ROBERTO ALVES NOGUEIRA

HAMILTONIANA DE HOLSTEIN PARA PEQUENOS POLARONS E UM MODELO PARA O EFEITO FOTOMAGNÉTICO

BELO HORIZONTE
1973

HAMILTONIANA DE HOLSTEIN PARA PEQUENOS POLARONS E UM MODELO PARA O EFEITO FOTOMAGNETICO

ROBERTO ALVES NOGUEIRA

Tese de mestrado apresentada ao Instituto de Ciencias Exatas da U F M G

BELO HORIZONTE

1973

À memória de
Giovani Falieri

"Sapo pula não por buniteza mas porém por percisão"

(provérbio popular)

AGRADECIMENTOS

- Aos professores Helmut Reik e Francisco César Barreto pela orientação desta tese.

- Aos professores Ramayana Gazzinelli e Manoel Lopes de Siqueira pelo apoio e constante incentivo.

- Ao professor Márcio Quintão Moreno, chefe do Departamento de Física pelo estímulo e amizade.

- À Comissão Permanente de Tempo Integral e Dedicação Exclusiva (COPERTIDE) da UFMG pelas condições de trabalho indispensáveis à realização desta tese.

RESUMO

Apresenta-se um modelo para o efeito fotomagnético baseado em uma teoria de pequenos polarons.

Partiu-se de uma Hamiltoniana de pequenos polarons e determinou-se uma equação de movimento para as populações dos níveis entre os quais se verificam transições.

A equação, obtida à partir de um cálculo microscópico, contém toda a informação dinâmica da Hamiltoniana.

INDICE

CAPITULO I

INTRODUÇÃO

Se um determinado material vem a ter alterações em suas propriedades magnéticas devidas a ação de radiação eletromagnética, estaremos presenciando um tipo de fenômeno ao qual chamamos "efeito magnético foto-induzido" ou, de uma maneira mais simples, "efeito foto-magnético". (*)

Embora não sendo as únicas susceptíveis a variações foto-induzidas, as propriedades magnéticas apresentam relativa facilidade na sua deteção, o que as torna de grande interesse para o trabalho científico.

Um material que apresenta particular interesse devido ao seu comportamento foto magnético são as granadas de ytrio-ferro, YIG dopadas com Si ($Y_3 Fe^{3+}_{5-2x}(Fe^{2+} Si^{4+})_x O_{12}$) sobre as quais sabemos ser possível a indução de uma anisotropia magnética de baixa temperatura.[1,2] Teale e Temple puderam verificar, em uma experiência de ressonância ferromagnética, que o decaimento na anisotropia induzida é sensivelmente marcado pela ação da radiação infra-vermelha.[3]

---

* OBS. Costuma-se reservar o nome "efeito fotomagnético" para a ação da luz sobre a susceptibilidade magnética de certas amostras.

Verificou-se ainda que além da anisotropia são também alteradas, quando da ação da radiação eletromagnética, a permeabilidade e força coerciva[4,5], a anisotropia estática[6], as propriedades de comutação[7], o dicroismo linear[8] e o "strain"[9]. Além do YIG-Si sabe-se que o $CdCr_2Se_4$ (Ga) e algumas ferrites exibem propriedades foto-magnéticas[7].

Mesmo que ainda não se possa falar de um modelo para o efeito foto-magnético pode-se pensar em um mecanismo que consista de transições eletrônicas foto-induzidas entre cátions que se encontrem em diferentes pontos da rede ou seja, um processo de transporte de carga[10,6,11]. Dentro deste ponto de vista, uma transição eletrônica de um íon A^{2+} para um outro íon A^{3+} é equivalente a um deslocamento do íon A^{2+} para o local ocupado por A^{3+}. Se, por acaso, as duas posições apresentam alguma inequivalência, seja com respeito à simetria local ou com respeito aos íons vizinhos, é de se esperar que elas contribuam de maneiras diferentes para as propriedades magnéticas.

Na medida em que os elétrons tenham pequena mobilidade é de se esperar também que os efeitos foto-induzidos sejam persistentes o que é realmente verificado para baixas temperaturas, em contraste com a situação de temperaturas elevadas onde passa a haver uma competição entre as transições foto-induzidas e o movimento térmico dos elétrons.

Acredita-se que no YIG-Si os íons de Fe^{++} ocupem posições octaédricas das quais existem quatro tipos, distinguíveis pelos eixos trigonais que são coincidentes com as direções <111>

Para uma igual ocupação destas posições pelos ions Fe^{++} tem-se um cancelamento da anisotropia uniaxial enquanto que, por meio de um "annealing" magnético, com a magnetização paralela a um determinado eixo trigonal, consegue-se uma ocupância em excesso nesta direção e, conseqüentemente, o aparecimento da anisotropia uniaxial. A influência da polarização da radiação incidente, que pôde ser evidenciada em medidas de torque e dicroismo linear, tem sua interpretação no fato de que a probabilidade de se ionizar um Fe^{++} é uma função do angulo medido entre $\vec{E}$ e o eixo trigonal local. Supõe-se que os elétrons excitados decaiam de uma maneira aleatória nos quatro tipos de "sítios" disponíveis.(6,8)

Neste trabalho vamos propor uma análise de propriedades foto-magnéticas do VIG-Si baseada em um modêlo de pequenos polarons(12,13) que é adequado para situações em que os portadores tenham pequena mobilidade. Para isto, desenvolvemos no capítulo II a Hamiltoniana do problema, a matriz densidade e a equação do movimento para um operador M qualquer do sistema. Na teoria dos pequenos polarons, a Hamiltoniana de ordem zero seria aquela em que a interação eletron-fonon fosse tomada em conta enquanto que a integral de tunel t (que é uma amplitude de probabilidade de transição) fosse desprezada. Com isto, teríamos um polaron localizado no espaço $\mathcal{R}$ e uma mobilidade nula. Se, por outro lado, admitirmos o efeito de t em primeira ordem, teremos um polaron em $\mathcal{R}$ com um tempo de vida suficientemente grande e uma pequena mobilidade para os portadores. A Hamiltoniana a ser usada será então composta de termos livres e de um termo de interação que contenha t. Com o conhecimento da matriz densidade temos condições de calcular valores médios, o que na verdade vamos fazer para o operador ocupância. Teremos assim uma informação à respeito da população nos níveis entre os quais ocorram transições que nos interessem. Como veremos, a evolução no tempo do operador ocupância, é função de integrais cujas soluções se apresentam bastante complexas. Não obstante, com a definição de parametros adequados, obtemos no capítulo III uma forma bastante simples para tal evolução e concluimos no capítulo IV com uma interpretação física e algumas possibilidades de aplicação da nossa equação.

CAPITULO II

Como já foi mencionado no capítulo anterior, trataremos agora da Hamiltoniana, da matriz densidade e da equação de movimento para um operador do sistema. No desenvolvimento da Hamiltoniana seguimos de perto os trabalhos de Riik[15] e Holstein.[18]

1. A Hamiltoniana do problema

A Hamiltoniana de Holstein[15] é

$$H_s = H_c + H_{ph} + H_{eph} \tag{1}$$

onde $$H_c = \sum_s (\varepsilon_s - \mu) c_s^+ c_s + \sum_{s,i} t_{s,i} (c_s^+ c_{s+i} + c_{s+i}^+ c_s) \tag{2}$$

Em (2), $\underline{s}$ é um ponto que pode ser ocupado pelo portador enquanto que $\underline{i}$ representa todos os pontos que são disponíveis como destino de saltos oriundos de s. Assim, o operador $c_s^+ c_s$ mede em s uma partícula com energia cinética $\varepsilon_s - \mu$ onde o potencial químico μ aparece como uma característica da conservação do número de partículas. O termo $c_s^+ c_{s+i} + c_{s+i}^+ c_s$ é responsável pelos saltos eletrônicos entre $\underline{s}$ e $\underline{s+i}$ sendo que $t_{s,i}$ representa a matriz de transição.

A parte relativa aos phonons, H_{ph}, é dada por[19]

$$H_{ph} = \sum_{q,\lambda} \hbar \omega_\lambda(q) \; b_{q\lambda}^+ b_{q\lambda} \tag{3}$$

Em (3), os operadores b^+b medem um fonon de energia $\hbar\omega$ em q, com vetor de onda k. A soma é feita em todos os ramos longitudinais, de índices genéricos λ.

O termo de interação eletron-fonon tem a seguinte forma:[15,19]

$$H_{eph} = \sum_{q,\lambda,s} i\hbar\omega_\lambda(q)\,\alpha_\lambda^{\frac{1}{2}}(q)\left[b_{q\lambda}e^{i\vec{q}\cdot\vec{R}_s} - b^+_{q\lambda}e^{-i\vec{q}\cdot\vec{R}_s}\right]C_s^+C_s \qquad (4)$$

onde $\vec{R}_s$ é o vetor posição do ponto s. As interações com os modos longitudinais acústicos e óticos podem ser levados em conta com

$$\alpha_{ac}(q) = \frac{\Xi_d^2}{2\rho V\hbar\,\omega_{ac}^3(q)}\,|q|^2$$

$$\alpha_{ot}(q) = \frac{A^2}{2\bar{\rho}\,V\hbar\,\omega_{op}^3(q)}$$

onde Ξ_d = constante do potencial de deformação
ρ = densidade
V = volume do cristal
A = constante do potencial de deformação ótica
$\bar{\rho}$ = densidade de massa reduzida

Vamos, em seguida, reescrever a Hamiltoniana (1) de maneira mais adequada. Para isto, completamos os quadrados na expressão H_{eph} e obtemos:

$$H_s = \sum_s (\varepsilon_s - \mu) c_s^+ c_s + \sum_{s,i} t_{s,i} \left(c_s^+ c_{s+i} + c_{s+i}^+ c_s \right) +$$

$$\sum_{q,\lambda} \hbar\omega_\lambda(q) \left[b_{q\lambda}^+ + i\alpha_\lambda^{\frac{1}{2}}(q) \sum_s e^{i\vec{q}\cdot\vec{R}_s} c_s^+ c_s \right] \times \left[b_{q\lambda} - i\alpha_\lambda^{1/2}(q) \sum_{s'} e^{-i\vec{q}\cdot\vec{R}_{s'}} c_{s'}^+ c_{s'} \right]$$

$$-\sum_{q,\lambda} \hbar\omega_\lambda(q)\, \alpha_\lambda(q) \sum_{s,s'} e^{i\vec{q}\cdot(\vec{R}_s - \vec{R}_{s'})} c_s^+ c_s c_{s'}^+ c_{s'} \tag{5}$$

Em (5), as duas primeiras somas representam H_c enquanto que o restante da expressão representa $H_{ph} + H_{eph}$. O último termo nos dá uma contribuição para a auto-energia quando $s = s'$ e, a interação elétron-elétron quando $s \neq s'$. Esta interação será desprezada para densidades de portadores de carga até cerca de $10^{20}\ cm^{-3}$.

Definamos agora o operador $B_{q\lambda}^+$ da seguinte forma:

$$B_{q\lambda}^+ = b_{q\lambda} + i\,\alpha_\lambda^{\frac{1}{2}}(q) \sum_s e^{i\vec{q}\cdot\vec{R}_s} c_s^+ c_s \tag{6}$$

Este, juntamente com $B_{q\lambda}$ forma um par de criação e destruição de fonons e os dois seguem as mesmas regras de comutação de $b_{q\lambda}$ e $b_{q\lambda}^+$ não comutando entretanto com c_s^+ e c_s. Por outro lado, os operadores

$$C_s^+ = c_s^+ \prod_{q,\lambda} e^{i\alpha_\lambda^{\frac{1}{2}}(q)\left[e^{-i\vec{q}\cdot\vec{R}_s} b_{q\lambda}^+ + e^{+i\vec{q}\cdot\vec{R}_s} b_{q\lambda}\right]} \tag{7}$$

$$C_s = c_s \prod_{q,\lambda} e^{-i\alpha_\lambda^{\frac{1}{2}}(q)\left[e^{i\vec{q}\cdot\vec{R}_s} b_{q\lambda} + e^{-i\vec{q}\cdot\vec{R}_s} b_{q\lambda}^+\right]}$$

não só obedecem às regras de anti-comutação de c_s^+ e c_s

como também comutam com $B^+_{q\lambda}$ e $B_{q\lambda}$. C^+_s cria, simultaneamente em s um eletron e a polarização dos fonons enquanto que o operador

$$c^+_s = C^+_s \prod_{q,\lambda} e^{-i\alpha_\lambda^{\frac{1}{2}}(q)[e^{-i\vec{q}\cdot\vec{R}_s} B^+_{q\lambda} + e^{i\vec{q}\cdot\vec{R}_s} B_{q\lambda}]} \qquad (8)$$

cria um polaron em s mas, ao mesmo tempo, retira a polarização dos fonons.

Considerando as equações (6) e (8), a expressão para a Hamiltoniana toma a forma seguinte

$$H_s = \sum_s (\varepsilon_s - \mu) C^+_s C_s + \sum_{q,\lambda} \hbar\omega_\lambda(q) B^+_{q\lambda} B_{q,\lambda} +$$

$$\sum_{s,i} t_{s,i} \left(C^+_s C_{s+i} X_{s,s+i} + C^+_{s+i} C_s X_{s+i,s} \right) \qquad (9)$$

onde $$X_{s,s+i} = \prod_{q,\lambda} e^{-i\alpha_\lambda^{\frac{1}{2}}(q)\{[e^{-i\vec{q}\cdot\vec{R}_s} - e^{-i\vec{q}\cdot\vec{R}_{s+i}}]B^+_{q\lambda} + [e^{i\vec{q}\cdot\vec{R}_s} - e^{i\vec{q}\cdot\vec{R}_{s+i}}]B_{q\lambda}\}} \qquad (10)$$

Temos assim uma Hamiltoniana composta de termos livres e de um termo de interação que depende da matriz de transição $t_{s,i}$. O termo de interação (transição Franck - Condon) faz com que um eletron, ao ser transportado de um ponto ao outro, deixe no ponto de saida a polarização existente quando êle ali se encontrava. De uma certa forma podemos interpretar esta interação como um "striptease" do polaron provocado pelo operador X.

Tal como foi proposta em (1), a Hamiltoniana do nosso problema não prevê a possível existência de um campo externo. Entretanto, para nós é fundamental a existência deste termo já que pretendemos descrever uma situação em que um determinado cristal é submetido à influência de radiação eletromagnética. Este fato faz com que sejamos obrigados a adicionar um outro termo na equação (1) que seja responsável pelo campo externo agindo no sistema. Assim, temos:

$$H_s = H_c + H_{ph} + H_{eph} + H_{ext}$$

onde,

$$H_{ext}(t') = e\sum_{s}\left[E_s(\omega)\, e^{i\omega t'} + E_s(-\omega)\, e^{-i\omega t'}\right]\sum_{q} q^{s}\, C_q^{+} C_q$$

ou,

$$H_s = \sum_{s}(\varepsilon_s - \mu)\, C_s^{+} C_s + \sum_{q,\lambda} \hbar\omega_\lambda(q)\, B_{q\lambda}^{+} B_{q\lambda} \; +$$

$$+\sum t_{s,i}\left(C_s^{+} C_{s+i}\, X_{s,s+i} + C_{s+i}^{+} C_s\, X_{s+i,s}\right) + e\sum_{s}\left[E_s(\omega)\, e^{i\omega t'} + E_s(-\omega)\, e^{-i\omega t'}\right]\sum_{q} q^{s} C_q^{+} C_q$$

que, de uma maneira abreviada, pode ser escrita

$$H = H_S + H_R + H_{SR} + H_{ext}$$

onde S e R referem-se a sistema e reservatório, respectivamente

Do ponto de vista da mecânica clássica a solução para o nosso problema seria admitir inicialmente um sistema isolado cujo movimento fosse determinado por uma certa Hamiltoniana $\mathcal{H}$. Supõe-se então que uma perturbação é aplicada ao sistema na forma de uma fôrça externa $F(t)$ cujo efeito é descrito por uma perturbação $\mathcal{H}'$ na energia.

