UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE FÍSICA E QUÍMICA DE SÃO CARLOS

ESTADOS COERENTES DE FONONS
E
EFEITO MÖSSBAUER

GILMAR EUGENIO MARQUES

(Trabalho apresentado ao Instituto de
Física e Química de São Carlos ,
USP, para a obtenção do título de
Mestre em Física.)

Orientador:
Dr. ROBERTO LOBO

DEPARTAMENTO DE FÍSICA E CIÊNCIAS DOS MATERIAIS
SÃO CARLOS-1976

ESTADOS COERENTES DE FONONS

E

EFEITO MÖSSBAUER

Gilmar Eugenio Marques

OK

ORIENTADOR: Prof. Roberto Lobo

À REGINA

AOS MEUS PAIS

Este trabalho foi realizado com o apoio financeiro da UFSCAR.

INDICE

- Agradecimentos	7
- Resumo	9
- Abstract	11
- Introdução	13
- Capítulo I - Estados Coerentes de Fonons:	
I.1 - Quantização das vibrações de um cristal	17
I.2 - Funções de coerência e correlação	23
I.3 - Estados coerentes	27
I.4 - Propriedades dos estados coerentes	29
- Capítulo II - Efeito Mössbauer:	
II.1 - Introdução	33
II.2 - Teoria do efeito Mössbauer em sólidos	38
II.3 - Secção de choque	42
II.4 - Cálculo de $F_s(k,t)$ para um sólido harmônico	46
II.5 - Secção de choque Mössbauer para um sólido de Debey	48
- Capítulo III -	
III.1 - Operador evolução e operador criação de estados coerentes	53
III.2 - Equação de Fokker-Planck	57
III.3 - Solução da equação de Fokker-Planck	61
III.4 - Aplicação ao efeito Mössbauer	69
- Comentários Gerais e Sugestões	75
- Referências	79

OS MEUS AGRADECIMENTOS

- Ao Prof. Roberto Lobo, pela sugestão, orientação e atitude científica trans
mitida.
- À UFSCAR, pelas condições e facilidades proporcionadas afim de que este traba
lho pudesse ser realizado.
- Aos colegas do Departamento de Física da UFSCAR, pelo ótimo ambiente de traba
lho, em especial ao Prof. Raimundo Alexandre Tavares de Lima, pelas proveito
sas discussões.
- Ao IFQ USP - SÃO CARLOS e ao quadro de Professores, responsáveis por minha for
mação, com seus excelentes cursos.
- À Srta. Loreni B. Pereira, pela paciência e excelente trabalho de datilografia.
- Enfim, a todos aqueles que de forma direta ou indireta contribuíram para que
fosse possível a realização deste trabalho, a minha gratidão.

RESUMO

Neste trabalho introduzimos a representação de estados coerentes de fonons e desenvolvemos o formalismo para o tratamento do campo sujeito a excitações lineares. Obtemos a equação de Fokker-Planck para a função distribuição associada ao operador densidade assim como as amplitudes dos estados devidas à excitação.

Como aplicação, usamos a interação foton-núcleo para o estudo de algumas propriedades fundamentais do efeito Mössbauer . Obtivemos, de uma maneira muito simples, a energia e o momento linear transferidos ao cristal devido à absorção ou emissão de um raio gama e a relação entre o operador criação do estado coerente $|\beta\rangle$ e a função de espalhamento $F_s(\vec{k}, t)$.

Mostramos claramente que o efeito Mössbauer é devido a transições de zero-fonons. O efeito da temperatura sobre probabilidades de transições e sobre medições também aparece de um modo claro.

ABSTRACT

We introduce the representation of coherent states of phonons and develop the procedures to treat the field with linear excitation.

We obtain the Fokker-Planck equation of the distribution function associated with the density operator as well as the amplitudes of the states due to the excitation.

As an application, we use the interaction photon-nucleus in the study of some fundamental properties of Mössbauer effect. We obtain, in a very simple way, the energy and linear momentum transferred to the crystal due to absorption or emission of a gamma-ray and the connection between the creation operator of the $|\beta\rangle$ coherent state and the scattering function $F_s(\vec{k}, t)$. We show clearly that Mössbauer effect is due to zero-phonons transitions. The effect of temperature on transition probabilities and measurements arises in a clear way.

INTRODUÇÃO

Queremos fazer, aqui, alguns comentários de forma a dar ao leitor uma visão geral do trabalho desenvolvido bem como dos objetivos e motivações que nos orientam. No final desta introdução apresentaremos um resumo de cada capítulo salientando o conteúdo básico.

Na realização deste trabalho fomos guiados pelas seguintes motivações:

- a) Uma rápida pesquisa bibliográfica mostrou-nos a representação de estados coerentes para os campos de fótons e magnons, introduzidas respectivamente por R.J. Glauber⁽²⁾ (1963) e S.M. Rezende e N. Zagury⁽¹¹⁾ (1969). Após as modificações necessárias foi imediato estender a representação ao campo de fonons. Os estados coerentes de fonons tinham as mesmas características daqueles encontrados por R.J. Glauber. Assim, deixamos de apresentar muitas demonstrações de propriedades, pois seriam meras repetições de um trabalho extensivamente discutido por aquele autor.
- b) A simples extensão da representação ao campo de fonons não justificaria este trabalho. Por outro lado não existe muitas aplicações, usando esta representação, no tratamento de problemas relacionados com os campos de fótons e magnons. Então, buscamos um problema concreto no qual pudessemos mostrar uma aplicação prática. Após uma análise detalhada das propriedades e características notamos que poderíamos estudar algumas características fundamentais do "Efeito Mössbauer". Isso obrigou-nos um estudo detalhado de:
 - Processos de geração de um estado coerente sujeito a várias excitações externas. Neste trabalho analisamos os seguintes processos:

$$|\text{estado fundamental}\rangle \xrightarrow[\substack{\text{Excitação} \\ \text{Externa} \\ (T = 0)}]{\text{Excitação}} |\text{estado coerente}\rangle$$

$$|\text{estado fundamental}\rangle \xrightarrow[\substack{\text{Excitação} \\ \text{Térmica}}]{\text{Excitação}} |\text{estado coerente}\rangle \\ \text{(Térmico)}$$

$$|est. fund.> \xrightarrow[\text{Térmica}]{Exc.} |est. coer.> \xrightarrow[\text{Externa}]{Exc.} |estado coer.>$$

(Térmico) (Superposto)

- Probabilidades de Transições de Fonons:
Usamos a abordagem devida a "Van Hooves"⁽⁵⁾ estudando uma função convenientemente definida. Em particular estavam interessados em transições de zero-fonons, pois esta contribuição é a responsável pelo Efeito Mössbauer. O principal resultado obtido neste trabalho foi a demonstração de que a secção de choque Mössbauer era devida a transições de zero-fonons.
 - Estudamos também as transferências de energia e momento linear ao cristal devido a emissão ou absorção de um fóton-gama por um núcleo da rede.
- c) Quando nos aprofundamos nos mistérios desta representação podemos notar algumas semelhanças com outros formalismos. Gostaríamos de chamar a atenção para os seguintes fatos:
- O uso da representação de estados coerentes leva, de maneira automática, às equações de Fokker-Planck Langevin. As soluções destas equações fornecem respectivamente: a função distribuição associada ao operador densidade e as amplitudes dos estados dos estados gerados pela excitação.
 - As "funções de correlação" através dos quais são definidos os estados coerentes têm propriedades semelhantes às "funções de Green". Uma das mais fortes semelhanças está relacionada com o teorema de Wick:
"Uma função de correlação de segunda ordem decompõe-se em uma combinação de produtos de funções de correlação de primeira ordem quando a função associada ao operador densidade é "gaussiana". Em ordens superiores esta decomposição dependerá do "grau de coerência" do campo de fonons".
 - Um "estado coerente" corresponde a uma "transformação canônica" de um conjunto de estados ortonormalizados (número de ocupação) a um conjunto de estados normalizados e não-ortogonais (estado coerente).

RESUMO POR CAPÍTULO

CAPÍTULO I

Começamos com quantização das vibrações da rede até obtermos os operadores convenientes para a definição de "função de correlação". Definimos e construímos um estado coerente e apresentamos algumas propriedades. Damos ênfase naquelas que consideramos importantes.

CAPÍTULO II

Neste capítulo apresentamos o "Efeito Mössbauer" usando as abordagens convencionais. O objetivo desta apresentação é condensar um número de relações e informações necessárias para uso no Capítulo III. Procuramos dar o máximo possível de detalhes afim de facilitar a leitura àqueles não familiarizados com tal fenômeno.

CAPÍTULO III

Este é o centro deste trabalho. Aqui analisamos os processos de geração de "estados coerentes" usando dois pontos de vista. O primeiro deles, baseado em Mecânica Quântica, onde usamos a analogia entre operador evolução temporal e operador criação de estado coerente. O outro ponto de vista, baseado em Mecânica Estatística, onde usamos as conhecidas abordagens através das equações de Fokker-Planck e Langevin.

Este segundo ponto de vista fornece todos detalhes sobre os processos além de incluir a temperatura como parâmetro, o que é muito importante na análise do Efeito Mössbauer. Esta forma de abordagem parece abrir um extenso campo de aplicação para a representação de estados coerentes.

CAPÍTULO I

ESTADOS COERENTES DE FONONS

1) Quantização das vibrações de um cristal

Vamos admitir que temos um cristal constituído de uma rede com N células unitárias e uma base com p -átomos. Sejam $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ os vetores de base. Assim o cristal terá dimensões $N_1 |\vec{a}_1|$ e possuirá $N=N_1 N_2 N_3$ células unitárias e portanto $p \times N$ átomos cujo número de graus de liberdade será $3p \times N$.

Vamos definir também $\vec{u}_s(\vec{l})$ como o deslocamento da posição de equilíbrio do s -ésimo átomo da l -ésima célula unitária, tal que o estado de equilíbrio do cristal corresponda a todos $\vec{u}_s(\vec{l}) \equiv 0$.

Seja também $v(\vec{u}_s(\vec{l}))$ uma função que expressa a energia potenciał do cristal em função dos deslocamentos das posições de equilíbrio.

A energia cinética pode ser escrita como

$$T = \sum_{s,l} 1/2 m_s \left(\dot{\vec{u}}_s(l) \right)^2 \quad (\text{I-1.1})$$

onde m_s é a massa do s -ésimo átomo.

Usando a teoria de "pequenas vibrações" podemos expandir a energia potencial em torno das posições de equilíbrio e reter apenas o termo harmônico, isto é:

$$V = \sum_{s',l',j'} \left(\frac{\partial^2 V}{\partial u_{s'}^j(l') \partial u_{s'}^{j'}(l')} \right) u_{s'}^j(l) u_{s'}^{j'}(l') \quad (\text{I-1.2})$$

onde $u_{s'}^j(\vec{l})$ são as componentes cartesianas. Podemos reescrever (I-1.2) como:

$$V = \sum_{s',l',j'} \Phi_{s'l',s'l'}^{jj'} u_{s'}^j(l) u_{s'}^{j'}(l') \quad (\text{I-1.3})$$

Como as forças devem depender apenas da diferença $\vec{\ell}' - \vec{\ell} = \vec{h}$ temos

$$\Phi_{s\vec{\ell}, s'\vec{\ell}'}^{jj'} = \Phi_{ss'}^{jj'}(\vec{h}) \quad (\text{I-1.4})$$

A equação (I-1.3) ficará

$$V = \sum_{s', j', \vec{h}} \Phi_{ss'}^{jj'}(\vec{h}) u_s^j(\vec{\ell}) u_{s'}^{j'}(\vec{\ell} + \vec{h}) \quad (\text{I-1.5})$$

Pelo formalismo Lagrangeano, temos as equações de movimento

$$m_s \ddot{u}_s^j(\vec{\ell}) + \sum_{s', j', \vec{h}} \Phi_{ss'}^{jj'}(\vec{h}) u_{s'}^{j'}(\vec{\ell} + \vec{h}) = 0 \quad (\text{I-1.6})$$

Como a rede deve possuir simetria de translação, podemos tentar soluções da equação (I-1.6) na forma:

$$\vec{u}_s(\vec{\ell}) = \vec{e}_s(\vec{q}) e^{i(\vec{q} \cdot \vec{\ell} - \omega_q t)} \quad (\text{I-1.7})$$

Por outro lado, escolhendo condições de contorno cíclicas, isto é, $\vec{u}_s(\vec{\ell}) = \vec{u}_s(\vec{\ell} + N\vec{a})$, devemos ter $e^{i\vec{q} \cdot N_1 \vec{a}_1} = 1$, que impõe as seguintes restrições sobre $\vec{q}$:

$$\vec{q} \cdot N_1 \vec{a}_1 = 2\pi n_1 \quad \text{ou} \quad \vec{q} \cdot \vec{a}_1 = \frac{2\pi n_1}{N_1} \quad (\text{I-1.8})$$

onde n_1 é um número inteiro.

Se, por conveniência, introduzimos o vetor recíproco $\vec{g}_1$ definido por

$$\vec{g}_1 = \frac{2\pi \vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{[\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)]} \quad (\text{I-1.9})$$

Temos assim

$$\vec{a}_j \cdot \vec{g}_1 = \frac{2\pi \vec{a}_j \cdot (\vec{a}_j \times \vec{a}_k)}{|\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)|} = 2\pi \delta_{1j} \quad (\text{I-1.10})$$

Logo a solução de (I-1.8) será

$$\vec{q} = \sum_{i=1}^3 \frac{n_i}{N_1} \vec{g}_i \quad (\text{I-1.11})$$

onde n_1 fica restrito a

$$-\frac{N_1}{2} < n_1 < \frac{N_1}{2} \quad (i=1,2,3) \quad (\text{I-1.12})$$

Levando (I-1.7) em (I-1.6) com $\vec{q}$ sujeito as restrições (I-1.11) e (I-1.12), temos:

$$\sum_{s',j',\vec{h}} \Phi_{ss'}^{jj'}(\vec{h}) e^{i(\vec{q} \cdot \vec{h})} u_{s'}^{jj'}(\vec{t}) - m_s \omega_q^2 u_s^j(\vec{t}) = 0$$

$$\sum_{s',j'} \sum_{\vec{h}} \Phi_{ss'}^{jj'}(\vec{h}) e^{i(\vec{q} \cdot \vec{h})} - m_s \omega_q^2 u_s^j(\vec{t}) = 0 \quad (\text{I-1.13})$$

Definindo

$$\Phi_{ss'}^{jj'}(\vec{q}) = \sum_{\vec{h}} \Phi_{ss'}^{jj'}(\vec{h}) e^{i\vec{q} \cdot \vec{h}} \quad (\text{I-1.14})$$

que é a chamada matriz dinâmica do sistema; vem:

$$\sum_{s',j'} \Phi_{ss'}^{jj'}(\vec{q}) u_{s'}^{jj'}(\vec{t}) - m_s \omega_q^2 u_s^j(\vec{t}) = 0 \quad (\text{I-1.15})$$

As componentes cartesianas $\hat{e}_s^j(\vec{q})$ são determinadas por

$$| \sum_{s',j'} \Phi_{ss'}^{jj'}(\vec{q}) - m_s \omega_q^2 \delta_{ss'} \delta_{jj'} | e_s^{j'}(\vec{q}) = 0 \quad (\text{I-1.16})$$

Temos assim um problema de auto-valores, com um número limitado de equações a resolver, isto é, as propriedades de invariância translacional permitem diminuir o número de equações de $3pN$ para $3p$, pois sendo as células idênticas na estrutura, as informações dinâmicas do cristal são obtidas estudando o que acontece em apenas uma célula unitária.

Para encontramos as frequências próprias de vibração devemos então resolver a equação secular:

$$\det | \Phi_{ss'}^{jj'}(\vec{q}) - m_s \omega^2 \delta_{ss'} \delta_{jj'} | = 0 \quad (\text{I-1.17})$$

Esta equação determina $3p$ frequências $\omega_v(q)$ ($v=1 \dots 3p$) de forma que para cada frequência, a equação (I-1.16) determina um vetor. Para cada vetor assim determinado teremos por (I-1.7) o deslocamento próprio na forma

$$\vec{u}_{vs}(\vec{r}) = \hat{e}_{vs}(\vec{q}) e^{i(\vec{q} \cdot \vec{r} \pm \omega_v(q)t)} \quad (\text{I-1.18})$$

Podemos expressar o deslocamento real do sistema como uma combinação linear (superposição) de todos os deslocamentos próprios, isto é, para todo $v=1 \dots 3p$ e todo $\vec{q}_i$ ($i=1 \dots N$), temos:

$$\begin{aligned} \vec{u}_s(\vec{r}, t) = \sum_{v, \vec{q}} \left[\frac{\hbar}{2m_s N \omega_v(q)} \right]^{1/2} \hat{e}_{vs}(\vec{q}) \left(a_{qv} e^{i(\vec{q} \cdot \vec{r} - \omega_v(q)t)} + \right. \\ \left. + a_{qv}^* e^{-i(\vec{q} \cdot \vec{r} - \omega_v(q)t)} \right) \end{aligned} \quad (\text{I-1.19})$$

onde as a_{qv} são as amplitudes de cada modo próprio e os coeficientes são escolhidos convenientemente para satisfazer condições de completeza e ortonormalidade do conjunto $\{\hat{e}_{vs}(q)\}$.

