) = -\left[ c + \ln|\alpha| + \sum_1^{\infty} \frac{(-\alpha)^n}{n n!} \right]$$

onde  $c$  é a constante de Euler, dada por

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \left( 1 + \frac{1}{2} + \dots + \frac{1}{n} - \ln n \right) = c = 0,5772 \dots$$

e considerando regiões de temperaturas para as quais  $\alpha, \alpha' \ll 1$  (por exemplo para  $T > 10^0 \text{k}$  temos  $\alpha$  e  $\alpha' < 0,1$ ), podemos fazer

$$E_1(\alpha) \approx c + \ln \alpha$$

$$E_1(\alpha') \approx -c - \ln \alpha'$$

e

$$e^{\alpha} \approx e^{-\alpha'} \approx 1$$

Com isto A-12 fica

$$4 \left( \frac{k_B T}{\hbar s} \right)^2 - \left( \frac{k_B T}{\hbar s} \right)^2 \int_1^{-1} d(\cos \theta) \left\{ \left( \frac{2ms}{k_B T} \right)^2 (s - v \cos \theta)^2 [-c - \ln \alpha] \right. \\ \left. - \left( \frac{2ms}{k_B T} \right)^2 (s + v \cos \theta)^2 [c + \ln \alpha'] \right\}$$

$$= 4 \left( \frac{k_B T}{\hbar s} \right)^2 + \left( \frac{2m}{\hbar} \right)^2 \int_1^{-1} d(\cos \theta) \left\{ c [2s^2 + 2v^2 \cos^2 \theta] + s^2 \ln(\alpha \alpha') \right. \\ \left. + 2sv \cos \theta \ln \left( \frac{\alpha'}{\alpha} \right) + v^2 \cos^2 \theta \ln(\alpha \alpha') \right\}$$

A-13

Façamos agora as seguintes expansões em A-13

$$\ln(\alpha \alpha') = \ln \left( \frac{2ms^2}{k_B T} \right)^2 \left( 1 - \frac{v^2}{s^2} \cos^2 \theta \right) \approx \ln \left( \frac{2ms^2}{k_B T} \right)^2 - \left( \frac{v}{s} \right)^2 \cos^2 \theta$$

$$\ln \frac{\alpha'}{\alpha} = \ln \frac{1 + \frac{v}{s} \cos \theta}{1 - \frac{v}{s} \cos \theta} \approx \frac{2v}{s} \cos \theta$$

daí

$$4\left(\frac{k_B T}{\hbar s}\right)^2 - 4cs^2 \left(\frac{2m}{\hbar}\right)^2 - 2s^2 \left(\frac{2m}{\hbar}\right)^2 \ln\left(\frac{2ms}{k_B T}\right)^2 - \left(\frac{2m}{\hbar}\right)^2 \left[\frac{4}{3}c + 2 - \frac{2}{3}\ln\left(\frac{k_B T}{2ms^2}\right)^2\right] v^2 \quad A-14$$

Reunindo, a seguir, os termos em  $v^2$  de A-9 e A-14 obtemos

$$-\left(\frac{2m}{\hbar}\right)^2 \left\{3 + \frac{4}{3}c - \frac{1}{3}\ln\left(\frac{\hbar q_D}{2ms}\right)^2 - \frac{2}{3}\ln\left(\frac{k_B T}{2ms^2}\right)^2\right\} v^2 \quad A-15$$

Por outro lado temos

$$\varepsilon = \varepsilon_k + \text{Re}\Sigma_R(k)$$

para a qual admitiremos

$$\Delta + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \text{Re}\Sigma_R(k) \quad A-16$$

Portanto de A-15 e A-16 obtemos

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \frac{2m^2 g^2 s}{3\pi^2 \hbar^3} \left\{2\ln\left(\frac{\hbar q_D}{2ms}\right) - 4c - 9 + 4\ln\left(\frac{k_B T}{2ms^2}\right)\right\} \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

onde substituímos  $v^2 = \left(\frac{\hbar k}{m}\right)^2$ .

E daí

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{m} - \frac{1}{m} \left\{ \frac{2m^2 g^2 s}{3\pi^2 \hbar^3} \left[ 2\ln\left(\frac{\hbar q_D}{2ms}\right) - 11,3 + 4\ln\left(\frac{k_B T}{2ms^2}\right) \right] \right\} \quad A-17$$

pondo  $c = 0,58$ .

Finalmente de A-17 escrevemos

$$\frac{m^* - m}{m} = \frac{4m^2 g^2 s}{3\pi^2 \hbar^3} \left\{ \ln\left(\frac{\hbar q_D}{2ms}\right) - 6,7 + 2\ln\left(\frac{k_B T}{2ms^2}\right) \right\} \quad A-18$$

que representa a variação da massa efetiva do elétron com a temperatura, devido efeito de fonons acústicos. Note que quando  $T \rightarrow 0, \ln T \rightarrow \infty$ .