Estatisticamente falando faz-se necessário conhecermos a função distribuição $f(p,q)$ que descreva um ensemble composto dos sistemas que estamos estudando. Na ausência da perturbação o movimento do sistema é descrito por

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -\sum\left(\frac{\partial f}{\partial q}\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p} - \frac{\partial f}{\partial p}\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q}\right) = (\mathcal{H}, f)$$

Admitimos então que a perturbação foi estabelecida em um passado remoto, $t = -\infty$ de forma que a função distribuição perturbada tem como equação de movimento

$$\frac{\partial f'}{\partial t} = (\mathcal{H}, f') + (\mathcal{H}', f)$$

e, se fazemos uma aproximação linear pondo $f' = f + \Delta f$ temos $\dfrac{\partial \Delta f}{\partial t} = (\mathcal{H}, \Delta f) - F(t)\,(A, f)$ onde A é obtido da

equação: $\mathcal{H}'(t) = -A F(t)$ e a solução para Δf será

$$\Delta f(t) = -\int_{-\infty}^{t} e^{i(t-t')L}\,(A,f)\,F(t')\,dt'$$

onde L é definido por $iLg = (\mathcal{H}, g)$

No caso quântico a função distribuição f' será substituida pela matriz densidade $\rho'(t)$ cuja equação do movimento é

$$i\hbar \frac{d}{dt} \rho'(t) = [\mathcal{H} + \mathcal{H}', \rho']$$

Ainda, se trabalhamos na aproximação $\rho' = \rho + \Delta\rho$, teremos

$$\Delta\rho = -\frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^{t} e^{\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}(t'-t)} [A,\rho]\, e^{-\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}(t'-t)} F(t')\, dt'$$

Assim, uma quantidade qualquer B terá uma variação que estatisticamente é dada por $\Delta B = \mathrm{Tr}\, \Delta\rho(t) B$.

Uma discussão completa deste tipo de problema encontra-se no artigo de R. Kubo[20] que seguimos de perto nesta discussão.

Na seção seguinte deste capítulo vamos estudar a equação de movimento para a matriz densidade do nosso problema e vamos obter soluções que, como veremos, são essencialmente iguais a equação de $\Delta\rho$ obtida acima.

2. A matriz densidade do problema

Como vimos, a Hamiltoniana é

$$H = H_S + H_R + H_{SR} + H_{ext} \tag{11}$$

A matriz densidade[16] correspondente será então da forma abaixo

$$\rho(t) = \rho_R^{eq}\left[f_s(t) + \varphi_s(t)\right] + g(t) + r(t) \tag{12}$$

Em (12), os vários termos têm os seguintes significados:

$\rho_R^{eq} f_s(t)$ - descrição de um problema do tipo SISTEMA-RESERVATÓRIO, sem interação.

$g(t)$ _ termo que responde pela interação S-R

$r(t)$ _ termo da perturbação CAMPO EXTERNO - SISTEMA

$\rho_R^{eq}\varphi_s(t)$ – termo responsável pela ação do campo externo sobre o reservatório

Assim, 1º) Se $H_{SR} = H_{ext} = 0$ então $\rho(t) = \rho_R^{eq} f_s(t)$

2º) Se $H_{ext} = 0$ então $\rho(t) = \rho_R^{eq} f_s(t) + g(t)$

A equação do movimento para $\rho(t)$ é obtida de

$$i\hbar\,\dot{\rho} = \mathcal{L}\rho \qquad (13)$$

onde $\mathcal{L}$ é o operador de Liouville(17). No nosso caso,

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}_S + \mathcal{L}_R + \mathcal{L}_{SR} + \mathcal{L}_{ext} \qquad (14)$$

Como $\dot{\rho}_R^{eq} = 0$ temos $\mathcal{L}_R\,\rho_R^{eq} = 0$ e a equação do movimento para $\rho(t)$ será:

$$i\hbar\,\dot{\rho} = \left[\mathcal{L}_S + \mathcal{L}_{SR} + \mathcal{L}_{ext}\right]\left[\rho_R^{eq}\left(f_S(t) + \varphi_S(t)\right)\right] +$$

$$+ \left[\mathcal{L}_S + \mathcal{L}_R + \mathcal{L}_{SR} + \mathcal{L}_{ext}\right]\left[g(t) + r(t)\right] \qquad (15)$$

Em (12) admitamos que $g(t)$ e $r(t)$ tenham traços nulos com relação ao reservatório e tomemos $Tr_R\,\rho(t)$:

$$Tr_R\,\rho(t) = f_S(t) + \varphi_S(t) \qquad (16)$$

Por outro lado de (13) e (16) podemos escrever

$$i\hbar\,Tr_R\,\dot{\rho} = Tr_R\,\mathcal{L}\rho = i\hbar\left(\dot{f}_S(t) + \dot{\varphi}_S(t)\right) \qquad (17)$$

Em (17) calculemos, detalhadamente, $Tr_R\,\mathcal{L}\rho$

Do segundo membro de (15) podemos escrever

$$Tr_R \mathcal{L} \rho = Tr_R \left\{ [L_s + L_{SR} + L_{ext}][\rho_R^{eq}(f_s(t) + \varphi_s(t))] \right\} +$$

$$+ Tr_R \left\{ [L_s + L_R + L_{SR} + L_{ext}][g(t) + r(t)] \right\}$$

Na equação acima, temos

$$Tr_R [L_s + L_{SR} + L_{ext}][\rho_R^{eq}(f_s(t) + \varphi_s(t))] =$$

$$Tr_R L_s [\rho_R^{eq}(f_s(t) + \varphi_s(t))] + Tr_R L_{SR} [\rho_R^{eq}(f_s(t) + \varphi_s(t))] +$$

$$+ Tr_R L_{ext} [\rho_R^{eq}(f_s(t) + \varphi_s(t))]$$

onde

$$Tr_R L_s [\rho_R^{eq}(f_s(t) + \varphi_s(t))] = Tr_R L_s \rho_R^{eq} f_s(t) + Tr_R L_s \rho_R^{eq} \varphi_s(t)$$

$$= L_s f_s(t) + L_s \varphi_s(t)$$

$$Tr_R L_{SR} [\rho_R^{eq}(f_s(t) + \varphi_s(t))] = Tr_R L_{SR} \rho_R^{eq} f_s(t) + Tr_R L_{SR} \rho_R^{eq} \varphi_s(t) = 0$$

$$Tr_R L_{ext} [\rho_R^{eq}(f_s(t) + \varphi_s(t))] = Tr_R L_{ext} \rho_R^{eq} f_s(t) + Tr_R L_{ext} \rho_R^{eq} \varphi_s(t)$$

$$= L_{ext} f_s(t) + L_{ext} \varphi_s(t)$$

e temos ainda

$$Tr_R \left\{ [L_s + L_R + L_{SR} + L_{ext}][g(t) + r(t)] \right. = Tr_R L_s (g(t) + r(t) +$$

$$+ Tr_R L_R (g(t) + r(t)) + Tr_R L_{SR} (g(t) + r(t)) + Tr_R L_{ext} (g(t) + r(t))$$

$$= Tr_R L_{SR} (g(t) + r(t))$$

podemos então escrever

$$i\hbar\left(\dot{f}_s(t)+\dot{\varphi}_s(t)\right)=\left(L_s+L_{ext}\right)\left(f_s(t)+\varphi_s(t)\right)+Tr_R\, L_{sR}\left(g(t)+r(t)\right) \quad (18)$$

Multipliquemos agora ambos os membros de (18) por ρ_R^{eq}

$$i\hbar\,\rho_R^{eq}\left[\dot{f}_s(t)+\dot{\varphi}_s(t)\right]=L_s\,\rho_R^{eq} f_s(t)+L_s\,\rho_R^{eq}\varphi_s(t)+L_{ext}\,\rho_R^{eq} f_s(t)\quad +$$

$$+\,\rho_R^{eq}\, Tr_R\, L_{sR}\left(g(t)+r(t)\right)$$

De (12) temos ainda que

$$i\hbar\left[\dot{\rho}(t)-\rho_R^{eq}\left(\dot{f}_s(t)+\dot{\varphi}_s(t)\right)\right]=i\hbar\left(\dot{g}(t)+\dot{r}(t)\right)$$

ou $$i\hbar\left[\dot{g}(t)+\dot{r}(t)\right]=\left(L_s+L_{sR}+L_{ext}\right)\left[\rho_R^{eq}\left(f_s(t)+\varphi_s(t)\right)\right]\quad +$$

$$+\left[L_s+L_R+L_{sR}+L_{ext}\right]\left(g(t)+r(t)\right)-L_s\,\rho_R^{eq}\left[f_s(t)+\varphi_s(t)\right.$$

$$-L_{ext}\,\rho_R^{eq}\left[f_s(t)+\varphi_s(t)\right]-\rho_R^{eq}\, Tr_R\, L_{sR}\left[g(t)+r(t)\right]$$

donde

$$i\hbar\left[\dot{g}(t)+\dot{r}(t)\right]=\left[L_s+L_R+L_{sR}-\rho_R^{eq}\, Tr_R\, L_{sR}+L_{ext}\right]\left[g(t)+r(t)\right]$$

$$+\,L_{sR}\,\rho_R^{eq}\left[f_s(t)+\varphi_s(t)\right]$$

e, $$i\hbar\,\dot{g}(t)=\left[L_s+L_R\right]g(t)+L_{sR}\,\rho_R^{eq} f_s(t) \quad (19)$$

$$i\hbar\,\dot{r}(t)=\left[L_s+L_R\right]r(t)+L_{ext}\,g(t)+L_{sR}\,\rho_R^{eq}\varphi_s(t)+L_{ext}\,r(t) \quad (20)$$

Observe-se que na passagem para as equações (19) e (20) foi deliberadamente omitido o termo $(\mathcal{L}_{SR} - \rho_R^{eq} Tr_R \mathcal{L}_{SR})[g(t) + \gamma(t)]$

Para as equações (19) e (20) temos as soluções

$$g(t') = -\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{t'} e^{\frac{i}{\hbar}(H_S+H_R)(t''-t')}\left[H_{SR}, \rho_R^{eq} f_S(t'')\right] e^{-\frac{i}{\hbar}(H_S+H_R)(t''-t')}\, dt'' \qquad (21)$$

$$\gamma^{\circ}(t) = -\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{t} e^{\frac{i}{\hbar}(H_S+H_R)(t'-t)}\left[H_{ext}(t'), g(t')\right] e^{-\frac{i}{\hbar}(H_S+H_R)(t'-t)}\, dt' \qquad (22)$$

$$\gamma'(t) = -\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{t} e^{\frac{i}{\hbar}(H_S+H_R)(t'-t)}\left[H_{ext}(t'), \gamma^{\circ}(t')\right] e^{-\frac{i}{\hbar}(H_S+H_R)(t'-t)}\, dt' \qquad (23)$$

Neste ponto é bom lembrarmos a comparação com a solução clássica feita na primeira parte deste capítulo. Lá, a interação aparecia na forma .... (A, f).... enquanto que aqui, temos em $g(t')$ a interação SR no termo ... $[H_{SR}, \rho_R f_S]$... . É como se fosse estabelecida a interação SR sem se tomar conhecimento de qualquer outra influência. Já em $\gamma(t)$ temos a presença do campo externo no termo ... $[H_{ext}, g(t')]$... significando que tal campo foi superposto à interação SR já existente.

Na seção seguinte, vamos estabelecer a equação do movimento para um operador qualquer M do sistema, em uma aproximação menor que a que poderíamos obter com o uso das equações (21), (22) e (23) acima.

3. A equação do movimento

Com a matriz densidade desenvolvida na seção anterior podemos estabelecer a equação do movimento para um operador qualquer do sistema. Nesta seção vamos escrever a equação do movimento usando uma aproximação menor que a possibilitada pelo uso das equações (21)...(23). Na verdade, vamos admitir a presença do campo externo na matriz $g(t)$ com o que conseguimos desprezar a matriz γ no nosso problema.

Tomemos então

$$i\hbar\, \dot{g}(t) = \left[\left\{ H_s + H_R + H_1(e^{i\omega t} + e^{-i\omega t})\right\},\ g(t)\right]_- + \left[H_{SR}, \rho_R f_s(t)\right]$$

donde

$$g(t) = \frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{i}{\hbar}\int_{t'}^{t}[H_s + H_R + H_1(e^{i\omega\tau} + e^{-i\omega\tau})]d\tau}\,[H_{SR}, \rho_R f_s(t')]$$
$$\times\ e^{\frac{i}{\hbar}\int_{t'}^{t}[H_s + H_R + H_1(e^{i\omega\tau} + e^{-i\omega\tau})]d\tau}\, dt' \qquad (24)$$

onde $H_1 = \frac{1}{2}\, e\, E_s(\omega)\, a_{\delta,s}$

Resolvendo as integrais que aparecem nas exponenciais, temos para $g(t)$ a expressão seguinte:

$$g(t) = \frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^{t} dt' \quad e^{-\frac{i}{\hbar}[H_S+H_R](t-t') - \frac{i}{\hbar} H_1\left\{\frac{e^{i\omega t}(1-e^{i\omega(t'-t)}) - e^{-i\omega t}(1-e^{-i\omega(t'-t)})}{i\omega}\right\}}$$

$$\times \left[H_{SR} , \rho_R\, f_S(t') \right]$$

$$\times\, e^{+\frac{i}{\hbar}[H_S+H_R](t-t') + \frac{i}{\hbar} H_1\left\{\frac{e^{i\omega t}(1-e^{i\omega(t'-t)}) - e^{-i\omega t}(1-e^{-i\omega(t'-t)})}{i\omega}\right\}}$$

Tomemos agora $H_{SR} = -\sum_j F(j)\,Q(j)$ e escrevamos

$$g(t) = \frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^{t} dt' \quad e^{-\frac{i}{\hbar}\Gamma(t,t')} \left[-\sum_i Q(i)F(i),\ \rho_R\, f_S(t')\right] e^{\frac{i}{\hbar}\Gamma(t,t')}$$

Por outro lado, a equação do movimento é

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\langle M\rangle = \langle [M, H_S + H_{ext}]_- \rangle + Tr_{R+S}\left\{[M, H_{SR}]\, g(t)\right\}$$

Façamos agora o cálculo de $Tr_{R+S}\left\{[M,H_{SR}]\,g(t)\right\}$.

Para simplificar, coloquemos $g(t)$ na forma abaixo

$$g(t) = \int (-\Sigma\, F Q)\,\rho f - \rho f\,(-\Sigma\, F Q)$$

Observe-se que, nesta forma, salienta-se a atuação do comutador desprezando-se, provisoriamente, as exponenciais. Com isto, os termos da expressão que pretendemos calcular são:

$$M(-\Sigma FQ)(-\Sigma FQ\ \rho f) - M(-\Sigma FQ)[\rho f(-\Sigma FQ)] - (-\Sigma FQ)M[(-\Sigma FQ)\rho f] +$$

$$+ (-\Sigma FQ)M[\rho f(-\Sigma FQ)]$$

Calculemos termo por termo a expressão acima

1º termo

$$-\frac{i}{\hbar}\sum_{i,j} Tr_{R+S}\int_{-\infty}^{t} dt' \left\{ M\,Q(j)\,F(j)\,e^{-\frac{i}{\hbar}\Gamma(t,t')} Q(i)F(i)\,\rho_R\, f_s(t')\,e^{\frac{i}{\hbar}\Gamma(t,t')} \right\}$$

Façamos agora um rearranjo no integrando da expressão acima colocando:

$$\bar{F} = e^{\frac{i}{\hbar}H_R(t-t')}\,F\,e^{-\frac{i}{\hbar}H_R(t-t')}$$

$$\bar{Q} = e^{\frac{i}{\hbar}H_S(t-t') + \frac{i}{\hbar}H_1\left\{\frac{e^{i\omega t}(1-e^{i\omega(t'-t)}) - e^{-i\omega t}(1-e^{-i\omega(t'-t)})}{i\omega}\right\}}$$

$$\times\, Q \,\times\, e^{-\frac{i}{\hbar}H_S(t-t') - \frac{i}{\hbar}H_1\left\{\frac{e^{i\omega t}(1-e^{i\omega(t'-t)}) - e^{-i\omega t}(1-e^{-i\omega(t'-t)})}{i\omega}\right\}}$$

e teremos para o 1º termo a seguinte forma:

$$\frac{1}{i\hbar}\sum \mathrm{Tr}_{R+S}\int dt' \;\; \bar{M}\,\bar{Q}\,\bar{F}\,Q\,F\,\rho\, f$$ ou

$$\frac{1}{i\hbar}\sum \int dt' \left\langle \bar{M}\,\bar{Q}(j)\,Q(i)\right\rangle_{t'} \left\langle F(i)\,\bar{F}(j)\right\rangle$$

Analogamente, obtemos

2º termo

$$-\frac{1}{i\hbar}\sum \int dt' \left\langle Q(i)\,\bar{M}\,\bar{Q}(j)\right\rangle_{t'} \left\langle F(i)\,\bar{F}(j)\right\rangle$$

3º termo

$$-\frac{1}{i\hbar}\sum \int dt' \left\langle \bar{Q}(j)\,\bar{M}\,Q(i)\right\rangle_{t'} \left\langle \bar{F}(j)\,F(i)\right\rangle$$

4º termo

$$\frac{1}{i\hbar}\sum \int dt' \left\langle Q(i)\,\bar{Q}(j)\,\bar{M}\right\rangle_{t'} \left\langle F(i)\,\bar{F}(j)\right\rangle$$

Colocando em termos de comutadores e anti-comutadores, vem

$$\frac{1}{2i\hbar}\sum \int dt' \Big\{ \left\langle \bar{F}(j),F(i)\right\rangle \left\langle \left[Q(i),\left[\bar{M},Q(j)\right]\right]_+\right\rangle_{t'} - \left\langle \left[\bar{F}(j),F(i)\right]_+\right\rangle \left\langle \left[Q(i),\left[\bar{M},\bar{Q}(j)\right]\right]\right\rangle_{t'} \Big\} \tag{25}$$

Temos então que a nossa equação do movimento será

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\langle M\rangle = \langle [M, H_S + H_{ext}]\rangle \quad +$$

$$+ \frac{1}{2i\hbar}\sum_{i,j}\int_{-\infty}^{t} dt' \left\{ \langle [\bar{F}(j), F(i)]\rangle \langle [Q(i), [\bar{M}, \bar{Q}(j)]]_+\rangle - \langle [\bar{F}(j), F(i)]_+\rangle \langle [Q(i), [\bar{M}, \bar{Q}(j)]]\rangle \right\}$$

(26)

Será nosso objetivo no capítulo seguinte o tratamento da integral que aparece na equação acima. Lá, o operador genérico M será substituido por um operador específico que nos possa dar informações sôbre o comportamento do sistema.