O momento linear $\vec{P}_s(\vec{r}, t)$ pode então ser obtido na forma:

$$\begin{aligned} \vec{p}_s(\vec{\ell}, t) = \sum_{\nu, \vec{q}} \frac{1}{i} \left[\frac{m_s \hbar \omega_{\nu}(\vec{q})}{2N} \right]^{\frac{1}{2}} \hat{e}_{\nu s}(\vec{q}) \left\{ a_{\nu \vec{q}} e^{i(\vec{q} \cdot \vec{\ell} - \omega_{\nu}(\vec{q})t)} - \right. \\ \left. - a_{\nu \vec{q}}^* e^{-i(\vec{q} \cdot \vec{\ell} - \omega_{\nu}(\vec{q})t)} \right\} \end{aligned} \quad (\text{I-1.20})$$

A Hamiltoniana do sistema pode então ser obtida, de (I-1.19), (I-1.20) e (I-1.15), sabendo-se que:

$$\frac{1}{N} \sum_{\vec{\ell}} e^{i(\vec{q} - \vec{q}') \cdot \vec{\ell}} = \delta_{\vec{q} \vec{q}'} \quad (\text{I-1.21})$$

Obtemos assim a seguinte expressão

$$H = \sum_{\nu, \vec{q}} \frac{\hbar \omega_{\nu}(\vec{q})}{2} \left(a_{\nu \vec{q}} a_{\nu \vec{q}}^* + a_{\nu \vec{q}}^* a_{\nu \vec{q}} \right) \quad (\text{I-1.22})$$

que é uma hamiltoniana de $3pN$ osciladores harmônicos independentes. A quantização desta hamiltoniana é imediata se fizemos a correspondência entre as amplitudes $a_{\nu \vec{q}}$ e os operadores criação e destruição, da seguinte forma:

$$\begin{aligned} a_{\nu \vec{q}} &\rightarrow \hat{a}_{\nu \vec{q}} \\ a_{\nu \vec{q}}^* &\rightarrow \hat{a}_{\nu \vec{q}}^+ \end{aligned} \quad (\text{I-1.23})$$

com os operadores sujeitos as seguintes relações de comutação:

$$\begin{aligned} [\hat{a}_{\nu \vec{q}}, \hat{a}_{\nu' \vec{q}'}^+] &= 0 \\ [\hat{a}_{\nu \vec{q}}, \hat{a}_{\nu' \vec{q}'}] &= 0 \\ [\hat{a}_{\nu \vec{q}}, \hat{a}_{\nu' \vec{q}'}^+] &= \delta_{\vec{q} \vec{q}'} \delta_{\nu \nu'} \end{aligned} \quad (\text{I-1.24})$$

A substituição de (I-1.23) em (I-1.22) leva a função H a um opera-

dor $\hat{H}$ que após o uso da 3a. relação (I-1.24) toma a forma:

$$\hat{H} = \sum_{\nu, \vec{q}} \hbar \omega_{\nu}(\vec{q}) \left[\hat{a}_{\nu\vec{q}}^{\dagger} \hat{a}_{\nu\vec{q}} + 1/2 \right] \quad (\text{I-1.25})$$

É comum tomar $E_0 = \sum_{\nu, \vec{q}} \frac{1}{2} \hbar \omega_{\nu}(\vec{q})$ a energia do estado fundamental como referência para as medidas da energia, logo, temos

$$\hat{H} = \sum_{\nu, \vec{q}} \hbar \omega_{\nu}(\vec{q}) \hat{a}_{\nu\vec{q}}^{\dagger} \hat{a}_{\nu\vec{q}} \quad (\text{I-1.26})$$

A Hamiltoniana (I-1.26) pode ser interpretada de duas maneiras equivalentes:

a) A hamiltoniana descreve um sistema de $3pN$ osciladores harmônicos quânticos, independentes e distinguíveis, identificados pelos índices $(\nu, \vec{q})$. Cada oscilador pode estar em vários "estados estacionários", identificadas pelo número quântico $n_{\vec{q}\nu}^+$. O operador $\hat{a}_{\vec{q}\nu}^{\dagger}$ excita o sistema do estado fundamental $(|0\rangle)$ ao estado estacionário $|n_{\vec{q}\nu}^+\rangle$ pela aplicação sucessiva, isto é,

$$|n_{\vec{q}\nu}^+\rangle = \frac{(\hat{a}_{\vec{q}\nu}^{\dagger})^{n_{\vec{q}\nu}^+}}{(n_{\vec{q}\nu}^+!)^{1/2}} |0\rangle \quad (\text{I-1.27})$$

Este estado corresponde uma energia $E_{n_{\vec{q}\nu}^+} = n_{\vec{q}\nu}^+ \hbar \omega_{\nu}(\vec{q})$. Cada excitação corresponde à vibração de todos os átomos do cristal.

b) A segunda maneira completamente equivalente é a seguinte: A hamiltoniana (I-1.26) corresponde a hamiltoniana de um gás de partículas indistinguíveis, chamadas fonons; que obedecem a estatística de Bose-Einstein. Um fonon pode estar em vários "estados estacionários" identificados pelos índices $(\vec{q}\nu)$. O número de fonons em um estado estacionário $(\vec{q}\nu)$ é $n_{\vec{q}\nu}^+$. O operador $\hat{a}_{\vec{q}\nu}^{\dagger}$ cria um fonon no estado $(\vec{q}\nu)$ a partir do vácuo $(|0\rangle)$. O estado de $n_{\vec{q}\nu}^+$ fonons de mesmo tipo é obtido pela aplicação sucessiva do operador $\hat{a}_{\vec{q}\nu}^{\dagger}$ ao vácuo, isto é, a expressão (I-1.27). Devido as relações de

comutação (I-1.24) o estado $|n_{q\nu}^1, n_{q\nu}^2, \dots\rangle$ não muda de sinal pela troca dos operadores de criação.

2) Funções de coerência e correlação

Vamos reescrever o operador deslocamento (I-1.19) para um cristal de um só átomo na base, ou seja

$$\hat{u}(\vec{r}, t) = \hat{u}^{(+)}(\vec{r}, t) + \hat{u}^{(-)}(\vec{r}, t) \quad (\text{I-2.1})$$

onde:

$$\hat{u}^{(+)}(\vec{r}, t) = \sum_{\nu, q} \left[\frac{\hbar}{2mN\omega_{\nu}(q)} \right]^{1/2} \hat{e}_{\nu}(q) \hat{a}_{q\nu} e^{i[\vec{q} \cdot \vec{r} - \omega_{\nu}(q)t]} \quad (\text{I-2.2})$$

$$\hat{u}^{(-)}(\vec{r}, t) = [\hat{u}^{(+)}(\vec{r}, t)]^{\dagger}$$

Como pode ser visto o operador $\hat{u}^{+}$ está relacionado com a absorção (aniquilação) de fonons enquanto o operador $\hat{u}^{-}$ está relacionado com a emissão (criação) de fonons. Existe também as seguintes relações de comutação entre estes operadores :

$$[\hat{u}^{(+)}(\vec{r}, t) ; \hat{u}^{(+)}(\vec{r}', t')] = 0$$

$$[\hat{u}^{(-)}(\vec{r}, t) ; \hat{u}^{(-)}(\vec{r}', t')] = 0 \quad (\text{I-2.3})$$

$$[\hat{u}^{(+)}(\vec{r}, t) ; \hat{u}^{(-)}(\vec{r}', t')] = T[(\vec{r} - \vec{r}'), (t - t')]$$

O argumento de T demonstra a invariância translacional da teoria no espaço-tempo.

Em muitos casos é necessário calcular probabilidade de transição por unidade de tempo.

A amplitude de transição para o processo onde um fonon é absorvi-

do em $(\vec{\ell}, t)$ com o sistema passando de $|i\rangle$ para $|f\rangle$ é proporcional a

$$\langle f | \hat{u}^+(\vec{\ell}, t) | i \rangle \quad (\text{I-2.4})$$

Por outro lado a probabilidade de transição por unidade de tempo será proporcional a

$$|\langle f | \hat{u}^+(\vec{\ell}, t) | i \rangle|^2 \quad (\text{I-2.5})$$

Em geral temos sempre um conjunto de estados finais e como qualquer estado que difere do estado $|i\rangle$ por mais que a absorção de 1 fonon será ortogonal a $\hat{u}^+|i\rangle$, podemos somar a (I-2.5) sobre um conjunto completo de estados finais, isto é,

$$\sum_f |\langle f | \hat{u}^+ | i \rangle|^2 = 1 \quad (\text{I-2.6})$$

A probabilidade de transição será proporcional a

$$\langle i | \hat{u}^-(\vec{\ell}, t) \hat{u}^+(\vec{\ell}, t) | i \rangle \quad (\text{I-2.7})$$

Da mesma forma num processo de 2 fonons absorvidos em $(\vec{\ell}_1, t_1)$ e $(\vec{\ell}_2, t_2)$ teremos, a probabilidade de transição proporcional a

$$\langle i | \hat{u}^-(\vec{\ell}_1, t_1) \hat{u}^-(\vec{\ell}_2, t_2) \hat{u}^+(\vec{\ell}_2, t_2) \hat{u}^+(\vec{\ell}_1, t_1) | i \rangle \quad (\text{I-2.8})$$

Com isto em mente podemos definir função de coerência de fonons . Seja $\hat{\rho}$ o operador densidade do sistema de forma que o valor médio de qualquer operador $\hat{O}$ se escreve:

$$\langle \hat{O} \rangle = \text{Tr}(\hat{\rho} \hat{O}) \quad (\text{I-2.9})$$

Vamos adotar também $\hat{\rho}$ normalizado, isto é, o operador identidade tem valor médio 1, ou seja,

$$T_r(\hat{\rho}) = 1$$

Assim definimos função de coerência de ordem n como

$$G^{nn}(x_1, \dots, x_n, x_n, \dots, x_1) = T_r[\hat{\rho} \hat{u}^-(x_1) \dots \hat{u}^-(x_n) \hat{u}^+(x_n) \dots \hat{u}^+(x_1)] \quad (I-2.10)$$

onde $x_i = (\vec{\ell}_i, t_i)$.

Note que se o estado caracterizado por $\hat{\rho}$ é um estado puro, teremos

$$\hat{\rho} = |1\rangle\langle 1| \quad (I-2.11)$$

Assim a função de coerência de primeira ordem será

$$G^{11}(x_1, x_1) = T_r[|1\rangle\langle 1| \hat{u}^-(x_1) \hat{u}^+(x_1)] = \langle 1 | \hat{u}^-(x_1) \hat{u}^+(x_1) | 1 \rangle$$

que é análoga a expressão (I-2.7).

Da mesma forma a função de coerência de 2a. ordem será

$$G^{22}(x_1, x_2, x_2, x_1) = \langle 1 | \hat{u}^-(x_1) \hat{u}^-(x_2) \hat{u}^+(x_2) \hat{u}^+(x_1) | 1 \rangle$$

que é análoga a (I-2.8).

Podemos também definir outra função, bastante mais complicada que a (I-2.10), chamada função de correlação de ordem 2n, como:

$$G^{nn}(x_1 \dots x_n, x_{n+1} \dots x_{2n}) = T_r[\hat{\rho} \hat{u}^-(x_1) \dots \hat{u}^-(x_n) \hat{u}^+(x_{n+1}) \dots \hat{u}^+(x_{2n})] \quad (I-2.12)$$

Note que quando $(x_{n+1} \dots x_{2n})$ coincidir com $(x_n \dots x_1)$ a função de correlação de ordem 2n coincidirá com a função de coerência de ordem n.

Sabendo-se que $\hat{\rho}$ é um operador hermitiano e as seguintes identidades

$$a) \quad T_r[\hat{A}\hat{B}\hat{C}] = T_r[\hat{B}\hat{C}\hat{A}] = T_r[\hat{C}\hat{A}\hat{B}] \quad (I-2.13)$$

$$b) \quad T_r(\hat{\rho}\hat{O}^+) = [T_r(\hat{\rho}\hat{O})]^* \quad (I-2.14)$$

$$c) \quad T_r(\hat{\rho}\hat{O}^+\hat{O}) \geq 0 \quad (I-2.15)$$

pode-se demonstrar as seguintes propriedades da função de correlação.

P.1)- Se o campo de fonons está em um estado de N fonons, todas as funções de correlação anular-se-ão para todo $n > N$, isto é,

$$G^{nn}(x_1 \dots x_{2n}) \equiv 0 \quad \text{para } n > N \quad (I-2.16)$$

P.2) -

$$G^{nn}(x_1 \dots x_n, x_{n+1} \dots x_{2n}) = [G^{nn}(x_{2n} \dots x_{n+1}, x_n \dots x_1)]^* \quad (I-2.17)$$

P.3)- A função de coerência de ordem n é positiva, isto é,

$$G^{nn}(x_1 \dots x_n, x_n \dots x_1) \geq 0 \quad (I-2.18)$$

P.4) -

$$|G^{11}(x_1, x_2)|^2 \leq G^{11}(x_1, x_1) G^{11}(x_2, x_2) \quad (I-2.19)$$

As propriedades P.3 e P.4 permitem definir "grau de coerência" do campo como:

$$g^{11}(x_1, x_2) = \frac{G^{11}(x_1, x_2)}{[G^{11}(x_1, x_1)]^{1/2} [G^{11}(x_2, x_2)]^{1/2}} \quad (I-2.20)$$

Analogamente define-se "grau de coerência" de ordem (2n) como:

$$g^{nn}(x_1 \dots x_{2n}) = \frac{G^{nn}(x_1 \dots x_{2n})}{\prod_{j=1}^{2n} [G^{11}(x_j, x_j)]^{1/2}} \quad (I-2.21)$$

P.5)- Para um campo estacionário ($[\hat{H}, \hat{\rho}] = 0$) as funções de correlação são invariantes por uma translação temporal, isto é,

$$G^{nn}[(\vec{t}_1, t_1 + \tau); \dots (\vec{t}_{2n}, t_{2n} + \tau)] = G^{nn}[(\vec{t}_1, t_1) \dots (\vec{t}_{2n}, t_{2n})] \quad (\text{I-2.22})$$

Tendo como base as propriedades P.3 e P.4 definimos:

$$\text{Campo Coerente} \quad |g| = 1 \quad (\text{I-2.23})$$

$$\text{Campo Incoerente} \quad |g| = 0 \quad (\text{I-2.24})$$

Então de (I-2.21) temos para um campo coerente

$$|G^{nn}(x_1 \dots x_{2n})|^2 = \prod_{j=1}^{2n} G^{11}(x_j, x_j) \quad (\text{I-2.25})$$

Para o caso $n=1$ teremos:

$$|G^{11}(x_1, x_2)|^2 = G^{11}(x_1, x_1) G^{11}(x_2, x_2) \quad (\text{I-2.26})$$

Assim podemos mostrar⁽³⁾ que a condição necessária e suficiente para que $|g^{11}(x_1, x_2)| = 1$ é que a função de correlação seja fatorada em um produto de funções da forma:

$$G^{11}(x_1, x_2) = V^*(x_1) V(x_2) \quad (\text{I-2.27})$$

De uma maneira geral teremos um campo coerente quando

$$G^{nn}(x_1, \dots, x_{2n}) = V^*(x_1) \dots V^*(x_n) V(x_{n+1}) \dots V(x_{2n}) \quad (\text{I-2.28})$$

que é chamada de "propriedade de fatoração".

3) Estados coerentes de fonons

Vamos admitir que exista um estado $|\rangle$ do campo de fonons tal que

$$\hat{u}^+(x) |> = V(x) |> \quad (I-3.1)$$

$$\text{e portanto } <|\hat{u}^-(x) = V^*(x) <|$$

Assim o estado $|>$ é um auto-estado da parte de aniquilação do operador $\hat{u}$ com auto-valor $V(x)$.

