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

ESTADOS SUPERFICIAIS EM SISTEMAS
QUASE-BIDIMENSIONAIS

GIL DE AQUINO FARIAS

Departamento de Física
Universidade Federal de São Carlos

(Tese apresentada ao Instituto de Física e
Química de São Carlos - USP, para a obten-
ção do título de Doutor em Física)

ORIENTADOR:

Prof. Dr. Oscar Hipólito

SÃO CARLOS
1980

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

ESTADOS SUPERFICIAIS EM SISTEMAS
QUASE-BIDIMENSIONAIS

GIL DE AQUINO FARIAS

Departamento de Física
Universidade Federal de São Carlos

(Tese apresentada ao Instituto
de Física e Química de São Car-
los - USP, para a obtenção do
título de Doutor em Física)

ORIENTADOR:

Prof.Dr. Oscar Hipólito .

SÃO CARLOS
1980

MEMBROS DA COMISSÃO JULGADORA DA TESE DE DOUTORADO DE GIL DE
AQUINO FARIAS

APRESENTADA AO INSTITUTO DE FÍSICA E QUÍMICA DE SÃO CARLOS, DA
UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO, EM 28 DE março DE 1980.

COMISSÃO JULGADORA:

Dr. Oscar Hipólito

- Orientador

Dr. Roberto Leal Lobo e Silva Filho

Dr. Bernhard Joachim Mokross

Dra. Vera Beatriz Freitas de Campos

Dr. Luis Marcos Brescansin

À Angela e Deborah

A meus pais

AGRADEÇO

ao Prof. Dr. Oscar Hipólito, pelo interesse e dedicação na reali
zação deste trabalho;

ã Angela, pelo apoio durante toda a elaboração;

aos colegas Vera Beatriz, Castilho Alcaraz e Nelson Studart, pe
la colaboração através de proveitosas discussões;

aos Profs. Milton F. de Souza e Roberto Lobo, pelo impulso ini
cial junto ao Instituto de Física e Química de São
Carlos;

aos colegas e funcionários do Departamento de Física da UFSCar
e do Instituto de Física e Química de São Carlos -
USP, especialmente do Centro de Computação, que di-
reta ou indiretamente contribuíram para o desenvol-
vimento deste trabalho;

ã Angela e Maria Laura, pelo excelente trabalho de datilografia

RESUMO

Neste trabalho estudamos o efeito da rugosidade da interface isolante-semicondutor, sobre a energia do estado fundamental do elétron ligado a uma impureza ionizada, situada próxima desta interface, para um sistema MOSFET de $\text{SiO}_2\text{-Si}$ [001].

Para impurezas doadoras situadas no Si, a energia de ligação é obtida através do método variacional, e os resultados são comparados com os de N.O.Lipari. Com impurezas situadas no óxido, a energia de ligação também é calculada de modo variacional, e a blindagem dos elétrons é levada em conta numa teoria de resposta linear. Os resultados obtidos são compatíveis com os experimentais, e indicam que o efeito da rugosidade é importante na blindagem dos elétrons.

Calculamos também a energia de separação entre sub-bandas elétricas de uma camada de inversão de Si tipo-n. Para isto, consideramos um potencial "nearly self-consistent" e o efeito da rugosidade é incorporado ao Hamiltoniano do sistema através do potencial imagem e da mudança da barreira de potencial na interface.

Os resultados mostram uma mudança significativa na energia de separação entre as sub-bandas, e indicam que a rugosidade da interface isolante-semicondutor não pode ser desprezada, num cálculo onde os efeitos de troca e correlação são levados em conta.

Considerando elétrons sobre uma superfície de um

filme de hélio líquido, calculamos a massa efetiva e a energia de formação do anion superficial. Para este cálculo usamos o método variacional de Feynman. Com isto, os resultados são válidos para qualquer campo elétrico aplicado. Tais resultados, quando comparados com os de outras teorias do anion superficial, permitem-nos inferir os intervalos de campo elétrico em que as mesmas são válidas.

ABSTRACT

We have investigated the effect of surface roughness on the binding energies of an electron bound to an ionized impurity center localized near the interface both in the silicon and in the silicon-dioxide of a MOS - Si [001] system. We have also discussed the roughness effects on the electric-subband energy separation in n-type Si inversion layer. The calculation reported here shows that those effects are significant and are in satisfactory agreement with experimental data.

In the case of electrons on liquid helium surface, we have calculated the effective mass and the formation energy of a surface anion (electron-ripplon interaction). We have used the Feynman variational method, and the results we have got gives the range of validity of other approximations.

SUMÁRIO

RESUMO

ABSTRACT

INTRODUÇÃO	10
CAPÍTULO 1 - ELÉTRONS EM SISTEMAS QUASE-BIDIMENSIONAIS	13
1.1 - <u>Sistemas MOSFET</u>	13
1.1.1 - Sub-bandas elétricas	15
1.1.2 - Estados ligados	19
1.2 - <u>Elétrons sobre uma Superfície de Hélio Líquido</u>	20
1.2.1 - Efeitos devido à deformação na superfície de hélio	23
CAPÍTULO 2 - PRINCÍPIO VARIACIONAL	25
2.1 - <u>Método de Rayleigh-Ritz</u>	25
2.2 - <u>Método de Feynman</u>	27
2.2.1 - Propagador e matriz densidade	27
2.2.2 - Propagador e matriz densidade no formalismo de integrais de trajetória	30

CAPÍTULO 3 - PROPRIEDADES ELETRÔNICAS NUMA INTER-	
FACE ISOLANTE-SEMICONDUCTOR	39
3.1 - <u>Potencial de uma Carga Próxima</u>	
<u>a uma Interface Rugosa</u>	39
3.2 - <u>Rugosidade em Sistemas MOSFET</u>	60
3.2.1 - Impurezas carregadas	
no isolante	61
3.2.2 - Efeito da rugosidade	
sobre a blindagem dos	
elétrons na camada de	
inversão	72
3.2.3 - Energia de transição	
entre sub-bandas	74
3.3 - <u>Impurezas Doadoras no Semicon-</u>	
<u>dutor</u>	76
3.4 - <u>Resultados e Conclusões</u>	80
CAPÍTULO 4 - ESTADOS SUPERFICIAIS LOCALIZADOS	84
4.1 - <u>Lagrangeana dos Ríplons</u>	85
4.2 - <u>Interação Elétron-Ríplon</u>	92
4.3 - <u>Energia de Formação do Anion</u>	
<u>Superficial em filmes de He</u>	
<u>Líquido</u>	100
4.4 - <u>Massa Efetiva do Anion Super-</u>	
<u>ficial em filmes de He líqui-</u>	
<u>do</u>	111
4.5 - <u>Anion Superficial na Interfa-</u>	
<u>ce He³-He⁴</u>	116

4.6 - <u>Resultados e Conclusões</u>	120
APÊNDICE A	124
APÊNDICE B	126
APÊNDICE C	132
LEGENDA DAS FIGURAS	137
FIGURAS	140
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	154

INTRODUÇÃO

O estudo de sistemas quase-bidimensionais tem despertado grande interesse nos últimos anos, como bem o demonstram os anais das três conferências internacionais, realizadas nos Estados Unidos (1975), na Alemanha (1977) e no Japão (1979).

Destes sistemas estudaremos particularmente algumas propriedades dos elétrons na camada de inversão de um semicondutor em sistemas MOSFET (Metal-Oxide-Field-Effect-Transistor) e de elétrons próximos de uma superfície de hélio líquido.

Elétrons na superfície de hélio líquido formam um dos mais interessantes sistemas quase-bidimensionais. Como exemplo mais marcante podemos citar a formação de um cristal de Wigner numa interface $\text{He}^3\text{-He}^4$.¹ Para sistemas MOSFET, além das propriedades fundamentais da Física da Matéria Condensada temos um outro ponto importante a salientar, que é sua aplicação no processo de miniaturização em inúmeros componentes eletrônicos.

O aspecto fundamental associado aos sistemas quase-bidimensionais é a quantização dos estados eletrônicos na direção perpendicular à superfície, enquanto que o movimento na direção paralela é praticamente livre.

As propriedades gerais associadas a estes sistemas serão descritas no primeiro capítulo do presente trabalho. No segundo capítulo apresentaremos os métodos variacionais de Rayleigh-Ritz² e de R.P.Feynman.³ Estes métodos tem se mostrado

extremamente úteis para a resolução de problemas específicos nos sistemas em questão. Isto porque a solução numérica é bastante difícil, e o método de perturbação não é aplicável.

No capítulo 3 será visto o efeito da rugosidade na interface óxido-semicondutor em sistemas MOSFET e sobre impurezas doadoras no semicondutor, próximas à interface. Para isto apresentaremos inicialmente o potencial de uma carga na presença de uma interface rugosa.⁴

Das propriedades dos elétrons na camada de inversão em sistemas MOSFET serão estudados dois aspectos: o nível de energia mais baixo para os elétrons ligados às impurezas no óxido, e a energia de transição entre as duas primeiras sub-bandas. Para a energia de ligação do elétron consideraremos baixas concentrações de impurezas no óxido, possibilitando assim tratarmos o problema de apenas uma impureza. O potencial levará em conta a rugosidade na interface óxido-semicondutor. O método variacional de Rayleigh-Ritz será usado para a função de onda do elétron.

