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

POLARON SUPERFICIAL: POSSÍVEL
EXISTÊNCIA DE UMA TRANSIÇÃO
DE FASE

EDSON LUIS DE BODAS

Dissertação apresentada ao Instituto de Física e Química de São Carlos, USP, para obtenção do título de Mestre em Física Básica.

Orientador: Prof.Dr. Oscar Hipólito

São Carlos

-1982-

MEMBROS DA COMISSÃO JULGADORA DA DISSERTAÇÃO DE MESTRADO DE _____

Edson Luis de Bodas

APRESENTADA AO INSTITUTO DE FÍSICA E QUÍMICA DE SÃO CARLOS, DA
UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO, EM 28 DE junho DE 198².

COMISSÃO JULGADORA:

Dr. Oscar Hipólito - Orientador

Dr. Luiz Nunes de Oliveira

Dr. Francisco Cesar de Sá Barreto

A meus pais,
Geraldo (em memória) e Zuinir,
e irmãos, Pedro Rubens, Maria
Inêz, Antonia Aparecida e
José Geraldo.

AGRADEÇO,

Ao Prof.Dr. Oscar Hipólito, que me orientou neste trabalho, por seus ensinamentos, dedicação e paciência.

À Profa.Dra. Vera B.F. Campos, pelo incentivo e apoio.

Aos meus colegas, pelo estímulo e amizade, em especial ao Hidembergue e Caliri, pelo apoio e discussões proveitosas.

A todo o Departamento de Física do IFQSC e da UFSCar, pelo carinho que sempre recebi.

Ao Valdeci e Valdir, do computador, pelo auxílio nos programas de computação.

À FAPESP (Proc. nº 78/1553) e CAPES, pelo apoio financeiro.

ÍNDICE

RESUMO	I
ABSTRACT	II
CAPÍTULO I - INTRODUÇÃO	1
CAPÍTULO II - HAMILTONIANA DO SISTEMA	5
CAPÍTULO III - MÉTODO VARIACIONAL	10
CAPÍTULO IV - APLICAÇÃO DO MODELO	20
4.1 - Elétron localizado perpendicularmente à superfície	21
4.2 - Função de onda variacional	28
CAPÍTULO V - CONCLUSÕES	33
APÊNDICE - HAMILTONIANA DE INTERAÇÃO ELÉTRON-MODOS SUPERFICIAIS	34
BILBIOGRAFIA	43
LEGENDA DAS FIGURAS	45
FIGURAS	47

RESUMO

Estudamos a interação de um elétron com os fonons óticos superficiais de um material semi-infinito. Consideramos apenas o caso em que o elétron está fora do material e ligado à superfície pelo seu potencial imagem. O método que usaremos é baseado no formalismo das transformações canônicas empregado com sucesso no caso do polaron volumétrico. Este método tem a vantagem de ser válido para todos os valores da constante de acoplamento. Um comportamento do tipo transição de fase de primeira ordem é observado quando a constante de acoplamento excede um certo valor crítico: o elétron passa de um estado quase livre para um estado ligado. Os aspectos que caracterizam este comportamento são uma rápida mudança na energia do estado fundamental, na massa efetiva, no número de fonons na nuvem ao redor do elétron e na localização espacial do elétron perpendicular à superfície quando a constante de acoplamento passa por um determinado valor crítico. A interação do elétron com os fonons volumétricos não é considerada neste caso.

ABSTRACT

A simple unitary transformation formalism successfully employed to the bulk polaron problem, is used in order to investigate the ground-state properties of an electron near a surface of a semi-infinite material and interacting with the surface optical modes. The method has the advantage of being applicable to the whole range of the electron-surface phonon coupling. A first-order phase transition like behavior from the quasi-free to the self-trapping electron state as the coupling constant exceeds a certain critical value is observed. The characteristic features of this phase transition such as rapid changes of the ground-state energy, the effective mass, the mean number of surface phonons in the cloud around the electron and the spatial localization of the electron perpendicular to the surface at the critical coupling constant are seen. On the present calculation, the coupling of the electron to the bulk excitation modes is not treated.

CAPÍTULO I

INTRODUÇÃO

A possibilidade de um elétron formar um estado ligado no qual ele se torna preso à superfície de um material semi-infinito devido à interação elétron-fonon ótico superficial tem se tornado objeto de grande interesse recentemente. (Farias, Studart e Hipólito 1982, Barton e Babiker 1981, Barton 1981). O caso em que o elétron interage com plasmas superficiais tem mostrado ser um modelo razoavelmente bom na descrição de estados superficiais de positron em metais (Niemi e Hodges 1978, Barberan e Echenique 1979). Além do mais, a localização de elétrons na camada de inversão de silício em sistema MOS (metal-óxido-semicondutor) foi também estudado em termos do modelo da interação elétron-fonon acústico superficial (Rona e Erçelebi 1979).

Estudos das propriedades do estado fundamental do polaron superficial foram realizados no limite de acoplamento fraco e intermediário simultaneamente por Evans e Mills (1972, 1973), usando o formalismo variacional empregado por Lee-Low-Pines (1953) para o problema do polaron volumétrico, e por Sak (1972) em termos da teoria de perturbação. Sak (1972) estudou também a interação elétron-fonon ótico superficial, no limite de acoplamento forte usando neste regime o mesmo anzats produto empregado por Pekar (1954) no caso do polaron volumétrico.

Com o objetivo de calcular a energia do estado fun

damental do polaron superficial para todos os valores da constante de acoplamento, Clark (1975) usou o formalismo variacional aplicado por Larsen (1966) ao polaron ligado a um potencial Coulombiano. Ele encontrou uma descontinuidade na inclinação da curva energia do estado fundamental versus constante de acoplamento, quando a constante de acoplamento passa por um determinado valor crítico. Esta descontinuidade tem a característica de uma transição de fase de primeira ordem na qual o elétron passa de um estado móvel para um estado fortemente ligado.

Recentemente duas aproximações, quais sejam, o formalismo da integral de trajetória de Feynman e um método variacional modificado da teoria de Lee-Low-Pines, foram aplicados respectivamente por Huybrechts (1978) e Hipólito (1979 a, b) para investigar o estado fundamental do polaron superficial, para todos os valores da constante de acoplamento. Entretanto estes cálculos não apresentam explicitamente o comportamento do tipo transição de fase de primeira ordem, no qual um elétron passa de um estado quase livre para um estado fortemente ligado. Por outro lado, Farias-Studart e Hipólito (1982) usando um formalismo generalizado da integral de trajetória, aplicado ao polaron volumétrico por Luttinger, e Lu (1980), mostraram a existência do fenômeno da descontinuidade para um valor crítico da constante de acoplamento. Se esta transição é apenas uma consequência da aproximação variacional utilizada ou uma propriedade geral do polaron superficial, esta é ainda uma questão a ser respondida.

Nestes últimos anos, muitos autores (Toyozaawa, 1961, 1963, Sumi e Toyozaawa 1973, Mañka 1978 a, b, 1979, Mañka e

Suffczyński 1980, Luttinger e Lu 1980 e Shoji e Tokuda 1981) vêm investigando sobre a existência de uma transição de fase do polaron volumétrico. Toyozawa (1961, 1963) primeiro supôs que esta transição de fase fosse causada pela natureza de curto alcance da interação entre o elétron e o fonon, e não pelo potencial de longo alcance. Deste modo apenas o polaron acústico, no qual a interação é de curto alcance, poderia sofrer transição de fase. Mais tarde várias investigações do estado fundamental do polaron tem descrito esta transição de fase em termos de uma quebra espontânea de simetria. A função de onda do estado fundamental é postulada como sendo o produto de uma função somente das coordenadas do elétron e um estado coerente de fonons virtuais. Este estado do polaron não preserva a invariança translacional da hamiltoniana. Nesta situação de quebra de simetria, na qual o estado fundamental tem simetria mais baixa que a simetria da hamiltoniana total, pode ocorrer uma transição de fase a partir de um estado quase-livre para um estado ligado.

A proposta deste trabalho então é investigar o estado fundamental do polaron ótico superficial, baseado no formalismo proposto por Huybrechts (1976, 1977). Este método, que é válido para todos os valores da constante de acoplamento foi aplicado com sucesso no estudo de transição de fase de diferentes tipos de polarons volumétricos (Shoji e Tokuda 1981).

Nós adaptamos este formalismo para calcular a energia do estado fundamental, a massa efetiva, o número de fonons em uma nuvem ao redor do elétron e a localização espacial do elétron perpendicular à superfície, como função da constante de acoplamento da interação elétron-fonon ótico su

perficial. Consideramos o caso em que o elétron permanece inteiramente fora do material, tal que possamos em primeira aproximação desprezar a interação elétron-fonon ôtico volumêtrico. É mostrado então a ocorrência de um comportamento do tipo transição de fase de primeira ordem, quando a constante de acoplamento passa por um determinado valor crítico.

No capítulo II derivamos a hamiltoniana total do sistema, que descreve a interação do elétron com os fonons ôticos superficiais e volumétricos. Restringindo-nos ao estudo da interação elétron-fonon ôtico superficial, desenvolvemos no capítulo III o método variacional que usaremos no estudo do polaron superficial. Determinamos então as expressões da energia do estado fundamental, da massa efetiva e do número de fonons em uma núvem ao redor do elétron, do polaron superficial externo. No capítulo IV aplicamos o modelo para dois casos distintos: no primeiro caso consideramos o elétron localizado a uma distância fixa da superfície, e no segundo caso tratamos o elétron, mais realisticamente, como uma partícula não localizada. Escolhemos uma função de onda variacional, que penetra muito pouco no material, de modo que ainda possamos desprezar a interação com os fonons ôticos volumétricos. Apresentamos então os resultados numéricos que revelam a existência de um comportamento do tipo transição de fase de primeira ordem para o polaron superficial. Finalmente no capítulo V apresentamos as conclusões do trabalho e algumas sugestões para estudos futuros.