Sendo $|>$ um auto-estado o operador densidade será

$$\hat{\rho} = |><| \quad (I-3.2)$$

Para este operador densidade a função de correlação tornar-se-á

$$\begin{aligned} G^{11}(x_1 \dots x_{2n}) &= T_r \left\{ |><| \hat{u}^-(x_1) \dots \hat{u}^-(x_n) \hat{u}^+(x_{n+1}) \dots \hat{u}^+(x_{2n}) \right\} = \\ &= <|\hat{u}^-(x_1) \dots \hat{u}^+(x_{2n}) |> \end{aligned}$$

Usando (I-3.1) temos:

$G^{11}(x_1 \dots x_{2n}) = V^*(x_1) \dots V(x_{2n})$ que é a expressão de função de correlação para um campo coerente.

O estado $|>$ que leva a função de correlação a uma forma fatorada é chamado de "estado coerente".⁽²⁾

Por outro lado sabemos que:

$$\hat{u}^+(\vec{r}, t) = \sum_{q, v} \left(\frac{\hbar}{2mN\omega_v(q)} \right)^{1/2} \hat{e}_v(q) \hat{a}_{qv} e^{i[\vec{q} \cdot \vec{r} - \omega_v(q)t]} \quad (I-3.3)$$

Se usamos para $V(x)$ uma expansão de Fourier da mesma forma, isto é,

$$V(\vec{r}, t) = \sum_{q, v} \left(\frac{\hbar}{2mN\omega_v(q)} \right)^{1/2} \hat{e}_v(q) \alpha_{qv} e^{i(\vec{q} \cdot \vec{r} - \omega_v(q)t)} \quad (I-3.4)$$

onde os parâmetros complexos α_{qv} são os coeficientes de Fourier. A substituição de (I-3.4) e (I-3.3) em (I-3.1) levará a

$$\hat{a}_{qv} |> = \alpha_{qv} |>, \quad (\text{I-3.5})$$

Então podemos construir o estado $|>$ como um produto direto de esta dos $|\alpha_{qv}>$ na forma

$$|> = \prod_q |\alpha_{qv}> \quad (\text{I-3.6})$$

onde cada $|\alpha_{qv}>$ satisfaz

$$\hat{a}_{qv} |\alpha_{qv}> = \alpha_{qv} |\alpha_{qv}> \quad (\text{I-3.7})$$

Não é difícil mostrar que o estado coerente $|\alpha_{qv}>$ tem a seguinte expressão

$$|\alpha_{qv}> = e^{-\frac{1}{2}|\alpha_{qv}|^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\alpha_{qv})^n}{(n_{qv}!)^{\frac{1}{2}}} |n_{qv}> \quad (\text{I-3.8})$$

onde $|n_{qv}>$ são os estados do oscilador harmônico.

4) Propriedades dos "estados coerentes" ⁽²⁾

É fácil ver que o valor médio do operador número em um estado coerente puro $|\alpha>$ será:

$$\bar{n} = \langle \hat{n} \rangle = \langle \alpha | a^+ a | \alpha \rangle = |\alpha|^2 \quad (\text{I-4.1})$$

A probabilidade de encontrar n fonons em um estado coerente $|\alpha>$ é dada por uma distribuição de Poisson

$$|\langle n | \alpha \rangle|^2 = \langle n | \alpha \rangle \langle \alpha | n \rangle = \frac{(|\alpha|^2)^n e^{-|\alpha|^2}}{n!} \quad (\text{I-4.2})$$

Uma outra propriedade conveniente é que o estado coerente $|\alpha>$ pode ser obtido pelo operador criação de estados coerentes $D(\alpha)$, unitário.

$$\hat{D}(\alpha) = e^{\alpha \hat{a}^+ - \alpha^* \hat{a}} \quad (\text{I-4.3})$$

cujã ação sobre o vãcuo ẽ:

$$\hat{D}(\alpha) |0\rangle = |\alpha\rangle \quad (\text{I-4.4})$$

Pode-se ver também que:

$$\hat{D}^+(\alpha) = \hat{D}^{-1}(\alpha) = \hat{D}(-\alpha) = e^{-\alpha \hat{a}^+ + \alpha^* \hat{a}} \quad (\text{I-4.5})$$

Com base nas expressões (I-1.17) e (I-1.18) podemos escrever as variãveis canônicas para um sô modo ($\hat{q}_V$), na representação de Heisenberg;

$$\hat{u}(t) = \left(\frac{\hbar}{2m\omega} \right)^{1/2} \hat{e} \left[\hat{a} e^{-i\omega t} + \hat{a}^+ e^{+i\omega t} \right] \quad (\text{I-4.6})$$

$$\hat{p}(t) = \frac{1}{i} \left(\frac{m\hbar\omega}{2} \right)^{1/2} \hat{e} \left[\hat{a} e^{-i\omega t} - \hat{a}^+ e^{+i\omega t} \right] \quad (\text{I-4.7})$$

Podemos então calcular a média de $\hat{u}(t)$ e $\hat{p}(t)$ em um estado coerente

$$\langle \alpha | \hat{u} | \alpha \rangle = \langle \hat{u}(t) \rangle = \left(\frac{\hbar}{2m\omega} \right)^{1/2} \hat{e} \left[\alpha e^{-i\omega t} + \alpha^* e^{+i\omega t} \right]$$

$$\langle \alpha | \hat{p} | \alpha \rangle = \langle \hat{p}(t) \rangle = \frac{1}{i} \left(\frac{m\hbar\omega}{2} \right)^{1/2} \hat{e} \left[\alpha e^{-i\omega t} - \alpha^* e^{+i\omega t} \right]$$

$$\text{Então fazendo } \alpha = |\alpha| e^{i\phi} \quad (\text{I-4.8})$$

temos

$$\langle \hat{u}(t) \rangle = 2 \left[\frac{\hbar}{2m\omega} \right]^{1/2} |\alpha| \cos(\omega t - \phi) \hat{e} \quad (\text{I-4.9})$$

$$\langle \hat{p}(t) \rangle = -2 \left[\frac{m\hbar\omega}{2} \right]^{1/2} |\alpha| \sin(\omega t - \phi) \hat{e} \quad (\text{I-4.10})$$

Vemos assim que os valores médios das variáveis canônicas compor - tam-se em função do tempo exatamente como as grandezas clássicas. É também interessante calcular as relações de incerteza.

$$\Delta p = (\langle \hat{p}^2 \rangle - \langle p \rangle^2)^{1/2} \quad (\text{I-4.11})$$

$$\Delta u = (\langle u^2 \rangle - \langle u \rangle^2)^{1/2} \quad (\text{I-4.12})$$

De (I-4.11) e (I-4.12) pode ser mostrado que:

$$\Delta p \Delta u = \frac{\hbar}{2} \quad (\text{I-4.13})$$

Assim em um estado coerente a relação de incerteza tem o mínimo valor possível.

Também não é difícil demonstrar que um estado coerente corresponde ao estado fundamental de um oscilador harmônico deslocado.

Outra propriedade fundamental é que os estados coerentes⁽²⁾, apesar de não-ortogonais, formam um conjunto completo e como tal podem ser usados como base para descrição do campo.

Conforme R.J.Glauber, existe também uma maneira única de expandir estados e operadores em termos de estados coerentes.

O operador densidade que representa uma mistura de esta dos coerentes pode ser representado por:

$$\hat{\rho} = \int P(\alpha) |\alpha\rangle\langle\alpha| d^2\alpha \quad (\text{I-4.14})$$

onde $d^2\alpha$ é um elemento de área no plano complexo e $P(\alpha)$ uma função que possui as seguintes restrições devidas as propriedades do operador $\hat{\rho}$.

$$\text{a) Hermiticidade de } \hat{\rho} \text{ implica em } P(\alpha) = P^*(\alpha) \quad (\text{I-4.15})$$

$$\text{b) Carácter positivo definido de } \hat{\rho} \text{ } (\langle \beta | \rho | \beta \rangle \geq 0) \text{ implica em}$$

$$\int |f(\alpha^*)|^2 P(\alpha) d^2\alpha > 0 \quad (\text{I-4.16})$$

para toda função f inteira.

c) Normalização de $\hat{\rho}$ ($\text{Tr } \hat{\rho} = 1$) implica em

$$\int P(\alpha) d^2\alpha = 1. \quad (\text{I-4.17})$$

Pode-se também mostrar⁽²⁾ que para um conjunto de fontes estatisticamente independentes, existe uma função $P(\alpha)$ que descreve um modo do campo dada por

$$P(\alpha) = \frac{1}{\Pi \langle n \rangle} e^{-\frac{|\alpha|^2}{\langle n \rangle}}. \quad (\text{I-4.18})$$

A função que descreve todo campo será o produto de funções (I-4.18). Para a função (I-4.18) o operador densidade toma a forma:

$$\hat{\rho} = \frac{1}{\Pi \langle n \rangle} \int e^{-\frac{|\alpha|^2}{\langle n \rangle}} |\alpha\rangle \langle \alpha| d^2\alpha. \quad (\text{I-4.19})$$

A função $P(\alpha)$ definida acima é chamada "Função associada" ao operador densidade $\hat{\rho}$.

De maneira geral, quando usamos a representação de estados coerentes podemos determinar para cada operador uma função associada a partir da equação de evolução quântica. Se adotarmos este procedimento para $\hat{\rho}$ encontraremos uma equação diferencial para $P(\alpha)$ que é a equação de Fokker-Planck⁽³⁾. Faremos isso no Capítulo III.

CAPÍTULO II

EFEITO MÖSSBAUER

1) Introdução

Vamos considerar dois núcleos iguais A e B, em repouso, de forma que A emita um fóton- γ e desejamos saber as condições de absorção pelo núcleo B. Conhecemos que um fóton de energia ϵ_γ tem momento linear $|\vec{p}| = |\hbar\vec{k}| = \epsilon_\gamma/c$, e que o estado excitado do núcleo possui largura natural Γ .

Fig.1

No processo de emissão as equações de conservação são:

$$E_e = E_f + E_\gamma + R \quad (\text{II-1.1})$$

$$0 = \vec{p}_N + \hbar\vec{k}$$

onde R é a energia de recuo e $\vec{p}_N$ o momento do núcleo. Assim chamando $\epsilon_0 = E_e - E_f$ a energia do gama se não houvesse recuo; temos:

$$E_\gamma = \epsilon_0 - R \quad (\text{II-1.2})$$

$$R = \frac{p_N^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{E_\gamma^2}{2mc^2} \quad (\text{II-1.3})$$

No processo de absorção as equações de conservação são:

$$E_\gamma = \epsilon_0 + R \quad (\text{II-1.4})$$

$$\hbar \vec{k} = \vec{p}_N \quad (\text{II-1.5})$$

Vemos assim que teremos um déficit de energia igual a $2R$, e para ocorrer absorção ressonante é necessário que:

$$R < \Gamma/2 \quad (\text{II-1.6})$$

Para um núcleo de número de massa $A=100$ e um gama de energia $E_\gamma=100$ KeV a energia de recuo é $R=0,05\text{eV}$. Por outro lado as larguras Γ dos estados excitados estão na faixa:

$$10^{-5}\text{eV} > \Gamma > 10^{-9}\text{eV} \quad (\text{II-1.6'})$$

Notamos então que a condição (II-1.6) não pode ser satisfeita para transições nucleares. O mesmo recuo ocorrerá em transições ópticas (atômicas) mas neste caso a condição (II-1.6) é satisfeita e pode ser observado absorção ressonante ou a chamada "ressonância fluorescente".

Agora se consideramos que os núcleos não estão em repouso, teríamos de forma análoga as relações:

$$E_\gamma = \epsilon_0 - R + \frac{E_\gamma v}{c} \cos\theta \quad (\text{emissão}) \quad (\text{II-1.7})$$

$$E_\gamma = \epsilon_0 + R + \frac{E_\gamma v}{c} \cos\theta \quad (\text{absorção}) \quad (\text{II-1.8})$$

onde v é a velocidade do núcleo antes da emissão e da absorção; e θ é o ângulo entre $\vec{v}$ e $\vec{k}$. Se $\epsilon = 1/2 mv^2$ é a energia cinética antes, temos:

$$2(R\epsilon)^{1/2} = E_\gamma \frac{v}{c} = D \quad (\text{largura Doppler}) \quad (\text{II-1.9})$$

Substituindo (II-1.9) em (II-1.7) e (II-1.8), vem:

$$E_\gamma = \epsilon_0 - R \pm D \cos\theta \quad (\text{II-1.10})$$

A relação (II-1.10) mostra que o espectro de foton- γ tem largura D centrada em $(\epsilon_0 - R)$ na emissão e em $(\epsilon_0 + R)$ na absorção.

Fig. 2

Para conseguirmos absorção ressonante devemos, por algum processo externo, suprir o sistema com uma energia da ordem de $2R$, e nestas condições existirá superposição considerável entre os espectros de emissão e absorção.

A secção de choque⁽⁴⁾ eficaz de absorção de um foton de energia E_γ , por um núcleo cujo estado excitado tem largura Γ é dada pela fórmula de Breit-Wigner :

$$\sigma_a(E_\gamma) = \sigma_0 \frac{\Gamma^2/4}{[(E_\gamma - \epsilon_0)^2 + \Gamma^2/4]} \quad (\text{II-1.11})$$

onde σ_0 é uma constante quando $E_\gamma = \epsilon_0$ (absorção sem recuo) e $\epsilon_0 = E_e - E_f$.

Vamos admitir que, para deslocarmos os espectros, damos ao conjunto de núcleos absorvedores velocidade u em relação ao conjunto de núcleos emissores, na direção de propagação do foton- γ . Seja $v' = v \cos \theta$ a projeção, nesta direção, da velocidade relativa do núcleo absorvedor em relação ao núcleo emissor.

Fig. 3

Se v' tem uma distribuição de Maxwell de velocidades , então a probabilidade de se encontrar um valor de velocidade entre v' e $v'+dv'$ é dada por:

$$P(v')dv' = \left(\frac{m}{4\pi k_B T} \right)^{1/2} e^{-\frac{mv'^2}{4k_B T}} dv' \quad (\text{II-1.12})$$

onde T é a temperatura dos dois conjuntos e k_B é a constante de Boltzmann.

De acordo com a equação (II-1.8), podemos escrever o deslocamento do espectro como:

$$E_Y \frac{u}{c} = 2R \approx \frac{\epsilon_0 u}{c} \quad (\text{II-1.13})$$

Assim teremos:

$$E_Y - \epsilon_0 = \frac{E_Y v'}{c} + R = \frac{E_Y}{c} [v' + u] - \frac{E_Y^2}{2mc^2}$$

$$E_Y - \epsilon_0 \approx \frac{\epsilon_0}{c} \left(v' + u - \frac{\epsilon_0}{2mc} \right) \quad (\text{II-1.14})$$

Desta forma a secção de choque eficaz será:

$$\bar{\sigma}_a(E_Y) = \int_{-\infty}^{+\infty} P(v') \sigma_a(E_Y) dv' \quad (\text{II-1.15})$$

A substituição de (I-1.14) e (I-1.11) em (I-1.15) leva a:

$$\bar{\sigma}_a(\epsilon_0) \approx \frac{\sigma_0 \Gamma^2}{4} \left(\frac{m}{4\pi k_B T} \right)^{1/2} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-\frac{mv'^2}{4k_B T}} dv'}{\left(\frac{\epsilon_0}{c} (v' + u - \frac{\epsilon_0}{2mc}) \right)^2 + \frac{\Gamma^2}{4}}$$

$$\bar{\sigma}_a(\epsilon_0) \approx \sigma_0 \left(\frac{m}{4\pi k_B T} \right)^{1/2} \left(\frac{\Gamma c}{2\epsilon_0} \right)^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-\frac{mv'^2}{4k_B T}} dv'}{\left(v' + u - \frac{\epsilon_0}{2mc} \right)^2 + \left(\frac{\Gamma c}{2\epsilon_0} \right)^2}$$

$$\begin{aligned} \bar{\sigma}_a(\epsilon_0) \approx \sigma_0 \left(\frac{m}{4\pi k_B T} \right)^{1/2} \left(\frac{\Gamma c}{2\epsilon_0} \right)^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{\epsilon_0}{i\Gamma c} \right) & \left(\frac{1}{\left(v' + u - \frac{\epsilon_0}{2mc} - \frac{i\Gamma c}{2\epsilon_0} \right)} - \right. \\ & \left. - \frac{1}{\left(v' + u - \frac{\epsilon_0}{2mc} + \frac{i\Gamma c}{2\epsilon_0} \right)} \right) e^{-\frac{mv'^2}{4k_B T}} dv' \end{aligned}$$

$$\bar{\sigma}_a(\epsilon_0) = \sigma_0 \left(\frac{m}{4\pi k_B T} \right)^{1/2} \frac{\Gamma c}{4i\epsilon_0} \oint e^{-z^2} \left(\frac{1}{z - z_0} - \frac{1}{z - z_0^*} \right) dz$$

$$\text{onde } z = \left(\frac{m}{4k_B T} \right)^{1/2} v'$$

(II-1.16)

$$z_0 = \left(\frac{m}{4k_B T} \right)^{1/2} \left(\frac{\epsilon_0}{2mc} - u + \frac{i\Gamma c}{2\epsilon_0} \right)$$

Resolvendo a integral temos:

$$\bar{\sigma}_a(\epsilon_0) \approx \sigma_0 \left(\frac{m}{4\pi k_B T} \right)^{1/2} \times \frac{\Gamma c}{4\epsilon_0} \times 2\pi e^{-\frac{m}{4k_B T} \left(\frac{\epsilon_0}{2mc} - u - \frac{i\Gamma c}{2\epsilon_0} \right)^2}$$

Uma vez que Γ é muito pequeno comparado com a largura da distribuição de Boltzmann, isto é, $\Gamma/2k_B T \ll 1$, podemos, na exponencial, desprezar Γ , e ficamos com:

$$\bar{\sigma}_a(\epsilon_0) \approx \frac{\sigma_0}{4} \left(\frac{\pi \Gamma^2}{2 R k_B T} \right)^{1/2} e^{-\frac{m}{4k_B T} \left(\frac{\epsilon_0}{2mc} - u \right)^2} \quad (\text{II-1.17})$$

Vemos assim que quando $u=0$, a dependência só com a temperatura tem a forma:

$$\bar{\sigma}_a(\epsilon_0) = \frac{\sigma_0}{4} \left(\frac{\pi \Gamma^2}{2 R k_B T} \right)^{1/2} e^{-\frac{R}{8k_B T}} \quad (\text{II-1.18})$$

Esta expressão é surpreendente, pois para conseguirmos uma superposição dos espectros poderíamos também aumentar a temperatura, entretanto vemos que o aumento da temperatura diminui a secção de choque.