CAPITULO III

No capítulo anterior foi deduzida a equação do movimento de um operador do sistema. Pretendemos agora tratar das integrais que aparecem naquela equação. O operador M que lá aparece é aqui identificado com o operador ocupância com auxílio do qual podemos contar o número de partículas em um determinado estado. Os comutadores estão calculados no apendice 1 e os operadores X, no apendice 2.

Os operadores são:

$$M = C_i^+ C_i$$

$$Q(j) = C_p^+ C_{p+a_\delta^p} \quad e \quad \bar{Q}(j) = C_p^+ C_{p+a_\delta^p}\, e^{\frac{i}{\hbar}\int_{t'}^{t} d\tau \left\{\left[\varepsilon(p) - \varepsilon(p+a_\delta^p) - \frac{1}{2} e\vec{E}\cdot\vec{a}_\delta^p \left(e^{i\omega\tau} + e^{-i\omega\tau}\right)\right.\right.}$$

$$Q(i) = C_\pi^+ C_{\pi + a_\delta^\pi}$$

$$\bar{F}(j) = \bar{X}_{p,\, p+a_\delta^p} \qquad F(i) = X_{\pi,\, \pi + a_\delta^\pi}$$

Com relação aos índices, veja-se a figura abaixo:

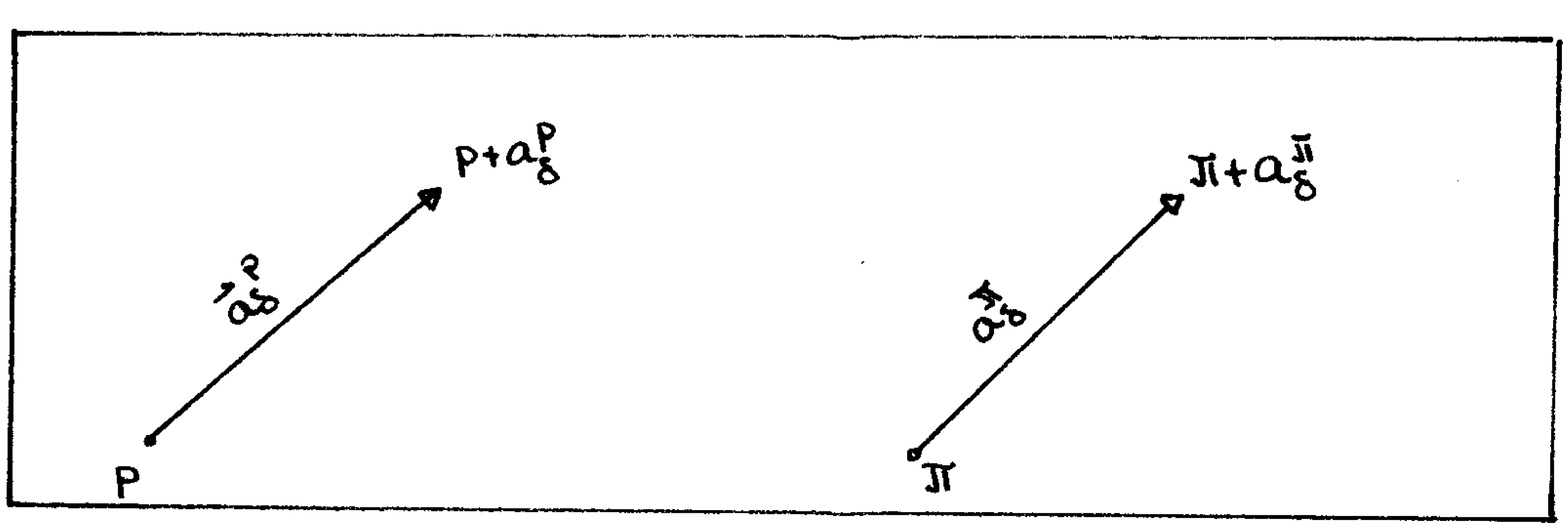

FIG. 3-1

Vamos agora tratar da resolução da integral abaixo:

$$\sum_{i,j}\int_{-\infty}^{t} dt'\Big\{\big\langle[\bar{F}(j),F(i)]_-\big\rangle\big\langle[Q(i),[\bar{M},\bar{Q}(j)]]_+\big\rangle_{t'}$$

$$-\big\langle[\bar{F}(j),F(i)]_+\big\rangle\big\langle[Q(i),[\bar{M},\bar{Q}(j)]]_-\big\rangle_{t'}\Big\} = I$$

Temos então

$$I = \frac{J^2}{\hbar^2}\, e^{-2\Sigma\,\alpha_j(q)\,\mathrm{sen}^2\frac{\vec{q}\cdot\vec{a}^i_\delta}{2}\,\mathrm{cotan}\,\hbar\,\omega_j(q)\beta/2} \times$$

$$\sum_{\delta}\int_{-\infty}^{t} dt'\Bigg[\Big\{\exp\Big(2\Sigma\,\alpha_j(q)\,\mathrm{sen}^2\frac{\vec{q}\cdot\vec{a}_\delta}{2}\,\frac{\cos\omega_j(q)(t-t'-i\hbar\beta/2)}{\mathrm{senh}\,\hbar\,\omega_j(q)\beta/2}\Big)$$

$$\times\exp\Big(\frac{i}{\hbar}[\varepsilon(i)-\varepsilon(i+a^i_\delta)](t-t'-i\hbar\beta/2)\Big)\times$$

$$\exp\Big(-\frac{i}{\hbar}\,\frac{e}{2}\,\vec{E}(\omega)\cdot\vec{a}_\delta\Big\{\frac{e^{i\omega t}(1-e^{i\omega(t'-t)})-e^{-i\omega t}(1-e^{-i\omega(t'-t)})}{i\omega}\Big\}\Big)\times$$

$$\langle C^+_{i+a^i_\delta}C_{i+a^i_\delta}\rangle\big[1-\langle C^+_iC_i\rangle\big]\times\exp\Big(-\frac{\beta}{2}[\varepsilon(i)-\varepsilon(i+a^i_\delta)]\Big)\Big\}$$

$$-\Big\{\exp\Big(2\Sigma\,\alpha_j(q)\,\mathrm{sen}^2\frac{\vec{q}\cdot\vec{a}^i_\delta}{2}\,\frac{\cos\omega_j(q)(t-t'+i\hbar\beta/2)}{\mathrm{senh}\,\hbar\omega_j(q)\beta/2}\Big)\times\exp\Big(\frac{i}{\hbar}[\varepsilon(i)-\varepsilon(i+a^i_\delta)](t-t'+i\hbar\beta/2)\Big)$$

$$\times\exp\Big(-\frac{i}{\hbar}\,\frac{e}{2}\,\vec{E}(\omega)\cdot\vec{a}^i_\delta\Big\{\frac{e^{i\omega t}(1-e^{i\omega(t'-t)})-e^{-i\omega t}(1-e^{-i\omega(t'-t)})}{i\omega}\Big\}\Big)\times$$

$$\langle C^+_iC_i\rangle\big[1-\langle C^+_{i+a^i_\delta}C_{i+a^i_\delta}\rangle\big]\times\exp\Big(\frac{\beta}{2}[\varepsilon(i)-\varepsilon(i+a^i_\delta)]\Big)\Big\}$$

$$+\left\{\exp\left(2\sum\alpha_j(q)\,\mathrm{sen}^2\frac{\vec{q}\cdot\vec{a}^i_\delta}{2}\,\frac{\cos\omega_j(q)(t-t'+i\hbar\beta/2)}{\mathrm{senh}\,\hbar\omega_j(q)\beta/2}\right)\times\exp\left(-\frac{i}{\hbar}[\varepsilon(i)-\varepsilon(i+a^i_\delta)](t-t'+i\hbar\beta/2)\right)\right.$$

$$\times\exp\left(\frac{i}{\hbar}\frac{e}{2}\vec{E}(\omega)\cdot\vec{a}^i_\delta\left\{\frac{e^{i\omega t}(1-e^{i\omega(t'-t)})-e^{-i\omega t}(1-e^{-i\omega(t'-t)})}{i\omega}\right\}\right)\times$$

$$\left.\times\left\langle C^+_{i+a^i_\delta}C_{i+a^i_\delta}\right\rangle\left[1-\langle C^+_iC_i\rangle\right]\times\exp\left(-\frac{\beta}{2}[\varepsilon(i)-\varepsilon(i+a^i_\delta)]\right)\right\}$$

$$-\left\{\exp\left(2\sum\alpha_j(q)\,\mathrm{sen}^2\frac{\vec{q}\cdot\vec{a}^i_\delta}{2}\,\frac{\cos\omega_j(q)(t-t'-i\hbar\beta/2)}{\mathrm{senh}\,\hbar\omega_j(q)\beta/2}\right)\times\exp\left(-\frac{i}{\hbar}[\varepsilon(i)-\varepsilon(i+a^i_\delta)](t-t'-i\hbar\beta/2)\right)\right.$$

$$\times\exp\left(\frac{i}{\hbar}\frac{e}{2}\vec{E}(\omega)\cdot\vec{a}^i_\delta\left\{\frac{e^{i\omega t}(1-e^{i\omega(t'-t)})-e^{-i\omega t}(1-e^{-i\omega(t'-t)})}{i\omega}\right\}\right)\times$$

$$\left.\left.\times\left\langle C^+_iC_i\right\rangle\left[1-\langle C^+_{i+a^i_\delta}C_{i+a^i_\delta}\rangle\right]\times\exp\left(\frac{\beta}{2}[\varepsilon(i)-\varepsilon(i+a^i_\delta)]\right)\right\}\right]$$

Vamos agora fazer as seguintes mudanças de variáveis

$$\tau = t - t'$$

$$A = \frac{2\sum\alpha_j(q)\,\mathrm{sen}^2\frac{\vec{q}\cdot a^i_\delta}{2}}{\mathrm{senh}\,\hbar\omega_j(q)\beta/2} \qquad B = \frac{1}{\hbar}\left[\varepsilon(i)-\varepsilon(i+a^i_\delta)\right]$$

$$\mathcal{C} = \left\langle C^+_{i+a^i_\delta}C_{i+a^i_\delta}\right\rangle\left[1-\langle C^+_iC_i\rangle\right]$$

$$\mathcal{D} = \left\langle C^+_iC_i\right\rangle\left[1-\langle C^+_{i+a^i_\delta}C_{i+a^i_\delta}\rangle\right]$$

Usando estas novas variaveis e, ainda, expandindo até a segunda ordem a exponencial em que aparece o campo elétrico $\vec{E}(\omega)$ temos para a integral: (a menos do fator comum)

$$\int_0^\infty d\tau\, e^{A\cos\omega_j(\tau - i\hbar\beta/2)} \times e^{iB(\tau - i\hbar\beta/2)} \times \ell \times$$

$$\times\Big[1 - \frac{i}{\hbar}\frac{e}{2}E_s(\omega)\, a^i_{\delta,s}\Big\{\frac{e^{i\omega t}(1-e^{-i\omega\tau}) - e^{-i\omega t}(1-e^{i\omega\tau})}{i\omega}\Big\}$$

$$-\frac{1}{2}\frac{e^2}{4\hbar^2}E_s(\omega)E_\mu(\omega)\, a^i_{\delta,s}\, a^i_{\delta,\mu}\,\frac{1}{(i\omega)^2}\Big\{e^{2i\omega t}(1+e^{-2i\omega\tau}-2e^{-i\omega\tau})$$

$$+e^{-2i\omega t}(1+e^{2i\omega\tau}-2e^{i\omega\tau})$$

$$-2(2-e^{i\omega\tau}-e^{-i\omega\tau})\Big\}\Big] \qquad (1.1)$$

$$+\int_0^\infty d\tau\, e^{A\cos\omega_j(\tau + i\hbar\beta/2)} \times e^{-iB(\tau + i\hbar\beta/2)} \times \ell \times$$

$$\times\Big[1 + \frac{i}{\hbar}\frac{e}{2}E_s(\omega)\, a^i_{\delta,s}\Big\{\frac{e^{i\omega t}(1-e^{-i\omega\tau}) - e^{-i\omega t}(1-e^{i\omega\tau})}{i\omega}\Big\}$$

$$-\frac{1}{2}\frac{e^2}{4\hbar^2}E_s(\omega)E_\mu(\omega)\, a^i_{\delta,s}\, a^i_{\delta,\mu}\,\frac{1}{(i\omega)^2}\Big\{e^{2i\omega t}(1+e^{-2i\omega\tau}-2e^{-i\omega\tau})$$

$$+e^{-2i\omega t}(1+e^{2i\omega\tau}-2e^{i\omega\tau})$$

$$-2(2-e^{i\omega\tau}-e^{-i\omega\tau})\Big\}\Big] \qquad (1.2)$$

$$-\int_0^\infty d\tau \; e^{A\cos\omega_j(\tau+i\hbar\beta/2)} \times e^{iB(\tau+i\hbar\beta/2)} \times D$$

$$\times\Big[1 - \frac{i}{\hbar}\frac{e}{2} E_\gamma(\omega)\, a^i_{\delta,\gamma}\Big\{\frac{e^{i\omega t}(1-e^{-i\omega\tau}) - e^{-i\omega t}(1-e^{i\omega\tau})}{i\omega}\Big\}$$

$$-\frac{1}{2}\frac{e^2}{4\hbar^2} E_\gamma(\omega)E_\mu(\omega)\, a^i_{\delta,\gamma}\, a^i_{\delta,\mu}\, \frac{1}{(i\omega)^2}\Big\{e^{2i\omega t}(1+e^{-2i\omega\tau}-2e^{-i\omega\tau})$$

$$+e^{-2i\omega t}(1+e^{2i\omega\tau}-2e^{i\omega\tau})$$

$$-2(2-e^{i\omega\tau}-e^{-i\omega\tau})\Big\}\Big] \qquad (1.3)$$

$$-\int_0^\infty d\tau \; e^{A\cos\omega_j(\tau-i\hbar\beta/2)} \times e^{-iB(\tau-i\hbar\beta/2)} \times D$$

$$\times\Big[1 + \frac{i}{\hbar}\frac{e}{2} E_\gamma(\omega)\, a^i_{\delta,\gamma}\Big\{\frac{e^{i\omega t}(1-e^{-i\omega\tau}) - e^{-i\omega t}(1-e^{i\omega\tau})}{i\omega}\Big\}$$

$$-\frac{1}{2}\frac{e^2}{4\hbar^2} E_\gamma(\omega)E_\mu(\omega)\, a^i_{\delta,\gamma}\, a^i_{\delta,\mu}\, \frac{1}{(i\omega)^2}\Big\{e^{2i\omega t}(1+e^{-2i\omega\tau}-2e^{-i\omega\tau})$$

$$+e^{-2i\omega t}(1+e^{2i\omega\tau}-2e^{i\omega\tau}$$

$$-2\big(2-e^{i\omega\tau}-e^{-i\omega\tau}\big)\Big\}\Big] \qquad (1.4)$$

Observemos agora que cada uma das integrais (1.1), (1.2), (1.3) e (1.4) pode ser subdividida como faremos a seguir, colocando

$$E = \frac{e}{2\hbar} E_\gamma(\omega)\, a^i_{\delta,\gamma}$$

1º integral

$$\left[\int_0^\infty d\tau\, e^{A\cos\omega_j(\tau-i\hbar\beta/2)} \times e^{iB(\tau-i\hbar\beta/2)}\right]\ell \times \left\{1-\frac{E}{\omega}\left(e^{i\omega t}-e^{-i\omega t}\right) + \frac{1}{2}\frac{E^2}{\omega^2}\left(e^{2i\omega t}+e^{-2i\omega t}-4\right)\right\}$$

$$+\left[\int_0^\infty d\tau\, e^{A\cos\omega_j(\tau-i\hbar\beta/2)} \times e^{iB(\tau-i\hbar\beta/2)} \times e^{i\omega\tau}\right]\ell \times \left\{-\frac{E}{\omega}e^{-i\omega t}-\frac{1}{2}\frac{E^2}{\omega^2}2\left(e^{-2i\omega t}-1\right)\right\}$$

$$+\left[\int_0^\infty d\tau\, e^{A\cos\omega_j(\tau-i\hbar\beta/2)} \times e^{iB(\tau-i\hbar\beta/2)} \times e^{-i\omega\tau}\right]\ell \times \left\{\frac{E}{\omega}e^{i\omega t}-\frac{E^2}{\omega^2}\left(e^{2i\omega t}-1\right)\right\}$$

$$+\left[\int_0^\infty d\tau\, e^{A\cos\omega_j(\tau-i\hbar\beta/2)} \times e^{iB(\tau-i\hbar\beta/2)} \times e^{2i\omega\tau}\right]\ell \times \left\{\frac{1}{2}\frac{E^2}{\omega^2}e^{-2i\omega t}\right\}$$

$$+\left[\int_0^\infty d\tau\, e^{A\cos\omega_j(\tau-i\hbar\beta/2)} \times e^{iB(\tau-i\hbar\beta/2)} \times e^{-2i\omega\tau}\right]\ell \times \left\{\frac{1}{2}\frac{E^2}{\omega^2}e^{2i\omega t}\right\}$$