A energia de ligação será obtida como função da densidade de cargas na camada de inversão, para várias distâncias da impureza à interface, e da rugosidade da superfície.

Além do efeito da rugosidade também será considerada a blindagem dos elétrons, na aproximação de campo médio.

No cálculo da energia de transição entre as duas primeiras sub-bandas, usaremos o potencial "nearly self-consistent" de F.J.Ohkawa e Y.Uemura.⁵

Para o caso de impurezas doadoras no semicondutor, na ausência de campo elétrico externo, a energia de ligação também será obtida através do método variacional de Rayleigh-Ritz. Os valores encontrados serão comparados com os obtidos teoricamente por N.O.Lipari.⁶

No capítulo 4 discutiremos a interação do elétron com as oscilações da superfície (riplons) de hélio líquido: o anion superficial. A massa efetiva e a energia de formação do anion superficial serão calculadas para dois tipos de interface: vácuo-He⁴ líquido e He³-He⁴.

A Lagrangeana que descreve o movimento do sistema elétron-riplon é análoga à do sistema elétron-fonon em materiais polares. Desta forma, o método de Feynman também pode ser usado para este problema.

Em virtude da forma da interação elétron-riplon, os resultados obtidos serão válidos para qualquer valor do campo elétrico externo aplicado.

Estes resultados serão discutidos e comparados com os obtidos por V.B.Shikin e Yu.P.Monarkha,⁷ e por L.M.Sander.⁸

1 - ELÉTRONS EM SISTEMAS QUASE-BIDIMENSIONAIS

Elétrons na camada de inversão de um semicondutor, em sistemas MOSFET, e sobre uma superfície de hélio líquido, representam os mais estudados sistemas quase-bidimensionais. Como os processos envolvidos em cada sistema possuem características diferentes, apresentaremos conceitos e propriedades gerais associadas a estes sistemas, e que serão utilizadas no decorrer deste trabalho.

1.1 - Sistemas MOSFET

Em todos os problemas aqui tratados o semicondutor usado será o silício tipo-p. Outros semicondutores, tais como o InSb, Ge, também podem ser utilizados na fabricação de um sistema MOSFET.

A estrutura de um sistema MOSFET de Si é mostrada na fig.(1). Numa descrição sucinta, tem-se um cristal de Si tipo-p, onde é crescida termicamente uma camada de SiO_2 , de espessura entre 10^2 a 10^3 Å. Um metal (o mais utilizado tem sido Alumínio), é depositado sobre o óxido, e o contato ôhmico é estabelecido sob o Si, formando o segundo eletrodo. Através destes contatos aplica-se um campo elétrico perpendicular à inter-

face óxido-semicondutor.

Com um campo elétrico aplicado perpendicularmente à interface óxido-semicondutor, os portadores minoritários (elétrons) aproximam-se da interface. Nesta situação mostramos, na fig.(2a), a energia de Fermi E_F , o mínimo da banda de condução E_C , e a energia de valência E_V .

A região onde os portadores majoritários (buracos) tem uma concentração menor que a do interior do cristal é chamada de camada de "depletion".

Para campos elétricos intensos, na região próxima à superfície, os portadores minoritários terão uma concentração maior que os portadores majoritários, conforme indicado na fig. (2b). Nesta região temos uma inversão na concentração de portadores de carga, caracterizando um semicondutor tipo-n. Desta forma, a camada de inversão tipo-n se constitui em um típico sistema eletrônico quase-bidimensional.

Se aplicarmos uma diferença de potencial entre os pontos a e b (fig.1), haverá uma corrente devido aos elétrons na camada de inversão. Como a distância entre os pontos de contato a e b (fig.1) é da ordem de $1000 \text{ \AA}$, é possível a miniaturização de componentes eletrônicos.

1.1.1 - Sub-bandas elétricas

Para descrever o movimento dos elétrons na camada de inversão do semiconductor, vamos considerar a equação de massa efetiva

$$\left[T - e\phi(\vec{x}) - E \right] \Psi(\vec{x}) = 0, \quad (1.1)$$

onde T é o operador de energia cinética, e $\phi(\vec{x})$ é o potencial eletrostático na camada de inversão, resultante da aplicação de um campo elétrico perpendicular à interface, dependente apenas da direção perpendicular z . Este potencial é determinado através da equação de Poisson

$$\nabla^2 \phi(z) = -4\pi\rho/\epsilon_s, \quad (1.2)$$

onde ρ é a densidade de cargas dada pela carga fixa na camada de "depletion", somada à carga dos elétrons existentes na camada de inversão, e ϵ_s é a constante dielétrica estática do semiconductor.

As condições de contorno para (1.2) serão dadas por

$$\phi(z) \rightarrow 0 \quad \text{para} \quad z \rightarrow \infty \quad (1.3a)$$

e

$$\epsilon_{ox} \left. \frac{d\phi(z)}{dz} \right|_{z=0^-} = \epsilon_s \left. \frac{d\phi(z)}{dz} \right|_{z=0^+} \quad (1.3b)$$

onde ϵ_{ox} é a constante dielétrica estática do óxido.

A barreira de potencial na interface $\text{SiO}_2\text{-Si}$ (3.1 eV), sendo muito maior que a energia dos elétrons na camada de inversão, pode ser considerada como infinita. A condição para $\Psi(\vec{x})$ na interface será então

$$\left. \Psi(\vec{r}, z) \right|_{z=0} = 0 \quad (1.4)$$

onde $r = (x^2 + y^2)^{1/2}$.

Nos problemas que serão estudados tomaremos como nula a função de onda do elétron na interface. Considerando o plano $[001]$ do Si paralelo à interface, a equação (1.1) pode ser escrita como

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_x} \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\hbar^2}{2m_y} \frac{\partial^2}{\partial y^2} - \frac{\hbar^2}{2m_z} \frac{\partial^2}{\partial z^2} - e\Phi(z) \right] \Psi(\vec{r}, z) = E\Psi(\vec{r}, z) \quad (1.5)$$

onde m_x , m_y e m_z representam as componentes principais do tensor de massa efetiva do elétron.

Uma vez que o potencial depende apenas de z , a função de onda é da forma

$$\Psi(\vec{r}, z) = e^{-ik_x x} e^{-ik_y y} f_n(z) \quad (1.6)$$

Assim, a energia total do elétron será

$$E = \frac{\hbar^2}{2m_x} k_x^2 + \frac{\hbar^2}{2m_y} k_y^2 + E_n \quad (1.7)$$

e a equação de movimento na direção perpendicular à interface será

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m_z} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + e\phi(z) + E_n \right] f_n(z) = 0 \quad (1.8)$$

Com as equações (1.6) e (1.8) temos que na direção paralela à interface o movimento da partícula é livre, enquanto que na direção perpendicular o movimento é quantizado. Desta forma, os elétrons no plano paralelo à interface estão situados em sub-bandas elétricas, onde cada uma corresponde a um nível quantizado E_n na direção z (fig.3).

A quantização destes níveis foi prevista por J.R. Schrieffer,⁹ em 1957, mas a natureza do gás de elétrons bidimensional, onde apenas uma sub-banda é ocupada, foi observada somente em 1966, por A.B.Fowler et al.¹⁰

O intervalo de densidades acessíveis experimentalmente na camada de inversão determina a natureza do gás de elétrons. A densidade varia entre $n=10^{11}$ e 10^{13} cm^{-2}

A energia de Fermi E_F para um gás de elétrons bidimensional é dada por

$$E_F = \frac{\pi \hbar^2 n}{m} \quad (1.9)$$

Assim, E_F para a camada de inversão varia entre 1 e 50 meV, , e portanto o gás de elétrons, mesmo a altas temperaturas, obedece à estatística de Fermi.

Em virtude destas densidades, a interação elétron-elétron deve ser levada em conta no cálculo do potencial $\phi(z)$.

Considerando esta interação, vários modelos de potencial tem sido propostos.^{11,12,13} Entretanto, o cálculo de T.Ando^{12,14} apresenta os resultados mais próximos dos obtidos experimentalmente.^{15,16} Para isto, o potencial é calculado de modo autoconsistente, levando-se em conta efeitos de troca e correlação entre os elétrons da camada de inversão.

Os elétrons desta camada estão situados próximos do mínimo da banda de condução. Para o Si esta banda apresenta (fig. 4) seis mínimos em $(\pm k_0, 0, 0)$, $(0, \pm k_0, 0)$, $(0, 0, \pm k_0)$ onde $k_0 = 0.85 (2\pi/a)$, sendo a constante de rede. O tensor de massa efetiva consiste em uma componente $m_l = 0.916 m$ ao longo do eixo do cristal, e duas componentes iguais com $m_t = 0.190 m$, sendo m a massa do elétron. Considerando a face $[001]$ do Si, teremos para os valores $(0, 0, \pm k_0)$, $m_z = m_l$ e $m_x = m_y = m_t$. Deste modo, as soluções de (1.8) apresentam degenerescência de spin e uma degenerescência nos dois vales. Para $(\pm k_0, 0, 0)$ e $(0, \pm k_0, 0)$ $m_z = m_t$ e portanto as energias E_n associadas serão maiores, que as correspondentes E_n para $(0, 0, \pm k_0)$. Em baixas temperaturas, apenas os vales $(0, 0, \pm k_0)$ são ocupados.