Desta maneira foi que Mössbauer, acidentalmente fez sua descoberta. Estudando a absorção ressonante de fótons gama de 129 keV pelo I^{191} , verificou que para esta transição deveria ocorrer absorção ressonante mesmo à temperatura ambiente. Para reduzir o efeito da temperatura, Mössbauer resfriou a fonte e o alvo esperando com isso diminuir a secção de choque. Verificou porém que esta au-mentava em vez de diminuir. Após uma análise detalhada pode constatar que este era um efeito completamente novo. Desta maneira foi capaz de mostrar que uma fração de gamas eram emitidos e absorvidos, sem recuo do núcleo, portanto sem transferência de energia cinética ao núcleo.

Este tipo de transição chama-se "transição Mössbauer". Os fons assim produzidos são monocromáticos possuindo um espectro cuja largura é a largura natural Γ do nível excitado.

2) Teoria do efeito Mössbauer em sólidos

Na secção anterior foi apresentado o "efeito Mössbauer" de maneira simples sem levarmos em conta que os núcleos, em um sólido cristalino, não são livres, mas fortemente ligados, por forças

de coesão, formando uma rede.

Vamos considerar o "sistema" constituído de núcleos idênticos+rede, e queremos calcular a probabilidade de transição para o sistema absorver um foton- γ de momento $\vec{k}$.

O acoplamento do sistema com o campo eletromagnético é feito através da hamiltoniana:

$$H_I = \left(-\frac{e}{mc}\right) \vec{p} \cdot \vec{A}(\vec{r}) \quad (\text{II-2.1})$$

onde $\vec{p}$ é o momento do sistema e $\vec{A}$ é o potencial vetor do campo de radiação, na posição do nucleon absorvedor.

A expansão de $\vec{A}$ em ondas planas, considerando apenas a absorção e um modo do campo, tem a forma:

$$\vec{A}(\vec{r}) = \vec{A}(\vec{k}, w_k) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \quad (\text{II-2.2})$$

Fig. 4

Pela figura acima podemos fazer as seguintes mudanças de variáveis

$$\vec{r} = \vec{R} + \vec{\rho} \quad (\text{II-2.3})$$

$$\vec{p} = \vec{p}_{cm} + \vec{p}_p$$

Desta forma podemos reescrever a equação (II-2.1) como:

$$H_I = \left(-\frac{e}{mc}\right) (\vec{p}_{cm} + \vec{p}_p) \cdot \vec{A}(\vec{k}, w_k) e^{i\vec{k} \cdot \vec{\rho}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} \quad (\text{II-2.4})$$

$$\text{Mas } \langle \vec{p}_{cm} \rangle \approx q_{\text{fonon}} \approx \frac{1}{a} \quad \text{e} \quad \langle \vec{p}_p \rangle \approx \langle p \rangle_{\text{gama}} \approx \frac{1}{r_n}$$

logo $\langle \vec{P}_p \rangle \approx 10^5 \langle \vec{P}_{cm} \rangle$, desta forma podemos desprezar o termo $\vec{P}_{cm}$ em (II-2.4), ficando então:

$$H_I = \left\{ \left(-\frac{e}{mc} \right) \vec{P}_p \cdot \vec{A}(\vec{k}, w_k) \right\} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} = H_{\text{núcleo}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} \quad (\text{II-2.5})$$

O termo entre colchetes sendo responsável pelas transições internas no núcleo e o termo $e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}}$ pelas transições relativas à rede.

Outra justificativa da separação (II-2.5) é o fato de que a rede possuindo simetria de translação, a hamiltoniana deveria também ser invariante por uma translação igual a um vetor da rede, pois os núcleos são idênticos por hipótese.

Desta forma a amplitude de transição pela absorção de um gama de momento $\vec{k}$, será:

$$\langle i | H_I | f \rangle = \langle i | H_{\text{núcleo}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} | f \rangle \quad (\text{II-2.6})$$

Admitindo que a interação entre núcleo e rede é fraca, podemos escrever

$$\begin{aligned} |i\rangle &= |N_0\rangle |n_0\rangle |\vec{k}\rangle \\ |f\rangle &= |N\rangle |n\rangle |0\rangle \end{aligned} \quad (\text{II-2.7})$$

onde $|N_0\rangle$ e $|N\rangle$ são estados inicial e final do núcleo
 $|n_0\rangle$ e $|n\rangle$ são estados inicial e final da rede
 $|\vec{k}\rangle$ e $|0\rangle$ são estados inicial e final do campo de radiação

Levando (II-2.7) em (II-2.6) temos:

$$\langle i | H_I | f \rangle = \{ \langle N_0 | \langle \vec{k} | H_{\text{núc.}} | 0 \rangle | N \rangle \} \langle n_0 | e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} | n \rangle . \quad (\text{II-2.8})$$

Pode-se então ver que a amplitude de transição da rede será; $\langle n_0 | e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} | n \rangle$ e desta forma a probabilidade de transição é dada por:

$$P_{\text{non}} = |\langle n_0 | e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} | n \rangle|^2 \quad (\text{II-2.9})$$

Vamos calcular então a energia média transferida à rede no processo de absorção.

Sabendo-se que

$$[\hat{p}_x, f(\hat{R})] = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial f}{\partial x} \quad (\text{II-2.10})$$

onde $\hat{P}$ e $\hat{R}$ são operadores referentes à rede, temos:

$$[\hat{H}, e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}}] e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}} = \frac{\hbar}{m} \vec{k} \cdot \hat{\vec{p}} - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (\text{II-2.11})$$

onde $\hat{H}$ é a hamiltoniana da rede.

Calculando o valor médio de (II-2.11) no estado $|n_0\rangle$, temos:

$$\langle n_0 | (\hat{H} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} - e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} \hat{H}) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}} | n_0 \rangle = - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \frac{\hbar}{m} \vec{k} \cdot \langle n_0 | \hat{\vec{p}} | n_0 \rangle$$

Usando a completeza dos estados $|n\rangle$, vem:

$$\begin{aligned} \sum_n \epsilon_n \langle n_0 | e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} | n \rangle \langle n | e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}} | n_0 \rangle - \epsilon_n \langle n_0 | e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} | n \rangle \langle n | e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}} | n_0 \rangle &= \\ &= - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \frac{\hbar \vec{k}}{m} \cdot \langle n_0 | \hat{\vec{p}} | n_0 \rangle \end{aligned}$$

$$\sum_n P_{\text{non}} (\epsilon_n - \epsilon_{n_0}) = - \frac{\hbar}{m} \vec{k} \cdot \langle n_0 | \hat{\vec{p}} | n_0 \rangle + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (\text{II-2.12})$$

Se o estado $|n\rangle$ é um estado estacionário, então $\langle n_0 | \hat{\vec{p}} | n_0 \rangle = 0$, logo:

$$\sum_n P_{n_0 n} (\epsilon_n - \epsilon_{n_0}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = R \quad (\text{II-2.13})$$

(4)

Esta regra de soma devida a H.J.Lipkin, mostra que a energia média transferida à rede é igual a energia de recuo clássica. Como vimos as "transições Mössbauer" são transições sem transferência de energia à rede, são portanto transições cuja probabilidade é:

$$P_{n_0 n_0} = |\langle n_0 | e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} | n_0 \rangle|^2 \quad (\text{II-2.14})$$

portanto, não contribuem à soma (II-2.13).

3) Secção de choque de absorção

A maneira mais imediata de se obter a secção de choque é reescrever a fórmula de Breit-Wigner, levando em conta a transição da rede; isto é:

$$\sigma_a(\epsilon_\gamma) = \sigma_0 \frac{\Gamma^2}{4} \sum_{n, n_0} \frac{P_{nn_0}}{(\epsilon_i - \epsilon_f)^2 + \Gamma^2/4} \quad (\text{II-3.1})$$

onde:

- $\epsilon_i = E_\gamma + E_f + \epsilon_{n_0}$ - energia inicial do sistema
- $\epsilon_f = E_e + \epsilon_n$ - energia final do sistema
- P_{nn_0} = probabilidade de transição da rede

Se levarmos em conta que na transição o núcleo desloca-se de $\vec{u} = \vec{R} - \vec{R}_0$, e se g_{n_0} é a probabilidade de se encontrar a rede no estado inicial $|n_0\rangle$, temos:

$$P_{nn_0} = g_{n_0} |\langle n_0 | e^{i\vec{k} \cdot \vec{u}} | n \rangle|^2 \quad (\text{II-3.2})$$

Fazendo estas substituições obtemos:

$$\sigma_a(E_\gamma) = \sigma_o \frac{\Gamma^2}{4} \sum_{n, n_o} \frac{g n_o |\langle n_o | e^{i\vec{k} \cdot \vec{u}} | n \rangle|^2}{[E_\gamma - E_o + \epsilon n_o - \epsilon_n]^2 + \Gamma^2/4} \quad (\text{II-3.3})$$

Para se obter a "secção de choque Mössbauer", basta tomar $n=n_o$, isto é,

$$\begin{aligned} \sigma_{a_{MB}}(E_\gamma) &= \sigma_o \frac{\Gamma^2}{4} \frac{1}{[E_\gamma - E_o]^2 + \Gamma^2/4} \times \sum_{n_o} g n_o |\langle n_o | e^{i\vec{k} \cdot \vec{u}} | n_o \rangle|^2 = \\ &= f \sigma_o(E_\gamma) \end{aligned} \quad (\text{II-3.4})$$

onde:

$$f = \sum_{n_o} g n_o |\langle n_o | e^{i\vec{k} \cdot \vec{u}} | n_o \rangle|^2 \quad \text{é chamado de "coeficiente Mössbauer".}$$

Para evidenciarmos a contribuição da dinâmica da rede é interessante reescrever a (II-3.3) de uma maneira mais geral.

Lembrando que:

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i(\mu - \mu_o)t} dt = \delta(\mu - \mu_o) \quad (\text{II-3.5})$$

Podemos reescrever (II-3.3) como:

$$\sigma_a(E_\gamma) = \sigma_o \frac{\Gamma^2}{4} \sum_{n, n_o} g n_o \langle n_o | e^{+i\vec{k} \cdot \vec{u}} | n \rangle \langle n | e^{-i\vec{k} \cdot \vec{u}} | n_o \rangle \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\delta[\mu - \frac{\epsilon n - \epsilon_o}{\hbar}] d\mu}{[E_\gamma - E_o - \hbar\mu]^2 + \Gamma^2/4} \quad (\text{II-3.6})$$

$$\begin{aligned} \sigma_a(E_\gamma) &= \sigma_o \frac{\Gamma^2}{4} \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dt \{ \sum_{nn_o} g n_o \langle n_o | e^{i\vec{k} \cdot \vec{u}} | n \rangle \langle n | e^{-i\vec{k} \cdot \vec{u}} | n_o \rangle e^{\frac{i}{\hbar}(\epsilon_n - \epsilon_{n_o})t} \} \times \\ &\times \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-i\mu t} d\mu}{[E_\gamma - E_o - \hbar\mu]^2 + \Gamma^2/4} \end{aligned}$$

Calculando a integral em μ , vem:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-i\mu t} d\mu}{(E-E_0-\hbar\mu)^2 + \Gamma^2/4} = \frac{i}{\Gamma} \int_{-\infty}^{+\infty} \left\{ \frac{1}{(E-E_0-\hbar\mu-i\Gamma/2)} - \frac{1}{(E-E_0-\hbar\mu+i\Gamma/2)} \right\} e^{-i\mu t} d\mu = \frac{(2\pi)}{\hbar\Gamma} e^{-\frac{1}{\hbar} t(E_\gamma-E_0) - \frac{\Gamma}{2\hbar}|t|} \quad (\text{II-3.7})$$

Substituindo (II-3.7) em (II-3.6) e usando o fato de que o conjunto $\{|n\rangle\}$ é completo temos:

$$H|n\rangle = \epsilon_n|n\rangle$$

$$\sum_n |n\rangle\langle n| = 1$$

Então:

$$\sigma_a(E_\gamma) = \left(\frac{\sigma_0\Gamma}{4\hbar}\right) \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{-\frac{1}{\hbar} t(E_\gamma-E_0) - \frac{\Gamma}{2\hbar}|t|} \sum_{n_0} g_{n_0}\langle n_0| e^{i\vec{k}\cdot\vec{u}} e^{\frac{i}{\hbar} Ht} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{u}} e^{-\frac{i}{\hbar} Ht} |n_0\rangle$$

$$\text{Como } \vec{u}(t) = e^{\frac{i}{\hbar} Ht} \vec{u}(0) e^{-\frac{i}{\hbar} Ht}, \text{ temos:}$$

$$\sigma_a(E_\gamma) = \left(\frac{\sigma_0\Gamma}{4\hbar}\right) \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{-\frac{1}{\hbar} t(E_\gamma-E_0) - \frac{\Gamma}{2\hbar}|t|} F_s(\vec{k},t) \quad (\text{II-3.8})$$

onde:

$$F_s(\vec{k},t) = \sum_{n_0} g_{n_0}\langle n_0| e^{i\vec{k}\cdot\hat{\vec{u}}(0)} e^{-i\vec{k}\cdot\hat{\vec{u}}(t)} |n_0\rangle = \text{Tr} \{ \hat{\rho} e^{i\vec{k}\cdot\hat{\vec{u}}(0)} e^{-i\vec{k}\cdot\hat{\vec{u}}(t)} \} \quad (\text{II-3.9})$$

é uma função de correlação dos operadores exponenciais, e $\hat{\rho}$ é o operador densidade da rede. A função $F_s(\vec{k}, t)$ foi usada por Van Hooves⁽⁵⁾ no estudo do espalhamento de neutrons.

Podemos ainda definir uma nova função $G_s(\vec{r}, t)$ da seguinte forma:

$$G_s(\vec{r}, t) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} F_s(\vec{k}, t) d\vec{k} \quad (\text{II-3.10})$$

Desta forma temos:

$$G_s(\vec{r}, t) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int T_r \{ \hat{\rho} e^{i\vec{k} \cdot \vec{u}(0)} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{u}(t)} \} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} d\vec{k}$$

$$G_s(\vec{r}, t) = T_r \left\{ \hat{\rho} \frac{1}{(2\pi)^3} \int e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{u}(0)} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{u}(t)} d\vec{k} \right\} \quad (\text{II-3.11})$$

No limite clássico temos:

$$G_s^{\text{class}}(\vec{r}, t) = T_r \left\{ \hat{\rho} \int d\vec{r}' \delta(\vec{r} + \vec{u}(0) - \vec{r}') \delta(\vec{r} - \vec{u}(t)) \right\} \quad (\text{II-3.12})$$

Podemos notar então que:

$$G_s^{\text{class}}(\vec{r}, 0) = \delta(\vec{r}) \quad (\text{II-3.13})$$

A interpretação de $G_s(\vec{r}, t)$ devida a Van Hooves é a seguinte: A função $G_s(\vec{r}, t)$, no limite clássico, dá a probabilidade de encontrar uma partícula em $(\vec{r}, t)$ se ela própria (por isso o índice s de "self") estava na origem no tempo $t=0$.