CAPÍTULO II

HAMILTONIANA DO SISTEMA

Neste capítulo vamos derivar a hamiltoniana que descreve a interação de um elétron com os modos superficiais e volumétricos de um material semi-infinito.

Quando um elétron se aproxima de um material ele excita os modos superficiais e volumétricos deste material. O campo eletrostático associado a estes modos atua sobre o elétron ligando-o na superfície. A este sistema, elétron mais fonons óticos do material denominamos polaron superficial. Nosso objetivo, então, é determinar a hamiltoniana que descreve este sistema.

Neste estudo vamos considerar o material como sendo semi-infinito, de área plana A em $z = 0$, e preenchendo o semi-espaco superior $z > 0$. Vamos supor que o elétron se move numa banda de condução não degenerada. Se o elétron estiver no interior do material, em estados próximos da banda de condução ele se move com massa efetiva m^* . No vácuo, externo ao material, ele se move com a massa do elétron livre m .

Um elétron com momento linear $\vec{p} = (\vec{P}, p_z)$ e vetor posição $\vec{r} = (\vec{R}, z)$, onde $\vec{P}$ e $\vec{R}$ são vetores do plano xy paralelo à superfície do material, tem energia cinética dada por:

$$E_c = \frac{f(z)}{2m^*} P^2 + \frac{1}{2} \frac{f(z)}{m} p_z^2$$

onde $f(z) = \theta(z) + \frac{m^*}{m} \theta(-z)$, e $\theta(z)$ é a função degrau usual ($\theta(z) = 0$, $z < 0$ e $\theta(z) = 1$, $z > 0$).

A função $f(z)$ foi introduzida de modo a se levar em conta a mudança na massa do elétron entre o vácuo e o material.

A estrutura de bandas do material não será levada em conta de maneira detalhada, apenas vamos introduzir uma barreira de potencial V_0 em $z = 0$, que definimos como:

$$V(z) = V_0 \theta(z)$$

Portanto a contribuição do elétron, sem a interação com os fonons, para a hamiltoniana do sistema, $H_e = E_c + V(z)$, será:

$$H_e = \frac{f(z) p^2}{2m^*} + p \frac{f(z)}{2m^*} p + V(z) \quad \dots (2.1)$$

A contribuição para a hamiltoniana devido aos fonons livres é dada por:

$$H_v = \sum_{\vec{k}} \hbar \omega_L b_{\vec{k}}^\dagger b_{\vec{k}} \quad \dots (2.2)$$

e

$$H_s = \sum_{\vec{k}} \hbar \omega_s a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}} \quad \dots (2.3)$$

onde $b_{\vec{k}}^\dagger (b_{\vec{k}})$ é o operador que cria (destrói) um fonon ótico longitudinal de momento $\hbar \vec{k}$ e energia $\hbar \omega_L$, e obedecem à estatística de Bosons. $\vec{k}$ é o vetor de onda e ω_L a frequência do fonon ótico longitudinal.

$a_{\vec{k}}^\dagger (a_{\vec{k}})$ é o operador que cria (destrói) um fonon ótico superficial de momento $\hbar \vec{k}$ e energia $\hbar \omega_s$, e obedecem à estatística de Bosons. $\vec{k}$ é o vetor de onda bidimensional e

ω_s é a frequência do fonon ótico superficial.

Estamos considerando que a frequência destes modos não dependem do vetor de onda dos mesmos, ou seja, não consideramos o efeito de dispersão, embora um estudo mais detalhado deve levar este fato em conta. É importante notar que mesmo com esta aproximação este método nos fornece informações importantes sobre o polaron superficial.

O último termo da hamiltoniana descreve a interação do elétron com os fonons óticos longitudinais, e é dado pelas equações (A.24) e (A.25) como sendo:

$$H_I = \sum_{\vec{k}} (V_{\vec{k}}^* e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}} a_{\vec{k}}^\dagger + h.c.) e^{-k|z|} + \sum_{\vec{k}, k_z} \Theta(z) \left[U_{\vec{k}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} (e^{ik_z z} - e^{-k_z z}) b_{\vec{k}} + h.c. \right] \dots (2.4)$$

onde $V_{\vec{k}}^+$ e $V_{\vec{k}}^-$ são respectivamente o coeficiente de Fourier da interação elétron-fonon ótico superficial e eletro-fonon ótico longitudinal, definidos no apêndice.

O primeiro termo descreve a interação do elétron com o fonon ótico superficial e o segundo, a interação do elétron com o fonon ótico longitudinal.

Quando o elétron está no interior do material, e muito longe da superfície ($z \gg z_s$, $z_s = (\frac{\hbar}{2m\omega_s})^{1/2}$ é uma grandeza na ordem do raio do polaron) podemos considerar o material como sendo infinito, tal que devemos então desprezar o efeito da superfície. A hamiltoniana se reduz, neste caso a:

$$H = \frac{p^2}{2m^*} + \sum_{\vec{k}} \hbar \omega_L b_{\vec{k}}^\dagger b_{\vec{k}} +$$

$$\sum_{\vec{k}} (v_{\vec{k}}^* e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} b_{\vec{k}} + h.c.) \quad , \quad \dots (2.5)$$

que é a hamiltoniana de Fröhlich (1954) para o polaron. Mañka (1978), Mañka e Suffczyński (1980), Tokuda et al (1981), usando esta hamiltoniana (2.5) determinaram um comportamento tipo transição de fase de primeira ordem para o polaron. Eles encontraram que para um determinado valor crítico da constante de acoplamento, α_c , o polaron sofre uma mudança de um estado quase livre para um estado fortemente ligado, provocando uma descontinuidade na energia do estado fundamental do polaron em função da constante de acoplamento α .

No nosso caso vamos estudar a interação do elétron com a superfície de um material semi-infinito, considerando que o elétron penetra muito pouco no material, tal que a função de onda que descreve o elétron anula-se rapidamente no interior do material. Deste modo vamos desprezar a interação do elétron com os fonons óticos longitudinais volumétricos. Como consequência desta aproximação a hamiltoniana que descreve a interação do elétron com a superfície do material é dada por:

$$H = \frac{f(z)}{2m^*} p_z^2 + \frac{f(z)}{2m^*} p_z + \sum_{\vec{k}} \hbar \omega_s a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}} \\ \sum_{\vec{k}} (v_{\vec{k}}^* e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}} a_{\vec{k}}^\dagger + h.c.) e^{-k|z|} + V(z) \quad \dots (2.6)$$

Esta é então a hamiltoniana que usaremos daqui para a frente no nosso estudo.

No capítulo seguinte vamos desenvolver o método que usaremos para o estudo do polaron superficial. Este método

do vai nos fornecer a expressão variacional da energia do es
tado fundamental do polaron superficial válida para todos os
valores da constante de acoplamento, bem como a massa efetii
va do polaron superficial e o número de fonons ao redor do
elêtron.

CAPÍTULO III

MÉTODO VARIACIONAL

Neste capítulo vamos obter as expressões que usaremos no estudo da interação do elétron com os fonons óticos superficiais.

Como dissemos no capítulo anterior, vamos considerar o elétron externo ao material, desprezando assim a interação com os fonons óticos longitudinais volumétricos. Ao sistema elétron-fonon superficial denominamos polaron superficial.

Nosso sistema é então descrito pela hamiltoniana (2.6):

$$H = \frac{f(z) P_z^2}{2m^*} + \frac{1}{2} \frac{f(z)}{2m^*} p_z^2 + V(z) + \sum_{\vec{k}} \hbar \omega_s a_{\vec{k}}^{\dagger} a_{\vec{k}} + \sum_{\vec{k}} (v_{\vec{k}}^* e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}} a_{\vec{k}}^{\dagger} + h.c.) e^{-k|z|} \quad \dots (3.1)$$

Esta hamiltoniana é invariante sob translação paralela à superfície do material.

O momento total do polaron superficial, $\vec{P}_t$, definido como a soma do momento do elétron paralelo à superfície com o momento do fonon ótico superficial

$$\vec{P}_t = \vec{P} + \sum_{\vec{k}} \hbar \vec{k} a_{\vec{k}}^{\dagger} a_{\vec{k}} \quad \dots (3.2)$$

se conserva, ou seja, $[H, \vec{P}_t] = 0$.

A função de onda que descreve o estado fundamental do polaron superficial será postulada como sendo o produto

de uma função de onda que depende apenas das coordenadas do elétron por uma função que depende apenas das coordenadas do fônon, ou seja, por um estado coerente de fonons.

Deste modo a função de onda que descreve o estado fundamental do polaron superficial é definida como:

$$|4\rangle = \phi(z) S(\eta, \lambda, \vec{P}_0) U(\vec{\xi}_k) |0\rangle ,$$

onde as transformações unitárias $U(\vec{\xi}_k)$ e $S(\eta, \lambda, \vec{P}_0)$ serão de finidas mais tarde, $\phi(z)$ é uma função de onda variacional que descreve o movimento do elétron perpendicularmente ao plano e $|0\rangle$ é o estado de vácuo dos fonons.