2º integral

$$\left[\int_0^\infty d\tau\, e^{A\cos\omega_j(\tau+i\hbar\beta/2)} \times e^{-iB(\tau+i\hbar\beta/2)}\right]\ell \times \left\{1+\frac{E}{\omega}\left(e^{i\omega t}-e^{-i\omega t}\right)-\frac{E^2}{2\omega^2}\left(e^{2i\omega t}+e^{-2i\omega t}-4\right)\right\}$$

$$+\left[\int_0^\infty d\tau\, e^{A\cos\omega_j(\tau+i\hbar\beta/2)} \times e^{-iB(\tau+i\hbar\beta/2)}\right]\ell \times \left\{\frac{E}{\omega}e^{-i\omega t}-\frac{E^2}{\omega^2}\left(e^{-2i\omega t}-1\right)\right\}$$

$$+\left[\int_0^\infty d\tau\, e^{A\cos\omega_j(\tau+i\hbar\beta/2)}\, e^{-iB(\tau+i\hbar\beta/2)}\, e^{-i\omega\tau}\right] C \left\{-\frac{E}{\omega}\, e^{i\omega t} - \frac{E^2}{\omega^2}\left(e^{2i\omega t} - 1\right)\right\}$$

$$+\left[\int_0^\infty d\tau\, e^{A\cos\omega_j(\tau+i\hbar\beta/2)} \times e^{-iB(\tau+i\hbar\beta/2)}\, e^{2i\omega\tau}\right] C \left\{\frac{1}{2}\,\frac{E^2}{\omega^2}\, e^{-2i\omega t}\right\}$$

$$+\left[\int_0^\infty d\tau\, e^{A\cos\omega_j(\tau+i\hbar\beta/2)} \times e^{-iB(\tau+i\hbar\beta/2)} \times e^{-2i\omega\tau}\right] C \left\{\frac{1}{2}\,\frac{E^2}{\omega^2}\, e^{2i\omega t}\right\}$$

3º integral

$$-\left[\int_0^\infty d\tau\, e^{A\cos\omega_j(\tau+i\hbar\beta/2)} \times e^{iB(\tau+i\hbar\beta/2)}\right] D \left\{1 - \frac{E}{\omega}\left(e^{i\omega t} - e^{-i\omega t}\right) + \frac{E^2}{2\omega^2}\left(e^{2i\omega t} + e^{-2i\omega t} - 4\right)\right\}$$

$$-\left[\int_0^\infty d\tau\, e^{A\cos\omega_j(\tau+i\hbar\beta/2)} \times e^{iB(\tau+i\hbar\beta/2)+i\omega\tau}\right] D \left\{-\frac{E}{\omega}\, e^{-i\omega t} - \frac{E^2}{\omega^2}\left(e^{-2i\omega t} - 1\right)\right\}$$

$$-\left[\int_0^\infty d\tau\, e^{A\cos\omega_j(\tau+i\hbar\beta/2)} \times e^{iB(\tau+i\hbar\beta/2)-i\omega\tau}\right] D \left\{\frac{E}{\omega}\, e^{i\omega t} - \frac{E^2}{\omega^2}\left(e^{2i\omega t} - 1\right)\right\}$$

$$-\left[\int_0^\infty d\tau\, e^{A\cos\omega_j(\tau+i\hbar\beta/2)} \times e^{iB(\tau+i\hbar\beta/2)+2i\omega\tau}\right] D \left\{\frac{1}{2}\,\frac{E^2}{\omega^2}\, e^{-2i\omega t}\right\}$$

$$-\left[\int_0^\infty d\tau\, e^{A\cos\omega_j(\tau+i\hbar\beta/2)} \times e^{iB(\tau+i\hbar\beta/2)-2i\omega\tau}\right] D \left\{\frac{1}{2}\,\frac{E^2}{\omega^2}\, e^{2i\omega t}\right\}$$

4ª integral

$$-\left[\int_0^\infty d\tau\, e^{A\cos\omega_j(\tau-i\hbar\beta/2)} \times e^{-iB(\tau-i\hbar\beta/2)}\right] D\left\{1+\frac{E}{\omega}\left(e^{i\omega t}-e^{-i\omega t}\right)+\frac{E^2}{2\omega^2}\left(e^{2i\omega t}+e^{-2i\omega t}-4\right)\right.$$

$$-\left[\int_0^\infty d\tau\, e^{A\cos\omega_j(\tau-i\hbar\beta/2)} \times e^{-iB(\tau-i\hbar\beta/2)+i\omega\tau}\right] D\left\{\frac{E}{\omega}e^{-i\omega t}-\frac{E^2}{\omega^2}\left(e^{-2i\omega t}-1\right)\right\}$$

$$-\left[\int_0^\infty d\tau\, e^{A\cos\omega_j(\tau-i\hbar\beta/2)} \times e^{-iB(\tau-i\hbar\beta/2)-i\omega\tau}\right] D\left\{-\frac{E}{\omega}e^{i\omega t}-\frac{E^2}{\omega^2}\left(e^{2i\omega t}-1\right)\right\}$$

$$-\left[\int_0^\infty d\tau\, e^{A\cos\omega_j(\tau-i\hbar\beta/2)} \times e^{-iB(\tau-i\hbar\beta/2)+2i\omega\tau}\right] D\left\{\frac{1}{2}\frac{E^2}{\omega^2}e^{-2i\omega t}\right\}$$

$$-\left[\int_0^\infty d\tau\, e^{A\cos\omega_j(\tau-i\hbar\beta/2)} \times e^{-iB(\tau-i\hbar\beta/2)-2i\omega\tau}\right] D\left\{\frac{1}{2}\frac{E^2}{\omega^2}e^{2i\omega t}\right\}$$

As várias integrais que aparecem entre colchetes nas expressões anteriores são semelhantes e podem ser agrupadas em dois tipos básicos. Assim, vamos em seguida estudar estes tipos básicos.

2. As integrais básicas - 1ª forma

A primeira e a terceira integrais são resumidas na forma abaixo:

$$\int_0^\infty d\tau \; e^{A_j \cos\omega_j(\tau \pm i\hbar\beta/2)} \times e^{iB(\tau \pm i\hbar\beta/2)} \times e^{\pm i\alpha\omega\tau} \qquad (2.1)$$

onde, nas expressões entre parênteses, o sinal (+) refere-se à terceira integral e, o (−), à primeira e ainda, temos $\alpha = 0, \pm 1, \pm 2$

Façamos $\tau = t + i\,\mathrm{Im}\,\tau$ onde t é pequeno e teremos:

$$\cos\omega_j(t + i\,\mathrm{Im}\,\tau \pm i\hbar\beta/2) = \cos\omega_j t \cos\omega_j(i\,\mathrm{Im}\,\tau \pm i\hbar\beta/2) - \mathrm{sen}\,\omega_j t \times$$

$$\times\, \mathrm{sen}\,\omega_j(i\,\mathrm{Im}\,\tau \pm i\hbar\beta/2) =$$

$$= \cos\omega_j t \cosh\omega_j(\mathrm{Im}\,\tau \pm \hbar\beta/2) - i\,\mathrm{sen}\,\omega_j t\, \mathrm{senh}\,\omega_j(\mathrm{Im}\,\tau \pm \hbar\beta/2)$$

Substituindo na expressão acima $\cos(\omega_j t)$ e $\mathrm{sen}(\omega_j t)$ por suas expansões em séries até a segunda ordem, vem

$$\cosh\omega_j(\mathrm{Im}\,\tau \pm \hbar\beta/2) - i t\omega_j\, \mathrm{senh}\,\omega_j(\mathrm{Im}\,\tau \pm \hbar\beta/2) - t^2\omega_j^2 \cosh\omega_j(\mathrm{Im}\,\tau \pm \hbar\beta/2) \qquad (2.2)$$

Por outro lado,

$$e^{iB(t+i\,\mathrm{Im}\,\tau \pm i\hbar\beta/2) \mp i\alpha\omega(t+i\,\mathrm{Im}\,\tau)} = e^{i(B\mp\alpha\omega)t}\, e^{-B(\mathrm{Im}\,\tau \pm \hbar\beta/2) \pm \alpha\omega\,\mathrm{Im}\,\tau} \tag{2.3}$$

Os têrmos lineares em t, agrupados e igualados a zero nos dão a seguinte equação:

$$-iA_j\omega_j \,\mathrm{senh}\, \omega_j(\mathrm{Im}\,\tau \pm \hbar\beta/2) + i(B\mp\alpha\omega) = 0 \tag{2.4}$$

Façamos $\mathrm{Im}\,\tau = \hbar\beta/2\,(\mp 1 \mp \Psi)$ onde Ψ fica por determinar (2.5)
e teremos

$$A_j\omega_j \,\mathrm{senh}\, \hbar\beta/2 \ominus \Psi - (B \overset{\ominus}{\mp} \alpha\omega) = 0$$

Neste ponto é bom lembrarmos que estamos resolvendo duas integrais simultaneamente e por isso, colocamos dentro dos pequenos círculos o sinal correspondente a outra solução. Tentamos, com este procedimento poupar a repetição de cálculos.

Levando em conta as definições de A e B, vem

$$2\sum_j \frac{\alpha_j(q)\,\mathrm{sen}^2\!\left(\frac{\vec{q}\cdot\vec{a}_\delta}{2}\right)\omega_j(q)}{\mathrm{senh}(\hbar\omega_j(q)\beta/2)}\,\mathrm{senh}\,\omega_j(q)\hbar\beta/2 \ominus \Psi - \left[\ominus\alpha\omega + \frac{1}{\hbar}\left[\varepsilon(i) - \varepsilon(i+a_\delta^i)\right]\right] = 0$$

Vamos agora definir uma frequencia média $\bar{\omega}$ como:

$$\omega_j(q) = \bar{\omega} + \Delta\omega_j(q) \tag{2.6}$$

Com esta definição, vem

$$\left[\Theta\alpha\omega + \frac{1}{\hbar}\left[\varepsilon(i) - \varepsilon(i+a_j^i)\right]\right] \oplus 2\sum_j \frac{\alpha_j(q)\, \mathrm{sen}^2 \frac{\vec{q}\cdot\vec{a}_j^i}{2}}{\mathrm{senh}\, \hbar\omega_j(q)\beta/2}\ \omega_j(q)\ \times$$

$$\times \left\{ \mathrm{senh}(\hbar\bar{\omega}\,\beta/_2\,\Psi) \cosh \hbar\,\Delta\omega_j(q)\beta/2\ \Psi + \cosh\ \hbar\bar{\omega}\,\beta/_2\,\Psi\ \mathrm{senh}\,\hbar\Delta\omega_j(q)\beta/_2\,\Psi \right\} = 0$$

Considerando $\Delta\omega$ pequeno, $\left.\begin{aligned} \mathrm{senh}\ \hbar\Delta\omega\Psi\beta/_2 &\simeq \hbar\,\Delta\omega_j(q)\,\beta/_2\,\Psi \\ \cosh\ \hbar\,\Delta\omega\,\Psi\beta/_2 &\simeq 1 \end{aligned}\right\}$ (2.7)

logo,

$$\Theta\alpha\omega + \frac{1}{\hbar}\left[\varepsilon(i) - \varepsilon(i+a_j^i)\right] \oplus 2\sum_j \frac{\alpha_j(q)\,\mathrm{sen}^2 \frac{\vec{q}\cdot\vec{a}_j^i}{2}}{\mathrm{senh}\,\hbar\omega_j\,\beta/2}\ \omega_j(q)\,\mathrm{senh}\,\hbar\bar{\omega}\,\Psi\beta/2$$

$$\oplus\ 2\sum_j \frac{\alpha_j(q)\,\mathrm{sen}^2 \frac{\vec{q}\cdot\vec{a}_j^i}{2}}{\mathrm{senh}\,\hbar\omega_j\,\beta/2}\ \omega_j(q)\left[\omega_j(q) - \bar{\omega}\right]\hbar\,\Psi\,\beta/2 = 0 \qquad (2.7a)$$

Definamos agora $\dfrac{1}{2\tau^2} = 2\sum_j \dfrac{\alpha_j\,\mathrm{sen}^2\frac{\vec{q}\cdot\vec{a}}{2}}{\mathrm{senh}\,\hbar\omega_j\,\beta/2}\ \omega_j^2$ (2.8)

e façamos $\bar{\omega} = \dfrac{1/2\tau^2}{2\sum \dfrac{\alpha_j\,\mathrm{sen}^2\,\vec{q}\cdot\vec{a}/2}{\mathrm{senh}\,\hbar\omega_j\beta/2}}$ (2.9)

Assim, o último termo da expressão (2.7a) é igual a zero e podemos escrever

$$\ominus \alpha\omega + \frac{1}{\hbar}\left[\varepsilon(i) - \varepsilon(i+a_\delta^j)\right] \overset{\oplus}{-} \frac{1}{2\sigma^2\bar{\omega}} \operatorname{senh} \hbar\,\bar{\omega}\,\psi\,\beta/2 = 0$$

donde

$$\psi = \frac{1}{\hbar\bar{\omega}\beta/2}\, \ln\left\{ 2\bar{\omega}\sigma^2\left(\alpha\omega \overset{\ominus}{+} \frac{1}{\hbar}\left[\varepsilon(i) - \varepsilon(i+a_\delta^j)\right]\right) + \right.$$

$$\left. + \left[1 + \left\{2\bar{\omega}\sigma^2\left(\alpha\omega \overset{\ominus}{+} \frac{1}{\hbar}\left[\varepsilon(i) - \varepsilon(i+a_\delta^j)\right]\right)\right\}^2\right]^{\frac{1}{2}} \right\} \tag{2.10}$$

Para um número médio de fonons $\eta = 2\sum \alpha \operatorname{sen}^2 \vec{q}\cdot\vec{a}/2$, (2.11)

$$\frac{1}{\sigma^2} = \frac{2\eta\bar{\omega}^2}{\operatorname{senh} \hbar\bar{\omega}\beta/2} \tag{2.12}$$

Levando em consideração que $\int_0^\infty e^{-a^2x^2}dx = \frac{\sqrt{\pi}}{2a}$ e as expressões (2.2), (2.3), (2.4) e (2.5) teremos para (2.1), usando as definições de A e B o seguinte resultado

$$e^{2\sum_j \frac{\alpha_j(q)\operatorname{sen}^2\frac{\vec{q}\cdot\vec{a}_\delta^j}{2}}{\operatorname{senh}\hbar\omega_j(q)\beta/2}\cosh \hbar\omega_j(q)\psi\beta/2} \times e^{\overset{\oplus}{-}\frac{1}{2}\left(\left[\varepsilon(i) - \varepsilon(i+a_\delta^j)\right]\overset{\ominus}{+}\alpha\hbar\omega\right)\beta\psi}$$

$$\times\, e^{\overset{\ominus}{+}\pm\frac{1}{2}\alpha\hbar\omega_j\beta} \times \frac{\sqrt{\pi}}{2}\, \frac{1}{\left\{2\sum_j \frac{\alpha_j(q)\operatorname{sen}^2\frac{\vec{q}\cdot\vec{a}_\delta^j}{2}}{\operatorname{senh}\hbar\omega_j(q)\beta/2}\,\omega_j^2(q)\cosh\hbar\omega_j(q)\beta/2\,\psi\right\}^{1/2}} \tag{2.13}$$

onde $\psi = \frac{1}{\hbar\bar{\omega}\beta/2}\ln\left\{2\bar{\omega}X + \left[1 + (2\bar{\omega}\sigma^2 X)^2\right]^{1/2}\right\}$ (2.14)

e $X = \alpha\omega \overset{\ominus}{+} \frac{1}{\hbar}\left[\varepsilon(i) - \varepsilon(i+a_\delta^j)\right]$ (2.15)