A descontinuidade no potencial produz uma pequena separação entre $(0, 0, \pm k_0)$.¹⁷ As transições entre os vales não serão levadas em conta nos problemas analisados a seguir.

1.1.2 - Estados ligados

Na presença de impurezas carregadas, próximas à interface isolante-semicondutor, formam-se, em geral, estados superficiais localizados, e as propriedades de transporte dos elétrons paralelos à interface são alteradas.

A.B.Fowler e A.Hartstein,¹⁸ difundindo ions Na^+ no óxido, num sistema MOSFET de SiO_2 - Si [001], produziram e observaram estados ligados na interface.

O primeiro estudo teórico destes estados localizados e de suas energias de ligação, numa camada de inversão de um semicondutor, foi apresentado por F.Stern e W.E.Howard.¹⁹ Nesta teoria considerou-se a camada de inversão com espessura nula, e a blindagem devido aos elétrons foi tomada numa aproximação de resposta linear.

Eliminando a restrição de um sistema bidimensional puro, e sem considerar a blindagem dos elétrons, foram calculadas em vários trabalhos^{6, 20, 21} a energia do estado fundamental e de estados excitados. Usando um formalismo de densidade funcional, B.Vinter²² apresentou também um cálculo para a energia de ligação. Entretanto, os resultados obtidos com estes trabalhos diferem de modo significativo do resultado experimental.¹⁸

Recentemente, O.Hipólito e V.B.Campos²³ calcularam a energia de ligação usando o método variacional, levando em consideração a teoria da resposta linear para a blindagem. Os resultados obtidos mostraram-se de acordo com os experimentais.

Nos trabalhos citados anteriormente, a interface isolante-semicondutor é considerada como sendo um plano ideal. Todavia isto não corresponde à realidade, pois experimentalmente sabe-se que esta interface é rugosa. Assim, analisaremos com detalhes, no capítulo 3, o efeito da rugosidade sobre os estados localizados, e sobre a energia de separação entre sub-bandas da camada de inversão. Os resultados obtidos mostram-se compatíveis com os experimentais, e indicam a importância do efeito da rugosidade.

1.2 - Elétrons sobre uma Superfície de Hélio Líquido

O movimento dos elétrons sobre uma superfície de hélio líquido é análogo ao dos elétrons na camada de inversão de um semicondutor. Entretanto, a densidade eletrônica neste caso varia entre $n=10^5$ e 10^9 cm^{-2} , o que representa a diferença mais significativa entre estes dois sistemas quase-bidimensionais.

A energia de Fermi (1.9) para as densidades acima mencionadas varia entre 10^{-6} e 10^{-2} meV . Portanto, o gás de elétrons na superfície de hélio é um gás clássico mesmo em temperaturas da ordem de milikelvins.

Uma vez que a densidade de elétrons neste sistema é pequena, a contribuição devido à interação elétron-elétron pode ser desprezada no cálculo do potencial $\phi(z)$. Assim, as contri-

buições importantes são dadas pelo potencial imagem e pelo campo elétrico perpendicular à interface.

Supondo que a superfície de hélio seja plana, podemos escrever a função de onda como

$$\psi(\vec{x}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} f_n(z) \quad (1.10)$$

onde $k = (k_x^2 + k_y^2)^{1/2}$, e a equação de movimento na direção z é dada por

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dz^2} f_n(z) + [-e\phi(z) + E_n] f_n(z) = 0 \quad (1.11)$$

sendo m a massa do elétron. No caso da interface hélio-vácuo, a barreira de potencial é $V_0 = 1.0$ eV. O modelo mais simples para o potencial considera a barreira de potencial como sendo infinita, e o potencial imagem como o potencial imagem clássico. Desta forma, para um campo elétrico $E_\perp$ aplicado perpendicularmente à superfície, temos

$$\begin{aligned} \phi(z) &= -\frac{Qe}{z} + E_\perp z & z > 0 \\ &= \infty & z < 0 \end{aligned} \quad (1.12)$$

sendo $Q = (\epsilon_{\text{He}} - 1)/4 (\epsilon_{\text{He}} + 1)$, ϵ_{He} a constante dielétrica estática do hélio.

Para um modelo mais realista devemos considerar a

barreira de potencial na interface V_0 , finita e eliminar a não física divergência $1/z$ do potencial imagem clássico para distâncias próximas à interface. Com estas características, vários modelos de potencial tem sido propostos.^{24, 25}

Considerando um potencial fenomenológico dado por

$$\begin{aligned}\phi(z) &= - \frac{Qe}{z+z^*} & z > 0 \\ &= V_0 & z < 0\end{aligned}\tag{1.13}$$

onde z^* é um parâmetro ajustável, Hipólito et al²⁶ calcularam a separação dos níveis entre o estado fundamental E_0 e o primeiro estado excitado E_1 . Os resultados obtidos com este modelo concordam plenamente com os valores experimentais de C.C.Grimes e T.R.Brown.²⁷ Entretanto, até o momento não se tem ainda um modelo satisfatório de potencial, sem parâmetros ajustáveis, para a interação do elétron com a superfície.

1.2.1 - Efeitos devido à deformação na superfície de hélio

Na região de baixas densidades eletrônicas, o movimento dos elétrons na direção paralela à superfície é governado pelo espalhamento por átomos de vapor de hélio na interface, e por vibrações da superfície de hélio. Estas vibrações correspondem classicamente às ondas de capilaridade, que quando quantizadas são conhecidas como ríplons.

O espalhamento por átomos de vapor é importante na região de temperatura acima de 0.8K. Uma vez que estaremos interessados apenas em temperaturas próximas de 0°K, este espalhamento não será considerado. Para temperaturas menores que 0.6K, predomina o espalhamento devido à interação elétron-ríplon. Nesta região de temperatura, e de campo elétrico $E_{\perp} \sim 400.0$ V/cm, este espalhamento é elástico. Logo, a mobilidade do elétron é calculada através da equação de Boltzman.²⁸ Na região de campos elétricos intensos $E_{\perp} > 2.0 \times 10^3$ V/cm, a superfície de hélio deforma-se devido à pressão do elétron contra a superfície. A depressão da superfície de hélio em torno de cada elétron forma um "dimple" que tende a localizar este elétron no plano.

Elétrons localizados nestes "dimples" são chamados de anion superficial e tem sua massa efetiva, mobilidade e outras propriedades muito diferentes das de um elétron livre na superfície. Como a energia de ligação do elétron no "dimple" é pequena, este sistema é estável apenas em baixas temperaturas $T < 0.1K$.

A teoria de anions superficiais foi inicialmente proposta por V.B.Shikin e Yu.P.Monarkha.⁷ Posteriormente, usando o método variacional, L.M.Sander⁸ calculou a energia de formação para o anion superficial, obtendo resultados diferentes comparados com os de Shikin e Monarkha. Uma discussão mais detalhada destes trabalhos, e a natureza da interação do elétron com a superfície deformada, serão consideradas no capítulo 4.

A mobilidade do anion superficial foi determinada experimentalmente por A.P.Volodin et al,²⁹ S.A.Rydbalko e Yu.Z. Kovdria,³⁰ considerando elétrons sobre filmes de hélio. Os resultados obtidos nestes trabalhos diferem de um fator $\sim 10^4$. Entretanto, estas experiências tem recebido críticas em virtude da espessura do filme de hélio não ser constante.

Para altas densidades de elétrons na superfície de hélio, a relação de dispersão do riplon é modificada devido à interação elétron-riplon. Para concentrações acima de ... $n \sim 2 \times 10^9 \text{ cm}^{-2}$ o sistema torna-se instável.

Recentemente, M.Wanner e P.Leiderer observaram experimentalmente¹ a formação de um cristal de "dimples" na interface $\text{He}^3\text{-He}^4$. Este cristal torna-se instável para altas densidades.

Para o estudo das propriedades do anion superficial usaremos o método de integral de trajetória de Feynman,³ considerando o limite de temperatura $T \rightarrow 0$, e baixa densidade de elétrons. Assim, os resultados serão válidos para o problema de um elétron e qualquer valor de campo $E_{\perp}$ aplicado.

2 - PRINCÍPIO VARIACIONAL

Dentre os métodos de solução para inúmeros problemas, em diversos campos da Física, o método variacional tem sido intensivamente usado com bons resultados. Isto ocorre particularmente nos casos em que a solução numérica é bastante difícil, ou quando o método de perturbação não é aplicável em virtude de não existir um problema próximo, cuja solução exata seja conhecida.

Em virtude da natureza dos problemas aqui estudados usaremos dois métodos alternativos para o princípio variacional, que são o método de Rayleigh-Ritz² e o método de Feynman.³

2.1 - Método de Rayleigh-Ritz

Este método é comumente utilizado em Mecânica Quântica para problemas onde se deseja obter a energia do estado fundamental E_0 de um sistema.

