

UNA FORMA EXPLICITA DE TENER EN CUENTA LA INTERACCION ELECTRON-POLARIZABILIDAD IONICA.

A. Greco y O. Zandron

Facultad de Ciencias Exactas, Ingeniería y Agrimensura, Universidad Nacional de Rosario, Instituto de Física Rosario, Bv 27 de Febrero 210 Bis, 2000 Rosario.

En este trabajo se propone un modelo en el cual se tiene en cuenta explícitamente la interacción de los electrones con la polarizabilidad iónica. Para ello se extiende el modelo de capas, el cual tiene en cuenta los efectos de polarizabilidad iónica, permitiendo que los electrones interactúen tanto con los carozos iónicos como con las capas. Debido a la naturaleza vinculada del modelo de capas, la incorporación de los electrones debe hacerse a nivel clásico usando variables de Grassmann.

INTRODUCCION

Para tratar la interacción electrón-fonón se utiliza con frecuencia el Hamiltoniano de Fröhlich^[1]. En este modelo los electrones interactúan con los iones rígidos los cuales vibran alrededor de su posición de equilibrio. Es bien conocido que cuando los iones se desplazan, las capas electrónicas de éstos se deforman pudiendo dar lugar a efectos de interacción entre electrones y estas deformaciones. Estos efectos, debidos a la polarizabilidad electrónica de los iones, pueden ser tenidos en cuenta dentro del marco del Hamiltoniano de Fröhlich introduciendo empíricamente la constante dieléctrica de alta frecuencia en el acoplamiento electrón-fonón. Es de esperar sin embargo, que la interacción de los electrones con la deformabilidad iónica dé lugar a efectos que no puedan ser tenidos en cuenta en la aproximación mencionada anteriormente.

En este trabajo se presenta un modelo el cual tiene en cuenta en forma explícita la interacción de los electrones con la deformabilidad electrónica del ión. Para este propósito se extenderá el modelo de capas^[2], el cual contiene los efectos de las polarizabilidades iónicas, permitiendo no solo la interacción de los electrones con los iones sino también la interacción de los electrones con la coordenada de capas v . Dado que el modelo de capas es un sistema Hamiltoniano vinculado, los grados de libertad electrónicos no pueden incorporarse a nivel cuántico de la misma forma en que se incorporan en un modelo de iones rígidos. Debido a esto los grados de libertad electrónicos deben incorporarse primeramente a nivel clásico, como variables de Grassmann^[3]. El modelo de capas extendido (M.C.E) así introducido, debe cuantificarse luego de estudiar su tratamiento clá-

sico. El tratamiento clásico de sistemas con grados de libertad bosónicos y fermiónicos se conoce con el nombre de pseudomecánica^[4].

El Lagrangiano que describe la dinámica clásica del MCE es^[5]:

$$L = \frac{1}{2} \dot{u}^i M_{ij} \dot{u}^j + \frac{i}{2} (\xi_\alpha^+ \dot{\xi}^\alpha - \dot{\xi}_\alpha^+ \xi^\alpha) - \phi(u, v, \xi, \xi^+) \quad (1)$$

El Lagrangiano (1) es una extensión del Lagrangiano del modelo de capas al cual se le han incorporado los grados de libertad fermiónico mediante un conjunto de variables ξ , las cuales verifican un álgebra de Grassmann. Estos grados de libertad fermiónicos pueden interactuar tanto con las coordenadas de carozos u como con las coordenadas de capas v . Este hecho se pone de manifiesto con la presencia del potencial $\phi(u, v, \xi, \xi^+)$. El índice genérico α en las variables ξ , representa por ejemplo, sitio, orbital o momento según sea la representación usada. Además este índice puede contener información sobre el espín.

La descripción clásica del modelo en el marco de la teoría de los sistemas Hamiltonianos vinculados^[5], se obtiene considerando los siguientes vínculos primarios que resultan del Lagrangiana (1):

$$\phi^j \equiv P_{v_j} \approx 0 \quad (2)$$

$$\psi_\alpha^+ \equiv \Pi_\alpha^+ + (i/2) \xi_\alpha^+ \approx 0 \quad (3)$$

$$\psi^\alpha \equiv \Pi^\alpha + (i/2) \xi^\alpha \approx 0 \quad (4)$$

La preservación en el tiempo de los vínculos

primarios lleva a las siguientes ecuaciones:

$$\dot{\phi}^j = \{ \phi^j, H_T \}_{CP} = - \frac{\partial \Phi}{\partial v_j} = 0 \quad (5)$$

$$\dot{\psi}_\alpha^* \{ \psi_\alpha^*, H_T \}_{CP} = - \frac{\partial \Phi}{\partial \xi_\alpha} + i F_\alpha^{1*} \approx 0 \quad (6)$$

$$\dot{\psi}^\alpha = \{ \psi^\alpha, H_T \}_{CP} = - \frac{\partial \Phi}{\partial \xi_\alpha^*} - i F^{2\alpha} \approx 0 \quad (7)$$

Donde $\{ , \}_{CP}$ denota corchetes de Poisson graduados^[4].