Usando a transformada inversa de (II-3.10), podemos reescrever a (II-3.8) como:

$$\sigma_a(E_\gamma) = \left(\frac{\sigma_0 \Gamma}{4\hbar} \right) \int dt d\vec{r} e^{-\frac{1}{\hbar} t [E_\gamma - E_0] - \frac{\Gamma}{2\hbar} |t|} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} G_s(\vec{r}, t) \quad (\text{II-3.14})$$

A vantagem de escrever a secção de choque na forma (II-3.14) é que ela aplica-se não só a sólidos como também a líquidos, sendo que no último caso o cálculo de $G_s(\vec{r}, t)$ ou $F_s(\vec{k}, t)$ é difícil.

Para sólidos é fácil o cálculo de $F_s(\vec{k}, t)$, sendo por tanto indiferente usar (II-3.8) ou (II-3.14).

4) Cálculo de $F_s(\vec{k}, t)$ para um sólido harmônico

Como vimos no capítulo I, o deslocamento do l -ésimo ion de uma rede com um só átomo por célula, pode ser escrito:

$$\hat{u}(t) = \sum_{\vec{q}} \left[\frac{\hbar}{2mNw_q} \right]^{1/2} \hat{e}(q) [\hat{a}_q e^{-i w_q t} + a_q^+ e^{+i w_q t}] \quad (\text{II-4.1})$$

onde tomamos o l -ésimo átomo como origem.

Então temos:

$$\hat{u}(0) = \sum_{\vec{q}} \left[\frac{\hbar}{2mNw_q} \right]^{1/2} \hat{e}(q) [\hat{a}_q + a_q^+] \quad (\text{II-4.2})$$

Usando o fato de que, se dois operadores $\hat{A}$ e $\hat{B}$, comutam com $[\hat{A}, \hat{B}]$, então:

$$e^{\hat{A}} e^{\hat{B}} = e^{\hat{A}+\hat{B}} - e^{-\frac{1}{2}[\hat{A}, \hat{B}]} \quad (\text{II-4.3})$$

Assim,

$$[i\vec{k} \cdot \hat{u}(0); -i\vec{k} \cdot \hat{u}(t)] = -2i \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} \right) \frac{1}{\hbar N} \sum_q (\vec{k} \cdot \hat{e}_q)^2 \frac{\sin(w_q t)}{w_q} \quad (\text{II-4.4})$$

Assim podemos reescrever $F_s(\vec{k}, t)$ como:

$$F_s(\vec{k}, t) = T_r \left\{ \hat{\rho} e^{(i\vec{k} \cdot \hat{u}(0) - i\vec{k} \cdot \hat{u}(t))} e^{-\frac{1}{2}[i\vec{k} \cdot \hat{u}(0); -i\vec{k} \cdot \hat{u}(t)]} \right\} \quad (\text{II-4.5})$$

Uma vez que o comutador (II-4.4) é um número, portanto satisfaz a (II-4.3). Usando (II-4.4) temos:

$$F_s(\vec{k}, t) = e^{+\frac{iR}{\hbar N} \sum_q (\hat{k} \cdot \hat{e}_q)^2 \frac{\sin(w_q t)}{w_q}} T_r \left\{ \hat{\rho} e^{i\vec{k} \cdot (\hat{u}(0) - \hat{u}(t))} \right\} \quad (\text{II-4.6})$$

Mas

$$i\vec{k} \cdot (\hat{u}(0) - \hat{u}(t)) = ik \sum_q (\hat{k} \cdot \hat{e}_q) \left[\frac{\hbar}{2mNw_q} \right]^{1/2} [a_q (1 - e^{-iw_q t}) + a_q^+ (1 - e^{+iw_q t})] \quad (\text{II-4.7})$$

Pelo teorema de Bloch⁽⁶⁾ temos:

"Se os diferentes modos próprios de vibração estão em equilíbrio termodinâmico, para todo operador hermitiano $\hat{A}$ que é escrito como uma soma de operadores $\hat{a}$ e $\hat{a}^+$, temos:

$$T_r \left(\hat{\rho} e^{i\hat{A}} \right) = e^{-\frac{1}{2} T_r (\hat{\rho} \hat{A}^2)} \quad (\text{II-4.8})$$

Desta forma obtemos:

$$T_r \left(\hat{\rho} e^{i\vec{k} \cdot (\hat{u}(0) - \hat{u}(t))} \right) = e^{-\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m}\right) \frac{1}{\hbar N} \sum_q (\hat{k} \cdot \hat{e}_q)^2 (2\bar{n}_q + 1) \left(\frac{1 - \cos w_q t}{w_q}\right)} \quad (\text{II-4.9})$$

onde

$$\bar{n}_q = T_r [\hat{\rho} a_q^+ a_q] \quad (\text{II-4.10})$$

Assim temos finalmente:

$$F_s(\vec{k}, t) = e^{-\frac{R}{\hbar N} \sum_q \frac{(\vec{k} \cdot \hat{e}_q)^2}{w_q} [(2\bar{n}_q + 1)(1 - \cos w_q t) - i \sin(w_q t)]} \quad (\text{II-4.11})$$

5) Secção de choque Mössbauer na aproximação de Debye

Vimos na secção anterior que a secção de choque de absorção era dada por:

$$\sigma_a(E_\gamma) = \left(\frac{\sigma_0 \Gamma}{4\hbar}\right) \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{-\frac{i}{\hbar} t [E_\gamma - E_0] - \frac{\Gamma |t|}{2\hbar}} F_s(\vec{k}, t) \quad (\text{II-5.1})$$

onde

$$F_s(\vec{k}, t) = e^{-\gamma(t)} \quad (\text{II-5.2})$$

e

$$\gamma(t) = \frac{R}{\hbar N} \sum_q \frac{(\vec{k} \cdot \hat{e}_q)^2}{w_q} [(2\bar{n}_q + 1)(1 - \cos w_q t) - i \sin(w_q t)] \quad (\text{II-5.3})$$

Se estamos interessados apenas na secção de choque Mössbauer, isto é, apenas na parte do espectro que tem largura natural Γ , devemos considerar em $F_s(\vec{k}, t)$ somente a parte independente do tempo, ou seja, a limite quando $t \rightarrow \infty$.

Podemos, por outro lado, escrever:

$$F_s(\vec{k}, t) = e^{-\gamma(\infty)} \{1 + [e^{-[\gamma(t) - \gamma(\infty)]} - 1]\} \quad (\text{II-5.4})$$

Notando na expressão (II-4.5) que no limite $t \rightarrow \infty$, a correlação entre os operadores $\vec{u}(t)$ e $\vec{u}(0)$ desaparece, podemos achar o limite indiretamente, isto é,

$$F_s(\vec{k}, \infty) = e^{-\frac{k^2}{2} T_r [\hat{\rho}(u(t) - u(0))^2]} = e^{-k^2 T_r \hat{\rho}(u^2(0))} \quad (\text{II-5.5})$$

Assim o limite para $t \rightarrow \infty$ corresponde fazer em (II-5.3)

$$\cos(w_q t) = \sin(w_q t) = 0 \quad \text{para } t \rightarrow \infty \quad (\text{II-5.6})$$

Desta forma temos:

$$\gamma(\infty) = \frac{R}{\hbar N} \sum_q \frac{(\hat{k} \cdot \hat{e}_q)^2}{w_q} (2\bar{n}_q + 1) \quad (\text{II-5.7})$$

Substituindo (II-5.4) em (II-5.1) vem:

$$\begin{aligned} \sigma_a(E_\gamma) &= \left(\frac{\sigma_o \Gamma}{4\hbar} \right) e^{-\gamma(\infty)} \left\{ \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{-\frac{it}{\hbar} [E_\gamma - E_o] - \frac{\Gamma|t|}{2\hbar}} + \right. \\ &+ e^{-\gamma(\infty)} \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{-\frac{it}{\hbar} [E_\gamma - E_o] - \frac{\Gamma|t|}{2\hbar}} \left\{ e^{-(\gamma(t) - \gamma(\infty))} - 1 \right\} \Big\} \end{aligned} \quad (\text{II-5.8})$$

Calculando a primeira integral temos:

$$\begin{aligned} \sigma_a(E_\gamma) &= \frac{\sigma_o \Gamma}{4\hbar} \left\{ \frac{e^{-\gamma(\infty)} \hbar \Gamma}{[E_\gamma - E_o]^2 + \frac{\Gamma^2}{4}} + e^{-\gamma(\infty)} \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{-\frac{it}{\hbar} (E_\gamma - E_o) - \frac{\Gamma|t|}{2\hbar}} \times \right. \\ &\times \left. \left\{ e^{-(\gamma(t) - \gamma(\infty))} - 1 \right\} \right\} \end{aligned} \quad (\text{II-5.9})$$

O primeiro termo é a contribuição Mössbauer, isto é,

$$\sigma_a(E_\gamma)_{\text{MB}} = \frac{\Gamma_o}{4} \cdot \frac{\Gamma^2}{[(E_\gamma - E_o)^2 + \Gamma^2/4]} \cdot e^{-\gamma(\infty)} \quad (\text{II-5.10})$$

Os termos seguintes levarão a processos de emissão ($E_Y > E_O$) ou absorção ($E_Y < E_O$) de um fonon , dois fonons , etc..

Vamos então calcular $\gamma(\infty)$, usando a aproximação de Debye. Sabendo-se que:

$$\gamma(\infty) = \frac{R}{\hbar N} \sum_q \frac{(\hat{k} \cdot \hat{e}_q)^2}{w_q} (\bar{n}_q + 1/2) \frac{1}{w_q}$$

$$\bar{n}_q = \frac{1}{e^{\frac{\hbar w_q}{k_B T}} - 1} \quad (\text{II-5.11})$$

Para simplicidade vamos admitir $\hat{k}$ paralelo a $\hat{e}_q$.

$$\gamma(\infty) = \frac{2R}{\hbar N} \sum_q (\bar{n}_q + \frac{1}{2}) \frac{1}{w_q}$$

Por outro lado temos também

$$\sum_q \rightarrow \frac{V}{8\pi^3} \int d^3q \rightarrow \int_0^{w_D} \rho(w) dw \quad (\text{II-5.12})$$

$$\gamma(\infty) = \frac{6R}{\hbar w_D^3} \int_0^{w_D} w \left[\frac{1}{2} + \frac{1}{e^{-\frac{\hbar w}{k_B T}} - 1} \right] dw \quad (\text{II-5.13})$$

$$\text{onde usamos o fato de que } \rho(w) = 3Nw^2/w_D^3 \quad (\text{II-5-14})$$

Fazendo as mudanças de variáveis

$$\frac{\hbar w}{k_B T} = x \quad \text{e} \quad \hbar w_D = k_B \theta \quad (\text{II-5.15})$$

$$\gamma(\infty) = \frac{6R}{k_B \theta^3} \int_0^{\theta/T} \left(\frac{x}{2} + \frac{1}{e^{-x}-1} \right) dx \quad (\text{II-5.16})$$

$$\gamma(\infty) = \frac{3R}{2 k_B \theta} \left[1 + 4 \left(\frac{T}{\theta} \right)^2 \int_0^{\theta/T} \frac{1}{(e^{-x}-1)} dx \right]$$

Assim o coeficiente Mössbauer fica:

$$f = e^{-\gamma(\infty)} = \begin{cases} e^{-\frac{3R}{2 k_B \theta}} & \text{se } T \gg \theta \\ e^{-\frac{3R}{2 k_B \theta} \left(1 + \frac{2}{3} \pi^2 \left(\frac{T}{\theta} \right)^2 \right)} & \text{se } T \ll \theta \end{cases} \quad (\text{II-5.17})$$

Notamos então que a secção de choque Mössbauer aumenta nos seguintes casos:

- a) Diminuindo a temperatura
- b) Diminuindo a energia de recuo
- c) Aumentando a temperatura de Debye

Como último comentário queremos destacar o papel desempenhado pela função de espalhamento $F_s(\vec{k}, t)$. Ela contém todas as in formações dinâmicas do sistema e está relacionada diretamente com a interação, o que era de se esperar uma vez que a interação governa a dinâmica. No capítulo seguinte voltaremos a este ponto usando a representação de estados coerentes na qual a interpretação de $F_s(\vec{k}, t)$ aparecesse com maior clareza.

CAPÍTULO III

Neste capítulo vamos usar a representação de estados coerentes no estudo dos processos de emissão ou absorção de um fotón por um núcleo ligado a uma rede cristalina.

1) OPERADOR EVOLUÇÃO E OPERADOR CRIAÇÃO DE ESTADOS COERENTES

Em mecânica quântica é bem conhecido que alguns operadores têm papel destacado sendo um deles o operador evolução temporal. Uma limitação na sua determinação aparece quando temos que resolver uma equação integral na qual estão envolvidos operadores que, em geral, não comutam entre si. Sob certas aproximações é possível obtermos uma solução como no caso que vamos calcular a seguir. Em geral, queremos determinar um operador $\hat{D}(t)$ tal que possamos conhecer o estado do sistema em qualquer tempo t , através de:

$$|t\rangle = \hat{D}(t) |0\rangle \quad (\text{III-1.1})$$

onde estamos admitindo que o sistema no tempo $t=0$ estava no estado fundamental, e o nosso objetivo é relacionar o operador evolução com o operador criação de estados coerentes que tem propriedade análoga a (III-1.1). Assim estamos interessados em estabelecer o tipo de perturbação que gera um estado coerente do sistema. No presente caso vamos usar a representação intermediária⁽⁶⁾ pois vamos admitir que o sistema seja perturbado de tal forma que possamos escrever:

$$\hat{D}(t) = \hat{D}_0 \hat{D}_I \quad (\text{III-1.2})$$

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_I \quad (\text{III-1.3})$$

onde $\hat{H}_0$ é a hamiltoniana sem perturbação e $\hat{H}_I$ uma perturbação devido a interação fóton-rede; $\hat{D}_0$ é a evolução livre ($\hat{D}_0 = e^{-i/\hbar \hat{H}_0 t}$) e $\hat{D}_I$ o o

perador evolução intermediário determinado pela equação:

$$i \hbar \frac{d}{dt} \hat{D}_I = \hat{H}_I \hat{D}_I \quad (\text{III-1.4})$$

A hamiltoniana $\hat{H}_I$ pode ser obtida fazendo $\vec{p} \rightarrow \vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A}$ no termo de energia cinética de H_0 . Considerando $\vec{A}$ expandido em ondas planas e na gauge transversal obtemos termos da forma $e^{\pm i \vec{k} \cdot \vec{r}}$ $\vec{p}$. Usando a representação de momentos ($\vec{r} \rightarrow i \hbar \vec{\nabla}_p$), estes termos podem ser escritos da seguinte forma⁽¹⁰⁾.

$$e^{\pm i \vec{k} \cdot \vec{r}} \vec{p} \rightarrow (\vec{p} \pm \hbar \vec{k}) \quad (\text{III-1.5})$$

Desta maneira a interação fóton-rede fica:

$$H_I = \pm \frac{\hbar \vec{k} \cdot \vec{P}}{m} \quad (\text{III-1.6})$$

onde $\pm$ (-) corresponde a absorção (emissão) de um fóton de momento $\hbar \vec{k}$ por um núcleo de massa m , sendo $\vec{P}$ o momento deste núcleo. Esta interação, quando expressa em termos do campo de fonons e considerando o núcleo em $\vec{r}=0$, fica:

$$\hat{H}_I = \pm \frac{\hbar \vec{k}}{m} \cdot \sum_{\vec{q}} \hat{e}_{\vec{q}} \frac{(2mN\hbar\omega_{\vec{q}})^{1/2}}{i 2N} (\hat{a}_{\vec{q}} e^{-i\omega_{\vec{q}}t} - \hat{a}_{\vec{q}}^+ e^{+i\omega_{\vec{q}}t}) \quad (\text{III-1.7})$$

Desta forma temos que resolver:

$$i \hbar \frac{d}{dt} \hat{D}_I = (\pm) \theta(t) \frac{\hbar \vec{k}}{m} \cdot \sum_{\vec{q}} \frac{\hat{e}_{\vec{q}} (2mN\hbar\omega_{\vec{q}})^{1/2}}{2N} (\hat{a}_{\vec{q}} e^{-i\omega_{\vec{q}}t} - \hat{a}_{\vec{q}}^+ e^{+i\omega_{\vec{q}}t}) \times \hat{D}_I$$

Assim, em primeira ordem e com a condição de que $\hat{D}(0) = 1$ temos⁽⁷⁾:

$$\hat{D}_I(t) = e^{\sum_{\vec{q}} \pm i \vec{k} \cdot \hat{e}_{\vec{q}} \left(\frac{\hbar}{2mN\omega_{\vec{q}}} \right)^{1/2} (\hat{a}_{\vec{q}} (1 - e^{-i\omega_{\vec{q}}t}) + \hat{a}_{\vec{q}}^+ (1 - e^{+i\omega_{\vec{q}}t}))} \quad (\text{III-1.8})$$

Podemos agora comparar (III-1.8) com (II-4.7) e vemos que:

$$\hat{D}_I(t) = e^{\pm i\vec{k} \cdot (\hat{u}(0) - \hat{u}(t))} \quad (\text{III-1.9})$$

onde $\hat{u}$ é o operador deslocamento nos tempos zero e t do núcleo em $\vec{r}=0$.