Vamos considerar a energia deste estado como um funcional $E[\Psi]$, definido por

$$E[\Psi] = \frac{\langle \Psi | H | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \quad (2.1)$$

sendo H o Hamiltoniano do sistema, e Ψ uma função arbitrária sujeita à condição

$$\langle \Psi | \Psi \rangle = 1 \quad (2.2)$$

Assim, $E[\Psi]$ satisfaz a duas condições:

a) $E[\Psi]$ é estacionária com respeito a variações arbitrárias de $|\Psi\rangle$ em torno da solução $|\Psi_0\rangle$ de

$$(H-E_0)|\Psi_0\rangle = 0 \quad (2.3)$$

b) Se $|\Psi_0\rangle$ representa o autoestado de energia mais baixa, temos

$$E[\Psi] \geq E_0 \quad (2.4)$$

Com isto, devemos tomar $|\Psi\rangle$ como função de um ou mais parâmetros que devem ser ajustados para tornar mínimo o funcional $E[\Psi]$, isto é,

$$E[\Psi] = E(a,b,\dots) = \frac{\langle \Psi(a,b,\dots) | H | \Psi(a,b,\dots) \rangle}{\langle \Psi(a,b,\dots) | \Psi(a,b,\dots) \rangle} \quad (2.5)$$

de modo que

$$\frac{\partial E}{\partial a} = \frac{\partial E}{\partial b} = \dots = 0 \quad (2.6)$$

A escolha de $|\Psi\rangle$ é importante, e deve satisfazer as simetrias apropriadas do sistema em consideração.

2.2 - Método de Feynman

O formalismo de integrais de trajetória de Feynman³ representa uma formulação alternativa para a Mecânica Quântica, e quivalente à de Schrödinger ou Heisenberg. Como um dos pontos importantes desta teoria, podemos salientar o modo simples e direto de relacionar a Mecânica Quântica à Clássica.

Através de uma continuação analítica para tempos imaginários deste formalismo, podemos calcular a matriz densidade pa ra um sistema cujo Hamiltoniano não dependa explicitamente do tem po. Com isto, as propriedades termodinâmicas do sistema podem ser analisadas.

Uma vez que estamos interessados em estudar as propri edades termodinâmicas de um sistema de elétrons interagindo com a superfície de He líquido, cujo Hamiltoniano não depende de spin , este formalismo pode ser aplicado com bons resultados.

2.2.1 - Propagador e Matriz Densidade

a) Propagador

Vamos considerar um sistema cuja configuração seja ca racterizada por um vetor r, que pode possuir um número arbitrário de componentes. O propagador associado a este sistema é definido ³¹ como

$$K(r''t''; r't') = \langle r''t'' | r't' \rangle \quad (2.7)$$

onde $|r't'\rangle$ é um autoestado do operador $r(t')$ na representação de Heisenberg.

Com esta definição,

$$P(r'', r') = |K(r''t''; r't')|^2 \quad (2.8)$$

representa a probabilidade do sistema, estando em r' no tempo t' , estar em r'' no tempo posterior t'' .

Uma vez que $\langle r''t'' | r't' \rangle^* = \langle r't' | r''t'' \rangle$, definimos

$$K(r''t''; r't') = K(r't'; r''t'')^* \quad \text{para } t'' < t' \quad (2.9)$$

O propagador definido em (2.8) satisfaz as seguintes propriedades:

19) Se $|rt\rangle$ representa um autoestado de r para um tempo t

$$K(r''t''; r't') = \int dr K(r''t''; rt) K(rt; r't') \quad \text{para } t'' > t > t' \quad (2.10)$$

29) Se $\Psi(r', t')$ representa o estado de um sistema no tempo t' , este estado evolui para $\Psi(r'', t'')$ em $t'' > t'$, como

$$\Psi(r'', t'') = \int dr' K(r''t''; r't') \Psi(r', t') \quad (2.11)$$

39) $K(r''t''; r't')$ satisfaz a equação de Schrödinger em (r'', t'') para $t'' > t'$

$$i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial t''} - H(r'', p'', t'') \right) K(r''t''; r't') = 0$$

para $t'' > t'$, (2.12a)

com a condição inicial

$$\lim_{t'' \rightarrow t' + 0} K(r''t''; r't') = \delta(r'' - r') ,$$

(2.12b)

sendo p'' o momentum com um número arbitrário de componentes.

4º) Para um sistema cujo Hamiltoniano não dependa explicitamente do tempo, e

$$H \phi_n(r) = E_n \phi_n(r) ,$$

(2.13)

podemos escrever $K(r''t''; r't')$ em função destes autovalores e autovetores como

$$K(r''t''; r't') = \sum_n e^{\frac{-iE_n}{\hbar}(t''-t')} \phi_n(r'') \phi_n^*(r') \quad (2.14)$$

b) Matriz Densidade no "Ensemble Canônico"

As propriedades termodinâmicas de um sistema, em equilíbrio térmico, podem ser descritas no "ensemble canônico" conhecendo-se sua matriz densidade, definida como

$$\begin{aligned} \rho(r'', r'; \beta) &= \langle r'' | e^{-\beta H} | r' \rangle = \\ &= \sum_n e^{-\beta E_n} \phi_n(r'') \phi_n^*(r') \end{aligned} \quad (2.15)$$

onde $\beta = \frac{1}{k_B T}$, k_B é a constante de Boltzman e T a temperatura do sistema.

Tomando-se o traço de $\rho(r''r'; \beta)$ teremos a função partição Z ,

$$Z = \sum_n e^{-\beta E_n} = \int dr \rho(r, r; \beta), \quad (2.16)$$

e consequentemente a energia livre F , do sistema dada por

$$e^{-\beta F} = Z. \quad (2.17)$$

Se compararmos (2.15) com (2.14) temos que

$$\rho(r'', r'; \beta) = K(r'', t' - i\beta\hbar; r' t') \quad (2.18)$$

Com a equação (2.18) vemos que o conhecimento do propagador nos permite calcular a matriz densidade, através de uma extensão para intervalos de "tempo" imaginários, quando o Hamiltoniano do sistema não depende explicitamente do tempo.

2.2.2 - Propagador e Matriz Densidade no Formalismo de Integrais de Trajetória

Vamos considerar inicialmente o propagador para um sistema de uma partícula, sujeita a um potencial $V(x)$, com apenas um grau de liberdade. Usando a equação (2.10) podemos subdividir o intervalo (t'', t') em intervalos infinitesimais, ou seja,

$$\begin{aligned}
 K(x''t''; x't') &= \int dx_1 \dots dx_n K(x''t''; x_n t_n) \dots \\
 &\dots K(x_{j+1} t_{j+1}; x_j t_j) \dots K(x_1 t_1; x't'),
 \end{aligned}
 \tag{2.19}$$

onde $t_{j+1} - t_j = \epsilon$ é um infinitesimal.

Considerando apenas $K(x_{j+1} t_{j+1}; x_j t_j)$, temos que

$$\begin{aligned}
 K(x_{j+1} t_{j+1}; x_j t_j) &= \langle x_{j+1} t_{j+1} | x_j t_j \rangle = \\
 &= \langle x_{j+1} | \exp \left\{ \frac{-i\epsilon}{\hbar} \left(p^2/2m + V(x) \right) | x_j \rangle
 \end{aligned}
 \tag{2.20}$$

Embora $p^2/2m$ e $V(x)$ não comutem, este fato pode ser desprezado, porque isto nos leva a um erro da ordem de ϵ^2 .

Desta forma, podemos escrever (2.20) como

$$\begin{aligned}
 K(x_{j+1} t_{j+1}; x_j t_j) &= \langle x_{j+1} | e^{\frac{-i\epsilon}{\hbar} \frac{p^2}{2m}} | x_j \rangle \\
 &\quad e^{-\frac{i\epsilon}{\hbar} V(x_j)}
 \end{aligned}
 \tag{2.21}$$

O primeiro fator da direita em (2.21) corresponde ao propagador de uma partícula livre, que é dado por³

$$\langle x_{j+1} | e^{\frac{-i\epsilon}{\hbar} \frac{p^2}{2m}} | x_j \rangle = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \epsilon} \right)^{1/2} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \frac{m}{2} \left(\frac{x_{j+1} - x_j}{\epsilon} \right)^2 \epsilon \right\} \quad (2.22)$$

Como $(x_{j+1} - x_j)/\epsilon$ é a velocidade média da partícula entre x_{j+1} e x_j , podemos finalmente escrever

$$K(x_{j+1}, t_{j+1}; x_j, t_j) = \frac{1}{A} e^{\frac{i}{\hbar} L(x_j, \dot{x}_j, t_j)} \quad (2.23)$$

onde

$$A = (2\pi i \hbar \epsilon / m)^{1/2} \quad (2.24)$$

e $L(x_j, \dot{x}_j, t_j)$ é a Lagrangeana do sistema.

Substituindo (2.23) e (2.24) em (2.19) temos que

$$K(x''t''; x't') = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{A} \int \dots \int \frac{dx_1}{A} \dots \frac{dx_n}{A} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{j=0}^n L(x_j, \dot{x}_j, t_j) \right\} \quad (2.25)$$

onde $x_0 = x'$, $x_{n+1} = x''$ e $\epsilon = (t'' - t') / (n+1)$.