Ainda, de (2.7), (2.11) e (2.12) temos

$$A_j = \frac{\eta_j}{\operatorname{senh} \hbar \bar{\omega} \beta/2} \simeq \frac{1}{2\bar{\omega}^2 \tau_j^2} \qquad (2.16)$$

Levemos agora (2.16), (2.15) e (2.14) em (2.13) ...

$$e^{\frac{1}{2\bar{\omega}^2\tau_j^2} \cosh\left\{ \frac{\omega_j(q)}{\bar{\omega}} \ln\left[2\bar{\omega}\tau_j^2 x + \left[1 + (2\bar{\omega}\tau_j^2 x)^2\right]^{1/2}\right]\right\}} \cdot$$

$$\times\, e^{-\hbar x \frac{\beta}{2} \ln\left\{2\bar{\omega}\tau_j^2 x + \left[1 + \left(2\bar{\omega}\tau_j^2 x\right)^2\right]^{1/2}\right]\right\}} \times e^{\boxed{\mp} \pm \frac{1}{2}\alpha\hbar\omega_j\beta}$$

$$\times \frac{\sqrt{\pi}}{2} \frac{1}{\left\{ \frac{1}{2\bar{\omega}\tau_j^2}\, \omega_j^2(q) \cosh \frac{\omega_j(q)}{\bar{\omega}} \ln\left\{2\bar{\omega}\tau_j^2 x + \left[1 + (2\bar{\omega}\tau_j^2 x)^2\right]^{1/2}\right\}\right\}^{1/2}} \qquad (2.17)$$

Observemos que, em (2.17) temos expressões que são do tipo

$$\cosh(\ln y) \quad \text{com} \quad y = z + (1+z^2)^{1/2}$$

como $\cosh(\ln y) = \frac{1}{2y}(y^2+1)$ teremos, no nosso caso

$$\cosh(\ln y) = \frac{1}{2}\, \frac{z^2 + 1 + z^2 + 2z(1+z^2)^{1/2} + 1}{z + (1+z^2)^{1/2}} = \frac{z^2 + 1 + z(1+z^2)^{1/2}}{z + (1+z^2)^{1/2}}$$

$$= (z^2+1)^{1/2}$$

Assim, levando em conta que $\omega_j \simeq \bar{\omega}$, podemos usar estas últimas relações bastando para isto colocarmos $z = 2\bar{\omega}\tau_j^2 x$. e a equação (2.17) será então escrita como ...

$$e^{\frac{1}{2\bar{\omega}^2\tau_j^2}\left[1+(2\omega\tau_j^2 x)^2\right]^{1/2}} \times e^{-\frac{x}{\omega}\ln\left\{2\bar{\omega}\tau_j^2 x+\left[1+(2\bar{\omega}\tau_j^2 x)^2\right]^{1/2}\right\}}$$

$$\times\, e^{\mp\pm\frac{1}{2}\alpha\hbar\omega_j\beta} \times \frac{\sqrt{\pi}}{2}\;\frac{1}{\left(\frac{1}{2\tau^2}\right)^{1/2}\left[1+(2\bar{\omega}\tau_j^2 x)^2\right]^{1/4}} .$$

que, por sua vez, pode ser reescrita como ...

$$\sqrt{\frac{\pi}{2}}\;\tau_j\,\frac{e^{\mp\pm\frac{1}{2}\alpha\hbar\omega_j\beta}}{\left[1+(2\bar{\omega}x\tau_j^2)^2\right]^{1/4}} \quad \times$$

$$e^{-x^2\tau_j^2\left\{\frac{1}{\bar{\omega}x\tau_j^2}\ln\left\{2\bar{\omega}\tau_j^2 x+\left[1+(2\bar{\omega}\tau_j^2 x)^2\right]^{1/2}\right\}-\frac{2}{(2\bar{\omega}x\tau_j^2)^2}\left[1+2(\bar{\omega}x\tau_j^2)^2\right]^{1/2}\right\}} \tag{2.18}$$

Voltemos agora ao início do nosso problema e estudemos o fator comum que multiplica a integral em estudo. Este fator é

$$\frac{J^2}{\hbar^2}\, e^{-2\Sigma\, \alpha_j(q)\, \mathrm{sen}^2 \frac{\vec{q}\cdot\vec{a}_\delta}{2}\, \mathrm{cotan}\, \hbar\omega_j(q)\,\beta/2}$$

Este fator pode ser colocado em uma forma mais conveniente mediante alguma manipulação na cotangente que nele aparece:

$$\mathrm{cotan}\; \hbar\omega\beta/2 = \frac{\cosh \hbar\omega\beta/2}{\mathrm{senh}\; \hbar\omega\beta/2} - \frac{1}{\mathrm{senh}\; \hbar\omega\beta/2} + \frac{1}{\mathrm{senh}\; \hbar\omega\beta/2}$$

$$= \frac{\cosh^2 \hbar\omega\beta/4 + \mathrm{senh}^2 \hbar\omega\beta/4 - (\cosh^2 \hbar\omega\beta/4 - \mathrm{senh}^2 \hbar\omega\beta/4)}{2\, \mathrm{senh}\; \hbar\omega\beta/4\, \cosh \hbar\omega\beta/4} + \frac{1}{\mathrm{senh}\; \hbar\omega\beta/2}$$

$$= \tanh \hbar\omega\beta/4 + \frac{1}{\mathrm{senh}\; \hbar\omega\beta/2}$$

O primeiro termo nos dá

$$e^{-2\Sigma_i\, \alpha_j(q)\, \mathrm{sen}^2 \frac{\vec{q}\cdot\vec{a}_\delta^{\,i}}{2}\, \tanh \hbar\omega_j(q)\,\beta/4}$$

e o segundo,

$$e^{-2\Sigma_i\, \alpha_j(q)\, \mathrm{sen}^2 \frac{\vec{q}\cdot\vec{a}_\delta}{2}\, \frac{1}{\mathrm{senh}\; \hbar\omega_j\beta/2}} = e^{-A_j} = e^{-\frac{1}{2\,\overline{\omega}^2 \tau_j^2}}$$

$$= e^{-x^2\tau_j^2 \left(\frac{2}{(2\,\overline{\omega}\, x\, \tau_j^2)^2}\right)}$$

Levando em (2.18) obtemos

$$\frac{J^2}{\hbar^2}\sqrt{\frac{\pi}{2}}\ \tau_j\ e^{-2\sum_j \alpha_j(q)\,\mathrm{sen}^2\frac{\vec{q}\cdot\vec{a}_\delta}{2}\ \tanh \hbar\omega_j(q)\beta/4}$$

$$\times\, e^{\boxed{\mp}\pm\frac{1}{2}\alpha\hbar\beta\omega} \times \frac{e^{-x^2\tau_j^2\, r_j^{(x)}}}{\left[1+(2\bar{\omega}\, x\, \tau_j^2)^2\right]^{1/4}} .$$

onde $r_j^{(x)} = \dfrac{1}{\bar{\omega}\, x\, \tau_j^2}\ \ln\left\{2\bar{\omega}\, x\, \tau_j^2 + \left[1+(2\bar{\omega}\, x\, \tau_j^2)^2\right]^{1/2}\right\} - \dfrac{2}{(2\bar{\omega}\, x\, \tau_j^2)^2}\left\{\left[1+(2\bar{\omega}\, x\, \tau_j^2)^2\right]^{1/2} - 1\right\}$

Finalmente, a nossa integral I será então

$$I = \frac{J^2}{\hbar^2}\sqrt{\frac{\pi}{2}}\ \sum_\delta \begin{Bmatrix} \ell \\ D \end{Bmatrix} \tau_j\ e^{-2\Sigma\alpha_j\,\mathrm{sen}^2\frac{\vec{q}\cdot\vec{a}_\delta}{2}\ \tanh\hbar\omega_j\beta/4}$$

$$\times\, e^{\mp\frac{1}{2}\alpha\hbar\beta\omega} \times \frac{e^{-x^2\tau_j^2\, r_j^{(x)}}}{\left[1+(2\bar{\omega}\, x\, \tau_j^2)^2\right]^{1/4}} \qquad (2.19)$$

onde

$$\ell = \langle C^+_{i+a_\delta} C_{i+a_\delta}\rangle\left[1-\langle C_i^+ C_i\rangle\right]$$

$$D = \langle C_i^+ C_i\rangle\left[1-\langle C^+_{i+a_\delta} C_{i+a_\delta}\rangle\right]$$

3. As integrais básicas – 2ª forma

Trataremos agora da forma básica das integrais (1.2) e (1.4). Como o método de resolução é semelhante ao da seção anterior limitamos-nos a apresentar aqui os resultados mais importantes.

A forma básica da integral é

$$\int_0^\infty d\tau \; e^{A_j \cos \omega_j (\tau \pm i\hbar\beta/2)} \; e^{-iB(\tau \pm i\hbar\beta/2)} \; e^{i\alpha\omega\tau} \qquad (3.1)$$

onde o sinal (+) é característico da segunda integral e o (−), da quarta.

Fazendo $\tau = t + i \operatorname{Im}\tau$ com t pequeno podemos substituir na equação (3.1), desenvolver em série até a 2ª ordem e obter uma equação com o termos lineares em t:

$$-i A_j \omega_j(q) \operatorname{senh} \omega_j(q)(\operatorname{Im}\tau \pm \hbar\beta/2) - i(B - \alpha\omega) = 0$$

Façamos $\operatorname{Im}\tau = \hbar\beta/2(\mp 1 + \psi)$ com ψ à determinar e vem

$$-A_j \omega_j(q) \operatorname{senh} \hbar\omega_j(q) \beta/2\, \psi - (B - \alpha\omega) = 0$$

Seja $\omega_j(q) = \overline{\omega} + \Delta\omega_j(q)$ e teremos

$$- A_j \omega_j(q) \operatorname{senh} \hbar\bar{\omega} \Psi \beta/2 - (B - \alpha\omega) - A_j \omega_j(q)[\omega_j(q) - \bar{\omega}] \hbar \Psi \beta/2 = 0$$

Escolhendo $\bar{\omega} = \dfrac{A_j \omega_j^2(q)}{A_j \omega_j(q)}$ o último termo da expressão acima anula-se. Tomamos também $\dfrac{1}{2\tau_j^2} = 2\sum_j \dfrac{\alpha_j(q) \operatorname{sen}^2 \frac{\vec{q}\cdot\vec{a}_\delta}{2}}{\operatorname{senh} \hbar\omega_j \beta/2} \omega_j^2$

Teremos $\alpha\omega - B = A_j \omega_j(q) \operatorname{senh} \hbar\bar{\omega} \beta/2 \, \Psi_y$

Fazendo $y = \alpha\omega - B = \alpha\omega - \frac{1}{\hbar}[\varepsilon(i) - \varepsilon(i + a_\delta^i)]$ obtemos

$$\Psi_y = \frac{1}{\hbar\bar{\omega}\beta/2} \ln \left\{ 2\bar{\omega}\tau_j^2 y + \left[1 + (2\bar{\omega} y \tau_j^2)^2\right]^{1/2} \right\}$$

A expressão para (3.1) será então

$$e^{2\sum_j \frac{\alpha_j(q) \operatorname{sen}^2 \frac{\vec{q}\cdot\vec{a}_\delta}{2}}{\operatorname{senh} \hbar\omega_j \beta/2} \cosh \hbar\omega_j(q)\beta/2} \quad e^{\frac{1}{2}\hbar\beta\left[[\varepsilon(i) - \varepsilon(i+a_\delta^i)]\frac{1}{\hbar} - \alpha\omega\right]\Psi}$$

$$e^{\pm\alpha\omega\hbar\beta/2} \quad \frac{\sqrt{\pi}}{2} \quad \frac{1}{\left\{ 2\sum_j \frac{\alpha_j(q)\operatorname{sen}^2 \frac{\vec{q}\cdot\vec{a}_\delta}{2}}{\operatorname{senh}\hbar\omega\beta/2} \omega_j^2(q) \cosh\omega_j(q)\hbar\beta/2 \, \Psi_y \right\}^{1/2}}$$

Como antes, $A_j \simeq \dfrac{1}{2\bar{\omega}^2 \tau_j^2}$

Levando os resultados de A_j e Ψ_Y na integral, obtemos a expressão abaixo:

$$e^{\frac{1}{2\varpi\tau_j^2}\cosh\left\{\frac{\omega_j(q)}{\varpi}\ln\left[2\varpi\tau_j^2 y+\left(1+(2\varpi y\tau_j^2)^2\right)^{1/2}\right]\right\}} \times$$

$$e^{-\hbar\frac{\beta}{2}y\frac{1}{\hbar\varpi\beta/2}\ln\left\{2\varpi y\tau_j^2+\left[1+(2\varpi y\tau_j^2)^2\right]^{1/2}\right\}} \times e^{\pm\frac{1}{2}\alpha\hbar\omega\beta} \cdot$$

$$\times\frac{\sqrt{\pi}}{2}\frac{1}{\left\{\frac{1}{2\varpi\tau_j^2}\omega_j^2\cosh\frac{\omega_j(q)}{\varpi}\ln\left\{2\varpi y\tau_j^2\left[1+(2\varpi y\tau_j^2)^2\right]^{1/2}\right\}\right\}^{1/2}}$$

Considerando que $\varpi\simeq\omega_j(q)$ e $\cosh\ln\left[z+(1+z^2)^{1/2}\right]$ com $z=2\varpi y\tau_j^2$

vem, finalmente para o valor da integral a expressão abaixo

$$\frac{J^2}{\hbar^2}\sqrt{\frac{\pi}{2}}\sum_{\delta}\left\{\begin{matrix}E\\D\end{matrix}\right\}\tau_j\, e^{\pm\frac{1}{2}\alpha\hbar\omega\beta}\, e^{-2\Sigma_i\alpha_j(q)\,\mathrm{sen}^2\frac{\vec{q}\cdot\vec{a}_\delta}{2}\tanh\hbar\omega_j(q)\beta/4}$$

$$\times\frac{e^{-y^2\tau_j^2 r_j^{(y)}}}{\left[1+(2\varpi y\tau_j^2)^2\right]^{1/4}} \qquad (3.2)$$

com $r_j^{(y)}=\frac{1}{\varpi y\tau_j^2}\ln\left\{2\varpi y\tau_j^2+\left[1+(2\varpi y\tau_j^2)^2\right]^{1/2}\right\}-\frac{2}{(2\varpi y\tau_j^2)^2}\times$

$$\left\{\left[1+(2\varpi y\tau_j^2)^2\right]-1\right\}$$

4. Vamos agora definir duas novas quantidades $X(\alpha)$ e $Y(\alpha)$ à partir das equações (2.19) e (3.2) :

$$X(\alpha) = \frac{e^{-x^2 \tau_j^2 r_j^{(x)}}}{\left[1 + (2\bar{\omega} x \tau_j^2)^2\right]^{1/4}} \qquad e \qquad Y(\alpha) = \frac{e^{-y^2 \tau_j^2 r_j^{(y)}}}{\left[1 + (2\bar{\omega} y \tau_j^2)^2\right]^{1/4}}$$