Neste ponto estamos em condições de alcançar o nosso objetivo que é relacionar o operador (III-1.8) com o operador criação de estados coerentes cujas propriedades são:

$$\hat{T}_q(\beta_q) |0\rangle = |\beta_q\rangle \quad (\text{III-1.10})$$

ou considerando todos os modos do campo;

$$\hat{T}|0\rangle = \prod_q |\beta_q\rangle \quad (\text{III-1.11})$$

onde (como no capítulo I),

$$\hat{T}_q(\beta_q) = e^{\beta_q \hat{a}_q^+ - \beta_q^* \hat{a}_q} \quad (\text{III-1.12})$$

e

$$\hat{T} = e^{i\Phi(t)} e^{\sum_q (\beta_q \hat{a}_q^+ - \beta_q^* \hat{a}_q)} \quad (\text{III-1.13})$$

sendo $\Phi(t)$ um fator de fase.

Assim, reescrevendo (III-1.8) vem:

$$\hat{D}_I(t) = e^{\sum_q (\beta_q(t) \hat{a}_q^+ - \beta_q^*(t) \hat{a}_q)} \quad (\text{III-1.14})$$

onde as amplitudes dos estados coerentes têm as seguintes expressões:

$$(\text{absorção}) \rightarrow \beta_q^{(a)}(t) = +i\vec{k} \cdot \vec{e}_q \left(\frac{\hbar}{2mN\omega_q} \right)^{1/2} \left(1 - e^{i\omega_q t} \right) \quad (\text{III-1.15})$$

$$(\text{emissão}) \rightarrow \beta_q^{(e)}(t) = -i\vec{k} \cdot \vec{e}_q \left(\frac{\hbar}{2mN\omega_q} \right)^{1/2} \left(1 - e^{i\omega_q t} \right) \quad (\text{III-1.16})$$

Desta forma vemos que o operador evolução $\hat{D}_I(t)$ é o operador criação de estados coerentes cujas amplitudes β_q são determinadas pela interação. Assim em termos de estados coerentes a equação (III-1.4) pode ser interpretada como a equação de evolução do operador $\hat{T}$. Uma das principais características do uso de estados coerentes é sempre transformar um problema quântico em um problema equivalente clássico, associando a cada operador uma função número, de uma forma unívoca (isto é sempre possível⁽⁸⁾), de maneira que sempre estaremos envolvidos com a solução de uma equação diferencial para a função associada. No presente caso a solução da equação (III-1.4) é simples. Em casos mais complicados poderíamos usar tal procedimento e teríamos que resolver em vez de (III-1.4), uma equação de Volterra⁽¹³⁾ para funções números associadas, desde que especificássemos a lei de associação. Esta lei de associação deverá indicar as condições sob as quais um operador pode ser substituído por seu auto-valor ou por uma expressão equivalente⁽⁸⁾.

Na seção seguinte adotaremos este procedimento para determinarmos a função associada ao operador densidade que é um outro tipo de operador relevante do sistema.

Após as observações podemos então escrever os operadores evolução como:

$$\hat{D} = \hat{D}_O \hat{D}_I = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_O t} e^{i\Phi(t)} e^{\sum_q (\beta_q(t) \hat{a}^+ - \beta_q^*(t) \hat{a})} \quad (\text{III-1.17})$$

de modo que o sistema no tempo t pode ser escrito da seguinte forma:

$$|t\rangle = \hat{D}_O \hat{D}_I |0\rangle = \prod_q \left| e^{\frac{i\Phi(t)}{e}} e^{-i\omega_q t} \beta_q(t) \right\rangle. \quad (\text{III-1.18})$$

Note que, devido a perturbação (III-1.6), o sistema (campo de fonons) estará no estado coerente (III-1.18).

Como último comentário queremos salientar que quando escrevemos a hamiltoniana de interação na forma (III-1.6) já pressupomos uma média nos estados nucleares e nos estados de fótons, isto é, a expressão (III-1.6) está relacionada apenas com o campo de fonons como pode ser visto comparando com o capítulo II.

Para futura comparação entre as amplitudes dos estados coerentes obtidas pela equação de Fokker-Planck vamos reescrever as expressões (III-1.15) e (III-1.16) na forma:

$$(\text{absorção}) \rightarrow \beta_q(a)(t) = i\vec{k} \cdot \vec{e}_q \left(\frac{\hbar}{2mN\omega_q} \right)^{1/2} [e^{-i\omega_q t} - 1] e^{i\omega_q t} \quad (\text{III-1.19})$$

$$(\text{emissão}) \rightarrow \beta_q(e)(t) = -i\vec{k} \cdot \vec{e}_q \left(\frac{\hbar}{2mN\omega_q} \right)^{1/2} [e^{-i\omega_q t} - 1] e^{i\omega_q t} \quad (\text{III-1.20})$$

2) EQUAÇÃO DE FOKKER-PLANCK

Com o mesmo espírito salientado na seção anterior vamos determinar a equação de Fokker-Planck para a função associada ao operador densidade, onde usaremos $\hat{\rho}$ na chamada representação diagonal ou representação $P^{(2)}$.

Como é bem conhecido, a evolução do operador densidade $\hat{\rho}$ é determinada por:

$$i\hbar \frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} = [\hat{H}, \hat{\rho}] \quad (\text{III-2.1})$$

onde $\hat{H}$ é a hamiltoniana do sistema com interação.

Por outro lado podemos também escrever $\hat{\rho}$, na representação de estados coerentes como:

$$\hat{\rho} = \int P(\alpha, \alpha^*, t) |\alpha\rangle\langle\alpha| d^2\alpha \quad (\text{III-2.2})$$

onde está implícito que a lei de associação⁽⁹⁾ é o ordenamento normal dos operadores ($\hat{u}^+$ e $\hat{u}^-$) como usado no capítulo I para a definição das funções de correlação na obtenção dos estados coerentes de fonons.

Como na secção anterior podemos escrever para cada modo do campo,

$$\hat{H} = [\hbar\omega_q a_q^+ a_q + \hbar(f_q a_q + f_q^* a_q^+)] \quad (\text{III-2.3})$$

onde a excitação tem a seguinte forma:

$$f_q = \pm \frac{\vec{k} \cdot \vec{e}_q}{i} \left(\frac{\hbar\omega_q}{2mN} \right)^{1/2} \quad (\text{III-2.4})$$

sendo $+$ ($-$) absorção (emissão) de um fóton de momento $\hbar\vec{k}$ por um núcleo em $\vec{\ell}=0$.

Então de (III-2.1) podemos escrever:

$$\int i\hbar \frac{\partial P(\alpha)}{\partial t} |\alpha\rangle\langle\alpha| d^2\alpha = \int P(\alpha) [\hat{H}, |\alpha\rangle\langle\alpha|] d^2\alpha \quad (\text{III-2.5})$$

onde usamos para economia de escrita $P(\alpha, \alpha^*, t) \equiv P(\alpha)$.

Vamos então reescrever o comutador do lado direito como:

$$[\hat{H}; |\alpha\rangle\langle\alpha|] = [\hat{H}; T(\alpha) |0\rangle\langle 0| T(-\alpha)] = [\hat{H}; \hat{T}(\alpha) \hat{\rho}_0 \hat{T}(-\alpha)] \quad (\text{III-2.6})$$

pois

$$|\alpha\rangle = T(\alpha) |0\rangle = e^{(\alpha a^+ - \alpha^* a)} |0\rangle \quad (\text{III-2.7})$$

$$\langle\alpha| = \langle 0| T(-\alpha) = \langle 0| e^{-\alpha a^+ + \alpha^* a} \quad (\text{III-2.8})$$

A fim de facilitar os cálculos devemos linearizar o termo de $\hat{H}_0$ pois o termo de H_{int} já está em uma forma conveniente, e para tal devemos reescrever apenas o comutador.

$$[\hat{H}_0, |\alpha\rangle\langle\alpha|] = \hbar\omega_q [a_q^\dagger a_q; \hat{T}(\alpha) \hat{\rho}_0 T(-\alpha)] \quad (\text{III-2.9})$$

que expandido fornece os seguintes termos:

$$[\hat{H}_0, |\alpha\rangle\langle\alpha|] = \hbar\omega_q \{ [a^\dagger a; \hat{T}(\alpha)] \hat{\rho}_0 \hat{T}(-\alpha) + \hat{T}(\alpha) \hat{\rho}_0 [a^\dagger a; T(-\alpha)] \} \quad (\text{III-2.10})$$

onde usamos o fato de que $[a^\dagger a, \hat{\rho}_0] = 0$.

Por outro lado, lembrando que:

$$T(\alpha) = e^{\alpha a^\dagger - \alpha^* a} = e^{\alpha a^\dagger} e^{-\alpha^* a} e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2} \quad (\text{III-2.11})$$

vem que:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2}|\alpha|^2 e [a^\dagger a; T(\alpha)] &= \{ [a^\dagger; e^{\alpha a^\dagger - \alpha^* a}] e^{\alpha a^\dagger} + e^{\alpha a^\dagger} [a^\dagger; e^{-\alpha^* a}] \} a + \\ &+ a^\dagger \{ [a; e^{\alpha a^\dagger - \alpha^* a}] e^{\alpha a^\dagger} + e^{\alpha a^\dagger} [a; e^{-\alpha^* a}] \} \end{aligned} \quad (\text{III-2.12})$$

onde usamos as seguintes identidades:

$$[\hat{A}; \hat{B}\hat{C}] = [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B} + \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}] \quad (\text{III-2.13})$$

$$[\hat{A}\hat{B}; \hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C} + \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}] \quad (\text{III-2.14})$$

Por outro lado sabendo-se também que:

$$[a, a^{+n}] = n a^{+(n-1)} \quad (\text{III-2.15-a})$$

$$[a^+, a^n] = -n a^{(n-1)} \quad (\text{III-2.15-b})$$

$$[a, a^n] = [a^+, a^{+n}] = 0 \quad (\text{III-2.15-c})$$

podemos obter em (III-2.12), após expandir as exponenciais e usar novamente a expressão (III-2.11):

$$[a^+ a, T(\alpha)] = \alpha^* \hat{T}(\alpha) a + \alpha a^+ \hat{T}(\alpha) \quad (\text{III-2.16})$$

Assim imediatamente podemos calcular:

$$[a^+ a, T(-\alpha)] = - [\alpha^* \hat{T}(-\alpha) a + \alpha a^+ \hat{T}(-\alpha)] \quad (\text{III-2.17})$$

fazendo $\alpha \rightarrow -\alpha$ em (III-2.16).

A substituição de (III-2.16) e (III-2.17) em (III-2.10) forçasse a expressão linearizada:

$$[H_0, |\alpha\rangle\langle\alpha|] = \hbar\omega[(\alpha^* a + \alpha a^+ - \alpha\alpha^*); |\alpha\rangle\langle\alpha|] \quad (\text{III-2.18})$$

Podemos então reescrever a expressão (III-2.6) na seguinte forma:

$$[\hat{H}, |\alpha\rangle\langle\alpha|] = \hbar\{(\omega\alpha^* + f_q) a + (\omega\alpha + f^*) a^+ - \omega\alpha\alpha^*\} |\alpha\rangle\langle\alpha| -$$

$$- |\alpha\rangle\langle\alpha| \{(\omega\alpha^* + f_q) a + (\omega\alpha + f^*) a^+ - \omega\alpha\alpha^*\} \hbar \quad (\text{III-2.19})$$

Agora fazendo uso das seguintes propriedades

$$a |\alpha\rangle\langle\alpha| = \alpha |\alpha\rangle\langle\alpha| \rightarrow |\alpha\rangle\langle\alpha| a^+ = \alpha^* |\alpha\rangle\langle\alpha| \quad (\text{III-2.20})$$

$$a^+ |\alpha\rangle\langle\alpha| = (\alpha^* + \frac{\partial}{\partial\alpha}) |\alpha\rangle\langle\alpha| \rightarrow |\alpha\rangle\langle\alpha| a = (\alpha + \frac{\partial}{\partial\alpha^*}) |\alpha\rangle\langle\alpha| \quad (\text{III-2-21})$$

Obtemos, levando (III-2.19) em (III-2.5) a expressão:

$$\int i\hbar \frac{\partial P}{\partial t} |\alpha\rangle\langle\alpha| d^2\alpha = \int \hbar P(\alpha) \left\{ \omega \left(\frac{\alpha \partial}{\partial \alpha^*} - \alpha^* \frac{\partial}{\partial \alpha} \right) + \right. \\ \left. + (f_q^* \frac{\partial}{\partial \alpha} - f_q \frac{\partial}{\partial \alpha^*}) \right\} |\alpha\rangle\langle\alpha| d^2\alpha \quad (\text{III-2.22})$$

Finalmente, integrando por partes o lado direito, obtemos por comparação a seguinte equação diferencial:

$$\frac{\partial P(\alpha, \alpha^*, t)}{\partial t} = i\omega \left\{ \frac{\partial}{\partial \alpha} (\alpha P) - \frac{\partial}{\partial \alpha^*} (\alpha^* P) \right\} + \left\{ i f_q^* \frac{\partial P}{\partial \alpha} - i f_q \frac{\partial P}{\partial \alpha^*} \right\} \quad (\text{III-2.23})$$

(*)

que é a equação de Fokker-Planck para a função $P(\alpha, \alpha^*, t)$.

Vemos que o uso da representação de estados coerentes permitiu substituir o problema de determinar o operador densidade em um problema equivalente de estatística clássica envolvendo a solução da equação diferencial (III-2.23). É dentro deste espírito que consideramos esta representação uma simplificação pois permite o tratamento de um problema quântico através de um análogo clássico equivalente. A sequência seguinte seria obter as equações de evolução para as amplitudes dos estados coerentes (α_q) , isto é, equações de Langevin⁽¹²⁾ para α_q sujeitas a cada tipo de interação e aproximação desejadas, que está fora do objetivo deste trabalho.

Na secção seguinte apresentaremos a solução da equação acima de uma forma geral.

3) SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DE FOKKER-PLANCK

Com o objetivo de completar o desenvolvimento anterior vamos apresentar a solução da equação (III-2.23), considerando a ex-

citação f_q de maneira geral e apenas no final usaremos a expressão (III-2.4) para aplicarmos ao efeito Mössbauer.

De maneira geral podemos escrever:

$$\frac{\partial P}{\partial t}(\alpha, \alpha^*, t) = i\omega \left[\frac{\partial}{\partial \alpha} (\alpha P) - \frac{\partial}{\partial \alpha^*} (\alpha^* P) \right] + \left[i f^* \frac{\partial P}{\partial \alpha} - i f \frac{\partial P}{\partial \alpha^*} \right] \quad (\text{III-3.1})$$

onde, como vimos, o primeiro termo é devido ao campo livre ($\hat{H}_0$) e o segundo termo é devido a interação ($\hat{H}_{int}$).

