TEORIA DE PERTURBACIONES PARA UN CRISTAL IONICO DESCRIPTO POR UN MODELO DE CAPAS.

A. Dobry, A. Greco y O. Zandrón.
Instituto de Física Rosario, Facultad de Ciencias Exactas, Ingeniería y Agrimensura, Universidad Nacional de Rosario, Av.Pellegrini 250, 2000 Rosario.

En este trabajo construimos una teoría perturbativa útil para calcular la función respuesta de fonón y propiedades termodinámicas de sólidos iónicos descriptos por un modelo de capas anarmónico.

INTRODUCCION

En el estudio de la dinámica de la red de cristales iónicos el modelo de capas es utilizado frecuentemente (1). En este modelo los electrones externos de los iones son representados como capas cargadas sin masa, incorporando de esta forma los efectos de polarizabilidad. Esto introduce vínculos en el sistema que sólo pueden resolverse exactamente en aproximación armónica. En este trabajo construimos una teoría de perturbaciones, utilizando técnicas diagramáticas para calcular la función respuesta de fonón y las propiedades termodinámicas de cristales iónicos descriptos por un modelo de capas anarmónico. Para este propósito tomaremos como punto de partida la función de partición definida recientemente (2) para una situación anarmónica general.

EVALUACION PERTURBATIVA

La función de partición cuántica viene dada por la siguiente integral de Camino (2):

$$Z=\int Du\, Dv\, D\lambda\, D\eta\, D\eta^{+}\exp[-S'(u,v,\lambda,\eta,\eta^{+})/h\}, \qquad (2.1)$$

donde la acción efectiva S' está definida por

$$S'(u,v,\lambda,\eta,\eta^{+}) = S_E(u,v) + \int_o^{\beta_h} d\tau\, [\lambda_i\, \chi^i + \eta_i^{+}\, \zeta^{ij}\eta_j] \qquad (2.2)$$

En la expresión (2.2) tenemos :

$$S_E(u,v) = \int_o^{\beta_h} d\tau\, [\dot{u}^i M_{ij}\, \dot{u}^j + \phi(u,v)]/2 \qquad (2.3.a)$$

$$\zeta_{ij}(u,v) = \partial^2\phi / \partial v_i\, \partial v_j \qquad (2.3.b)$$

$$\chi^j(u,v) \equiv -\partial\phi / \partial v_j \qquad (2.3.c)$$

Es importante tener en cuenta que las coordenadas η en (2.1) son variables de Grassman (2).
El potencial ϕ (u, v) será en general un polinomio en las variables u^i y v_j y por lo tanto la expresión (2.2) será un polinomio en las variables u,v, η, λ y η^+.
Si definimos la cantidad

$$\chi(i) = \begin{bmatrix} u^i \\ v_i \\ \lambda_i \end{bmatrix}, \qquad (2.4)$$

la expresión (2.2) queda escrita en términos de :

$$A_{\alpha\beta..\gamma}(i,j,...,k)\, \chi^{\alpha}(i)\, \chi^{\beta}(j)...\chi^{\gamma}(k) \qquad (2.5)$$

$$B_{\alpha\beta..\gamma}(i,j,...,k,h,p)\, \chi^{\alpha}(i)\, \chi^{\beta}(j)...\chi^{\gamma}(k)\, \eta_h^{+}\eta_p \qquad (2.6)$$

En las expresiones (2.5) y (2.6) la suma sobre índices (tanto griegos como latinos) ha sido omitida. Los índices griegos corren de 1 a 3. En los índices latinos, además de la suma sobre sitios, hay una integral entre 0 y β_h en la variable continua τ.
Las matrices A y B son tales que, al desarrollar las expresiones (2.5) y (2.6), obtenemos la expresión (2.2) para el dado potencial.
En este punto podemos dar las reglas de Feynman de nuestra teoría. Es decir, la parte armónica de la acción nos permitirá definir el propagador y las partes restantes serán representadas por vértices (3).
La parte armónica ϕ_o del potencial ϕ es:

$$\phi_o(u,v) = 1/2\, R_{ij}\, u^i u^j + T_i^j\, u^i v_j + 1/2\, S^{ij}\, v_i\, v_j \qquad (2.7)$$