Esta aproximação para a função de onda equivale a supormos uma independência no movimento do elétron e do sistema de fonons óticos superficiais. Deste modo esta função de onda não é autodefinição do momento total $\vec{P}_t$, e portanto não pertence a qualquer representação de grupo de translação. A utilização desta função de onda nos leva à não preservação da invariância translacional da Hamiltoniana, o que implica numa quebra espontânea de simetria no problema. Devido a esta quebra de simetria podemos esperar então um comportamento do tipo transição de fase para o problema, no qual o polaron superficial passa de um estado quase livre para um estado fortemente ligado quando a constante de acoplamento passa por um valor crítico. A minimização da energia deverá então ser realizada vinculando-se o momento total do sistema, da seguinte forma:

$$\delta \langle \Psi | (H - \vec{\mu} \cdot \vec{P}) | \Psi \rangle = 0 \quad \dots (3.3)$$

onde $\vec{\mu}$ é introduzido como um multiplicador de Lagrange para manter o momento do polaron superficial constante, e será identificado como a velocidade do polaron superficial.

O método que utilizaremos está baseado no formalismo das transformações canônicas. A técnica foi inicialmente introduzida por Huybrechts (1976, 1977) e consiste em uma generalização do formalismo de Lee-Low-Pines (1953) do polaron, para permitir o estudo do polaron superficial válido para todos os valores da constante de acoplamento α_s . Definimos esta transformação como:

$$S = \exp(-i\eta \sum_{\vec{k}} \vec{k} \cdot \vec{R} a_{\vec{k}}^{\dagger} a_{\vec{k}}) \quad \dots (3.4)$$

onde η é um parâmetro variacional a ser determinado miniizando a energia do estado fundamental do polaron superficial.

Usando (3.4) encontramos que:

$$S^{-1} \vec{P} S = \vec{P} - \eta \sum_{\vec{k}} \hbar \vec{k} a_{\vec{k}}^{\dagger} a_{\vec{k}} \dots (3.5.a)$$

$$S^{-1} a_{\vec{k}}^{\dagger} S = \exp(i\eta \sum_{\vec{k}} \vec{k} \cdot \vec{R}) a_{\vec{k}}^{\dagger} \dots (3.5.b)$$

$$S^{-1} a_{\vec{k}} S = \exp(-i\eta \sum_{\vec{k}} \vec{k} \cdot \vec{R}) a_{\vec{k}} \dots (3.5.c)$$

$$S^{-1} a_{\vec{k}}^{\dagger} a_{\vec{k}} S = a_{\vec{k}}^{\dagger} a_{\vec{k}} \dots (3.5.d)$$

$$S^{-1} p_z S = p_z \dots (3.5.e)$$

Da equação (3.3) definimos

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= H - \vec{\mu} \cdot \vec{P}_t = \mathcal{H}_1 + \frac{f(z) P^2}{2m^*} + \\ &\sum_{\vec{k}} (\hbar \omega_s - \hbar \vec{\mu} \cdot \vec{k}) a_{\vec{k}}^{\dagger} a_{\vec{k}} - \vec{\mu} \cdot \vec{P} + \\ &\sum_{\vec{k}} (v_{\vec{k}}^* e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}} a_{\vec{k}}^{\dagger} + h.c.) e^{-k|z|} \dots (3.6) \end{aligned}$$

onde:

$$\mathcal{H}_1 = p_z \frac{f(z)}{2m^*} p_z + V(z)$$

Usando (3.5) e (3.6) podemos escrever $H' = S^{-1} H S$,

como sendo:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}' &= \mathcal{H}_1 + \frac{f(z)}{2m^*} (\vec{P} - \eta \sum_{\vec{k}} \hbar \vec{k} a_{\vec{k}}^{\dagger} a_{\vec{k}})^2 + \\ &\sum_{\vec{k}} (\hbar \omega_s - \hbar \vec{\mu} \cdot \vec{k}) a_{\vec{k}}^{\dagger} a_{\vec{k}} - \vec{\mu} \cdot (\vec{P} - \eta \sum_{\vec{k}} \hbar \vec{k} a_{\vec{k}}^{\dagger} a_{\vec{k}}) \\ &+ \sum_{\vec{k}} (v_{\vec{k}}^* e^{-i(1-\eta)\vec{k} \cdot \vec{R}} a_{\vec{k}}^{\dagger} + h.c.) e^{-k|z|} \dots (3.7) \end{aligned}$$

É interessante notar que esta expressão reobtem o resultado para o acoplamento fraco de Evans-Mills (1972, 1973) no limite em que $\eta = 1$. Por outro lado quando $\eta \rightarrow 0$ obtemos a aproximação de acoplamento forte, recentemente discu

tido por Hipólito (1979 b).

Introduzindo agora a segunda transformação de Lee-
-Low-Pines:

$$U = \exp \left[\sum_{\vec{k}} \left(\xi_{\vec{k}} a_{\vec{k}}^{\dagger} - \xi_{\vec{k}}^* a_{\vec{k}} \right) \right] \dots (3.8)$$

onde $\xi_{\vec{k}}$ é uma função variacional. U descreve o deslocamento das oscilações da rede na presença do elétron.

Podemos então escrever que:

$$U^{-1} a_{\vec{k}} U = a_{\vec{k}} + \xi_{\vec{k}} \dots (3.9.a)$$

$$U^{-1} a_{\vec{k}}^{\dagger} U = a_{\vec{k}}^{\dagger} + \xi_{\vec{k}}^* \dots (3.9.b)$$

$$U^{-1} a_{\vec{k}}^{\dagger} a_{\vec{k}} U = |\xi_{\vec{k}}|^2 + a_{\vec{k}}^{\dagger} a_{\vec{k}} + \xi_{\vec{k}} a_{\vec{k}}^{\dagger} + \xi_{\vec{k}}^* a_{\vec{k}} \dots (3.9.c)$$

$$U^{-1} a_{\vec{k}}^{\dagger} a_{\vec{k}} a_{\vec{k}}^{\dagger} a_{\vec{k}} U = |\xi|^2 (\delta_{\vec{k}\vec{k}'} + |\xi_{\vec{k}}|^2) + U(a_{\vec{k}}^{\dagger}, a_{\vec{k}}) \dots (3.9.d)$$

Aplicando então a transformação U à hamiltoniana H' ,
ficamos com

$$\begin{aligned} \mathcal{H}'' = & \mathcal{H}_1 + \frac{f(z)}{2m^*} \left(P^2 - \eta \sum_{\vec{k}} \hbar \vec{k} |\xi_{\vec{k}}|^2 \right)^2 + \\ & \sum_{\vec{k}} \left(\hbar \omega_s + \eta^2 \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} f(z) - \hbar \vec{\mu} \cdot \vec{k} \right) |\xi_{\vec{k}}|^2 - \\ & \vec{\mu} \cdot \left(\vec{P} - \eta \sum_{\vec{k}} \hbar \vec{k} |\xi_{\vec{k}}|^2 \right) + \mathcal{H}_1'' + \\ & \sum_{\vec{k}} \left(V_{\vec{k}} \xi_{\vec{k}}^* e^{-i(1-\eta)\vec{k} \cdot \vec{R}} + h.c. \right) e^{-k|z|} \dots (3.10) \end{aligned}$$

onde H_1'' contém termos que não são importantes no cálculo do estado fundamental do polaron superficial.

Seguindo Huybrechts (1976, 1977) e Tokuda (1980), introduzimos os operadores de criação, destruição B_j^+ , B_j , que obedecem estatística de Bosons, pela relação:

$$P_j = \left(\frac{m\hbar\lambda}{2} \right)^{1/2} (B_j^+ + B_j + P_{0j}) \quad \dots (3.11.a)$$

$$R_j = i \left(\frac{\hbar}{2m\lambda} \right)^{1/2} (B_j - B_j^+) \quad \dots (3.11.b)$$

onde λ e $\vec{P}_0$ são parâmetros variacionais e o índice j refere-se às direções x e y .

A função que descreve o estado fundamental do polaron superficial é definido como:

$$|4\rangle = \phi_{el} |0\rangle = S U \phi(z) |0\rangle$$

deste modo e usando Eq. (3.11) podemos determinar o valor médio.

$$\begin{aligned} F(\eta, \lambda, \vec{\epsilon}_R, \vec{P}_0, \vec{\mu}) &= \langle 4 | (H - \vec{\mu} \cdot \vec{P}_t) | 4 \rangle \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dz \phi^*(z) \langle 0 | H | 0 \rangle \phi(z) \quad \dots (3.12) \end{aligned}$$