Vamos fazer as seguintes mudanças de variáveis:

$$\alpha = \gamma e^{-i\omega t}, \quad \alpha^* = \gamma^* e^{+i\omega t} \quad (\text{III-3.2})$$

Desta forma obtemos as seguintes relações:

$$P(\alpha, \alpha^*, t) = Q(\gamma, \gamma^*, t) \quad (\text{III-3.3})$$

$$\frac{\partial}{\partial \alpha} = e^{i\omega t} \frac{\partial}{\partial \gamma}; \quad \frac{\partial}{\partial \alpha^*} = e^{-i\omega t} \frac{\partial}{\partial \gamma^*} \quad (\text{III-3.4})$$

$$\frac{\partial}{\partial \alpha} (\alpha) = \frac{\partial}{\partial \gamma} (\gamma); \quad \frac{\partial}{\partial \alpha^*} (\alpha^*) = \frac{\partial}{\partial \gamma^*} (\gamma^*) \quad (\text{III-3.5})$$

Assim de (III-3.3) e (III-3.4) podemos escrever:

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \frac{\partial Q}{\partial \gamma} \frac{\partial \gamma}{\partial t} + \frac{\partial Q}{\partial \gamma^*} \frac{\partial \gamma^*}{\partial t} + \frac{\partial Q}{\partial t} = i\omega \left[\frac{\partial}{\partial \gamma} (\gamma Q) - \frac{\partial}{\partial \gamma^*} (\gamma^* Q) \right] + \frac{\partial Q}{\partial t} \quad (\text{III-3.6})$$

Então usando estas relações em (III-3.1) obtemos a seguinte equação de Fokker-Planck reduzida:

$$\frac{\partial Q}{\partial t} = i f e^{i\omega t} \frac{\partial Q}{\partial \gamma} - i f^* e^{-i\omega t} \frac{\partial Q}{\partial \gamma^*} \quad (\text{III-3.7})$$

Note que esta equação é mais simples que a (III-3.1) e está relacionada apenas com a interação.

Para encontrarmos a solução da equação (III-3.7) podemos definir uma probabilidade condicional do sistema possuir os valores γ, γ^* no tempo t se no tempo $t=0$, quando ligamos a perturbação, o sistema possuía os valores γ', γ'^* . Desta forma podemos construir a probabilidade condicional inicial como uma função delta, isto é:

$$Q(\gamma, \gamma^*, 0 / \gamma', \gamma'^*, 0) = \delta(\gamma - \gamma') \delta(\gamma^* - \gamma'^*) = \lim_{\epsilon \rightarrow \infty} \frac{\epsilon}{\pi} e^{-\epsilon(\gamma - \gamma')(\gamma^* - \gamma'^*)} \quad (\text{III-3.8})$$

Assim construímos uma solução de (III-3.7), por analogia com (III-3.8) na forma:

$$Q(\gamma, \gamma^*, t / \gamma', \gamma'^*, 0) = e^{-G(t)} \quad (\text{III-3.9})$$

onde

$$G(t) = - \frac{1}{\mu(t)} [\gamma - \eta(t)] [\gamma^* - \gamma'^*(t)] + \ln \nu(t) \quad (\text{III-3.10})$$

de forma que a solução geral de (III-3.7) seja escrita:

$$Q(\gamma, \gamma^*, t) = \int Q(\gamma, \gamma^*, t / \gamma', \gamma'^*, 0) Q_0(\gamma', \gamma'^*) d^2 \gamma' \quad (\text{III-3.11})$$

sendo $Q_0(\gamma', \gamma'^*)$ a probabilidade do sistema ter os valores γ', γ'^* em $t=0$.

Substituindo (III-3.9) em (III-3.7) e igualando os coeficientes de mesmos potenciais em γ, γ^* e $\gamma \gamma^*$ obtemos: as seguintes equações diferenciais para os parâmetros de $G(t)$:

$$\frac{1}{\mu^2(t)} \frac{d\mu}{dt} = 0 \quad (\text{III-3.12-a})$$

$$\frac{1}{v(t)} \frac{dv}{dt} = 0 \quad (\text{III-3.12-b})$$

$$\frac{d\eta(t)}{dt} = -i f^* e^{i\omega t} \quad (\text{III-3.12-c})$$

$$\frac{d\eta^*(t)}{dt} = i f e^{-i\omega t} \quad (\text{III-3.12-d})$$

Por outro lado devido a condição inicial (III-3.8) temos:

$$\mu(0) = \frac{1}{\varepsilon}; \quad \eta(0) = \gamma'; \quad \eta^*(0) = \gamma'^*; \quad v(0) = \frac{\varepsilon}{\pi} \quad (\text{III-3.13})$$

Logo o conjunto de equações (III-3.12) tem as seguintes soluções:

$$\mu(t) = \mu(0) = \frac{1}{\varepsilon} \quad (\text{III-3.13-a})$$

$$v(t) = v(0) = \frac{\varepsilon}{\pi} \quad (\text{III-3.13-b})$$

$$\eta(t) = \gamma' + \bar{\beta}(t) \quad (\text{III-3.13-c})$$

$$\eta^*(t) = \gamma'^* + \bar{\beta}^*(t) \quad (\text{III-3.13-d})$$

onde

$$\bar{\beta}(t) = -i e^{i\omega t} \int_0^t f^* e^{-i\omega t'} dt' \quad (\text{III-3.14})$$

Assim a solução $Q(\gamma, \gamma^*, t)$ de acordo com (III-3.8), (III-3.9) e (III-3.13) será:

$$Q(\gamma, \gamma^*, t) = \delta(\gamma - \gamma' - \bar{\beta}(t)) \delta(\gamma^* - \gamma'^* - \bar{\beta}^*(t)) \quad (\text{III-3.15})$$

Podemos então obter a solução geral de (III-3.7), usando (III-3.15)

e (III-3.11) e integrando em γ' , isto é:

$$Q(\gamma, \gamma^*, t) = Q_0[(\gamma - \bar{\beta}(t)); (\gamma^* - \bar{\beta}^*(t))] \quad (\text{III-3.16})$$

Note que se Q_0 é uma função normalizada a 1, então Q também será, sendo que isto satisfaz automaticamente a condição de normalização para $\hat{\rho}(T_r \hat{\rho} = 1)$.

A solução da equação de Fokker-Planck original é agora imediata pois basta usarmos a mudança de variáveis (III-3.2) e obtemos;

$$P(\alpha, \alpha^*, t) = Q_0[(\alpha e^{i\omega t} - \bar{\beta}(t)); (\alpha^* e^{-i\omega t} - \bar{\beta}^*(t))] \quad (\text{III-3.17})$$

Vamos agora analisar duas formas de Q_0 de particular interesse.

CASO A - CAMPO INICIALMENTE EM UM ESTADO COERENTE PURO

Para qualquer campo em um estado puro o operador densidade deverá sempre satisfazer a conhecida relação:

$$\hat{\rho}^2 = \hat{\rho} \quad (\text{III-3.18})$$

Assim se o estado puro é um estado coerente então o operador densidade pode ser escrito:

$$\hat{\rho} = |\alpha\rangle\langle\alpha| \quad (\text{III-3.19})$$

Logo por comparação com a expressão mais geral (III-2.2) para $\hat{\rho}$, vemos que a distribuição inicial Q_0 deverá ser uma função delta, isto é:

$$Q_0(\gamma', \gamma'^*) = \delta(\gamma') \delta(\gamma'^*) \quad (\text{III-3.20})$$

onde estamos impondo a condição de evoluir do vácuo para comparação com a expressão encontrada na secção 1.

De maneira imediata chegamos a expressão da distribuição $P(\alpha)$, fazendo as substituições indicadas em (III-3.17), isto é:

$$P(\alpha, \alpha^*, t) = \delta(\alpha e^{i\omega t} - \bar{\beta}(t)) \delta(\alpha^* e^{-i\omega t} - \bar{\beta}^*(t)) \quad (\text{III-3.21})$$

Esta expressão mostra que se o sistema estava em um estado coerente puro então devido a excitação ele continuará em um estado coerente puro cuja amplitude é dada por:

$$\alpha = e^{-i\omega t} \bar{\beta}(t) \quad (\text{III-3.22})$$

De outro lado, lembrando a expressão de $\bar{\beta}(t)$ dada por (III-3.14) vemos que a amplitude pode ser escrita:

$$\alpha = \beta(t) \quad (\text{III-3.23})$$

onde

$$\beta(t) = -i \int_0^t f^* e^{-i\omega t'} dt' \quad (\text{III-3.24})$$

que coincide com a expressão (III-1.19) ou (III-1.20) se a excitação for dada por (III-2.4).

Assim (III-3.24) é outra maneira para determinarmos as amplitudes dos estados coerentes para cada tipo de excitação f desejada.

Certamente um estado puro é uma simplificação muito grande e, a seguir, consideraremos um caso mais real e incluindo os efeitos de temperatura.

CASO B - CAMPO INICIALMENTE EM UM ESTADO MISTO

Como caso mais real vamos considerar que o campo está inicialmente em um estado que é uma mistura de estados coerentes

em equilíbrio térmico. Este estado pode ser representado por uma função gaussiana da forma:

$$Q_0(\gamma', \gamma'^*) = \frac{1}{\pi \bar{n}} e^{-\frac{\gamma' \gamma'^*}{\bar{n}}} \quad (\text{III-3.25})$$

onde $\bar{n}$ é o número médio de fonons no estado coerente $|\gamma'\rangle$. Para justificar a afirmação acima vamos mostrar que esta distribuição em estados coerentes é equivalente a uma distribuição de Planck.

O operador densidade para a distribuição (III-3.25) será

$$\hat{\rho} = \frac{1}{\pi \bar{n}} \int e^{-\frac{|\gamma'|^2}{\bar{n}}} |\gamma'\rangle \langle \gamma'| d^2 \gamma' \quad (\text{III-3.26})$$

Lembrando a expressão do Capítulo 1 para $|\gamma'\rangle$, temos:

$$|\gamma'\rangle = e^{-\frac{|\gamma'|^2}{2}} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(\gamma')^m}{(m!)^{1/2}} |m\rangle \quad (\text{III-3.27})$$

Levando (III-3.27) em (III-3.26) e integrando em γ' vem:

$$\hat{\rho} = \frac{1}{(1+\bar{n})} \sum_{m=0}^{\infty} \left(\frac{\bar{n}}{1+\bar{n}}\right)^m |m\rangle \langle m| \quad (\text{III-3.28})$$

Este é um operador densidade com distribuição de Planck característica de um conjunto de osciladores harmônicos estatisticamente independentes e em equilíbrio térmico.

Desta maneira, justificada a expressão (III-3.25) obtemos analogamente ao caso A a distribuição $P(\alpha)$ como:

$$P(\alpha, \alpha^*, t) = \frac{1}{\pi \bar{n}} e^{-\frac{|\alpha - \beta(t)|^2}{\bar{n}}} \quad (\text{III-3.29})$$

Note que a nova distribuição permanece do tipo térmica, porém deslocada de um valor exatamente igual a amplitude do estado coerente formado pela excitação. De outra forma podemos dizer que a excitação cria um estado coerente superposto ao fundo térmico.

Como outra característica é interessante notar que antes da excitação, tínhamos:

$$\langle \hat{a} \rangle = T_r(\hat{\rho} \hat{a}) = \frac{1}{\pi \bar{n}} \int_{\alpha} e^{-\frac{|\alpha|^2}{\bar{n}}} d^2\alpha = 0 \quad (\text{III-3.30})$$

$$\langle \hat{a}^+ \rangle = T_r(\hat{\rho} \hat{a}^+) = \frac{1}{\pi \bar{n}} \int_{\alpha} \alpha^* e^{-\frac{|\alpha|^2}{\bar{n}}} d^2\alpha = 0 \quad (\text{III-3.31})$$

$$\langle \hat{n} \rangle = \langle \hat{a}^+ \hat{a} \rangle = T_r(\hat{\rho} (\hat{a}^+ \hat{a})) = \frac{1}{\pi \bar{n}} \int |\alpha|^2 e^{-\frac{|\alpha|^2}{\bar{n}}} d^2\alpha = \bar{n} \quad (\text{III-3.32})$$

Após a excitação a distribuição passa a ter a forma (III-3.29) e de maneira análoga, vem:

$$\langle \hat{a} \rangle = \beta(t) \quad (\text{III-3.33})$$

$$\langle \hat{a}^+ \rangle = \beta^*(t) \quad (\text{III-3.34})$$

$$\langle \hat{n} \rangle = \langle \hat{a}^+ \hat{a} \rangle = \bar{n} + |\beta(t)|^2 \quad (\text{III-3.35})$$

Assim este novo estado criado sobre o fundo térmico tem propriedades muito semelhantes a um estado coerente puro porém com o número médio de partículas diferente. Isto era de se esperar pois uma excitação tende sempre redistribuir o número de partículas a fim de levar o sistema a um novo equilíbrio.

Podemos ver também que no limite em que $T \rightarrow 0$ a distribuição (III-3.29) tende a distribuição (III-3.21) pois $\lim_{T \rightarrow 0} \bar{n} = 0$ e o estado será coerente puro.

4) Aplicação ao efeito Mössbauer

Faremos agora uma aplicação do formalismo desenvolvido nas secções anteriores no estudo de algumas características fundamentais do efeito Mössbauer. Vamos antes determinar as amplitudes estacionárias ($t \rightarrow \infty$) dos estados coerentes, escrevendo a (III-3.24) na forma:

$$\beta_{MB}(q) = -i \int_0^\infty f_q^* e^{-i\omega_q t' - \mu t'} dt' \quad (III-4.1)$$

onde estamos chamando de amplitude Mössbauer, pois ela contém todas as informações relacionadas com tal efeito, como veremos depois.

Desta forma, usando a expressão de f_q^* (III-2.4), encontraremos:

$$(\text{absorção}) - \beta_{MB}^{(a)}(q) = i \vec{k} \cdot \hat{e}_q \left(\frac{\hbar}{2mN\omega_q} \right)^{1/2} \quad (III-4.2a)$$

$$(\text{emissão}) - \beta_{MB}^{(e)}(q) = -i \vec{k} \cdot \hat{e}_q \left(\frac{\hbar}{2mN\omega_q} \right)^{1/2} \quad (III-4.2b)$$

Lembrando a expressão do operador densidade da secção anterior, para cada modo do campo, vem que:

$$\hat{\rho}_q = \frac{1}{\pi \bar{n}_q} \int e^{-\frac{|\alpha_q - \beta(q)|^2}{\bar{n}_q}} |\alpha_q\rangle \langle \alpha_q| d^2 \alpha_q \quad (III-4.3)$$

Usando as expressões acima podemos então calcular os seguintes valores médios:

$$\langle \hat{a}_q \rangle = \text{Tr}(\hat{\rho}_q \hat{a}_q) = \beta_{MB}(q) \quad (III-4.4)$$

$$\langle \hat{a}_q^\dagger \rangle = \text{Tr}(\hat{\rho}_q \hat{a}_q^\dagger) = \beta_{MB}^*(q) \quad (III-4.5)$$

$$\langle \hat{a}_q^+ \hat{a}_q \rangle = \text{Tr}(\hat{\rho}_q \hat{a}_q^+ \hat{a}_q) = \bar{n}_q + |\beta_{MB}(q)|^2 \quad (\text{III-4.6})$$

Podemos agora obter as regras de soma para o momento e energia transferidos ao cristal pela absorção ou emissão de um gamma por um núcleo.

Para o ℓ -ésimo núcleo, temos:

$$\langle \hat{P}(\ell) \rangle = \sum_q \frac{\hat{e}_q}{i} \left(\frac{\hbar}{2mNw_q} \right)^{1/2} (\langle \hat{a}_q \rangle e^{i\vec{q} \cdot \vec{\ell}} - \langle \hat{a}_q^+ \rangle e^{-i\vec{q} \cdot \vec{\ell}}) \quad (\text{III-4.7})$$

Usando as expressões de $\beta_{MB}(q)$ e $\beta_{MB}^*(q)$, encontraremos:

$$\langle \hat{P}(\ell) \rangle = \pm \frac{1}{2N} \sum_q \hat{e}_q (\hbar \vec{k} \cdot \hat{e}_q) (e^{i\vec{q} \cdot \vec{\ell}} + e^{-i\vec{q} \cdot \vec{\ell}}) \quad (\text{III-4.8})$$

onde + (-) corresponde a absorção (emissão). Tornando o problema unidimensional com $\hat{k}$ paralelo a $\hat{e}_q$, vem:

$$\langle \hat{P}(\ell) \rangle = \pm \hbar k \delta(\ell, 0) \quad (\text{III-4.9})$$

Logo, o momento total transferido ao cristal, será:

$$P_c = \sum_{\ell} \langle \hat{P}(\ell) \rangle = \pm \hbar k \quad (\text{III-4.10})$$

que é o momento transferido ao centro de massa do cristal.