O conjunto de pontos $(x', t'; x_1, t_1; \dots; x_n, t_n; x'', t'')$ representa no espaço (x, t) uma aproximação para uma trajetória do sistema entre os pontos (x', t') e (x'', t'') . Quando tomamos $n \rightarrow \infty$ a integração sobre todo o espaço para cada ponto intermediário torna-se uma integral sobre todas as trajetórias. Assim,

para este sistema temos que

$$\begin{aligned}
 K(x''t''; x't') &= \int D x(t) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t'}^{t''} L(x, \dot{x}, t) dt \right\} = \\
 &= \int D x(t) e^{\frac{i}{\hbar} S}
 \end{aligned} \tag{2.26}$$

onde a ação S , do sistema é dada por

$$S = \int_{t'}^{t''} dt L(x, \dot{x}, t) \tag{2.27a}$$

e

$$Dx(t) = \lim_{n \rightarrow \infty} \prod_{i=1}^n \frac{dx_i}{A} \tag{2.27b}$$

sendo A uma constante de normalização.

Para um sistema com diversas variáveis, o propagador pode ser generalizado como

$$\begin{aligned}
 K(x_1'', \dots, x_n'', t''; x_1', \dots, x_n', t') &= \\
 &= \int \dots \int D x_1(t) \dots D x_n(t) e^{\frac{i}{\hbar} S(x_1(t), \dots, x_n(t))}
 \end{aligned} \tag{2.28}$$

sendo

$$S = \int_{t'}^{t''} dt L(x_1(t), \dots, x_n(t), \dot{x}_1(t), \dots, \dot{x}_n(t), t) \tag{2.29}$$

Usando (2.18) podemos escrever a matriz densidade no formalismo de integrais de trajetória como

$$\rho(x''x'; \beta) = \int Dx(u) e^{S/\hbar} \quad (2.30)$$

sendo S real dada por

$$S = \int_0^{\beta\hbar} du L(x(u), \dot{x}(u), u) \quad (2.31)$$

onde u corresponde a um "tempo" imaginário e $\dot{x}(u) = dx/du$.

2.2.3 - Determinação da Energia Livre

A energia livre F para um sistema, em equilíbrio térmico, no formalismo de integrais de trajetória, pode ser obtida com (2.16), (2.17), (2.30) e (2.31), ou seja,

$$e^{-\beta F} = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{x_1}^{x_1} dx_1 Dx(u) e^{S/\hbar} \quad (2.32)$$

onde a primeira integração representa a trajetória cujos pontos inicial e final são iguais.

É importante observar que o cálculo da integral sobre as trajetórias para sistemas que apresentam certa complexidade nem sempre é possível ser realizado exatamente. Em alguns casos, o método variacional é útil, e com ele tem-se obtido bons resultados.

Vamos considerar um sistema cuja "ação" S' satisfaça as condições:

1º) S' é suficientemente simples, de modo que expressões do tipo

$$\int Dx(u) G e^{S'/\hbar}$$

para funcionais G simples possam ser calculadas.

2º) Trajetórias importantes na integral

$$\int Dx(u) e^{S/\hbar} \quad \text{e em} \quad \int Dx(u) e^{S'/\hbar}$$

são próximas, ou seja, S e S' são semelhantes quando são pequenas.

Seja F' a energia livre associada a S' , isto é,

$$e^{-\beta F'} = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{x_1}^{x_1} dx_1 Dx(u) e^{S'/\hbar} \quad (2.33)$$

Então,

$$\frac{\int_{-\infty}^{+\infty} \int_{x_1}^{x_1} dx_1 Dx(u) e^{S/\hbar}}{\int_{-\infty}^{+\infty} \int_{x_1}^{x_1} dx_1 Dx(u) e^{S'/\hbar}} = e^{-\beta(F-F')} \quad (2.34)$$

Uma vez que $e^S = e^{(S-S')} e^{S'}$, podemos escrever (2.34)

como

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \int_{x_1}^{x_1} dx_1 Dx(u) e^{(S-S')/\hbar} e^{S'/\hbar} \left[\int_{-\infty}^{+\infty} \int_{x_1}^{x_1} dx_1 Dx(u) e^{S'/\hbar} \right]^{-1} = e^{-\beta(F-F')} \quad (2.35)$$

A equação anterior nos diz que $e^{-\beta(F-F')}$ é o valor médio de ... $e^{(S-S')/\hbar}$, sendo esta média tomada sobre todas as trajetórias com o mesmo ponto inicial e final, com $Dx(u)$ $e^{S'/\hbar}$ o "peso" associado a cada trajetória. Então

$$\langle e^{(S-S')/\hbar} \rangle = e^{-\beta(F-F')} \quad (2.36)$$

Para introduzir o princípio variacional, podemos observar que, se Y é uma variável aleatória, com uma densidade de probabilidade normalizada, temos que

$$\langle e^Y \rangle \geq e^{\langle Y \rangle} \quad (2.37)$$

Definindo o valor médio de $S-S'$ com o mesmo "peso" u usado para $e^{(S-S')/\hbar}$ em (2.35), temos

$$\begin{aligned} \langle S-S' \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{x_1}^{x_1} dx_1 Dx(u) (S-S') e^{S'/\hbar} \\ &\left[\int_{-\infty}^{+\infty} \int_{x_1}^{x_1} dx_1 Dx(u) e^{S'/\hbar} \right]^{-1} \end{aligned} \quad (2.38)$$

Comparando (2.36) e (2.38), através de (2.37), temos

$$e^{\langle S'-S \rangle / \hbar} \leq e^{-\beta(F-F')} \quad (2.39)$$

e finalmente

$$F \leq F' - \delta \quad (2.40)$$

onde

$$\delta = \frac{1}{\beta \hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{x_1}^{x_1} dx_1 D\mathbf{x}(u) (S-S') e^{S'/\hbar} \left[\int_{-\infty}^{+\infty} \int_{x_1}^{x_1} dx_1 D\mathbf{x}(u) e^{S'/\hbar} \right]^{-1} \quad (2.41)$$

A equação (2.40) representa o princípio variacional de Feynman.³ Nesta equação, se calcularmos $F' - \delta$ para várias "ações" S' , o cálculo que nos leva ao menor resultado representa o valor mais próximo ao da energia livre correta. Se $S' = S$, temos $F' = F$. Entretanto, se S' difere de S por um valor infinitesimal, a diferença entre F e $F' - \delta$ é de segunda ordem.

Para usarmos este princípio tomamos a "ação" S' como

$$S' = S'(a, b, \dots) \quad (2.42)$$

onde a, b , etc., são parâmetros que devem ser ajustados de modo a fazer com que a energia livre obtida satisfaça a condição

$$\frac{\partial}{\partial a} F' = \frac{\partial}{\partial b} F' = \dots = 0 \quad (2.43)$$

O mesmo princípio pode ser usado para o cálculo da energia do estado fundamental. Para isto, vamos considerar a função partição dada em (2.17), ou seja,

$$Z = e^{-\beta F} = \sum_n e^{-\beta E_n} \quad (2.44)$$

Quando a temperatura do sistema é extremamente baixa $\beta \rightarrow \infty$ e consequentemente a série é dominada pelo termo de menor energia, $e^{-\beta E_0}$. Deste modo,

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} Z = e^{-\beta E_0} \quad (2.45a)$$

e

$$F = E_0 \quad (2.45b)$$

Nesta condição, o princípio variacional para o cálculo da energia do estado fundamental será

$$E_0 \leq E' - \delta \quad (2.46)$$

onde δ é dado por (2.41), no limite $\beta \rightarrow \infty$.

3 - PROPRIEDADES ELETRÔNICAS NUMA INTERFACE ISOLANTE-SEMICONDUCTOR

Quando uma carga puntiforme está situada na vizinhança de uma interface de dois meios, o potencial num ponto qualquer deste sistema pode ser calculado através do método de imagem.

Se neste sistema admitirmos que a interface entre os meios é um plano ideal, o cálculo do potencial imagem é relativamente simples. Entretanto, se desejarmos tratar o problema de um modo mais realista, devemos levar em conta o fato de que a interface entre dois meios é rugosa. Desta forma, o cálculo do potencial num ponto qualquer torna-se mais complicado devido às condições de contorno na interface.

A rugosidade da superfície modifica de modo significativo as propriedades de sistemas de elétrons que com ela interagem.³² Desta forma o cálculo do potencial devido a uma carga, próxima a uma interface rugosa, é importante para o estudo destas propriedades.

3.1 - Potencial de uma Carga Próxima a uma Interface Rugosa

Consideremos uma carga localizada nas proximidades da interface de dois materiais dielétricos, de constantes dielétricas ϵ_1 e ϵ_2 .