Usando (2.4) y (2.7) la expresión (2.2) queda :

$$S'_o(u,v) = 1/2\,\chi^{\alpha}(i)[G^{-1}(i,j)]_{\alpha\beta}\,\chi^{\beta}(j) + \eta^{+}_{i}\,S^{ij}\,\eta_{j} \quad (2.8)$$

donde la matriz G^{-1} está dada por :

$$G^{-1} = \begin{bmatrix} g^{-1} & T & T \\ T^{+} & S & S \\ T^{+} & S & O \end{bmatrix} \quad (2.9)$$

De la expresión (2.8) vemos que tenemos un propagador para el campo χ y otro para el campo η. Estos propagadores son :

$$G = \begin{bmatrix} g & gC^{+} & O \\ Cg & CgC^{+} & S^{-1} \\ O & S^{-1} & -S^{-1} \end{bmatrix} \quad (2.10)$$

para el campo χ y S^{-1} para el campo η.
En (2.10) tenemos

$$g^{ij}(\tau) = (M_{ij}\,\partial^2_{\tau} + D_{ij})^{-1} \quad (2.11)$$

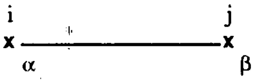
$$C_{ij} = -S^{-1}_{ik}\,(T^{\dagger})^{k}_{j} \quad (2.12)$$

$$D_{ij} = R_{ij} - T^{k}_{i}\,S^{-1}_{kl}\,(T^{\dagger})^{l}_{j} \quad (2.13)$$

La expresión (2.13) es la matriz dinámica del modelo de capas. Con estas consideraciones las reglas de Feynman son :

I) Propagadores

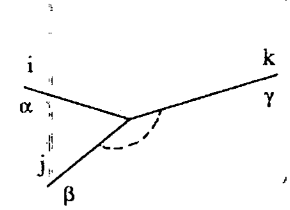
$G_{\alpha\beta}(i,j)$:



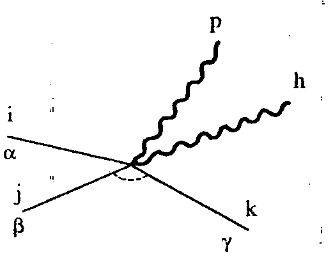
S^{-1}_{ij}:

II) Vértices

(-1) $\frac{1}{n!}A_{\alpha\beta\ldots\gamma}(i,j,\ldots,k)$



(-1) $B_{\alpha\beta\ldots\gamma}(i,j,\ldots,k,h,p)$



III) Cada diagrama debe ser multiplicado por un signo menos por cada " loop" en la variable Grassmaniana η.
IV) Cada diagrama debe ser multiplicado por el correspondiente factor topológico.
V) La suma sobre los índices internos (tanto griegos como latinos) debe hacerse.
VI) Las patas externas pueden tomar solo el valor α=1.
Luego de calculado un dado diagrama, este se pasa al espacio recíproco en la forma convencional (4) y la corrección a la frecuencia y tiempo de vida media del fonón se hacen de la misma manera que en la teoría de iones rígidos (4).
Al igual que en las teorías de iones rígidos, los diagramas de vacío nos llevan al cálculo de propiedades termodinámicas.
Una versión más amplia de este trabajo, junto al ensayo y aplicación de nuestra diagramática a un modelo particular, se encuentran en referencia (5).

REFERENCIAS

(1) W. Cochran , Crit. Rev. Solid State Sc. 2 (1971) 1.
(2) A. Dobry and A. Greco , J.Phys. A. 23 (1990) 567.
(3) G. t ' Hooft and M. Velman , "Diagramar" CERN - Genéve (1973).
(4) S. Califano , V. Schettino and N. Neto , " Lattice dynamics of molecular crystals" ,Springer Vlg. 1981.
(5) A. Dobry , A. Greco and O. Zandron , Phys. Rev. B (aceptado para su publicación, 1990)