Com o auxílio destas duas novas definições vamos escrever a equação do movimento do operador ocupância $C_i^+ C_i$ como se segue

$$\frac{d}{dt}\langle C_i^+ C_i\rangle = \frac{J^2}{\hbar^2}\sqrt{\frac{\pi}{2}} \sum_{\delta} \tau_j \, e^{-2\sum_j \alpha_j(q)\, \mathrm{sen}^2 \frac{\vec{q}\cdot\vec{a}_\delta}{2} \tanh \hbar\omega_j(q)\beta/4} \times$$

$$\Big\{ C\,X(0)\left[1 - \frac{E}{\omega}\left(e^{i\omega t} - e^{-i\omega t}\right) + \frac{E^2}{\omega^2}\left(e^{2i\omega t} + e^{-2i\omega t} - 4\right)\right] e^{-\frac{1}{2}\hbar\beta\omega x}$$

$$+ C\,X(1)\left[-\frac{E}{\omega}\, e^{-i\omega t} + \frac{E^2}{\omega^2}\left(e^{-2i\omega t} - 1\right)\right] e^{-\frac{1}{2}\hbar\beta x}$$

$$+ C\,X(-1)\left[\frac{E}{\omega}\, e^{i\omega t} - \frac{E^2}{\omega^2}\left(e^{2i\omega t} - 1\right)\right] e^{-\frac{1}{2}\hbar\beta x}$$

$$+ C\,X(2)\left[\frac{E^2}{\omega^2}\, e^{-2i\omega t}\right] e^{-\frac{1}{2}\hbar\beta x}$$

$$+ C\,X(-2)\left[\frac{E^2}{\omega^2}\, e^{2i\omega t}\right] e^{-\frac{1}{2}\hbar\beta x}$$

$$- DX(0)\left[1 - \frac{E}{\omega}\left(e^{i\omega t} - e^{-i\omega t}\right) + \frac{E^2}{\omega^2}\left(e^{2i\omega t} + e^{-2i\omega t} - 4\right)\right] e^{\frac{1}{2}\hbar\beta x}$$

$$+ DX(1)\left[\frac{E}{\omega}\, e^{-i\omega t} + \frac{E^2}{\omega^2}\left(e^{-2i\omega t} - 1\right)\right] e^{\frac{1}{2}\hbar\beta x}$$

$$- DX(-1)\left[\frac{E}{\omega}\, e^{i\omega t} - \frac{E^2}{\omega^2}\left(e^{2i\omega t} - 1\right)\right] e^{\frac{1}{2}\hbar\beta x}$$

$$- DX(2)\left[\frac{E^2}{\omega^2}\, e^{-2i\omega t}\right] e^{\frac{1}{2}\hbar\beta x}$$

$$- DX(-2)\left[\frac{E^2}{\omega^2}\, e^{2i\omega t}\right] e^{\frac{1}{2}\hbar\beta x} \Bigg\} \quad +$$

$$+ \frac{J^2}{\hbar^2}\sqrt{\frac{\pi}{2}} \sum_{\delta} e^{-2\sum_j \alpha_j(q)\, \mathrm{sen}^2 \frac{\vec{q}\cdot\vec{a}_\delta}{2}\, \tanh \hbar\omega_j(q)\beta/4} \quad \times$$

$$\Bigg\{ CY(0)\left[1 + \frac{E}{\omega}\left(e^{i\omega t} - e^{-i\omega t}\right) + \frac{E^2}{\omega^2}\left(e^{2i\omega t} + e^{-2i\omega t} - 4\right)\right] e^{\frac{1}{2}\hbar\beta y}$$

$$+ CY(1)\left[\frac{E}{\omega}\, e^{-i\omega t} - \frac{E^2}{\omega^2}\left(e^{-2i\omega t} - 1\right)\right] e^{\frac{1}{2}\hbar\beta y}$$

$$- CY(-1)\left[\frac{E}{\omega}\, e^{i\omega t} + \frac{E^2}{\omega^2}\left(e^{2i\omega t} - 1\right)\right] e^{\frac{1}{2}\hbar\beta y}$$

$$+ CY(2)\left[\frac{E^2}{\omega^2}\, e^{-2i\omega t}\right] e^{\frac{1}{2}\hbar\beta y}$$

$$+ CY(-2)\left[\frac{E^2}{\omega^2}\, e^{2i\omega t}\right] e^{\frac{1}{2}\hbar\beta y}$$

$$- D\,Y(0)\left[1+\frac{E}{\omega}\left(e^{i\omega t}-e^{-i\omega t}\right)+\frac{E^2}{\omega^2}\left(e^{2i\omega t}+e^{-2i\omega t}-4\right)\right]e^{-\frac{1}{2}\hbar\beta y}$$

$$- D\,Y(1)\left[\frac{E}{\omega}\,e^{-i\omega t}-\frac{E^2}{\omega^2}\left(e^{-2i\omega t}-1\right)\right]e^{-\frac{1}{2}\hbar\beta y}$$

$$+ D\,Y(-1)\left[\frac{E}{\omega}\,e^{i\omega t}+\frac{E^2}{\omega^2}\left(e^{2i\omega t}-1\right)\right]e^{-\frac{1}{2}\hbar\beta y}$$

$$- D\,Y(2)\left[\frac{E^2}{\omega^2}\,e^{-2i\omega t}\right]e^{-\frac{1}{2}\hbar\beta y}$$

$$- D\,Y(-2)\left[\frac{E^2}{\omega^2}\,e^{2i\omega t}\right]e^{-\frac{1}{2}\hbar\beta y}\quad\Big\} \qquad .(4.1)$$

Observemos agora que, de acordo com as definições de $X(\alpha)$, $Y(\alpha)$, x e y temos $X(1)=Y(-1)$ etc... Com isto, podemos reescrever a nossa equação em termos de uma única função, como fazemos a seguir:

$$\frac{d}{dt}\langle C_i^+ C_i\rangle = \frac{J^2}{\hbar^2}\sqrt{\frac{\pi}{2}}\sum_{\delta}\tau_j\, e^{-2\sum \alpha_j(q)\,\mathrm{sen}^2\frac{\vec{q}\cdot\vec{a}_\delta}{2}\,\tanh \hbar\omega_j(q)\beta/4}$$

$$\Bigg[\Big\{\langle C^+_{i+a_\delta^j} C_{i+a_\delta^j}\rangle\left(1-\langle C_i^+ C_i\rangle\right)\Big\{Y(0)\left[2+\frac{E^2}{\omega^2}\left(e^{2i\omega t}+e^{-2i\omega t}-4\right)\right]e^{\frac{1}{2}\hbar\beta y}$$

$$+Y(1)\left[\frac{E}{\omega}\left(e^{i\omega t}+e^{-i\omega t}\right)-\frac{E^2}{\omega^2}\left(e^{2i\omega t}+e^{-2i\omega t}-2\right)\right]e^{\frac{1}{2}\hbar\beta y}$$

$$-Y(-1)\left[\frac{E}{\omega}\left(e^{i\omega t}+e^{-i\omega t}\right)+\frac{E^2}{\omega^2}\left(e^{2i\omega t}+e^{-2i\omega t}-2\right)\right]e^{\frac{1}{2}\hbar\beta y}$$

$$+Y(2)\left[\frac{1}{2}\frac{E^2}{\omega^2}\left(e^{2i\omega t}+e^{-2i\omega t}\right)\right]e^{\frac{1}{2}\hbar\beta y}$$

$$+ Y(-2)\left[\frac{1}{2}\frac{E^2}{\omega^2}\left(e^{2i\omega t}+e^{-2i\omega t}\right)\right]e^{\frac{1}{2}\hbar\beta y}\Bigg\} - \langle C_i^\dagger C_i\rangle\left(1-\langle C^\dagger_{i+a_\delta} C_{i+a_\delta}\rangle\right) \times$$

$$\Bigg\{ Y(0)\left[2+\frac{E^2}{\omega^2}\left(e^{2i\omega t}+e^{-2i\omega t}-4\right)\right]e^{-\frac{1}{2}\hbar\beta y}$$

$$+ Y(1)\left[\frac{E}{\omega}\left(e^{i\omega t}+e^{-i\omega t}\right)-\frac{E^2}{\omega^2}\left(e^{2i\omega t}+e^{-2i\omega t}-2\right)\right]e^{-\frac{1}{2}\hbar\beta y}$$

$$- Y(-1)\left[\frac{E}{\omega}\left(e^{i\omega t}+e^{-i\omega t}\right)+\frac{E^2}{\omega^2}\left(e^{2i\omega t}+e^{-2i\omega t}-2\right)\right]e^{-\frac{1}{2}\hbar\beta y} \cdot$$

$$+ Y(2)\left[\frac{1}{2}\frac{E^2}{\omega^2}\left(e^{2i\omega t}+e^{-2i\omega t}\right)\right]e^{-\frac{1}{2}\hbar\beta y}$$

$$+ Y(-2)\left[\frac{1}{2}\frac{E^2}{\omega^2}\left(e^{2i\omega t}+e^{-2i\omega t}\right)\right]e^{-\frac{1}{2}\hbar\beta y}\Bigg\}\ \Bigg] \qquad (4.2)$$

onde $Y(\alpha) = \dfrac{e^{-y^2\tau_\delta^2 r_\delta}}{\left[1+(2\bar\omega y\tau_\delta^2)^2\right]^{1/4}}$

$$r_\delta = \frac{1}{\bar\omega y \tau_\delta^2}\ \ln\left\{2\bar\omega y\tau_\delta^2 + \left[1+(2\bar\omega y\tau_\delta^2)^2\right]^{1/2}\right\}$$

$$- \frac{2}{(2\bar\omega y\tau_\delta^2)^2}\left\{\left[1+(2\bar\omega y\tau_\delta^2)^2\right]-1\right\}$$

Façamos agora as seguintes definições

$$G = \frac{J^2}{\hbar^2}\sqrt{\frac{\pi}{2}} \quad \sigma_j \, e^{-2\sum \alpha_j(q)\,\text{sen}^2 \frac{\vec{q}\cdot\vec{a}^j_\delta}{2}} \tanh \hbar\omega_j(q)\beta/4$$

$$R^{(\omega)}_{i+a^i_\delta,i} = G \left\{ Y(0)\left[2 + \frac{E^2}{\omega^2}\left(e^{2i\omega t} + e^{-2i\omega t} - 4\right)\right] + Y(1)\left[\frac{E}{\omega}\left(e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}\right) - \frac{E^2}{\omega^2}\left(e^{2i\omega t} + e^{-2i\omega t} - 2\right)\right] - Y(-1)\left[\frac{E}{\omega}\left(e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}\right) + \frac{E^2}{\omega^2}\left(e^{2i\omega t} + e^{-2i\omega t} - 2\right)\right] + Y(2)\left[\frac{1}{2}\frac{E^2}{\omega^2}\left(e^{2i\omega t} + e^{-2i\omega t}\right)\right] + Y(-2)\left[\frac{1}{2}\frac{E^2}{\omega^2}\left(e^{2i\omega t} + e^{-2i\omega t}\right)\right] \right\} e^{\frac{1}{2}\hbar\beta y}$$

$$R^{(\omega)}_{i,i+a^i_\delta} = G \left\{ Y(0)\left[2 + \frac{E^2}{\omega^2}\left(e^{2i\omega t} + e^{-2i\omega t} - 4\right)\right] + Y(1)\left[\frac{E}{\omega}\left(e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}\right) - \frac{E^2}{\omega^2}\left(e^{2i\omega t} + e^{-2i\omega t} - 2\right)\right] - Y(-1)\left[\frac{E}{\omega}\left(e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}\right) + \frac{E^2}{\omega^2}\left(e^{2i\omega t} + e^{-2i\omega t} - 2\right)\right] + Y(2)\left[\frac{1}{2}\frac{E^2}{\omega^2}\left(e^{2i\omega t} + e^{-2i\omega t}\right)\right] + Y(-2)\left[\frac{1}{2}\frac{E^2}{\omega^2}\left(e^{2i\omega t} + e^{-2i\omega t}\right)\right] \right\} e^{-\frac{1}{2}\hbar\beta y}$$

Cabe relembrar aqui que, nas definições dos R acima, $y = y\,(i,\ i+a^i_\delta)$

Com auxílio destas definições a equação do movimento toma uma forma um pouco mais compreensível a saber, a equação (4.3) da página seguinte.

$$\frac{d}{dt}\langle C_i^+ C_i\rangle = \sum_{\delta}\left[R^{(\omega)}_{i+a_\delta^i,\, i}\left\{\langle C^+_{i+a_\delta^i}\, C_{i+a_\delta^i}\rangle\left(1-\langle C_i^+ C_i\rangle\right)\right\}\right]$$

$$-\sum_{\delta}\left[R^{(\omega)}_{i,\, i+a_\delta^i}\left\{\langle C_i^+ C_i\rangle\left(1-\langle C^+_{i+a_\delta^i}\, C_{i+a_\delta^i}\rangle\right)\right\}\right] \qquad (4.3)$$

Para colocarmos a equação acima numa forma mais conhecida, vamos chamar o ponto $i+a_\delta^i$ de ponto j e, às populações vamos dar os nomes n_i e n_j. Assim, (4.3) será da forma:

$$\frac{d}{dt} n_i = \sum_{\delta} R_{j,i}\ n_j(1-n_i) - \sum_{\delta} R_{i,j}\ n_i(1-n_j) \qquad (4.4)$$

Nesta equação, o primeiro têrmo é responsável pela entrada das partículas no nível i. Êle depende da existência de uma partícula em j e da não existência de uma partícula em i, o que possibilita uma transição de j para i. O segundo têrmo é uma medida das partículas que saem de i pois depende da existência da partícula em i e da não existência em j. As quantidades $R_{i,j}$ e $R_{j,i}$ são as probabilida des das transições $i \to j$ e $j \to i$, respectivamente.

Aplicando-se uma condição de equilíbrio à equação (4.4) podemos ainda obter resultados bastante interessantes. Para isto façamos $dn_i/dt = 0$, $w=0$ o que implica em admitirmos iguais os vários termos das séries, tomados δ por δ. Para um δ qualquer teremos

$$R_{j,i}\,(1-n_i^\circ)\,n_j^\circ = R_{i,j}\,(1-n_j^\circ)\,n_i^\circ \qquad \text{ou,}$$

$$\frac{R_{j,i}}{R_{i,j}} = \frac{n_i^\circ}{(1-n_i^\circ)}\,\frac{(1-n_j^\circ)}{n_j^\circ} \tag{4.5}$$

De acordo com as definições dos R e dos y,

$$\frac{R_{j,i}}{R_{i,j}} = \frac{e^{\frac{1}{2}\hbar\beta y}}{e^{-\frac{1}{2}\hbar\beta y}} = e^{\hbar\beta y} = e^{\hbar\beta\left(\frac{1}{\hbar}\varepsilon_j - \frac{1}{\hbar}\varepsilon_i\right)}$$

$$\frac{R_{j,i}}{R_{i,j}} = e^{\beta(\varepsilon_j - \varepsilon_i)}$$

A equação (4.5) pode então ser escrita

$$\frac{n_i^\circ}{(1-n_i^\circ)}\,\frac{(1-n_j^\circ)}{n_j^\circ} = e^{\beta(\varepsilon_j - \varepsilon_i)} \tag{4.6}$$

Da equação (4.6) podemos ainda determinar a função distribuição:

$$\frac{n_i^\circ}{(1-n_i^\circ)}\, e^{\beta \varepsilon_i} = \frac{n_j^\circ}{(1-n_j^\circ)}\, e^{\beta \varepsilon_j} \qquad (4.7)$$

Como os dois termos de (4.7) são completamente independentes, eles devem ser constantes:

$$\frac{n_i^\circ}{(1-n_i^\circ)}\, e^{\beta \varepsilon_i} = \frac{n_j^\circ}{(1-n_j^\circ)}\, e^{\beta \varepsilon_j} = C$$

Trabalhando especificamente com n_i, temos

$$\frac{n_i^\circ}{(1-n_i^\circ)}\, e^{\beta \varepsilon_i} = C$$

$$n_i^\circ = \frac{1}{\frac{1}{C} e^{\beta \varepsilon_i} + 1}$$

A constante C pode ser calculada se lembrarmos que para $\varepsilon = \mu$, $n_i^\circ = 1/2$. Assim concluimos que $C = e^{\beta\mu}$ ou

$$\boxed{n_i^\circ = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_i - \mu)} + 1}}$$

que é a distribuição de Fermi.

CAPITULO IV

CONCLUSÕES

Como dissemos no início deste trabalho, trataríamos da proposição de um modêlo que pudesse explicar uma evidencia física, o efeito foto-magnético.

Para a construção dêste modelo, partimos de uma Hamiltoniana de pequenos polarons interagindo com um campo externo, no caso, a luz e chegamos a uma equação de movimento para o operador ocupancia do sistema. Sabendo do comportamento dêste operador, temos conhecimento de como os níveis estão preenchidos e de como a população dos mesmos muda com o tempo.

Sob êste aspecto, podemos estabelecer a equação (4.3) do capítulo III como objetivo alcançado do nosso trabalho.

Esta equação, que está escrita de uma forma mais conveniente na eq. (4.4) não constitui, evidentemente, novidade alguma; trata-se de uma equação que relaciona o fluxo de entrada e saída de portadores em um determinado nível. O que se faz interessante notar é que chegamos a êste resultado através de um formalismo microscópico que nos dá condições de calcular os fatores $R_{i,j}$ que nela aparecem e trazem em si toda informação dinâmica contida na Hamiltoniana do problema.