A interface é definida pela equação

$$z = \zeta(\vec{r}) \quad (3.1)$$

sendo $\zeta(\vec{r})$ uma função estocástica de $\vec{r} = x \hat{x} + y \hat{y}$, com as seguintes propriedades:

$$\langle \zeta(\vec{r}) \rangle = 0 \quad (3.2)$$

$$\langle \zeta(\vec{r}) \zeta(\vec{r}') \rangle = \beta^2 \omega(\vec{r} - \vec{r}') \quad (3.3)$$

onde β é a raiz quadrática média do desvio da interface com relação à superfície plana, $\langle \zeta(\vec{r}) \rangle$ representa a média sobre os valores de $\zeta(\vec{r})$ e $\omega(\vec{r} - \vec{r}')$ é uma função de correlação associada à forma da superfície.

Para este sistema, o vetor deslocamento elétrico $\vec{D}$ e o campo elétrico $\vec{E}$ são dados por

$$\vec{D}(\vec{x}) = \epsilon_1 \vec{E}(\vec{x}), \quad z > \zeta(\vec{r}) \quad (3.4a)$$

$$= \epsilon_2 \vec{E}(\vec{x}), \quad z < \zeta(\vec{r}) \quad (3.4b)$$

e

$$\vec{E}(\vec{x}) = -\nabla \Phi(\vec{x} | \vec{x}') \quad (3.5)$$

O potencial eletrostático $\Phi(\vec{x}|\vec{x}')$ satisfaz as equações

$$z' > \zeta(\vec{r}) ;$$

$$\nabla^2 \Phi(\vec{x}|\vec{x}') = - \frac{4\pi Q}{\epsilon_1} \delta(\vec{x}-\vec{x}') \quad z > \zeta(\vec{r}) \quad (3.6a)$$

$$= 0 \quad z < \zeta(\vec{r}) \quad (3.6b)$$

$$z' < \zeta(\vec{r}) :$$

$$\nabla^2 \Phi(\vec{x}|\vec{x}') = 0 \quad z > \zeta(\vec{r}) \quad (3.6c)$$

$$= -\frac{4\pi Q}{\epsilon_2} \delta(\vec{x}-\vec{x}') \quad z < \zeta(\vec{r}) \quad (3.6d)$$

Como condições de contorno devemos ter a continuidade do potencial e do vetor deslocamento elétrico na interface, ou seja,

$$\Phi(\vec{x}|\vec{x}') \Big|_{z=\zeta(\vec{r})^-} = \Phi(\vec{x}|\vec{x}') \Big|_{z=\zeta(\vec{r})^+} \quad (3.7a)$$

e

$$\epsilon_2 \hat{n} \cdot \nabla \Phi(\vec{x}|\vec{x}') \Big|_{z=\zeta(\vec{r})^-} = \epsilon_1 \hat{n} \cdot \nabla \Phi(\vec{x}|\vec{x}') \Big|_{z=\zeta(\vec{r})^+} \quad (3.7b)$$

onde $\hat{n}$ é o vetor unitário, normal à superfície $z = \zeta(\vec{r})$ dado por

$$\hat{n} = \left(-\frac{\partial \zeta}{\partial x}(\vec{r}), -\frac{\partial \zeta}{\partial y}(\vec{r}), 1 \right) \left\{ 1 + \left(\frac{\partial \zeta}{\partial x}(\vec{r}) \right)^2 + \left(\frac{\partial \zeta}{\partial y}(\vec{r}) \right)^2 \right\}^{1/2} \quad (3.8)$$

Definindo

$$q = \frac{Q}{\epsilon_1} \quad (3.9)$$

e

$$\epsilon = \frac{\epsilon_2}{\epsilon_1} \quad (3.10)$$

(3.3) e (3.7) podem ser escritas como

$z' > \zeta(\vec{r}) :$

$$\nabla^2 \Phi(\vec{x}|\vec{x}') = -4\pi q \delta(\vec{x}-\vec{x}') \quad z > \zeta(\vec{r}) \quad (3.11a)$$

$$= 0$$

$$z < \zeta(\vec{r}) \quad (3.11b)$$

$z' < \zeta(\vec{r}) :$

$$\nabla^2 \Phi(\vec{x}|\vec{x}') = 0 \quad z > \zeta(\vec{r}) \quad (3.11c)$$

$$= -4\pi \frac{q}{\epsilon} \delta(\vec{x}-\vec{x}') \quad z < \zeta(\vec{r}) \quad (3.11d)$$

$$\Phi(\vec{x}|\vec{x}') \Big|_{z=\zeta(\vec{r})^-} = \Phi(\vec{x}|\vec{x}') \Big|_{z=\zeta(\vec{r})^+} \quad (3.12a)$$

$$\left. \epsilon \hat{n} \cdot \nabla \phi(\vec{x}|\vec{x}') \right|_{z=\zeta(\vec{r})^-} = \left. \hat{n} \cdot \nabla \phi(\vec{x}|\vec{x}') \right|_{z=\zeta(\vec{r})^+} \quad (3.12b)$$

A solução das equações acima é dada por:

$z' > \zeta(\vec{r})$:

$$\begin{aligned} \Phi(\vec{x}|\vec{x}') &= \int \frac{d^2 k}{(2\pi)^2} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{r} - \vec{r}')} \left(\frac{2\pi q}{k} \right) e^{-k|z-z'|} + \\ &+ \int \frac{d^2 k}{(2\pi)^2} A(\vec{k}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} e^{-kz} \quad z > \zeta(\vec{r}) \quad (3.13a) \end{aligned}$$

$$= \int \frac{d^2 k}{(2\pi)^2} B(\vec{k}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} e^{kz} \quad z < \zeta(\vec{r}) \quad (3.13b)$$

$z' < \zeta(\vec{r})$:

$$\Phi(\vec{x}|\vec{x}') = \int \frac{d^2 k}{(2\pi)^2} C(\vec{k}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} e^{-kz} \quad z > \zeta(\vec{r}) \quad (3.13c)$$

$$= \int \frac{d^2 k}{(2\pi)^2} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{r} - \vec{r}')} \left(\frac{2\pi q}{\epsilon} \right) e^{-k|z-z'|} +$$

$$+ \int \frac{d^2 k}{(2\pi)^2} D(\vec{k}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} e^{kz} \quad z < \zeta(\vec{r}) \quad (3.13d)$$

onde os coeficientes $A(\vec{k})$, $B(\vec{k})$, $C(\vec{k})$ e $D(\vec{k})$ são determinados pelas condições de contorno, ou seja, por (3.12a) e (3.12b).

Para uma forma qualquer da superfície nem sempre é possível obter exatamente estes coeficientes. Entretanto, se considerarmos que o desvio da interface com relação a uma superfície plana é pequeno, podemos tratar a rugosidade como uma perturbação. Assim, se considerarmos as condições de contorno (3.12a) e (3.12b) e expandirmos o potencial e o campo elétrico em potências de $\dots$ $\zeta(\vec{r})$, teremos para os coeficientes $A(\vec{k})$ e $B(\vec{k})$

$$A(\vec{k}) - B(\vec{k}) = - \frac{2\pi q}{k} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}'} e^{-kz'} - 2\pi q \int \frac{d^2 q}{(2\pi)^2} e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}'} e^{-qz'}$$

$$\times \zeta(\vec{k} - \vec{q}) + \int \frac{d^2 q}{(2\pi)^2} q \zeta(\vec{k} - \vec{q}) (A(\vec{q}) +$$

$$+ B(\vec{q})) - \pi q \int \frac{d^2 q}{(2\pi)^2} q e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}'} e^{-qz'} \int \frac{d^2 Q}{(2\pi)^2}$$

$$\zeta(\vec{Q}) \zeta(\vec{k} - \vec{q} - \vec{Q}) - \frac{1}{2} \int \frac{d^2 q}{(2\pi)^2} q^2 (A(\vec{q}) - B(\vec{q}))$$

$$\int \frac{d^2 Q}{(2\pi)^2} \zeta(\vec{Q}) \zeta(\vec{k} - \vec{q} - \vec{Q}) \quad (3.14a)$$

correspondente a (3.12a) e

$$\begin{aligned}
 A(\vec{k}) + \varepsilon B(\vec{k}) &= \frac{2\pi q}{k} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}'} e^{-kz'} + \frac{2\pi q}{k} \int \frac{d^2 q}{(2\pi)^2} \\
 &\quad \frac{\vec{k} \cdot \vec{q}}{q} e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}'} e^{-qz'} \zeta(\vec{k}-\vec{q}) + \\
 &\quad + \frac{1}{k} \int \frac{d^2 q}{(2\pi)^2} \zeta(\vec{k}-\vec{q})(\vec{k} \cdot \vec{q})(A(\vec{q}) - \varepsilon B(\vec{q})) + \\
 &\quad + \frac{2\pi q}{k} \int \frac{d^2 q}{(2\pi)^2} e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}'} e^{-qz'} \\
 &\quad \int \frac{d^2 Q}{(2\pi)^2} (\vec{q} \cdot \vec{Q} + \frac{1}{2} q^2) \times \zeta(\vec{Q}) \zeta(\vec{k}-\vec{q}-\vec{Q}) + \frac{1}{k} \int \frac{d^2 q}{(2\pi)^2} \\
 &\quad q \int \frac{d^2 Q}{(2\pi)^2} (\vec{q} \cdot \vec{Q} + \frac{1}{2} q^2) \times \zeta(\vec{Q}) \zeta(\vec{k}-\vec{q}-\vec{Q})(A(\vec{q}) + \\
 &\quad + \varepsilon B(\vec{q}))
 \end{aligned} \tag{3.14b}$$

correspondente a (3.12b). Em (3.14a) e (3.14b) tomamos a transformada de Fourier de $\zeta(\vec{r})$ definida por

$$\zeta(\vec{r}) = \int \frac{d^2 Q}{(2\pi)^2} e^{i\vec{Q} \cdot \vec{r}} \zeta(\vec{Q}), \tag{3.15}$$