Las ecuaciones (6) y (7) determinan unívocamente los multiplicadores fermiónicos F_α^{1*} y $F^{2\alpha}$, mientras que la ecuación (5) define el vínculo secundario:

$$\chi^j \equiv - \frac{\partial \Phi}{\partial v_j} \approx 0 \quad (8)$$

El requerimiento de consistencia sobre el vínculo secundario define unívocamente el multiplicador de Lagrange Bosónico B.

Finalmente, el sistema se describe mediante el Hamiltoniano:

$$H_T = H_{can} + \phi^i B_i + F_\alpha^{1*} \psi^\alpha + \psi_\alpha^* F^{2\alpha} \quad (9)$$

el cual es una cantidad dinámica de primera clase, y el conjunto de vínculos (2), (3), (4) y (8), los cuales son todos de segunda clase. La parte H_{can} está dada por:

$$H_{can} = \frac{1}{2} P_u (M^{-1})^{ij} P_v + \Phi(u, v, \xi, \xi^*) \quad (10)$$

El siguiente paso es calcular los corchetes de Dirac Graduados. Un corchete de Dirac graduado $\{ , \}^*$ entre dos cantidades O_1 y O_2 se define de la siguiente manera:

$$\{ O_1, O_2 \}^* = \{ O_1, O_2 \}_{CP} - \{ O_1, \phi_a \}_{CP} \Delta^{ab} \{ \phi_b, O_2 \}_{CP} \quad (11)$$

Las cantidades ϕ_a son las componentes del vector formado por los vínculos:

$$\phi = \begin{pmatrix} P_v \\ \chi^j \\ \psi^\alpha \\ \psi_\alpha^* \end{pmatrix} \quad (12)$$

mientras que la matriz Δ está definida a partir de la siguiente ecuación:

$$\Delta^{ab} \{ \phi_b, \phi_c \}_{CP} = \delta_c^a \quad (13)$$

La matriz Δ^{ab} tendrá elementos bosónicos y fermiónicos. A toda matriz con elementos bosónicos y fermiónicos se la conoce con el nombre de supermatriz^[6].

Luego de computados los corchetes de Dirac, las relaciones de conmutación graduadas entre dos operadores quedan definidas por:

$$\{ \hat{O}_1, \hat{O}_2 \} = i\hbar \{ O_1, O_2 \}^* \quad (14)$$

El punto de partida para el cálculo perturbativo será la función de partición cuántica del sistema. Debido a que el sistema tiene vínculos de segunda clase, esta debe calcularse siguiendo el método dado por Senjanovic^[7]:

$$Z = \int Du Dv D\xi D\xi^* D\eta D\eta^* D\lambda \exp \left\{ \frac{1}{\hbar} S' (u, v, \lambda, \xi, \xi^*, \eta^*) \right\} \quad (15)$$

donde

$$S' = S_E (u, v, \xi, \xi^*) + \int_0^{\beta\hbar} d\tau \left[\lambda_i \chi^i + \eta_i^* S^{ij} \eta_j \right] \quad (16)$$

$$S_E (u, v, \xi, \xi^*) = \int_0^{\beta\hbar} d\tau \left[\frac{1}{2} (\xi_\alpha^* \dot{\xi}^\alpha - \dot{\xi}_\alpha^* \xi^\alpha) + \frac{1}{2} \dot{u}^i M_{ij} \dot{u}^j + \Phi (u, v, \xi, \xi^*) \right] \quad (17)$$

En la expresión (15), mientras la integral de camino para las variables bosónicas se realiza sobre todos los caminos periódicos, la integral para las variables fermiónicas se realiza sobre

todos los caminos antiperiódicos.

Análogamente a lo realizado en Ref. [8], también pueden construirse las reglas de Feynman para el MCE. Un desarrollo más detallado de este trabajo puede encontrarse en Ref. [9].

REFERENCIAS

- [1] G.Mahan, *Many-Particle Physics*, Plenum Press, New York, 1981.
- [2] W. Cochran, *Crit. Rev. Solid State Sc.* 2 (1971) 1.
- [3] Berezin F., 1966, *The Method of Second Quantization* (Pure and Applied Physics).
- [4] Sundermeyer K., 1982, *Constrained Dynamics*, Springer-Verlag.
- [5] Dirac P., 1964, *Lectures on Quantum Mechanics*, New York, Academic Press.
- [6] van Nieuwenhuizen P. 1981, *Phys. Rep.* 68 189.
De Witt. B., 1984, *"Supermanifolds"*, Cambridge University Press.
- [7] Senjanovic P., 1976, *Ann. Phys.*, NY 100 227.
- [8] Dobry A, Greco A. and Zandron O., 1991, *Phys. Rev.* B43 1084.
- [9] A. Greco and O. Zandron, *J. Phys. A: Math. Gen.* 24, 000 (1991).