Isto se deve ao fato da aproximação feita para  $E_1(\alpha)$  e  $E_1(\alpha')$  só valer para  $T$  não muito pequeno. Acima de  $T = 10^0 k$  por exemplo, esta aproximação é boa.

Comparando a dependência em  $T$  verificada no cap. IV com a dependência logarítmica acima vemos que esta é irrelevante.

### A - III ACOPLAMENTO COM FONONS ÓPTICOS

Para este caso poderemos novamente partir da equação A-1, porém novas modificações devem ser feitas. Por exemplo a interação elétron fonon agora é proporcional a  $1/q$ , isto é

$$g^2(\vec{q}) = |\langle \vec{k}-\vec{q}; 1_q | H' | \vec{k}; 0_q \rangle|^2 = \frac{1}{q^2} g^2 \quad \text{A-19}$$

que pode ser visto da Hamiltoniana de Fröhlich dada no cap. III pela expressão III-28. Por outro lado admitiremos também que a frequência dos fonons  $\omega_q$  é constante. Com isto temos

$$\begin{aligned} \text{Re}\Sigma_R(\vec{k}) = & -\frac{\hbar}{V} \sum_q g^2(\vec{q}) \left\{ \frac{1}{\hbar\omega_\ell - \epsilon_k + \epsilon_{k-q}} + \right. \\ & \left. + e^{-\hbar\omega_\ell/k_B T} \left[ \frac{1}{\hbar\omega_\ell - \epsilon_k + \epsilon_{k-q}} - \frac{1}{\hbar\omega_\ell + \epsilon_k - \epsilon_{k-q}} \right] \right\} \omega_\ell \quad \text{A-20} \end{aligned}$$

Fazendo uso de A-19 e das relações

$$\epsilon_k = \frac{\hbar^2 m^2}{2m} \quad , \quad \epsilon_{k-q} = \frac{\hbar^2}{2m} (\vec{k}-\vec{q})^2$$

fica

$$\begin{aligned} \text{Re}\Sigma_R(\vec{k}) = & -\frac{\hbar g^2 \omega_\ell}{V} \sum_q \frac{1}{q^2} \left[ \frac{1}{\hbar \omega_\ell - \frac{\hbar^2 k q \cos \theta}{m} + \frac{\hbar^2 q^2}{2m}} + \right. \\ & \left. + e^{-\frac{\hbar \omega_\ell}{k_B T}} \left[ \frac{1}{\hbar \omega_\ell - \frac{\hbar^2 k q \cos \theta}{m} + \frac{\hbar^2 q^2}{2m}} - \frac{1}{\hbar \omega_\ell + \frac{\hbar^2 k q \cos \theta}{m} - \frac{\hbar^2 q^2}{2m}} \right] \right] \quad \text{A-21} \end{aligned}$$

Transformando a soma numa integral e pondo  $\hbar^2/2m$  em evidência, temos

$$\begin{aligned} \text{Re}\Sigma_R(\vec{k}) = & -\frac{2mg^2 \omega_\ell}{(2\pi)^2 \hbar} \int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^{q_D} \frac{1}{q^2 - 2kq \cos \theta + q^2} + \\ & + e^{-\frac{\hbar \omega_\ell}{k_B T}} \left( \frac{1}{q^2 - 2kq \cos \theta + q^2} - \frac{1}{q^2 + 2kq \cos \theta - q^2} \right) dq \quad \text{A-22} \end{aligned}$$

onde fizemos  $q_\ell^2 = \frac{2m\omega_\ell}{\hbar}$ .

Fazendo desta vez

$$x' = \frac{k}{q_\ell} \quad \text{e} \quad x = \frac{q}{q_\ell}$$

vem

$$\begin{aligned} \text{Re}\Sigma_R(\vec{k}) = & \frac{2mg^2 \omega_\ell}{(2\pi)^2 \hbar q_\ell} \int_1^{-1} d(\cos \theta) \int_0^{x_D} \frac{1}{1 - 2xx' \cos \theta + x^2} + \\ & + e^{-\frac{\hbar \omega_\ell}{k_B T}} \left( \frac{1}{1 - 2xx' \cos \theta + x^2} - \frac{1}{1 + 2xx' \cos \theta - x^2} \right) dx \quad \text{A-23} \end{aligned}$$