A função de onda variacional $\phi(z)$ é considerada real e normalizada, tal que:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dz |\phi(z)|^2 = 1 \quad \dots (3.13)$$

e o estado de vácuo, $|0\rangle$, do sistema de fonon é obtido pelas relações:

$$a_k|0\rangle=0, B_j|0\rangle=0 \text{ e } \langle 0|0\rangle=1 \quad (3.14)$$

Usando ainda o fato de que o momento total do polron superficial se conserva, ou seja

$$\langle \Psi | (\vec{P} + \sum_{\vec{k}} \hbar \vec{k} a_{\vec{k}}^{\dagger} a_{\vec{k}}) | \Psi \rangle = 0 \quad \dots (3.15)$$

encontramos que (3.12) é dado por:

$$\begin{aligned} F(\eta, \lambda, \xi_{\vec{k}}, \vec{P}_0, \vec{\mu}) = & W \left(\frac{\hbar \lambda}{2} + \frac{\hbar \lambda}{4} P_0^2 \right) - \\ & \left(\frac{m \hbar \lambda}{2} \right)^{1/2} \vec{\mu}_0 \cdot \vec{P}_0 + \sum_{\vec{k}} \left(\hbar \omega_s + W \eta^2 \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \hbar \vec{\mu}_0 \cdot \vec{k} \right) |\xi_{\vec{k}}|^2 + \\ & \sum_{\vec{k}} (V_{\vec{k}}^* \xi_{\vec{k}}^* + V_{\vec{k}} \xi_{\vec{k}}) m(k) e^{-\frac{(1-\eta)^2 \hbar k^2}{4m\lambda}} + \\ & \int_{-\infty}^{\infty} dz \phi(z) \left[\frac{1}{2m^*} \frac{1}{2} f(z) \frac{1}{2} + V(z) \right] \phi(z), \quad \dots (3.16) \end{aligned}$$

onde definimos:

$$W = \left(\frac{m}{m^*} \right) \int_{-\infty}^{\infty} dz \phi(z) f(z) \phi(z) \quad \dots (3.17)$$

e

$$M(k) = \int_{-\infty}^{\infty} dz \phi(z) e^{-k|z|} \phi(z) \quad \dots (3.18)$$

Minimizando $F(\eta, \lambda, \xi_{\vec{k}}, \vec{P}_0, \vec{\mu})$ com relação a $\xi_{\vec{k}}$ e $\vec{P}_0$,
ou seja:

$$\frac{\partial F}{\partial \vec{\xi}_k} = 0 \quad e \quad \frac{\partial F}{\partial \vec{p}_0} = 0, \quad \dots (3.19)$$

encontramos:

$$\vec{\xi}_k = \frac{-V_k^* M(k) e^{-(1-\eta)^2 \hbar k^2 / 4 m \lambda}}{\hbar \omega_s + W \eta^2 \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \hbar \vec{\mu} \cdot \vec{k}} \quad \dots (3.20)$$

e

$$\vec{p}_0 = \left(\frac{2m}{\hbar \lambda} \right)^{1/2} \frac{\vec{\mu}}{W} \quad \dots (3.21)$$

Substituindo então $\vec{p}_0$ e $\vec{\xi}_k$ de volta em (3.16), e rearranjando os termos temos:

$$F(\eta, \lambda, \vec{\mu}) = W \frac{\hbar \lambda}{2} - \frac{m}{2W} \mu^2 - \sum_{\vec{k}} \frac{|V_k|^2 M^2(k) \exp[-(1-\eta)^2 \hbar k^2 / 2 m \lambda]}{\hbar \omega_s + \eta^2 \frac{\hbar^2 k^2}{2m} W - \hbar \vec{\mu} \cdot \vec{k}} \int_{-\infty}^{\infty} dz \phi(z) \left[\frac{1}{2m^*} \left| \frac{1}{z} f(z) \right|_{\frac{1}{z}}^2 + V(z) \right] \phi(z) \quad \dots (3.22)$$

Considerando pequenas velocidades do polaron superficial expandimos $F(\eta, \lambda, \vec{\mu})$ até segunda ordem em $\vec{\mu}$, e obtemos

$$F(\eta, \lambda, \vec{\mu}) = W \frac{\hbar \lambda}{2} + \int_{-\infty}^{\infty} dz \phi(z) \left[\frac{1}{2m^*} \left| \frac{1}{z} f(z) \right|_{\frac{1}{z}}^2 + V(z) \right] \phi(z) - \sum_{\vec{k}} \frac{|V_k|^2 M^2(k) \exp[-(1-\eta)^2 \hbar k^2 / 2 m \lambda]}{\hbar \omega_s + \eta^2 \frac{\hbar^2 k^2}{2m} W}$$

$$- \frac{m}{2} \mu^2 \left[\frac{1}{W} + \frac{\hbar^2}{m} \sum_{\vec{k}} \frac{|V_{\vec{k}}|^2 k^2 m^2(k) e^{-\frac{(1-\eta)^2 \hbar k^2}{2m\lambda}}}{(\hbar \omega_s + \eta^2 \frac{\hbar^2 k^2 W}{2m})^3} \right] \dots (3.23)$$

O termo independente de $\vec{\mu}$ na eq. (3.23) nos fornece a energia do estado fundamental do polaron superficial,

$$E_0 = W \frac{\hbar \lambda}{2} - \sum_{\vec{k}} \frac{|V_{\vec{k}}|^2 m^2(k) e^{-\frac{(1-\eta)^2 \hbar k^2}{2m\lambda}}}{\hbar \omega_s + \eta^2 \frac{\hbar^2 k^2 W}{2m}} + \int_{-\infty}^{\infty} dz \phi(z) \left[\frac{1}{2m^*} p_z f(z) p_z + V(z) \right] \phi(z) \dots (3.24)$$

O terceiro termo de (3.23), que é quadrático em $\vec{\mu}$ nos dá a massa efetiva do polaron superficial como sendo

$$\frac{m_{SP}}{m} = \frac{1}{W} + \frac{\hbar^2}{m} \sum_{\vec{k}} \frac{|V_{\vec{k}}|^2 k^2 m^2(k) e^{-\frac{(1-\eta)^2 \hbar k^2}{2m\lambda}}}{(\hbar \omega_s + \eta^2 \frac{\hbar^2 k^2 W}{2m})^3} \quad (3.25)$$

O número de fonons superficiais ao redor do elétron é obtido através da expressão:

$$N = \langle \psi | \sum_{\vec{k}} a_{\vec{k}}^+ a_{\vec{k}} | \psi \rangle = \sum_{\vec{k}} |\xi_{\vec{k}}(\vec{\mu}=0)|^2, \dots (3.26)$$

onde $\xi_{\vec{k}}$ é dado por (3.20), logo:

$$N = \sum_{\vec{k}} \frac{|V_{\vec{k}}|^2 m^2(k) e^{-\frac{(1-\eta)^2 \hbar k^2}{2m\lambda}}}{(\hbar \omega_s + \eta^2 \frac{\hbar^2 k^2 W}{2m})^2} \dots (3.27)$$

Determinamos assim a expressão da energia do estado fundamental (3.24), da massa efetiva (3.25) do polaron superficial externo, bem como a expressão do número de fônons ao redor do elétron (3.27).

No limite em que $\eta \rightarrow 1$, vemos que o mínimo de E_0 ocorre quando $\lambda \rightarrow 0$ e então reobtemos os resultados de Evans-Mills (1976, 1977) para o acoplamento fraco. Quando $\eta \rightarrow 0$ encontramos os resultados de Hipólito (1979 b), para a energia no limite de acoplamento forte.

No próximo capítulo faremos a aplicação deste modelo para duas formas distintas da função de onda variacional do elétron.

Inicialmente consideramos a partícula localizada em $z = z_0$ e então minimizando $E_0(\eta, \lambda)$ determinamos o ótimo par (η, λ) para a energia do estado fundamental.

Em seguida consideramos uma função de onda não localizada para descrever o elétron. Com esta função de onda determinamos o conjunto (η, λ, β) que minimiza a energia do estado fundamental. β é um parâmetro variacional introduzido pela função de onda.

CAPÍTULO IV

APLICAÇÃO DO MODELO

Vamos agora aplicar o formalismo desenvolvido anteriormente para estudar as propriedades do estado fundamental de um elétron ligado à superfície de um material. Uma partícula carregada nas proximidades de um material é atraída para sua superfície pelo potencial imagem. Deste modo poder-se-á formar um estado no qual a partícula estará ligada à superfície.

Calculamos a energia do estado fundamental, a massa efetiva do polaron superficial, o número de fonons ao redor do elétron e a localização espacial do elétron como função da constante de acoplamento α_s .

Estudamos dois casos distintos: no primeiro caso supomos que o elétron está localizado a uma certa distância $z = z_0$ da superfície e, no segundo caso, descrevemos o movimento perpendicular da partícula através de uma função de onda variacional $\phi(z)$.

Na expressão (3.24), a energia de ligação do polaron superficial, podemos trocar $\sum_{\vec{k}}$ pela $\int d\vec{k}$, supondo o limite de grandes comprimentos de onda, que é a região na qual estamos interessados. Usando a definição de $V_{\vec{k}}$, dada no Apêndice pela eq. (A.22), e a aproximação de contínuo para o cristal, podemos reescrever a energia do polaron superficial como sendo:

$$E_0(\eta, \lambda) = \frac{W\lambda}{2} - \alpha_s \int_0^\infty dx \frac{M^2(x) e^{-(1-\eta)^2 x^2 / \lambda}}{1 + \eta^2 x^2 W} +$$

$$\frac{1}{\hbar\omega_s} \int_{-\infty}^{\infty} dz \phi(z) \left[\frac{1}{2m^*} \left| \frac{d}{dz} f(z) \right|^2 + V(z) \right] \quad \dots (4.1)$$

As funções V e $M(x)$ estão definidas pelas Eqs.(3.17) e (3.18). A energia está em unidade de $\hbar\omega_s$, λ em unidade de ω_s e os comprimentos em unidades de z_s . Estas são as unidades que usaremos daqui para frente.

Estamos considerando ainda que $m^* = m$, a massa do elétron livre.