Por outro lado, a energia média do sistema com interação (campo de fonons), será:

$$\langle \hat{H} \rangle = \sum_q \{ \hbar w_q \langle \hat{a}_q^+ \hat{a}_q \rangle + \hbar f_q \langle \hat{a}_q \rangle + \hbar f_q^* \langle \hat{a}_q^+ \rangle \} \quad (\text{III-4.11})$$

Após as substituições de β_q e f_q , encontraremos:

$$\langle \hat{H} \rangle = \sum_q \hbar \omega_q \bar{n}_q + 3 \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} \right) \times \frac{1}{N} \sum_q (\vec{k} \cdot \vec{e}_q)^2 \quad (\text{III-4.12})$$

Tornando o problema unidimensional, como antes, vem:

$$\langle \hat{H} \rangle = \langle \hat{H}_0 \rangle + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (\text{III-4.13})$$

Desta forma vemos que a energia média transferida à rede pela interação será:

$$\Delta H = \langle \hat{H} \rangle - \langle \hat{H}_0 \rangle = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = R \quad (\text{III-4.14})$$

isto é, numericamente igual a energia de récuo clássica de um núcleo livre. Note que a expressão acima é a regra de soma de Lipkin apresentada no capítulo II.

Uma das principais motivações de usarmos uma representação não convencional como a representação de estados coerentes foi procurar entender o efeito Mössbauer como um processo de transição de zero fonon que não podia ser claramente conseguido na representação do capítulo II, pois a projeção de um estado $|n\rangle$ sobre o estado de zero fonon $|0\rangle$ não teria o significado desejado, pela ortogonalidade destes estados. Assim, usando a representação de estados coerentes, vamos calcular a função de espalhamento $F_s(\vec{k}, t)$, que contém todas as informações sobre as probabilidades de transições, mostraremos então que a contribuição Mössbauer ($F_s(\vec{k}, \infty)$) é a projeção do estado coerente $|\beta_q\rangle$ sobre o estado de zero fonon ($|0\rangle$).

Antes porém, comparando as expressões (III-1.9 e III-1.14) com (II-4.6) podemos escrever a função de espalhamento como:

$$F_s(\vec{k}, t) = \bar{e} \frac{iR}{\hbar N} \sum_q (\vec{k} \cdot \vec{e}_q)^2 \frac{\sin \omega_q t}{\omega_q} \text{Tr}(\hat{\rho} \hat{T}) \quad (\text{III-4.15})$$

onde $\hat{T}$ é dada por (III-1.13), e $\hat{\rho}$ um produto da forma (III-4.3) e , portanto é suficiente calcularmos:

$$\text{Tr}(\hat{\rho}_q \hat{T}_q(\beta_q)) = \frac{1}{\pi \bar{n}_q} \int e^{-\frac{|\alpha_q - \beta_q|^2}{\bar{n}_q}} \langle \alpha_q | T_q(\beta_q) | \alpha_q \rangle d^2 \alpha_q \quad (\text{III-4.16})$$

Lembrando que

$$T(\alpha_1) T(\alpha_2) = e^{\alpha_1 a^\dagger - \alpha_1^* a} e^{\alpha_2 a^\dagger - \alpha_2^* a} = T(\alpha_1 + \alpha_2) e^{\frac{1}{2} (\alpha_1^* \alpha_2 - \alpha_1 \alpha_2^*)} \quad (\text{III-4.17})$$

$$\langle 0 | \alpha \rangle = e^{-\frac{1}{2} |\alpha|^2} \quad (\text{III-4.18})$$

podemos escrever o elemento de matriz dentro da integral como:

$$\begin{aligned} \langle \alpha_q | \hat{T}_q(\beta_q) | \alpha_q \rangle &= \langle 0 | T_q(-\alpha_q) T_q(\beta_q) T_q(\alpha_q) \rangle = \langle 0 | \beta_q \rangle e^{(\beta_q \alpha_q^* - \beta_q^* \alpha_q)} \\ \langle \alpha_q | T_q(\beta_q) | \alpha_q \rangle &= e^{-\frac{1}{2} |\beta_q|^2} e^{(\beta_q \alpha_q^* - \beta_q^* \alpha_q)} \quad (\text{III-4.19}) \end{aligned}$$

Levando (III-4.19) em (III-4.16) e após a expansão das exponenciais, e fazendo a mudança de variáveis

$$(\alpha_q - \beta_q) = (\bar{n}_q)^{1/2} \gamma_q \quad (\text{III-4.20})$$

obtemos:

$$\text{Tr}(\hat{\rho}_q T_q(\beta_q)) = e^{-\frac{1}{2} |\beta_q|^2} \sum_{r,s} \frac{(\bar{n}_q)^{\frac{r+s}{2}}}{r! s!} (\beta_q)^r (-\beta_q^*)^s \frac{1}{\pi} \int \gamma_q^{*r} \gamma_q^s e^{-|\gamma_q|^2} d^2 \gamma_q \quad (\text{III-4.21})$$

Calculando a integral, e somando em r e s, vem:

$$\text{Tr}(\hat{\rho}_q \hat{T}_q(\beta_q)) = e^{-\frac{1}{2}|\beta_q|^2} e^{-|\beta_q|^2 \bar{n}_q} = e^{-|\beta_q|^2 (\bar{n}_q + 1/2)} \quad (\text{III-4.22})$$

Então, para todos os modos do campo, temos:

$$\text{Tr}(\hat{\rho} \hat{T}) = e^{-\sum_q |\beta_q|^2 (\bar{n}_q + 1/2)} \quad (\text{III-4.23})$$

Assim a função de espalhamento $F_s(\vec{k}, t)$, para o valor de $\beta_q(t)$ encontrado, será escrita:

$$F_s(\vec{k}, t) = e^{-\frac{R}{\hbar N} \sum_q \left(\frac{\hat{k} \cdot \hat{e}_q}{w_q} \right)^2 \left[(2\bar{n}_q + 1) \cos w_q t \pm i \sin w_q t \right]} \quad (\text{III-4.24})$$

onde + (-) para a emissão (absorção).

Desta forma vemos que a contribuição Mössbauer será:

$$F_s(\vec{k}, \infty) = e^{-\frac{R}{\hbar N} \sum_q \left(\frac{\hat{k} \cdot \hat{e}_q}{w_q} \right)^2 (2\bar{n}_q + 1)} \quad (\text{III-4.25})$$

Assim, no limite $T \rightarrow 0$, vemos claramente que:

$$F_s(\vec{k}, \infty) = e^{-\sum_q |\beta_{MB}(q)|^2} = |\langle \{0\} | \{ \beta_{MB}(q) \} \rangle|^2 = \prod_q |\langle 0 | \beta_{MB}(q) \rangle|^2 \quad (\text{III-4.26})$$

que é a projeção do estado $|\{ \beta_{MB} \} \rangle$ sobre o estado de zero fonons, isto é, a probabilidade de transição, pela absorção ou emissão, de um gama por um núcleo, sem a consequente criação de fonons. Como não há criação de fonons a transição Mössbauer não poderá contribuir com transferência de energia à rede, ou seja, ao cristal. Con-
vém notar também que na expressão (III-4.25) está explícito o papel da temperatura, através de $\bar{n}_q$, mostrando que sua diminuição umenta a probabilidade de transição Mössbauer. Desta maneira notamos

que a representação usada neste trabalho é a mais natural para o estudo deste efeito, justificando indiretamente o seu alto grau de precisão como técnica de medição , uma vez que a relação de incerteza nesta representação é dada por:

$$\Delta P \Delta U = \frac{1}{N} \sum_q (\bar{n}_q + 1/2) \hbar \quad (\text{III-4.27})$$

Note outra vez o papel indesejável da temperatura, diminuindo a precisão de uma medida (no limite $T \rightarrow 0$ temos incerteza mínima). Outro fato a se ressaltar também é que esta representação correspondendo, de um lado, a um tratamento semi-clássico contém, por outro lado, propriedades e informações de efeitos puramente quânticos, como o efeito Mössbauer, o que lhe confere um futuro muito amplo, pelo menos na teoria de medidas.

COMENTÁRIOS GERAIS E SUGESTÕES

Em toda bibliografia existente notamos sempre uma tendência a evitar o uso de representações não-ortogonais em problemas envolvendo espaços vetoriais tanto a 3-dimensões como para funções a N-dimensões. Esta tendência foi motivada por algumas facilidades e comodidades apresentadas pelas representações ortogonais e pela inexistência de uma representação não-ortogonal para os espaços de funções. Desta maneira o tratamento de problemas envolvendo campos ficou restrito apenas a formalismos baseados em representações ortogonais. Em 1963, R.J.Glauber⁽²⁾ introduziu uma representação não-ortogonal para o campo eletromagnético que denominou estados coerentes de fons. Em 1969, S.M.Rezende e N.Zagury⁽¹¹⁾ introduziram os estados coerentes de magnons. Na realidade os estados coerentes formam uma representação comum a qualquer campo bosonico.

Por outro lado podemos notar que as relações obtidas no estudo do efeito Mössbauer, usando a representação de estados coerentes são extremamente mais simples que as obtidas com as representações convencionais. Como exemplo, basta compararmos as expressões da energia e momento transferidos ao cristal. Mais ainda, a probabilidade de transição de zero-fonon não pode ser obtida usando a representação do número de ocupação do capítulo II. Reconhecemos que esta é uma contribuição muito pequena ao efeito Mössbauer mas entendemos que é também fundamental.

De maneira geral as simplificações obtidas tiveram como preço as dificuldades na determinação da função distribuição $P(\alpha)$ associada ao operador densidade. Hoje porém as relações entre equações de Fokker-Planck e Langevin estão bem estabelecidas e suas soluções bem estudadas na teoria de processos estocásticos⁽¹²⁾. Desta maneira, fenômenos lineares podem ser facilmente tratados como no caso do efeito Mössbauer; um outro exemplo seria o Polaron cuja hamiltoniana proposta por Frölich tem a mesma forma que a equação III-2.4.

Como este trabalho ficou restrito a excitações lineares, seria interessante desenvolver o formalismo para o tratamento de pro

cessos não-lineares, obtendo as equações de Langevin para as amplitudes (III-3.12-c) e a equação de Fokker-Planck através das equações de evolução dos operadores (Heisenberg).

Queremos por outro lado salientar que existe grande analogia entre o tratamento de campos com funções de Green e com estados coerentes. Estas analogias podem ser vistas no seguinte desenvolvimento. No capítulo I definimos função de correlação de primeira ordem como:

$$G_{\lambda_1 \lambda_2}^{11}(x_1, x_2) = \text{Tr} (\hat{\rho} \hat{U}_{\lambda_1}^{(-)}(x_1) \cdot \hat{U}_{\lambda_2}^{(+)}(x_2)) \quad (1)$$

onde explicitamos os índices de polarização.

Usando ondas planas temos:

$$G_{\lambda_1, \lambda_2}^{11}(x_1, x_2) = \sum_q \frac{\hat{e}_{\lambda_1}(q) \cdot \hat{e}_{\lambda_2}(q)}{2mN} e^{-i\vec{q} \cdot (\vec{r}_1 - \vec{r}_2) + i\omega_q(t_1 - t_2)} \frac{(\text{Tr} \hat{\rho} \hat{a}_q^+ \hat{a}_q)}{\omega_q} \quad (2)$$

pois, devido ao fato de $P(\alpha)$ ser gaussiana,

$$\text{Tr}(\hat{\rho} \hat{a}_q^+ \hat{a}_q) = \text{Tr}(\hat{\rho} \hat{a}_q^+ \hat{a}_q) \delta(q, q') = \langle n_q \rangle \delta_{qq'} \quad (3)$$

Assim a expressão (2) para o campo com interação ficará:

$$G_{\lambda_1 \lambda_2}^{11}(x_1, x_2) = \sum_q \frac{\hat{e}_{\lambda_1}(q) \cdot \hat{e}_{\lambda_2}(q)}{2mN} e^{-i\vec{q} \cdot (\vec{r}_1 - \vec{r}_2) + i\omega_q(t_1 - t_2)} \left[\frac{\overline{n_q}}{\omega_q} + \frac{|\beta_q|^2}{\omega_q} \right] \quad (4)$$

pois, vimos no capítulo III que:

$$\langle n_q \rangle = \text{Tr}(\hat{\rho} \hat{a}_q^+ \hat{a}_q) = \overline{n_q} + |\beta_q|^2 \quad (5)$$

sendo β_q determinado pela interação.

Analisando a expressão entre colchetes notamos que ela é análoga a função de Green diagonal $G(q)$, para bosons⁽¹³⁾.

Devido ainda ao fato de $P(\alpha)$ ser gaussiana, temos:

$$\begin{aligned} \langle \hat{a}_{q_1}^+ \hat{a}_{q_2}^+ \hat{a}_{q_3} \hat{a}_{q_4} \rangle &= \langle n_{q_1} \rangle \langle n_{q_2} \rangle \delta(q_1 q_3) \delta(q_2 q_4) + \\ &+ \langle n_{q_3} \rangle \langle n_{q_4} \rangle \delta(q_1 q_4) \delta(q_2 q_3) . \end{aligned} \quad (6)$$

Então a função de correlação de 2a. ordem terá a seguinte expressão:

$$G^{22}(x_1, x_2, x_3, x_4) = G^{11}(x_1, x_3) G^{11}(x_2, x_4) + G^{11}(x_1, x_4) G^{11}(x_2, x_3) \quad (7)$$

Note que esta é uma forma do teorema de Wick para funções de Green⁽¹³⁾. Mais ainda, o número total de partículas em um sistema pode ser calculado, pois:

$$N = \sum_q \langle \hat{a}_q^+ \hat{a}_q \rangle = \sum_q (\bar{n}_q + |\beta_q|^2) = N_0 + \sum_q |\beta_q|^2 \quad (8)$$

Note também a semelhança com o tratamento devido a Bogolinbov⁽¹³⁾, usando transformações canônicas. Isto era de se esperar pois um estado coerente corresponde a um deslocamento no plano complexo dos operadores $\hat{a}$ e $\hat{a}^+$ da forma:

$$\hat{T}^+(\alpha) \hat{a} \hat{T}(\alpha) = \hat{T}(-\alpha) \hat{a} \hat{T}(\alpha) = \hat{a} + \alpha \quad (9)$$

$$\hat{T}^+(\alpha) \hat{a}^+ \hat{T}(\alpha) = \hat{T}(-\alpha) \hat{a}^+ \hat{T}(\alpha) = \hat{a}^+ + \alpha^* \quad (10)$$

onde $\hat{T}(\alpha)$ é o operador criação do estado $|\alpha\rangle$, isto é:

$$\hat{T}(\alpha) |0\rangle = |\alpha\rangle \quad (11)$$

Para finalizar, queremos fazer apenas uma observação.

Enquanto no formalismo de função de Green o operador densidade usado é aquele obtido para o campo sem interação aqui o operador $\hat{\rho}$ contém em si o termo devido a interação, isto é, tem a forma:

$$\hat{\rho}_q = \frac{1}{\pi n_q} \int e^{-\frac{|\alpha_q - \beta_q|^2}{n_q}} |\alpha_q\rangle \langle \alpha_q| d^2\alpha \quad (12)$$

com β_q determinado pela interação.

REFERÊNCIAS

- (1) A.S.DAVIDOV - Quantum Mechanics- Addison-Wesley, Inc.
- (2) R.J. GLAUBER - Phys.Review- 131, nº 6- 2766 (1963).
- (3) H.M.NUSSENZEVEIG - Introdução à Ótica Quântica, PUC-RJ, (jan. 1968).
- (4) A.ABRAGAM - L'Efect Mössbauer et Ses Aplicacions a L'Etude Des Champs Internes - Gordon and Breach.
- (5) T.A.BAK - Phonons and Phonon Interactions - W.A.Benjamin, Inc.
- (6) A.MESSIAH - Quantum Mechanics - vol.I- John Wiley & Sons, Inc.
- (7) J.SCHWINGER - Phys.Rev. 75, 651 (1949).
- (8) P.A.M.DIRAC - Rev. of Mod.Phys. 17,2 195 (1945) - On the Analogy Between Classical and Quantum Mechanics.
- (9) W.H.LOUISELL - Quantum Statistical Properties of Radiation.
- (10) A.RAMAN, K.S.SINGWI and A.SJÖHANDER- Phys.Rev. 126,3, 986 , (1962).
- (11) S.M.REZENDE e N.ZAGURY - Phys.Lett. A, 29, 47 (1969).
- (12) H.HAKEN - Rev.Mod.Phys. vol.47, nº 11, (Jan.1975).
- (13) A.L.FETTER and J.D.WALECKA - Quantum Theory of Many-Particle Systems - McGraw-Hill, Inc.