Podemos reescrever (3.14a) e (3.14b) como

$$\begin{aligned}
 & \begin{bmatrix} A(\vec{k}) \\ B(\vec{k}) \end{bmatrix} = \frac{1}{\epsilon+1} \int \frac{d^2 q}{(2\pi)^2} q \zeta(\vec{k}-\vec{q}) \begin{bmatrix} \vec{k} \cdot \vec{q} + \epsilon - \epsilon(\vec{k} \cdot \vec{q} - 1) \\ \vec{k} \cdot \vec{q} - 1 - \epsilon(\vec{k} \cdot \vec{q} - 1) \end{bmatrix} \times \\
 & \times \begin{bmatrix} A(\vec{q}) \\ B(\vec{q}) \end{bmatrix} + \frac{1}{\epsilon+1} \int \frac{d^2 q}{(2\pi)^2} \int \frac{d^2 Q}{(2\pi)^2} q^2 \zeta(\vec{Q}) \zeta(\vec{k}-\vec{q}-\vec{Q}) \times \\
 & \times \begin{bmatrix} \frac{1}{k} (\vec{q} \cdot \vec{Q} + \frac{1}{2} q) + \frac{\epsilon}{2} & \frac{\epsilon}{k} (\vec{q} \cdot \vec{Q} + \frac{1}{2} q) - \frac{\epsilon}{2} \\ \frac{1}{k} (\vec{q} \cdot \vec{Q} + \frac{1}{2} q) - \frac{1}{2} & \frac{\epsilon}{k} (\vec{q} \cdot \vec{Q} + \frac{1}{2} q) + \frac{1}{2} \end{bmatrix} \times \\
 & \begin{bmatrix} A(\vec{q}) \\ B(\vec{q}) \end{bmatrix} = \frac{2\pi q}{(\epsilon+1)k} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}'} e^{-kz'} \begin{bmatrix} 1-\epsilon \\ 2 \end{bmatrix} + \\
 & + \frac{2\pi q}{\epsilon+1} \int \frac{d^2 q}{(2\pi)^2} e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}'} \zeta(\vec{k}-\vec{q}) e^{-qz'} \begin{bmatrix} \vec{k} \cdot \vec{q} - \epsilon \\ \vec{k} \cdot \vec{q} + \epsilon \end{bmatrix} + \\
 & + \frac{2\pi q}{\epsilon+1} \int \frac{d^2 q}{(2\pi)^2} q \int \frac{d^2 Q}{(2\pi)^2} q e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}'} e^{-qz'} \\
 & \zeta(\vec{Q}) \zeta(\vec{k}-\vec{q}-\vec{Q}) \begin{bmatrix} \frac{1}{k} (\vec{q} \cdot \vec{Q} + \frac{1}{2} q) - \frac{\epsilon}{2} \\ \frac{1}{k} (\vec{q} \cdot \vec{Q} + \frac{1}{2} q) + \frac{1}{2} \end{bmatrix}
 \end{aligned}$$

onde $\hat{q}$ e $\hat{k}$ são vetores unitários na direção de $\vec{q}$ e $\vec{k}$, respectivamente.

Usando as mesmas aproximações podemos obter os coeficientes $C(\vec{k})$ e $D(\vec{k})$, que são dados por

$$\begin{bmatrix} C(\vec{k}) \\ D(\vec{k}) \end{bmatrix} = \frac{1}{\epsilon+1} \int \frac{d^2 q}{(2\pi)^2} q \zeta(\vec{k}-\vec{q}) \begin{bmatrix} k \cdot \hat{q} + \epsilon & -\epsilon k \cdot \hat{q} + \epsilon \\ k \cdot \hat{q} - 1 & -\epsilon k \cdot \hat{q} - 1 \end{bmatrix} \times$$

$$\begin{bmatrix} C(\vec{q}) \\ D(\vec{q}) \end{bmatrix} + \frac{1}{\epsilon+1} \int \frac{d^2 q}{(2\pi)^2} \int \frac{d^2 Q}{(2\pi)} q^2 \zeta(Q) \zeta(\vec{k}-\vec{q}-\vec{Q}) \times$$

$$\begin{bmatrix} \frac{1}{k} (\hat{q} \cdot \vec{Q} + \frac{1}{2} q) + \frac{\epsilon}{2} & \frac{\epsilon}{k} (\hat{q} \cdot \vec{Q} + \frac{1}{2} q) - \frac{\epsilon}{2} \\ \frac{1}{k} (\hat{q} \cdot \vec{Q} + \frac{1}{2} q) - \frac{1}{2} & \frac{\epsilon}{k} (\hat{q} \cdot \vec{Q} + \frac{1}{2} q) + \frac{1}{2} \end{bmatrix} \times$$

$$\begin{bmatrix} C(\vec{q}) \\ D(\vec{q}) \end{bmatrix} = \frac{2\pi q}{(\epsilon+1)k} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}'} e^{kz'} \begin{bmatrix} 2 \\ 1-1/\epsilon \end{bmatrix} - \frac{2\pi q}{\epsilon+1} \times$$

$$\int \frac{d^2 q}{(2\pi)^2} e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}'} e^{qz'} \zeta(\vec{k}-\vec{q}) \begin{bmatrix} k \cdot \hat{q} + 1 \\ k \cdot \hat{q} - 1/\epsilon \end{bmatrix} +$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{2\pi q}{\epsilon+1} \int \frac{d^2 q}{(2\pi)^2} \int \frac{d^2 Q}{(2\pi)^2} q \cdot q^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}} e^{qz'} \zeta(\vec{Q}) \zeta(\vec{k}-\vec{q}-\vec{Q}) \times \\
& \left[\begin{array}{cc} \frac{1}{k} (\vec{q} \cdot \vec{Q} + \frac{1}{2} q) & + \frac{1}{2} \\ \frac{1}{k} (\vec{q} \cdot \vec{Q} + \frac{1}{2} q) & - \frac{1}{2\epsilon} \end{array} \right] \quad (3.17)
\end{aligned}$$

As equações para os coeficientes $A(\vec{k})$, $B(\vec{k})$, $C(\vec{k})$ e $D(\vec{k})$ contêm a transformada de Fourier para a função $\zeta(\vec{r})$, que descreve a rugosidade. Esta função não pode ser conhecida para todos os valores de $\vec{r}$. Assim, para o cálculo destes coeficientes, tomaremos a média sobre os possíveis valores de $\zeta(\vec{r})$. Para esta média, admitiremos um processo estocástico estacionário com as propriedades

$$\langle \zeta(\vec{k}) \rangle = 0 \quad (3.18)$$

e

$$\langle \zeta(\vec{k}) \zeta(\vec{k}') \rangle = \beta^2 (2\pi)^2 g(|\vec{k}|) \delta(\vec{k}+\vec{k}'), \quad (3.19)$$

onde $g(|\vec{k}|)$ será o fator de estrutura da superfície. Este processo de tomar a média sobre os valores de $\zeta(\vec{r})$ restitui a invariância translacional do sistema com respeito a qualquer ponto sobre a superfície.

Para o cálculo do potencial tomaremos uma expansão dos

coeficientes, usando $\zeta(\vec{k})$ como parâmetro. Então, podemos tomar os coeficientes como

$$A(\vec{k}) = A^{(0)}(\vec{k}) + A^{(1)}(\vec{k}) + A^{(2)}(\vec{k}) + \dots \quad (3.20a)$$

$$B(\vec{k}) = B^{(0)}(\vec{k}) + B^{(1)}(\vec{k}) + B^{(2)}(\vec{k}) + \dots \quad (3.20b)$$

$$C(\vec{k}) = C^{(0)}(\vec{k}) + C^{(1)}(\vec{k}) + C^{(2)}(\vec{k}) + \dots \quad (3.20c)$$

$$D(\vec{k}) = D^{(0)}(\vec{k}) + D^{(1)}(\vec{k}) + D^{(2)}(\vec{k}) + \dots \quad (3.20d)$$

onde o índice de cada termo indica a ordem em $\zeta(\vec{k})$.