Reescrevendo a massa efetiva e o número de fonons em unidades adimensionais ficamos com as seguintes expressões:

$$\frac{m_{sb}}{m} = \frac{1}{W} + 2\alpha_s \int_0^{\infty} dx \frac{x^2 m^2(x) e^{-((1-\eta)^2 x^2/\lambda)}}{(1 + \eta^2 x^2 W)^3} \quad (4.2)$$

e

$$N = \alpha_s \int_0^{\infty} dx \frac{m^2(x) e^{-((1-\eta)^2 x^2/\lambda)}}{(1 + \eta^2 x^2 W)^2} \quad \dots (4.3)$$

IV.1 - Elétron localizado perpendicularmente à superfície

Nossa primeira aproximação é considerar o elétron localizado perpendicularmente à superfície do material, a uma distância fixa $z = z_0$. Assim vamos supor que a função densidade que descreve o elétron tem a forma:

$$|\phi(z)|^2 = \delta(z - z_0) \quad \dots (4.4)$$

onde $z_0 > 0$. Como estamos tratando classicamente o movimento do elétron na direção perpendicular podemos tomar $p_z = 0$, tal que o terceiro termo em (4.1) é identicamente nulo. Neste caso temos:

$$W=1 \quad e \quad M(x) = e^{-x z_0}$$

Portanto a expressão variacional da energia do estado fundamental é dada por:

$$E_0(\eta, \lambda) = \frac{1}{2} - \alpha_s \int_0^\infty dx \frac{e^{-\frac{(1-\eta)^2 x^2}{\lambda} - 2x z_0}}{1 + \eta^2 x^2} \quad \dots (4.5)$$

A massa efetiva e o número de fonons são expressos por:

$$\frac{m_{sp}}{m} = 1 + 2\alpha_s \int_0^\infty dx \frac{e^{-\frac{(1-\eta)^2 x^2}{\lambda} - 2x z_0}}{(1 + \eta^2 x^2)^3} x^2 \quad \dots (4.6)$$

e

$$N = \alpha_s \int_0^\infty dx \frac{e^{-\frac{(1-\eta)^2 x^2}{\lambda} - 2x z_0}}{(1 + \eta^2 x^2)^2} \quad \dots (4.7)$$

Analisando a equação (4.5) vemos que o segundo termo representa a variação da energia do elétron devido à interação com os fonons óticos superficiais. Definindo este termo como $V(z_0)$, temos:

$$V(z_0) = -\alpha_s \int_0^\infty dx \frac{e^{-\frac{(1-\eta)^2 x^2}{\lambda} - 2x z_0}}{(1 + \eta^2 x^2)} \quad \dots (4.8)$$

No caso limite em que $z_0 \gg 1$, ou seja, supondo que o elétron está localizado a grande distância da superfície

cie a contribuição importante para a integral é devida a pe quenos x do integrando. Dessa forma temos que

$$V(z \gg 1) = -\frac{\alpha_s}{2z} = -\frac{ee'}{4z_0} \quad \dots (4.9)$$

Este é o potencial imagem clássico onde e' representa a car ga imagem do elétron.

Quando $\eta \rightarrow 1$ e $\lambda \rightarrow 0$ encontramos o limite de aco plamento fraco, que corresponde a $\alpha_s \ll 1$ e neste caso pode mos resolver (4.8), que nos fornece:

$$V(z=0) = -\frac{\pi\alpha_s}{2} \quad \dots (4.10.a)$$

O limite de acoplamento forte é obtido quando te mos $\alpha_s \gg 1$. Este limite corresponde a $\eta = 0$ e $\lambda = \frac{\pi\alpha_s^2}{4}$. Des te modo temos:

$$V(z=0) = -\frac{\pi\alpha_s^2}{4} \quad \dots (4.10.b)$$

Estes resultados mostram que a Eq. (4.8) elimina a divergência do potencial imagem clássico, quando a partícula está próxima da superfície, como descrito por Sak (1972) e Evans-Mills (1973) no limite de acoplamento fraco. Recentemente Hipólito (1979 a,b) apresentou estes mesmos resultados nos limites de acoplamento fraco e forte.

Antes de apresentarmos o resultado numérico da mi nimização de $E_0(\eta, \lambda)$, Eq. (4.5), é conveniente analisarmos os limites de acoplamento fraco e forte da energia do estado fundamental do polaron superficial.

Como já foi dito anteriormente o limite de acoplamento fraco, $\alpha_s \ll 1$, ocorre quando $\lambda \rightarrow 0$ e $\eta \rightarrow 1$. Para este caso, obtemos:

$$E_0 = -\frac{\pi\alpha_s}{2} \quad \dots (4.11.a)$$

$$\frac{m_{sp}}{m} = 1 + \frac{\pi\alpha_s}{8} \quad \dots (4.11.b)$$

e

$$N = \frac{\pi\alpha_s}{2} \quad \dots (4.11.c)$$

A massa efetiva que encontramos é idêntica àquela encontrada por Sak (1972), usando teoria de perturbação de segunda ordem, considerando que o elétron se encontra em estado de baixa energia de ligação ao qual ele denomina estados profundos*.

Quando $\alpha_s \gg 1$ temos que $\eta \rightarrow 0$ e neste limite obtemos os resultados correspondentes ao regime de acoplamento forte. A energia do estado fundamental do polaron superficial é então dada por:

$$E_0(\lambda) = \frac{1}{2} - \alpha_s \int_0^\infty dx e^{-x^2/\lambda} \quad \dots (4.12)$$

* Sak (1972) usa uma função de onda variacional do tipo $\phi(Z) = 2\beta^{3/2} Z e^{-\beta Z}$. A região, no espectro de energia, que corresponde aos estados profundos é obtido no limite $\beta \rightarrow \infty$. Então a função: $|\phi(z)|^2 = 4\beta^3 Z^2 e^{-2\beta Z}$, possui um pico bem pronunciado na vizinhança da origem ($z \sim 0$), num comportamento tipo da função delta. Portanto a contribuição mais importante para a energia vem da região próxima à superfície.

O valor de λ que minimiza $E_0(\lambda)$ é determinado pela equação $\frac{\partial E_0}{\partial \lambda} = 0$, como sendo:

$$\lambda = \frac{\pi \alpha_s^2}{4} \quad \dots (4.13)$$

Deste modo temos que:

$$E_0 = -\frac{\pi \alpha_s^2}{8} \quad \dots (4.14.a)$$

$$\frac{m_{sp}}{m} = 1 + \frac{\pi^2 \alpha_s^4}{16} \quad \dots (4.14.b)$$

e

$$N = \frac{\pi \alpha_s^2}{4} \quad \dots (4.14.c)$$

A energia do polaron superficial se comporta na forma quadrática em α_s , como já tinha sido previsto por Hipólito (1979 b). Este comportamento é análogo àquele encontrado para o polaron volumétrico, Huybrechts (1976, 1977), Tokuda (1980) entre outros.

É interessante notar que a massa efetiva determinada por Tokuda (1980), usando o modelo de Huybrechts para o polaron volumétrico, no limite de acoplamento forte, apresenta também um comportamento à quarta potência na constante de acoplamento. Recentemente Farias et al (1982) calcularam a massa efetiva do polaron superficial em ambos os limites de acoplamento fraco e forte, usando o método da integral de trajetória de Feynman e encontraram os mesmos valores para a massa efetiva do polaron superficial no estado fundamental.

De um modo geral a expressão da energia do estado fundamental deve ser determinada minimizando-se a equação (4.5) com relação aos parâmetros η e λ para valores fixos de z_0 e α_s . Os valores de η e λ que minimizam a energia do estado fundamental do polaron superficial são determinados numericamente a partir das equações:

$$\frac{\partial E_0}{\partial \lambda} = 0, \quad \frac{\partial E_0}{\partial \eta} = 0 \quad \dots (4.15)$$

Este cálculo foi feito para dois valores distintos de z_0 ($z_0 = 0$, $z_0 = 0,1$), como função de α_s .

De posse destes resultados plotamos na figura 1 a energia do estado fundamental do polaron superficial, como função de α_s , para $z_0 = 0$ e $z_0 = 0,1$. A energia possui então dois ramos distintos. O primeiro é uma linha reta, correspondente ao limite de acoplamento fraco, e termina no ponto α_{sf} . O segundo ramo é uma curva, assintoticamente quadrática, que começa em α_{si} , representando o limite de acoplamento forte. O ramo pontilhado corresponde à solução de máximo e representa uma solução instável para a energia do estado fundamental. O ponto de cruzamento entre os dois ramos de mínimo α_{sc} , é o ponto de transição de fase de primeira ordem. Neste ponto crítico o polaron superficial passa de um estado quase livre para um estado fortemente ligado.

Para tornar mais clara nossa análise, plotamos na figura 2 o valor do parâmetro η , que minimiza $E_0(\eta, \lambda)$, com relação à constante de acoplamento α_s , para os dois valores de z_0 . O parâmetro η varia no intervalo de $\eta = 1$, que corresponde à região de acoplamento fraco, ou seja, o elétron está

quase livre, para $\eta = 0$, correspondendo à região de acoplamento forte, no qual o elétron está fortemente ligado. Na figura 2 a curva cheia (larga) corresponde à solução estável com mais baixa energia, a curva cheia (fina) corresponde à solução meta-estável e a curva pontilhada corresponde à solução de máximo da energia. Nesta figura podemos ver claramente a mudança brusca que ocorre na energia de ligação do polaron superficial, pela forma rápida com que o parâmetro η passa do valor $\eta = 1$ para valores próximos de zero.

Com os valores de η e λ que minimizam a energia do estado fundamental do polaron superficial, calculamos, através das equações (4.6) e (4.7), a massa efetiva do polaron superficial e o número de fonons ao redor do elétron. Estes resultados foram plotados nas figuras 3 e 4 respectivamente.