Ainda, a razão $R_{j,i} / R_{i,j} = \exp(\varepsilon_j - \varepsilon_i)\beta$ aparece de uma forma natural, ao contrário de outros trabalhos onde ela é tacitamente admitida como, por exemplo, em estudos sobre condução por "hopping".[21] Aliás, a obtenção dêste resultado fecha uma condição de contorno da solução ou seja, a situação de equilíbrio para a equação.

No caso específico do YIG, a aplicação da equação fica reduzida ao calculo dos R adequados e à solução de um sistema de quatro equações correspondentes às populações das quatro posições octaedricas que os polarons podem ocupar. Alguns resultados já foram obtidos para o torque e o dicroismo em YIG(Si)[14] e outros calculos encontram-se em fase final.

APENDICE I - Cálculo das expressões $\langle \bar{X} X \rangle$ e $\langle X \bar{X} \rangle$

Neste apendice vamos tratar dos operadores X e $\bar{X}$ tal como aparecem nas integrais do capítulo III

No capítulo II, os operadores X foram definidos pela seguinte equação

$$X_{s,s+i} = \prod_{q\lambda} e^{-i\{\Gamma_{q\lambda,s,i} B^+_{q\lambda} + \Gamma^*_{q\lambda,s,i} B_{q\lambda}\}}$$

e também,

$$X_{s+i,s} = \prod e^{+i\{\Gamma_{q\lambda si} B^+_{q\lambda} + \Gamma^*_{q\lambda si} B_{q\lambda}\}}$$

onde

$$\Gamma_{q\lambda si} = \alpha^{1/2}_{\lambda q}\left[e^{i\vec{q}\cdot\vec{R}_s} - e^{i\vec{q}\cdot\vec{R}_{s+i}}\right]$$

Vamos agora tratar de expressão do tipo $\bar{X} X$. Observemos que, nesta expressão, o operador $\bar{X}$ é afetado pelo tempo enquanto que X refere-se ao tempo zero. Por isso, partiremos da forma abaixo

$$X_{s,s+i}(\tau)\, X_{s+i,s}(0)$$

Consideremos inicialmente um $q\lambda$ qualquer...

e temos

$$e^{-i\left\{\Gamma(z)B^+_{q\lambda}+\Gamma^*(z)B_{q\lambda}\right\}}\times e^{+i\left\{\Gamma(0)B^+_{q\lambda}+\Gamma^*(0)B_{q\lambda}\right\}}$$

$$=e^{-i\left\{\Gamma^*(z)B+\Gamma(z)B^+\right\}}\, e^{+i\left\{\Gamma^*(0)B+\Gamma(0)B^+\right\}} \qquad (I\text{-}1)$$

Usemos agora a relação

$$e^{A+B}=e^{A}\cdot e^{B}\cdot e^{-\frac{1}{2}[A,B]} \quad .$$

Com ela, a expressão na qual estamos trabalhando toma a forma seguinte:

$$e^{-i\Gamma^*(z)B}\cdot e^{-i\Gamma(z)B^+}\cdot e^{+i\Gamma^*(0)B}\cdot e^{+i\Gamma(0)B^+}$$

$$\cdot\, e^{-\frac{1}{2}\left(-i\Gamma^*(z)\right)\left(-i\Gamma(z)\right)[B,B^+]}\cdot e^{-\frac{1}{2}\left(+i\Gamma^*(0)\right)\left(i\Gamma(0)\right)[B,B^+]}$$

$$=e^{+\frac{1}{2}\left\{\Gamma^*(z)\Gamma(z)+\Gamma^*(0)\Gamma(0)\right\}}\cdot e^{-i\Gamma^*(z)B}\, e^{-i\Gamma(z)B^+}\, e^{i\Gamma^*(0)B}\, e^{i\Gamma(0)B^+}$$

$$=e^{\frac{1}{2}\left\{\Gamma^*(z)\Gamma(z)+\Gamma^*(0)\Gamma(0)\right\}}\, e^{-i\Gamma^*(z)B}\, e^{\left(-i\Gamma(z)B^++i\Gamma^*(0)B\right)}$$

$$e^{i\Gamma(0)B^+}\, e^{\frac{1}{2}\left(-i\Gamma(z)\right)\left(i\Gamma^*(0)\right)[B^+,B]}$$

$$= e^{\frac{1}{2}\left\{\Gamma^*(z)\Gamma(z) + \Gamma^*(0)\Gamma(0)\right\}} \cdot e^{-\frac{1}{2}\Gamma(z)\Gamma^*(0)} \; e^{-i\Gamma^*(z)B}$$

$$e^{(i\Gamma^*(0)B - i\Gamma(z)B^+)} \; e^{+i\Gamma(0)B^+}$$

$$= e^{\frac{1}{2}\left\{\Gamma^*(z)\Gamma(z) + \Gamma^*(0)\Gamma(0)\right\}} \; e^{-\frac{1}{2}\Gamma(z)\Gamma^*(0)} \; e^{-\frac{1}{2}(i\Gamma^*(0))(-i\Gamma(z))}$$

$$e^{-i\Gamma^*(z)B} \; e^{+i\Gamma^*(0)B} \; e^{-i\Gamma(z)B^+} \; e^{i\Gamma(0)B^+} \cdot$$

$$= e^{\frac{1}{2}\left\{\Gamma^*(z)\Gamma(z) + \Gamma(0)\Gamma^*(0)\right\}} \; e^{-\frac{1}{2}2\Gamma^*(0)\Gamma(z)}$$

$$\cdot e^{i(\Gamma^*(0) - \Gamma^*(z))B} \; e^{i(\Gamma(0) - \Gamma(z))B^+} \qquad (I\text{-}2)$$

Na expressão acima, vamos escrever as duas ultimas exponenciais na forma abaixo

$$e^{i\gamma^* B} \cdot e^{i\gamma B^+}$$

Estes termos, vamos calculá-los com a matriz densidade

$$\sum_0^\infty \frac{|n\rangle\langle n| e^{-\beta\hbar\omega n}}{Z} \qquad \text{onde } Z = \frac{1}{1 - e^{-\beta\hbar\omega}}$$

Temos

$$\sum_n \frac{1}{Z}\frac{1}{n!}\langle 0|B^n\, e^{i\rho^* B}\, e^{i\rho B^+}\, B^{+n}|0\rangle\, e^{-\beta\hbar\omega n}$$

$$= \frac{1}{Z}\sum_n\sum_m\sum_\ell \langle 0|B^n (i\rho^*)^m B^m (i\rho)^\ell B^{+\ell} B^{+n}|0\rangle \frac{1}{n!}\frac{1}{m!}\frac{1}{\ell!} e^{-\beta\hbar\omega n}$$

$$= \frac{1}{Z}\frac{1}{2\pi i}\sum \oint (i\rho^*)^m (i\rho)^\ell \frac{1}{n!}\frac{1}{m!}\frac{1}{\ell!} e^{-\beta\hbar\omega n}\, \zeta^{m-\ell-1} (n+\ell)!\, d\zeta$$

$$= \frac{1}{Z}\frac{1}{2\pi i}\oint \frac{d\zeta}{\zeta}\sum_{n,m,\ell} \frac{1}{n!}\frac{1}{m!}\frac{1}{\ell!} (i\rho^*\zeta)^m e^{-\beta\hbar\omega n} (i\rho\,\zeta^{-1})^\ell (n+\ell)!$$

$$= \frac{1}{Z}\frac{1}{2\pi i}\oint \frac{d\zeta}{\zeta}\sum_m \frac{1}{m!}(i\rho^*\zeta)^m \sum_n\sum_{n+\ell} \frac{(n+\ell)!}{n!\,\ell!} e^{-\beta\hbar\omega n} (i\rho\,\zeta^{-1})^\ell$$

$$= \frac{1}{Z}\frac{1}{2\pi i}\oint \frac{d\zeta}{\zeta} e^{i\rho^*\zeta} \sum_{n+\ell}\left(i\rho\,\zeta^{-1} + e^{-\beta\hbar\omega}\right)^{(n+\ell)}$$

Temos $e^{-\beta\hbar\omega} < 1$. Se ζ é grande, o primeiro termo será também menor que 1 em módulo e temos uma série geométrica. Vem então

$$\frac{1}{2\pi i}\frac{1}{Z}\oint \frac{d\zeta}{\zeta} e^{i\rho^*\zeta} \frac{1}{1 - i\rho\,\zeta^{-1} - e^{-\beta\hbar\omega}}$$

$$= \frac{1}{2}\frac{1}{2\pi i}\oint d\xi \frac{1}{\xi(1-e^{-\beta\hbar\omega})-i\Gamma} e^{i\Gamma^*\xi}$$

$$= \frac{1}{2}\frac{1}{(1-e^{-\beta\hbar\omega})}\frac{1}{2\pi i}\oint d\xi \frac{e^{i\Gamma^*\xi}}{\xi - \frac{i\Gamma}{(1-e^{-\beta\hbar\omega})}}$$

$$= e^{-\frac{\Gamma^*\Gamma}{(1-e^{-\beta\hbar\omega})}}$$

Levando este resultado na equação (I-2) obtemos

$$X_{s,s+i} X_{s+i,s} =$$

$$= e^{\frac{1}{2}\left\{\Gamma^*(z)\Gamma(z) + \Gamma^*(0)\Gamma(0)\right\} - \frac{1}{2} 2\Gamma^*(0)\Gamma(z)\}}$$

$$\cdot e^{-\frac{(\Gamma^*(0)-\Gamma^*(z))(\Gamma(0)-\Gamma(z))}{1-e^{-\beta\hbar\omega}}}$$

$$= e^{\Gamma^*(0)\Gamma(0)\left\{1 - \frac{2}{e^{-\hbar\omega\beta/2}(e^{\hbar\omega\beta/2}-e^{-\hbar\omega\beta/2})}\right\}}$$

$$e^{\Gamma^*(0)\Gamma(0)\left\{1 - \frac{e^{\hbar\omega\beta/2}}{\operatorname{senh}\hbar\omega\beta/2}\right\}}$$

$$e^{\Gamma^*(0)\Gamma(0)\left\{\frac{\frac{1}{2}e^{\hbar\omega\beta/2} - \frac{1}{2}e^{-\hbar\omega\beta/2} - e^{\hbar\omega\beta/2}}{\operatorname{senh}\hbar\omega\beta/2}\right\}}$$

$$= e^{-\Gamma^*(0)\,\Gamma(0)\,\coth \hbar\omega\beta/2}$$

Considerando que $\Gamma^*(z)\,\Gamma(z) = \Gamma^*(0)\,\Gamma(0)$ podemos escrever para a expressão acima:

$$e^{\Gamma^*(0)\,\Gamma(0) - \frac{2\Gamma^*(0)\,\Gamma(0)}{1-e^{-\beta\hbar\omega}}}$$

$$\cdot\; e^{-\Gamma^*(0)\,\Gamma(z) + \frac{\Gamma^*(0)\Gamma(z)+\Gamma^*(z)\Gamma(0)}{1-e^{-\beta\hbar\omega}}}$$

$$= e^{-\Gamma^*(0)\,\Gamma(0)\,\coth \hbar\omega\beta/2}$$

$$e^{+\frac{\Gamma^*(0)\,\Gamma(0)\,e^{i\omega z} + \Gamma^*(0)\,\Gamma(0)\,e^{-i\omega z}}{1-e^{-\beta\hbar\omega}}}$$

$$= e^{-\Gamma^*(0)\,\Gamma(0)\,\coth \hbar\omega\beta/2}\; e^{\Gamma^*(0)\Gamma(0)\left\{\frac{e^{\hbar\omega\beta/2}\left(e^{i\omega z}+e^{-i\omega z}\right)}{2\,\mathrm{senh}\,\hbar\omega\beta/2} - e^{i\omega z}\right\}}$$

$$= e^{-\Gamma^*(0)\,\Gamma(0)\,\coth \hbar\omega\beta/2}$$

$$\cdot\; e^{\Gamma^*(0)\,\Gamma(0)\,\frac{\frac{1}{2}\left(e^{\hbar\omega\beta/2}\left[e^{i\omega z}+e^{-i\omega z}\right]-e^{i\omega z}\left(e^{\hbar\omega\beta/2}-e^{-\hbar\omega\beta/2}\right)\right)}{\mathrm{senh}\,\hbar\omega\beta/2}}$$

$$= e^{-\Gamma^*(0)\Gamma(0)\coth \hbar\omega\beta/2} \; e^{\Gamma^*(0)\Gamma(0)\frac{\cos\omega(z+i\hbar\beta/2)}{\operatorname{senh}\hbar\omega\beta/2}}$$

Agora, levando em conta a definição dos Γ e ainda que devemos multiplicar em $q\lambda$ (o que na exponencial aparece como uma soma obtemos

$$\langle \bar{X} X \rangle = e^{-2\sum \alpha_j(q)\,\operatorname{sen}^2 \frac{\vec{q}\cdot\vec{a}_\delta}{2}\,\coth \hbar\omega\beta/2} \; .$$

$$\cdot\, e^{2\sum \alpha_j(q)\,\operatorname{sen}^2 \frac{\vec{q}\cdot\vec{a}_\delta^{\,i}}{2}\,\frac{\cos\omega_j(q)(t-t'+i\hbar\beta/2)}{\operatorname{senh}\omega_j(q)\beta/2}}$$

Finalmente, devemos considerar o elemento da matriz de transição que aparece inicialmente na equação (2) do cap II. É ele o fator multiplicativo $J^2/\hbar^2$ que aparece inicialmente na integral I do capítulo III.

APENDICE II - Cálculo dos comutadores e anti-comutadores da eq. (26)

No capítulo II, chegamos a uma equação do movimento que depende do cálculo de comutadores e anti-comutadores. Pretendemos agora mostrar o cálculo de tais expressões, justificando assim o seu uso tal como foi feito no capítulo III.

I. Calculo do comutador $[Q(i), [\bar{M}, \bar{Q}(j)]]_-$

onde

$$Q(i) = C^+_{\pi} C_{\pi + a^{\pi}_{\delta}}$$

$$\bar{Q}(j) = C^+_p C_{p+a^p_{\delta}} \exp\left(\frac{i}{\hbar}\int_{t'}^{t} d\tau \left\{ \varepsilon(p) - \varepsilon(p+a^p_{\delta}) - \frac{1}{2} e\vec{E}\cdot\vec{a}_{\delta} (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}\right)\right)$$

$$\bar{M} = C^+_i C_i$$

1. Calculemos inicialmente $[\bar{M}, \bar{Q}(j)]_-$

$$[\bar{M}, \bar{Q}(j)]_- = [C^+_i C_i , C^+_p C_{p+a^p_{\delta}}] = C^+_i C_i C^+_p C_{p+a^p_{\delta}} - C^+_p C_{p+a^p_{\delta}} C^+_i C_i$$

(a menos da exponencial)

Sabendo-se que $C_i C^+_p + C^+_p C_i = \delta_{i,p}$ vem que

$$C_i C^+_p = \delta_{i,p} - C^+_p C_i$$

e assim,

$$[\bar{M},\bar{Q}(j)]_- = C_i^+(\delta_{i,p} - C_p^+ C_i) C_{p+a_\delta^p} - C_p^+ C_{p+a_\delta^p} C_i^+ C_i$$

analogamente, $C_{p+a_\delta^p} C_i^+ + C_i^+ C_{p+a_\delta^p} = \delta_{p+a_\delta^p, i}$ e

$$[\bar{M},\bar{Q}(j)]_- = C_i^+(\delta_{i,p} - C_p^+ C_i) C_{p+a_\delta^p} - C_p^+(\delta_{p+a_\delta^p,i} - C_i^+ C_{p+a_\delta^p}) C_i$$

$$= C_i^+ C_{p+a_\delta^p} \delta_{i,p} - C_i^+ C_p^+ C_i C_{p+a_\delta^p} - C_p^+ C_i \delta_{p+a_\delta^p,i} + C_p^+ C_i^+ C_{p+a_\delta^p} C_i$$

ou $$[\bar{M},\bar{Q}(j)]_- = C_i^+ C_{p+a_\delta^p} \delta_{i,p} - C_p^+ C_i \delta_{p+a_\delta^p,i}.$$

2. Calculemos agora $[Q(i),[\bar{M},\bar{Q}(j)]_-]_-$

$$[Q(i),[\bar{M},\bar{Q}(j)]_-]_- = [C_\pi^+ C_{\pi+a_\delta^\pi}, (C_i^+ C_{p+a_\delta^p} \delta_{i,p} - C_p^+ C_i \delta_{p+a_\delta^p,i})]_-$$

$$= C_\pi^+ C_{\pi+a_\delta^\pi}(C_i^+ C_{p+a_\delta^p} \delta_{i,p} - C_p^+ C_i \delta_{p+a_\delta^p,i}) - (C_i^+ C_{p+a_\delta^p} \delta_{i,p} - C_p^+ C_i \delta_{p+a_\delta^p,i}) C_\pi^+ C_{\pi+a_\delta^\pi}$$

$$= C_\pi^+ C_{\pi+a_\delta^\pi} C_i^+ C_{p+a_\delta^p} \delta_{i,p} - C_\pi^+ C_{\pi+a_\delta^\pi} C_p^+ C_i \delta_{p+a_\delta^p,i}$$

$$- C_i^+ C_{p+a_\delta^p} C_\pi^+ C_{\pi+a_\delta^\pi} \delta_{i,p} + C_p^+ C_i C_\pi^+ C_{\pi+a_\delta^\pi} \delta_{p+a_\delta^p,i} = [2]$$