Para elétron lento temos  $\frac{k}{q_\ell} \ll 1$ . Admitindo por outro lado que  $q_\ell > q_D$ , segue as expansões

$$\frac{1}{1 - 2xx' \cos \theta + x^2} = \frac{1}{1+x^2} \left\{ 1 + \frac{2xx' \cos \theta}{1+x^2} + \frac{4x^2 x'^2 \cos^2 \theta}{(1+x^2)^2} + \dots \right\} \quad \text{A-24}$$

$$\frac{1}{1+2xx' \cos\theta - x'^2} = \frac{1}{1-x'^2} \left\{ 1 - \frac{2xx' \cos\theta}{1-x'^2} + \frac{4x^2 x'^2 \cos^2\theta}{1-x'^2} - \dots \right\} \quad \text{A-24}$$

Fazendo estas expansões em A-23 e efetuando a integração em  $\cos\theta$  resulta

$$\begin{aligned} \text{Re}\Sigma_R(\vec{k}) = & - \frac{2mg^2\omega_\ell}{(2\pi)^2\hbar^3q_\ell} \left\{ \int_0^{x_D} \frac{dx}{1+x^2} \left( 2 + \frac{8x^2x'^2}{3(1+x^2)^2} \right) + \right. \\ & \left. + e^{-\frac{\hbar\omega_\ell}{k_B T}} \int_0^{x_D} \left[ \frac{1}{1+x^2} \left( 2 + \frac{8x^2x'^2}{3(1+x^2)^2} \right) - \frac{1}{1-x^2} \left( 2 + \frac{8x^2x'^2}{3(1-x^2)^2} \right) \right] dx \right\} \quad \text{A-25} \end{aligned}$$

onde tomamos apenas até o termo em  $x'^2$ .

Agrupando os termos em  $x'^2 = \left(\frac{k}{q}\right)^2$  obtemos

$$- \frac{16mg^2\omega_\ell}{3(2\pi)^2\hbar^3q_\ell^3} \left\{ \int_0^\infty \frac{x^2 dx}{(1+x^2)^3} + e^{-\frac{\hbar\omega_\ell}{k_B T}} \int_0^{x_D} \left( \frac{1}{(1+x^2)^3} - \frac{1}{(1-x^2)^3} \right) x^2 dx \right\} k^2 \quad \text{A-26}$$

e portanto

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \left\{ A + B e^{-\hbar\omega_\ell/k_B T} \right\} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad \text{A-27}$$

onde

$$A = \frac{8m^2 g^2 \omega_\ell}{3\pi^2 \hbar^3 q_\ell^3} \int_0^\infty \frac{x^2 dx}{(1+x^2)^3} \quad ; \quad B = \frac{8m^2 g^2 \omega_\ell}{3\pi^2 \hbar^3 q_\ell^3} \int_0^{x_D} \left( \frac{1}{(1+x^2)^3} - \frac{1}{(1-x^2)^3} \right) x^2 dx$$

De A-27 tiramos finalmente

$$\frac{m^*}{m} = 1 + A + B e^{-\frac{\hbar\omega_\ell}{k_B T}} \quad \text{A-28}$$

que é o resultado esperado<sup>(6)</sup>. Esta dependência, apesar de exponencial, está muito longe de contribuir significativamente ao efeito observado, da fig. 1. Isto pode ser visto considerando que, para o AgBr,  $\hbar\omega_\ell = k_B \theta_\ell \approx 200 k_B$ . Logo  $e^{-200/T}$  é muito pequeno na região  $T < 200^\circ\text{K}$ .

Pode-se verificar na expressão A-28 que

$$A = \frac{1}{6} \alpha$$

onde  $\alpha$  é a constante de acoplamento adimensional introduzida por por Fröhlich.

R E F E R Ê N C I A S

1. J. E. Baxter, G. Ascarelli and S. Rodriguez *Phys. Rev. Letters*, 27, 100 (1971).
2. S. Rodriguez; *Resonant Electron-Phonon Interaction in Solids. "Polaron in Ionic Crystals and Polar Semi-conductors"*, Edited by Josef T. Devreese (North-Holland).
3. H. Fröhlich, *Proc. Roy. Soc. A* 160, 230 (1973).
4. Abrikosov, Gorcov and Dzialoshinski, *"Methods of Quantum Field Theory in Statistical Physics"*, pag. 182, Prentice Hall, Inc(1963).
5. G. Ascarelli; *Polaron in Cyclotron Resonance. "Polarons and Excitons"*. Edited by C. G. Kuper and G. D. Whitfield (Oliver & Boyd).
6. T. Fulton, *Phys. Rev.* 103, 1712 (1956).
7. D. W. Langer and C. J. Vesely, *Phys. Rev. B1*, 4784 (1970).
8. Kittel, *"Quantum Theory of Solids"*, pag. 134, John Wiley.