O comportamento do tipo transição de fase fica bem caracterizado quando a constante de acoplamento passa pelo valor crítico $\alpha_s = \alpha_{sc}$, pela descontinuidade na massa efetiva do polaron superficial e, no número de fonons ao redor do elétron.

A forma da densidade de probabilidade que usamos, $|\phi(z)|^2 = \delta(z+z_0)$, descreve o elétron como uma partícula localizada perpendicularmente à superfície. Como consequência a energia do estado fundamental foi determinada mais negativa do que ela realmente é.

Considerando este fato, na seção seguinte vamos tratar o elétron usando uma função de onda variacional que tem como efeito a não localização do elétron.

IV.2 - Função de onda variacional

Nesta seção vamos tratar o elétron como uma partícula não localizada. Deste modo, seguindo Evans-Mills(1973), vamos descrever o elétron através da função de onda variacional, dada por:

$$\phi(z) = \begin{cases} A e^{-\gamma z} & , z > 0 \\ B(z-z_0)e^{\beta z} & , z < 0 \end{cases} \quad \dots (4.16)$$

O parâmetro γ mede a penetração da função de onda no material. Podemos considerá-lo, em uma primeira aproximação, como dependente apenas da barreira de potencial V_0 . Então quando V_0 for muito grande, comparado com a energia de ligação do polaron superficial, podemos considerar γ como sendo dado por: $\gamma = (2m^*V_0)^{1/2}/\hbar$. Num caso mais geral devemos considerar que γ depende da constante de acoplamento α_s , além de V_0 . Desta forma devemos tratar γ como sendo um parâmetro variacional que minimiza a energia do estado fundamental do polaron superficial. Deixaremos esta aproximação para ser feita no futuro, já que, considerando γ fixo, podemos obter informações importantes do problema. Resta agora mais quatro parâmetros a serem determinados. Da condição de normalização de $\phi(z)$, e da imposição de que $\phi(z)$ e sua derivada sejam contínuas na superfície $z = 0$, determinamos três dos quatro parâmetros restantes, ficando o quarto para ser determinado variacionalmente. Escolhemos β como sendo esse parâmetro variacional, e γ mantivemos com um valor fixo ($\gamma =$

$= (2m^*v_0)^{1/2}/\hbar$, deste modo podemos determinar A , B e Z_0 co
mo sendo:

$$A = \left(\frac{4\gamma\beta^3}{\gamma+2\beta} \right)^{1/2} \cdot \frac{1}{\gamma+\beta} \quad \dots (4.17.a)$$

$$B = - \left(\frac{4\gamma\beta^3}{\gamma+2\beta} \right)^{1/2} \quad \dots (4.17.b)$$

$$Z_0 = \frac{1}{\gamma+\beta} \quad \dots (4.17.c)$$

Usando a função $\phi(Z)$ definida pelas equações (4.16) e (4.17), determinamos a energia do polaron superficial como sendo dada pela equação:

$$E_0(\eta, \lambda, \beta) = \frac{\gamma\beta^2}{\gamma+2\beta} \left[1 + 2\gamma\beta \left(1 - \frac{m}{m^*} \right) / (\gamma+\beta)^2 \right] + \frac{W\lambda}{2} - \alpha \int_0^\infty dx \frac{m^2(x) \exp[-(1-\eta)^2 x^2/\lambda]}{1 + \eta^2 x^2 W} \quad \dots (4.18)$$

onde:

$$W = 1 - \frac{2\beta^3 (1 - m/m^*)}{(\gamma+2\beta)(\gamma+\beta)^2} \quad \dots (4.19)$$

e

$$M(x) = \frac{\gamma}{\gamma+2\beta} \left(\frac{2\beta^3}{\gamma+2\beta} \right)^3 \left[1 + \frac{x+2\beta}{\gamma+\beta} + \frac{(x+2\beta)^2 (x+\gamma+\beta)}{(\gamma+2\beta)(\gamma+\beta)^2} \right] \quad \dots (4.20)$$

A massa efetiva do polaron superficial externo e o número de fonons ao redor do elétron são dados respectivamente por:

$$\frac{m_{sp}}{m} = \frac{1}{W} + 2\alpha_s \int_0^\infty dx \frac{x^2 m^2(x) e^{-(1-\eta)x^2/\lambda}}{(1 + \eta^2 x^2 W)^3} \quad (4.21)$$

e

$$N = \alpha_s \int_0^\infty dx \frac{M^2(x) e^{-(1-\eta)^2 x^2/\lambda}}{(1 + \eta^2 x^2 W)^2} \quad \dots (4.22)$$

Como anteriormente, a energia está em unidades de $\hbar\omega_s$, λ em unidade de ω_s e, os comprimentos em unidades de $z_s = (\hbar/2m\omega_s)^{1/2}$, z_s é a distância média do elétron à superfície. Deste modo $x = z_s K$, $y = z_s \gamma$ e $\beta = \beta z_s$.

Os parâmetros η , λ e β que minimizam $E_0(\eta, \lambda, \beta)$, eq. (4.18), são determinados através das equações:

$$\frac{\partial E_0}{\partial \eta} = 0, \quad \frac{\partial E_0}{\partial \lambda} = 0, \quad \frac{\partial E_0}{\partial \beta} = 0 \quad \dots (4.23)$$

Os cálculos foram efetuados usando $\gamma = \infty$, que equivale à aproximação de barreira infinita e, $\gamma = 10$, na qual se permite que a função de onda do elétron penetre no material, embora como já dissemos inicialmente, não consideramos a interação do elétron com os fonons óticos longitudinais do volume. Estes cálculos foram feitos como função da constante de acoplamento α_s .

De posse dos valores de η, λ e β que minimizam a energia do estado fundamental do polaron superficial, plotamos na figura 5 $E_0(\eta, \lambda, \beta)$ como função de α_s , para os valores $\gamma = \infty, 10$. Analisando a figura 5 vemos que a energia possui dois ramos distintos. O primeiro começa na origem e termina

em α_{sf} , e corresponde a limite de acoplamento fraco, relacionado com pequenos valores da constante de acoplamento α_s . Este ramo foi calculado por Evans-Mills (1972, 1973) dentro da aproximação de Lee-Low-Pines (1953), para a região de acoplamento intermediário e fraco. Este ramo cruza o segundo no ponto $\alpha_s = \alpha_{sc}$. O segundo ramo começa em α_{si} e corresponde à aproximação de acoplamento forte, como discutido por Hipólito (1979 b). Entre estes dois ramos existe um terceiro que começa em α_{si} e termina em α_{sf} e corresponde ao máximo da energia.

Quando a constante de acoplamento atinge o valor crítico α_{sc} , o polaron superficial passa de um estado quase livre, para um estado fortemente ligado, num comportamento do tipo transição de fase de primeira ordem.

Na figura 6 plotamos o parâmetro que minimiza a energia como função da constante de acoplamento α_s . A linha cheia (larga) corresponde à solução estável, a curva pontilhada corresponde ao ramo de máximo da energia, e a curva cheia (fina) corresponde à solução instável do problema. Pela forma descontínua com que o parâmetro passa do valor $\eta = 1$ que equivale ao acoplamento fraco, para $\eta \neq 1$, que tende ao acoplamento forte, fica bem claro o comportamento tipo transição de fase do polaron superficial.

Quando o parâmetro γ diminui, isto é, quando ocorre uma maior penetração da função de onda do elétron no material, esta fica mais compactada à superfície, o ponto crítico de transição de fase tende a diminuir, assim o elétron pode ficar mais facilmente preso à superfície.

Nas figuras 7, 8 e 9 plotamos, respectivamente, a

massa efetiva do polaron superficial, o número de fonons ao redor do elétron, e a localização espacial do elétron na direção perpendicular à superfície como função de α_s .

A transição de fase fica bem caracterizada pela descontinuidade destas funções, quando a constante de acoplamento atinge o valor crítico α_{sc} .

Concluimos essa seção com algumas considerações sobre o parâmetro γ . Quando a barreira de potencial V_0 é muito maior que a energia de ligação do elétron, a aproximação $\gamma = (2mV_0/\hbar)^{1/2}$ é uma boa aproximação. Entretanto no caso em que a barreira V_0 não for tão alta assim, o parâmetro deverá depender também de α_s . Assim sendo, γ não poderá ser um parâmetro previamente fixado. O melhor então será tratar γ como um parâmetro variacional.

CAPÍTULO V

CONCLUSÃO

Neste trabalho aplicamos o formalismo de transformação canônica para estudar as propriedades do estado fundamental do polaron superficial. Nós consideramos o caso em que o elétron permanece externo ao material, e como consequência interage apenas com os fonons óticos superficiais. Os resultados numéricos mostram uma mudança brusca na energia do estado fundamental, na massa efetiva, no número de fonons ao redor do elétron e na localização espacial do elétron na direção perpendicular à superfície, quando a constante de acoplamento passa por um determinado valor crítico. Neste comportamento do tipo transição de fase o polaron superficial passa de um estado quase livre para um estado fortemente ligado. Os resultados apresentados aqui dão uma boa representação de alguns aspectos qualitativos de um elétron acoplado aos modos superficiais.

Para o futuro seria interessante um estudo mais completo, no qual se levasse em conta também a interação do elétron com os modos volumétricos.

Neste estudo deve-se considerar o elétron tanto externo, quanto interno ao material. É interessante verificar se podem ser formados estados superficiais internos, como previsto teoricamente por Evans-Mills (1973) no limite de acoplamento fraco.