Observemos agora que

$$C_{\pi+a_\delta^\pi} C_i^+ = \delta_{i,\pi+a_\delta^\pi} - C_i^+ C_{\pi+a_\delta^\pi}$$

$$C_{\pi+a_\delta^\pi} C_p^+ = \delta_{p,\pi+a_\delta^\pi} - C_p^+ C_{\pi+a_\delta^\pi}$$

$$C_{p+a^p_\delta}\, C^+_\pi = \delta_{\pi,\, p+a^p_\delta} - C^+_\pi\, C_{p+a^p_\delta}$$

$$C_i\, C^+_\pi = \delta_{i,\pi} - C^+_\pi\, C_i$$

Assim, temos

$$[2] = C^+_\pi\left(\delta_{\pi+a^\pi_\varepsilon,\, i} - C^+_i\, C_{\pi+a^\pi_\delta}\right) C_{p+a^p_\delta}\, \delta_{i,p} - C^+_\pi\left(\delta_{p,\, \pi+a^\pi_\varepsilon} - C^+_p\, C_{\pi+a^\pi_\varepsilon}\right) C_i\, \delta_{p+a^p_\delta,\, i}$$

$$- C^+_i\left(\delta_{\pi,\, p+a^p_\delta} - C^+_\pi\, C_{p+a^p_\delta}\right) C_{\pi+a^\pi_\varepsilon}\, \delta_{i,p} + C^+_p\left(\delta_{i,\pi} - C^+_\pi\, C_i\right) C_{\pi+a^\pi_\varepsilon}\, \delta_{p+a^p_\delta,\, i}$$

Desenvolvendo e cancelando os termos semelhantes, obtemos

$$[2] = C^+_\pi\, C_{p+a^p_\delta}\, \delta_{\pi+a^\pi_\varepsilon,\, i}\, \delta_{i,p} - C^+_\pi\, C_i\, \delta_{p+a^p_\delta,\, i}\, \delta_{\pi+a^\pi_\varepsilon,\, p} - C^+_i\, C_{\pi+a^\pi_\varepsilon}\, \delta_{p+a^p_\delta,\, \pi}\, \delta_{i,p}$$

$$+ C^+_p\, C_{\pi+a^\pi_\varepsilon}\, \delta_{i,\pi}\, \delta_{p+a^p_\delta,\, i}$$

Vamos agora analisar cada um dos termos da expressão acima no que diz respeito aos índices. Não nos esqueçamos que cada termo deve ser ainda multiplicado por $[\bar{F}(j), F(i)]_+$ e pela exponencial que até agora temos omitido. Assim, vejamos

1º termo $\quad C^+_\pi\, C_{p+a^p_\delta}\, \delta_{\pi+a^\pi_\varepsilon,\, i}\, \delta_{i,p}$

$p = i \quad , \quad \pi = i + a^i_\varepsilon$

$$\left\langle \left[\bar{x}_{i,\, i+a^i_\delta}\, ,\, x_{i+a^i_\varepsilon,\, i}\right]_+ \right\rangle \left\langle C^+_{i+a^i_\varepsilon}\, C_{i+a^i_\delta} \right\rangle e^{\ldots\, E(i) - E(i+a^i_\delta)\, \ldots}$$

2º termo $\quad C^+_{\pi} C_i \, \delta_{p+a^p_\delta, i} \, \delta_{\pi + a^\pi_\varepsilon, p}$

$p = i \quad , \quad \pi = i + a^i_\delta + a^i_\varepsilon$

$$\langle [\bar{X}_{i+a^i_\delta, i}, X_{i+a^i_\delta + a^i_\varepsilon, i+a^i_\delta}]_+ \rangle \langle C^+_{i+a^i_\delta + a^i_\varepsilon} C_i \rangle \, e^{\cdots \varepsilon(i+a^i_\delta) - \varepsilon(i) \cdots}$$

3º termo $\quad C^+_i C_{\pi + a^\pi_\varepsilon} \, \delta_{p+a^p_\delta, \pi} \, \delta_{i,p}$

$p = i \quad \pi = i + a^i_\delta$

$$\langle [\bar{X}_{i, i+a^i_\delta}, X_{i+a^i_\delta, i+a^i_\delta + a^i_\varepsilon}]_+ \rangle \langle C^+_i C_{i+a^i_\delta + a^i_\varepsilon} \rangle \, e^{\cdots \varepsilon(i) - \varepsilon(i+a^i_\delta) \cdots}$$

4º termo $\quad C^+_p C_{\pi + a^\pi_\varepsilon} \, \delta_{i, \pi} \, \delta_{p+a^p_\delta, i}$

$\pi = i \quad , \quad p = i + a^i_\delta$

$$\langle [\bar{X}_{i+a^i_\delta, i}, X_{i, i+a^i_\varepsilon}]_+ \rangle \langle C^+_{i+a^i_\delta} C_{i+a^i_\varepsilon} \rangle \, e^{\cdots \varepsilon(i+a^i_\delta) - \varepsilon(i) \cdots}$$

Fazendo $a_\varepsilon = -a_\delta$ e agrupando, vem

$$[2] = \langle [\bar{X}, X]_+ \rangle \left\{ \langle C^+_{i+a^i_\delta} C_{i+a^i_\delta} \rangle - \langle C^+_i C_i \rangle \right\} \, e^{\cdots [\varepsilon(i) - \varepsilon(i+a^i_\delta)] \cdots}$$

$$+ \, [\bar{X}, X]_+ \rangle \left\{ \langle C^+_{i+a^i_\delta} C_{i+a^i_\delta} \rangle - \langle C^+_i C_i \rangle \right\} \, e^{- \cdots [\varepsilon(i) - \varepsilon(i+a^i_\delta)] \cdots}$$

II Cálculo do anti-comutador $[Q(i),[\bar{M},\bar{Q}(j)]_-]_+$

$[\bar{M},\bar{Q}(j)]_-$ foi calculado na seção anterior. Chamemos de $[1]_+$ o nosso anti-comutador e teremos

$$[1]=\left[C^+_\pi C_{\pi+a^\pi_\xi}\,,\left(C^+_i C_{p+a^p_\delta}\,\delta_{i,p}-C^+_p C_i\,\delta_{p+a^p_\delta,i}\right)\right]_+$$

$$=C^+_\pi C_{\pi+a^\pi_\xi}C^+_i C_{p+a^p_\delta}\,\delta_{i,p}-C^+_\pi C_{\pi+a^\pi_\xi}C^+_p C_i\,\delta_{p+a^p_\delta,i}+C^+_i C_{p+a^p_\delta}C^+_\pi C_{\pi+a^\pi_\xi}\,\delta_{i,p}$$
$$-C^+_p C_i C^+_\pi C_{\pi+a^\pi_\xi}\,\delta_{p+a^p_\delta,i}$$

$$=C^+_\pi\left(\delta_{\pi+a^\pi_\xi,i}-C^+_i C_{\pi+a^\pi_\xi}\right)C_{p+a^p_\delta}\,\delta_{i,p}-C^+_\pi\left(\delta_{\pi+a^\pi_\xi,p}-C^+_p C_{\pi+a^\pi_\xi}\right)C_i\,\delta_{p+a^p_\delta,i}$$
$$+C^+_i\left(\delta_{p+a^p_\delta,\pi}-C^+_\pi C_{p+a^p_\delta}\right)C_{\pi+a^\pi_\xi}\,\delta_{i,p}-C^+_p\left(\delta_{i,\pi}-C^+_\pi C_i\right)C_{\pi+a^\pi_\xi}\,\delta_{p+a^p_\delta,i}$$

$$=C^+_\pi C_{p+a^p_\delta}\,\delta_{i,p}\,\delta_{\pi+a^\pi_\xi,i}-C^+_\pi C^+_i C_{\pi+a^\pi_\xi}C_{p+a^p_\delta}\,\delta_{i,p}$$
$$-C^+_\pi C_i\,\delta_{\pi+a^\pi_\xi,p}\,\delta_{p+a^p_\delta,i}+C^+_\pi C^+_p C_{\pi+a^\pi_\xi}C_i\,\delta_{p+a^p_\delta,i}$$
$$+C^+_i C_{\pi+a^\pi_\xi}\,\delta_{i,p}\,\delta_{p+a^p_\delta,\pi}-C^+_i C^+_\pi C_{p+a^p_\delta}C_{\pi+a^\pi_\xi}\,\delta_{i,p}$$
$$-C^+_p C_{\pi+a^\pi_\xi}\,\delta_{i,\pi}\,\delta_{p+a^p_\delta,i}+C^+_p C^+_\pi C_i C_{\pi+a^\pi_\xi}\,\delta_{p+a^p_\delta,i}$$

Simplificando, analisando termo por termo e fazendo $a_\delta = -a_\varepsilon$ – (tal como foi feito na seção anterior) encontramos

$$[1]_+ = \langle[\bar{x},x]_-\rangle\left\{\langle C^\dagger_{i+a_\delta} C_{i+a_\delta}\rangle + \langle C^\dagger_i C_i\rangle - 2\langle C^\dagger_i C^\dagger_{i+a_\delta} C_i C_{i+a_\delta}\rangle\right\} e^{\cdots[\varepsilon(i)-\varepsilon(i+a_\delta)]\cdots}$$

$$-\langle[\bar{x},x]_-\rangle\left\{\langle C^\dagger_i C_i\rangle + \langle C^\dagger_{i+a_\delta} C_{i+a_\delta}\rangle + 2\langle C^\dagger_i C^\dagger_{i+a_\delta} C_i C_{i+a_\delta}\rangle\right\} e^{\cdots[\varepsilon(i+a_\delta)-\varepsilon(i)]\cdots}$$

Consideremos agora os resultados obtidos para o comutador e o anti-comutador e desenvolvamos os termos $[\bar{x},x]_-$ e $[\bar{x},x]_+$. Com isto, vamos obter depois de alguma simplificação

$$\langle[\bar{F}(j),F(i)]_+\rangle\langle[Q(i),[\bar{M},\bar{Q}(j)]_-]_-\rangle - \langle[\bar{F}(j),F(i)]_-\rangle\langle[Q(i),[\bar{M},\bar{Q}(j)]_-]_+\rangle =$$

$$\langle\bar{x}x\rangle\left\{-\langle C^\dagger_i C_i\rangle - \langle C^\dagger_i C_i\rangle + 2\langle C^\dagger_i C^\dagger_{i+a_\delta} C_i C_{i+a_\delta}\rangle\right\} e^{\cdots[\varepsilon(i)-\varepsilon(i+a_\delta)]\cdots}$$

$$+\ \langle x\bar{x}\rangle\left\{\langle C^\dagger_{i+a_\delta} C_{i+a_\delta}\rangle + \langle C^\dagger_{i+a_\delta} C_{i+a_\delta}\rangle - 2\langle C^\dagger_i C^\dagger_{i+a_\delta} C_i C_{i+a_\delta}\rangle\right\} e^{\cdots[\varepsilon(i)-\varepsilon(i+a_\delta)]\cdots}$$

$$+\ \langle\bar{x}x\rangle\left\{\langle C^\dagger_{i+a_\delta} C_{i+a_\delta}\rangle + \langle C^\dagger_{i+a_\delta} C_{i+a_\delta}\rangle - 2\langle C^\dagger_i C^\dagger_{i+a_\delta} C_i C_{i+a_\delta}\rangle\right\} e^{-[\varepsilon(i)-\varepsilon(i+a_\delta)]\cdots}$$

$$+\ \langle x\bar{x}\rangle\left\{-\langle C^\dagger_i C_i\rangle - \langle C^\dagger_i C_i\rangle + 2\langle C^\dagger_i C^\dagger_{i+a_\delta} C_i C_{i+a_\delta}\rangle\right\} e^{\cdots-[\varepsilon(i)-\varepsilon(i+a_\delta)]\cdots}$$

Um arranjo final nos permitirá escrever

$$- \sum \left\langle \left[\bar{F}(j) , F(i) \right]_+ \right\rangle \left\langle \left[Q(i) , \left[\bar{M} , \bar{Q}(j) \right]_- \right]_- \right\rangle$$

$$- \sum \left\langle \left[\bar{F}(j) , F(i) \right]_- \right\rangle \left\langle \left[Q(i) , \left[\bar{M} , \bar{Q}(j) \right]_- \right]_+ \right\rangle =$$

$$2 \langle x \bar{x} \rangle \sum_{\delta} \left\langle C^{+}_{i+a_\delta^i} C_{i+a_\delta^i} \right\rangle \left[1 - \left\langle C^{+}_{i} C_{i} \right\rangle \right] e^{+\frac{i}{\hbar}[\cdots}$$

$$- 2 \langle \bar{x} x \rangle \sum_{\delta} \left\langle C^{+}_{i} C_{i} \right\rangle \left[1 - \left\langle C^{+}_{i+a_\delta^i} C_{i+a_\delta^i} \right\rangle \right] e^{+\frac{i}{\hbar}[\cdots}$$

$$- 2 \langle x \bar{x} \rangle \sum_{\delta} \left\langle C^{+}_{i} C_{i} \right\rangle \left[1 - \left\langle C^{+}_{i+a_\delta^i} C_{i+a_\delta^i} \right\rangle \right] e^{-\frac{i}{\hbar}[\cdots}$$

$$+ 2 \langle \bar{x} x \rangle \sum_{\delta} \left\langle C^{+}_{i+a_\delta^i} C_{i+a_\delta^i} \right\rangle \left[1 - \left\langle C^{+}_{i} C_{i} \right\rangle \right] e^{-\frac{i}{\hbar}[\cdots} .$$

Este resultado será usado nas integrais do capítulo III.

BIBLIOGRAFIA

1. Epstein, (D.J), Frackiewicz, (B.) e Hunt, (R.P.), J. Appl. Phys. 32, 2705 (1961)
2. Hunt, (R.P.), J. Appl. Phys. 37, 1330 (1966)
3. Teale, (R.W.) e Temple, (D.W.), Phys. Rev. Letters 19, 904 (1967)
4. Enz, (U.) e Van der Heide, (H.), Solid St. Commun., 6, 347 (1968)
5. Enz, (U.), Lems (W.), Metselaar, (R.), Rijnierse, (P.J), e Teale, (R.W), IEEE Trans. Magn. MAG-5, 467 (1969)
6. Pearson, (R.F.), Annis (A.D) e Kompfner (P.), Phys. Rev. Letters 21, 1805 (1968)
7. Holtwijk, (Th.), Lems, (W.), Verhulst, (A.G.H.) e Enz, (U.), Intermag Conf. Paper 30.6 (1970)
8. Dillon, JR., (J.F.), Gyorgy, (E.M.) e Remeika (J.P.), Phys. Rev. Letters 22, 643 (1969)
9. Dillon, JR., (J.F.), Gyorgy, (E.M.) e Remeika (J.P.), Phys. Rev. Letters 15, 221 (1969)
10. Gyorgy (E.M.), Dillon, JR. (J.F.) e Remeika (J.P.), IBM J. Res. Develop, 14, 321 (1970)
11. Enz, (U.), Metselaar, (R.) e Rijnierse, (P.S.), Não publicado
12. Reik, (H.G.), Solid St. Commun., 8, 1737 (1970)
13. Reik, (H.G) e Schirmer, (R.), Solid St. Commun., 10, 1209 (1972)
14. Barreto, (F.C.), Reik, (H.G.) e Schirmer, (R.), Solid St. Commun., 12, 231 (1973)
15. Reik, (H.G.), Polarons in Ionic Crystals, p. 679, North-Holland, Amsterdam (1972)
16. Messiah, (A.), Quantum Mechanics - Vol 1, p. 331, North Holland, Amsterdam (1970)
17. Kubo, (R.), Many Body Problems, p. 264, Benjamin, New York (1969)
18. Holstein, (T.), Ann. Phys., 8, 343 (1959)
19. Pines, (D.), Elementary Excitations in Solids, Cap 1, Benjamin, New York (1964)
20. Kubo, (R.), Journ. Phys. Soc. of Japan, 12, 6, 570 (1957)
21. Butcher, (P.N.), Hopping Conductivity in Semiconductors and glasses, p. 3.1, Instituto Politecnico Nacional, México (1973)