Outro aspecto interessante seria o estudo do efeito de um campo magnético externo sobre o polaron superficial.

Peeters e Devreese (1981) estudando o polaron volumétrico num campo magnético, encontrando uma possível transição de fase, quando a relação entre a frequência ciclotrônica e a frequência do fonon ótico longitudinal atinge um certo valor crítico.

Outro estudo importante será considerar o efeito sobre o polaron superficial, quando se tratar o problema mais geral, considerando uma temperatura finita. Saitoh (1980) estudou o polaron volumétrico à temperatura finita usando o formalismo de Feynman.

Temos ainda a possibilidade de aplicar este modelo ao estudo dos estados superficiais de positrons em metais.

É interessante notar que o modelo aqui estudado pode ser aplicado a qualquer hamiltoniana que tenha a forma da hamiltoniana de Frohlich para o polaron.

APÊNDICE

HAMILTONIANA DE INTERAÇÃO ELÉTRON - MODOS SUPERFICIAIS

Consideremos um material semi-infinito de área plana A em $z = 0$, e que ocupa o semi-espço superior $z > 0$. Vamos considerar o material descrito pela função dielétrica dependente apenas da frequência do modo superficial, $\epsilon = \epsilon(\omega)$.

A dependência do vetor de onda $\vec{k}$ não será considerada visando uma maior facilidade nos cálculos, embora um tratamento mais realístico deva considerar esta dependência.

Se o material for um metal ele será descrito pela função dielétrica

$$\epsilon(\omega) = 1 - \left(\frac{\omega_p}{\omega} \right)^2 \quad \dots (A.1)$$

onde $\omega_p = \frac{4\pi n e^2}{m}$ é a frequência de plasma e n é a densidade eletrônica.

No caso do material ser um cristal iônico a função dielétrica é definida como:

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_\infty + \frac{\epsilon_0 - \epsilon_\infty}{1 + \omega^2/\omega_T^2} \quad \dots (A.2)$$

onde ϵ_0 e ϵ_∞ são respectivamente a constante dielétrica estática e ótica do material e, ω_T é a frequência do fonon ótico transversal.

A frequência de um modo superficial é obtida pela condição: $\epsilon(\omega) = -1$ (A.3)

Assim sendo a frequência do plasmon superficial será dada por $\omega_{sp} = \frac{\omega_p}{\sqrt{2}}$, e a frequência do fonon ótico superficial será:

$$\omega_s^2 = \frac{\epsilon_0 + 1}{\epsilon_0 + 1} \omega_T^2$$

Vamos considerar o material como sendo não-magnético, tal que a permeabilidade magnética seja dada por $\mu = 1$.

Os modos superficiais de um material semi-infinito (plasmon em metais, e fonon ótico em cristais iônicos) são de origem inteiramente clássicos. Estes têm associado um campo elétrico que atua sobre o elétron atraindo-o para a superfície. Na derivação deste campo elétrico podemos partir das equações de Maxwell,

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{D} = 4\pi \rho \quad \dots (A.4.a)$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0 \quad \dots (A.4.b)$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{H}}{\partial t} \quad \dots (A.4.c)$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{H} = \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} + \frac{4\pi \vec{J}}{c} \quad \dots (A.4.d)$$

e das relações $\vec{D} = \epsilon(\omega) \vec{E}$, $\vec{B} = \mu \vec{H}$.

Estes campos estão sujeitos às condições de contorno usuais: componente normal do vetor deslocamento elétrico e do campo magnético, componente paralela do campo elétrico e do campo magnético contínuas na superfície.

Neste estudo vamos considerar que não existam cargas ou correntes no sistema, ou seja, $\rho = \vec{J} = 0$.

A equação (A.4.a) nos fornece a relação:

$$\epsilon(\omega) \cdot \vec{\nabla} \cdot \vec{E} = 0 \quad \dots (A.5)$$

A solução com $\vec{\nabla} \cdot \vec{E} \neq 0$ no material corresponde às oscilações volumétricas (plasmon volumétrico em metais, e fonon ótico longitudinal volumétrico em cristais iônicos) e levam ao resultado de Fröhlich (1954), para um material infinito quando $\epsilon(\omega) = 0$.

O caso $\vec{\nabla} \cdot \vec{E} = 0$ e $\epsilon(\omega) \neq 0$, e soluções ligadas, não radiativas, corresponde às oscilações superficiais, na qual estamos interessados. Esta solução nos dirige a dois casos distintos:

- 1) Soluções elétricas ou modos transversais magnéticos
($H_1 = 0$)
- 2) Soluções magnéticas ou modos transversais elétricos
($E_1 = 0$).

A solução a que estamos interessados são as do primeiro tipo, pois apenas estas soluções geram os modos superficiais.

Vamos determinar então a forma do potencial de interação entre um elétron e os modos superficiais.

Devido à invariança translacional, paralelamente à superfície, consideraremos que todas as amplitudes do campo têm a dependência do tipo $\exp i(\vec{K} \cdot \vec{R} - \omega t)$ onde $\vec{K}$ e $\vec{R}$ são vetores do plano xy. Assim as equações (A.4) se reduzem a:

$$E_{||} = \frac{i}{k} \frac{\partial E_z}{\partial z} \quad \dots (A.6)$$

$$H_{//} = \frac{\omega \epsilon(\omega)}{c k} E_z \quad \dots (A.7)$$

$$\frac{\partial^2 E_z}{\partial z^2} - \gamma_i^2 E_z = 0 \quad \dots (A.8)$$

onde

$$\gamma_i = \left[k^2 - \frac{\omega^2 \epsilon_i}{c^2} \right]^{1/2}, \quad i = 1, 2 \quad \dots (A.9)$$

e $\epsilon_1 = 1$, no vácuo

$\epsilon_2 = \epsilon(\omega)$, no material.

Encontramos para a componente z , do campo elétrico a solução:

$$E_z = \begin{cases} E_z^{(1)} e^{\gamma_1 z} e^{i(\vec{k} \cdot \vec{R} - \omega t)} & , z < 0 \\ E_z^{(2)} e^{\gamma_2 z} e^{i(\vec{k} \cdot \vec{R} - \omega t)} & , z > 0 \end{cases} \quad \dots (A.10)$$

A condição de continuidade da componente paralela do campo elétrico e do campo magnético na superfície nos fornece a equação de auto valor que descreve os modos superficiais como sendo:

$$\epsilon(\omega) = - \frac{\gamma_2}{\gamma_1} \quad \dots (A.11)$$

Desde que γ_1 e γ_2 são positivos, esta relação mostra que os modos superficiais só existem para $\epsilon(\omega) < 0$.

O caso em que estamos interessados, que são os modos não radiativos, os parâmetros γ_1 e γ_2 são reais, isto é, $k^2 > \frac{\omega^2 \epsilon_i(\omega)}{c^2}$. No limite em que $k c \gg \omega$, podemos considerar

$\gamma_1 = \gamma_2 \equiv K$. Neste caso temos $\epsilon(\omega) = -1$, condição que define os modos superficiais.

O campo elétrico associado ao modo superficial po de ser expresso como uma superposição de

$$\vec{E} = \sum_{\vec{k}} \left[\frac{E_z(z) \hat{e}_z + E_k \vec{k}}{k} \right] e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} \quad \dots (A.12)$$

ou de maneira equivalente, em termos do potencial escalar

$$\phi(\vec{R}, z) = \begin{cases} \sum_{\vec{k}} \phi_{1\vec{k}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R} + kz} & , z < 0 \\ \sum_{\vec{k}} \phi_{2\vec{k}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R} - kz} & , z > 0 \end{cases} \quad \dots (A.13)$$

O campo de deslocamento é expresso por:

$$\vec{U}(\vec{R}, z) = \begin{cases} 0 & , z < 0 \\ \sum_{\vec{k}} \vec{U}_{\vec{k}} e^{-kz + i\vec{k} \cdot \vec{R}} & , z > 0 \end{cases} \quad \dots (A.14)$$

onde $\vec{U}_{\vec{k}} = U_{kz} \hat{e}_z + U_{\vec{k}} \frac{\vec{k}}{k}$

Nos modos superficiais só pode ocorrer flutuações de carga na superfície, tal que

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{U}(\vec{R}, z) = 0 \quad \dots (A.15)$$

logo, $U_{\vec{k}} = -i U_{kz}$.

A relação entre o campo de deslocamento e o potencial é dada por:

$$\nabla^2 \phi_i(\vec{R}, z) = -4\pi \delta \rho_i = 4\pi \rho_i \vec{\nabla} \cdot \underline{U}(\vec{R}, z), \quad (\text{A.16})$$

onde $\delta \rho_i$ é a flutuação de carga.

Então de (A.15) e (A.16) temos:

$$\delta \rho = \sum_{\vec{k}} n e U_{kz} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} \quad \dots (\text{A.17})$$

Da descontinuidade da componente normal do campo elétrico podemos determinar $\delta \rho$, expresso em função de ϕ_{1k} ou ϕ_{2k} , como:

$$\delta \rho = \sum_{\vec{k}} \left(\frac{k}{2\pi} \right) \phi_{2k} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} \quad \dots (\text{A.18})$$

Então, a partir das equações (A.17) e (A.18) podemos escrever que:

$$\phi_{1k} = \phi_{2k} = \left(\frac{2\pi n e}{k} \right) U_{kz} \quad \dots (\text{A.19})$$

Introduzindo os operadores de criação e destruição para o plasmon superficial (Economou e Ngai, 1974), pela relação

$$\begin{aligned} a_{\vec{k}} &= \left(\frac{A\pi n^2 e^2}{\hbar \omega k} \right)^{1/2} U_{\vec{k}} + i \left(\frac{2A n m \hbar \omega}{k} \right)^{1/2} p_{\vec{k}} \\ a_{-\vec{k}}^+ &= \left(\frac{A\pi n^2 e^2}{\hbar \omega k} \right)^{1/2} U_{\vec{k}} - i \left(\frac{2A n m \hbar \omega}{k} \right)^{1/2} p_{\vec{k}}, \end{aligned} \quad (\text{A.20})$$

obedecendo a relação de comutação $[a_{\vec{k}}, a_{\vec{k}'}^+] = \delta_{\vec{k}\vec{k}'}$, podemos reescrever o potencial escalar na forma quantizada. Usando as Eqs. (A.19) e (A.20) temos:

$$\phi(\vec{R}, z) = \sum_{\vec{k}} \left(\frac{\pi \hbar \omega}{A k} \right)^{1/2} e^{-k|z| + i\vec{k} \cdot \vec{R}} (a_{\vec{k}} - a_{-\vec{k}}^+) \quad \dots (\text{A.21})$$

Definindo

$$V_{\vec{k}} = -\hbar\omega_s \left(\frac{\hbar}{2m\omega_s} \right)^{1/2} \left(\frac{2\pi\alpha_s}{Ak} \right)^{1/2} \dots (\text{A.22})$$

com

$$\alpha_s = \frac{e^2}{2\hbar\omega_s} \left(\frac{2m\omega_s}{\hbar} \right)^{1/2} \epsilon_{ef}^s \dots (\text{A.23})$$

onde ω_s é a frequência do modo superficial, e ϵ_{ef} é

$$\epsilon_{ef}^s = 1 \text{ , para os metais}$$

$$\epsilon_{ef}^s = \frac{\epsilon_0 - 1}{\epsilon_0 + 1} - \frac{\epsilon_\infty - 1}{\epsilon_\infty + 1} \text{ , para os cristais iônicos.}$$

A energia potencial de interação elétron-modos superficiais pode então ser expressa por:

$$H_I^s = \sum_{\vec{k}} V_{\vec{k}} e^{-k|z|} (a_{\vec{k}}^+ e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}} + h.c.). (\text{A.24})$$

De maneira análoga podemos obter a hamiltoniana de interação elétron-modos volumétricos, levando em conta o efeito da superfície, como sendo dada por:

$$H_I^v = \sum_{\vec{k}} e(z) \left[v_{\vec{k}}^* e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}} (e^{-ik_z z} - e^{-kz}) b_{\vec{k}}^+ + h.c. \right], \dots (\text{A.25})$$

onde $b_{\vec{k}}^+$ ($b_{\vec{k}}$) é o operador de criação (destruição) dos modos volumétricos. $\vec{k} = (\vec{k}_1, k_2)$ é o vetor de onda do modo volumétrico

trico de frequência longitudinal ω_L ,

$$U_{\vec{k}} = -\frac{i\hbar\omega_L}{k} \left(\frac{\hbar}{2m\omega_L} \right)^{1/4} \left(\frac{4\pi\alpha}{V} \right)^{1/2},$$

e

.... (A.26)

$$\alpha = \frac{e^2}{2\hbar\omega_L} \left(\frac{2m\omega_L}{\hbar} \right)^{1/2} \epsilon_{ef}^v$$

Nos metais $\epsilon_{ef} = 1$ e nos cristais iônicos $\epsilon_{ef} =$
 $= \frac{1}{\epsilon_{\infty}} - \frac{1}{\epsilon_0}.$

α e α_s são respectivamente a constante de acoplamento adimensional da interação elétron-modos volumétricos e elétron-modos superficiais.

BIBLIOGRAFIA

- BABIKER, M. e TILLEY, D.R., Sol. State Comm. 39, 691-97.(1981)
- BARBERÁN, N. e ECHENIQUE, Phys. Rev. B.19, 5431-32 (1979)
- BARTON, G., J. Phys. C: Sol. State Phys. 14, 1974-94 (1981)
- BARTON, G. e BABIKER, M., Idem 14 4951-68, (1981)
- CLARK, T.D., Sol. State Comm. 16, 861-65 (1975)
- ECONOMOU, E.N. e NGAI, K.L., Advances in Chemical Physics, volume XXVII, editado por I. Prigogine e Stuart A. Rice (John Wiley and Sons, New York 1974), p. 265-354
- EVANS, E. e MILLS, D.L., Sol. State Comm. 11, 1093-98 (1972)
- Idem, Phys. Rev. B.8, 404-18 (1973)
- FARIAS, G.A.; STUART, N. e HIPÓLITO, O., a ser publicado (1982)
- FROHLICH, H., Advan. Phys. 3, 325-61 (1954)
- FEYNMAN, R.P., Phys. Rev. B.7, 660-65 (1955)
- HIPÓLITO, O., Sol. State Comm. 32, 515-19 (1979)
- Idem, J. Phys. C: Sol. State Phys. 12, 1-6 (1979 b)
- Idem, Interação de partículas carregadas com a superfície de um material semi-infinito. Tese apresentada no Departamento de Física do IFQSC-USP, 1979)
- HUYBRECHTS, W.J., J. Phys. C: Sol. State Comm. 10, 3761-68 (1977); 9, L211-L212 (1976)
- Idem, Sol. State Comm., 28, 95-97 (1978)
- LARSEN, D.M., Phys. Rev. 144, 697-702 (1966)
- LEE, T.D.; LOW, F.E. e PINES, D., Phys. Rev. 90, 297-302 (1953)
- LUTTINGER, J.M. e LU, C.Y., Phys. Rev. B21, 4251-63 (1980)
- MAHAN, G.D., Elementary Excitation in Solids, Molecules and Atoms, Parte B, editado por J.T. Devreese, A.B. Kuns, e T.C. Kollins (Plenum Press, London, 1974) p. 93-130.
- MAŃKA, R., Phys. Lett. 67.A, 311-12, (1978)

- Idem, Phys. Stat. Sol. b.93, 53-58 (1979)
- MAŃKA, R. e SUFFCZYŃSKI, M., J. Phys. C: Sol. State Phys. 13, 6369-79 (1980)
- NIEMINEN, R.M. e HODGES, C.H., Phys. Rev. B.18, 2568-76 (1978)
- PEETERS, F.M. e DEVREESE, J.T., Sol. State Comm. 39, 445-49 (1981)
- PEKAR, S.I., Untersuchungen Über die Elektronentheorie der Kristalle (Berlin: Akademik-Verlag)
- RONA, M. e ICERLEBI, A., Phys. Rev. B.19, 5431- (1979)
- SAITOH, M., J. Phys. Soc. Japan, 49, 878-85 (1980)
- SAK, J., Phys. Rev. B.6, 3981-86 (1972)
- SHOJI, H. e TOKUDA, N., J. Phys. C: Sol. State Phys. 13, L173-6 (1981)
- TOKUDA, N., Idem, 14, 1231-34 (1981)
- TOYOZAWA, Y., Prog. Theor. Phys., 26, 29-44 (1981)

LEGENDA DAS FIGURAS

FIGURA 1

Energia do estado fundamental do polaron superficial, em unidades de $\hbar\omega_s$, como função da constante de acoplamento α_s , para dois valores da distância do elétron à superfície, z_0 . A linha cheia (larga) corresponde à solução estável com mais baixa energia. A linha cheia (fina) corresponde à segunda solução de energia mínima representando um estado meta-estável, onde $\alpha_s < \alpha_{sc}$ representa o estado fortemente ligado e, $\alpha_s > \alpha_{sc}$ representa o estado quase livre. A linha pontilhada corresponde ao máximo de energia representando uma solução instável.

FIGURA 2

Parâmetro variacional η , que minimiza a energia do estado fundamental, em função da constante de acoplamento α_s , para dois valores de z_0 , distância do elétron à superfície. As curvas são descritas como na figura 1.

FIGURA 3

Massa efetiva do polaron superficial como função da constante de acoplamento para dois valores de z_0 , distância do elétron à superfície.

FIGURA 4

Número médio de fonons ao redor do elétron como função da constante de acoplamento α_s para dois valores de z_0 , a distância do elétron à superfície.

FIGURA 5

Energia do estado fundamental do polaron superficial como função da constante de acoplamento α_s para dois valores de γ , que é o inverso da penetração da função de onda no material. As notações α_{si} , α_{sc} e α_{sf} bem como as curvas estão descritas no texto.

FIGURA 6

Parâmetro variacional η que minimiza a energia do estado fundamental do polaron superficial como função da constante de acoplamento para dois valores de γ , inverso da penetração da função de onda no material.

FIGURA 7

Massa efetiva do polaron superficial como função da constante de acoplamento α_s para dois valores de γ , inverso da penetração da função de onda no material.

FIGURA 8

O número médio de fonons ao redor do elétron como função da constante de acoplamento α_s para dois valores de γ , inverso da penetração da função de onda no material.

FIGURA 9

Localização espacial do elétron perpendicularmente à superfície como função da constante de acoplamento α_s para dois valores de γ , inverso da penetração da função de onda no material.

FIGURA 1

FIGURA 2

FIGURA 3

FIGURA 4

FIGURA 5

FIGURA 6

FIGURA 7

FIGURA 8

FIGURA 9