Substituindo (3.20a) e (3.20b) em (3.16), e comparando os termos independentes de $\zeta(\vec{k})$, temos

$$\begin{bmatrix} A^{(0)}(\vec{k}) \\ B^{(0)}(\vec{k}) \end{bmatrix} = \frac{2\pi q}{k} \frac{1}{(\epsilon+1)} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}'} e^{-\vec{k} \cdot \vec{z}'} \begin{bmatrix} 1-\epsilon \\ 2 \end{bmatrix} \quad (3.21)$$

Com (3.20a), (3.20b) e (3.21) podemos comparar em ... (3.16) os termos de primeira ordem em $\zeta(k)$. Com isto teremos

$$\begin{bmatrix} A^{(1)}(\vec{k}) \\ B^{(1)}(\vec{k}) \end{bmatrix} = -4\pi q \frac{\epsilon-1}{(\epsilon+1)^2} \int \frac{d^2q}{(2\pi)^2} e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}'} e^{-q z'} \zeta(\vec{k}-\vec{q}) \begin{bmatrix} \epsilon + \vec{k} \cdot \vec{q} \\ -1 + \vec{k} \cdot \vec{q} \end{bmatrix} \quad (3.22)$$

Finalmente, usando (3.20a), (3.20b), (3.21) e (3.22) em (3.16), e comparando os termos de segunda ordem em $\zeta(\vec{k})$, temos

$$\begin{bmatrix} A^{(2)}(\vec{k}) \\ B^{(2)}(\vec{k}) \end{bmatrix} = -4\pi q \frac{\epsilon-1}{(\epsilon+1)^3} \int \frac{d^2q}{(2\pi)^2} \int \frac{d^2Q}{(2\pi)^2} e^{-i\vec{Q} \cdot \vec{r}'} e^{-Qz'} \zeta(\vec{k}-\vec{q}) \zeta(\vec{q}-\vec{Q}) \times \begin{bmatrix} \epsilon(\epsilon-1) + 2\epsilon\vec{q} \cdot (\vec{Q} + \vec{k}) - (\vec{k} \cdot \vec{q}) \times (\vec{q} \cdot \vec{Q})(\epsilon-1) \\ -(\epsilon-1) - 2\vec{Q} \cdot \vec{q} + 2\epsilon(\vec{k} \cdot \vec{q}) - (\vec{k} \cdot \vec{q})(\vec{q} \cdot \vec{Q})(\epsilon-1) \end{bmatrix} \quad (3.23)$$

De modo análogo podem ser obtidos os coeficientes $C(\vec{k})$ e $D(\vec{k})$, e então teremos

$$\begin{bmatrix} C^{(0)}(\vec{k}) \\ D^{(0)}(\vec{k}) \end{bmatrix} = \frac{2\pi q}{k} \frac{1}{(\epsilon+1)} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}'} e^{kz'} \begin{bmatrix} 2 \\ 1-1/\epsilon \end{bmatrix} \quad (3.24)$$

$$\begin{bmatrix} C^{(1)}(\vec{k}) \\ D^{(1)}(\vec{k}) \end{bmatrix} = -4\pi q \frac{(\epsilon-1)}{(\epsilon+1)^2} \int \frac{d^2 q}{(2\pi)^2} e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}'} e^{q \cdot z'} \zeta(\vec{k} - \vec{q}) \times \begin{bmatrix} \hat{k} \cdot \hat{q} - 1 \\ \hat{k} \cdot \hat{q} + 1/\epsilon \end{bmatrix} \quad (3.25)$$

e

$$\begin{bmatrix} C^{(2)}(\vec{k}) \\ D^{(2)}(\vec{k}) \end{bmatrix} = -4\pi q \frac{(\epsilon-1)}{(\epsilon+1)^3} \int \frac{d^2 q}{(2\pi)^2} \int \frac{d^2 Q}{(2\pi)^2} \zeta(\vec{k} - \vec{q}) \zeta(\vec{q} - \vec{Q}) \times \\ \times q e^{-i\vec{Q} \cdot \vec{r}'} e^{Qz'} \begin{bmatrix} -(\epsilon-1) + 2\hat{q} \cdot (\epsilon\vec{Q} - \vec{k}) - (\epsilon-1) \times (\hat{k} \cdot \hat{q})(\hat{q} \cdot \hat{Q}) \\ 1 - 1/\epsilon - 2\hat{q} \cdot (\hat{k} + \hat{Q}) - (\epsilon-1) \times (\hat{k} \cdot \hat{q})(\hat{q} \cdot \hat{Q}) \end{bmatrix} \quad (3.26)$$

Uma vez que estamos interessados em valores médios, podemos usar (3.18) e (3.19) e obter os valores de $\langle A(\vec{k}) \rangle$, $\langle B(\vec{k}) \rangle$, $\langle C(\vec{k}) \rangle$ e $\langle D(\vec{k}) \rangle$, ou seja,

$$\langle A(\vec{k}) \rangle = A^{(0)}(\vec{k}) + \langle A^{(2)}(\vec{k}) \rangle \quad (3.27a)$$

$$\langle B(\vec{k}) \rangle = B^{(0)}(\vec{k}) + \langle B^{(2)}(\vec{k}) \rangle \quad (3.27b)$$

$$\langle C(\vec{k}) \rangle = C^{(0)}(\vec{k}) + \langle C^{(2)}(\vec{k}) \rangle \quad (3.27c)$$

$$\langle D(\vec{k}) \rangle = D^{(0)}(\vec{k}) + \langle D^{(2)}(\vec{k}) \rangle \quad (3.27d)$$

$$\langle A^{(1)}(\vec{k}) \rangle = \langle B^{(1)}(\vec{k}) \rangle = \langle C^{(1)}(\vec{k}) \rangle = \langle D^{(1)}(\vec{k}) \rangle = 0 \quad (3.27e)$$

onde os termos de segunda ordem são dados por

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} \langle A^{(2)}(\vec{k}) \rangle \\ \langle B^{(2)}(\vec{k}) \rangle \end{bmatrix} &= -4\pi q \beta^2 \frac{(\epsilon-1)}{(\epsilon+1)^3} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}'} e^{-kz'} \int \frac{d^2q}{(2\pi)^2} q g(|\vec{k}-\vec{q}|) \times \\ &\times \begin{bmatrix} \epsilon(\epsilon-1) + 4\epsilon \vec{k} \cdot \hat{q} - (\vec{k} \cdot \hat{q})^2 (\epsilon-1) \\ -(\epsilon-1) + 2\vec{k} \cdot \hat{q} (\epsilon-1) - (\vec{k} \cdot \hat{q})^2 (\epsilon-1) \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (3.28)$$

e

$$\begin{aligned}
 \begin{bmatrix} \langle C^{(2)}(\vec{k}) \rangle \\ \langle D^{(2)}(\vec{k}) \rangle \end{bmatrix} &= -4\pi q \beta^2 \frac{(\epsilon-1)}{(\epsilon+1)^3} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}'} e^{kz'} \int \frac{d^2q}{(2\pi)^2} q \times \\
 &\times g(|\vec{k}-\vec{q}|) \times \left[\frac{-(\epsilon-1)+2\vec{k} \cdot \vec{q}(\epsilon-1)-(\vec{k} \cdot \vec{q})^2(\epsilon-1)}{1-1/\epsilon-4\vec{k} \cdot \vec{q}-(\epsilon-1)(\vec{k} \cdot \vec{q})^2} \right]
 \end{aligned}
 \tag{3.29}$$

Admitindo uma forma Gaussiana para o fator de estrutura $g(|\vec{k}|)$,

$$g(|\vec{k}|) = \pi^2 \alpha^2 e^{-\alpha^2 k^2 / 4} \tag{3.30}$$

onde α é a distância de correlação transversal (fig. 5), e tomando

$$\hat{R} = (\cos \theta, \sin \theta) \tag{3.31a}$$

$$\hat{q} = (\cos \theta, \sin \theta) \tag{3.31b}$$

teremos

$$\begin{bmatrix} \langle A^{(2)}(\vec{k}) \rangle \\ \langle B^{(2)}(\vec{k}) \rangle \end{bmatrix} = -16\pi q \frac{\beta^2}{\alpha^4} \frac{(\epsilon-1)^2}{(\epsilon+1)^3} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}'} \frac{e^{-kz'}}{k^3} \times$$

$$\begin{bmatrix} (\epsilon - \frac{1}{2}) J_0(\xi) + \frac{4\epsilon}{\epsilon-1} J_1(\xi) - \frac{1}{2} J_2(\xi) \\ -\frac{3}{2} J_0(\xi) + 2 J_1(\xi) - \frac{1}{2} J_2(\xi) \end{bmatrix}$$

(3.32)

$$\begin{bmatrix} \langle C^{(2)}(\vec{k}) \rangle \\ \langle D^{(2)}(\vec{k}) \rangle \end{bmatrix} = -16\pi q \frac{\beta^2}{\alpha^4} \frac{(\epsilon-1)^2}{(\epsilon+1)^3} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}'} \frac{e^{kz'}}{k^3} \times$$

$$\begin{bmatrix} -\frac{3}{2} J_0(\xi) + 2 J_1(\xi) - \frac{1}{2} J_2(\xi) \\ \{-\frac{1}{2} + \frac{1}{\epsilon}\} J_0(\xi) - \frac{4}{\epsilon-1} J_1(\xi) - \frac{1}{2} J_2(\xi) \end{bmatrix}$$

(3.33)

com

$$J_n(\xi) = e^{-\xi^2/4} \int_0^\infty dy e^{-y^2/\xi^2} y^2 I_n(y) \quad (3.34)$$

sendo

$$\xi = \alpha k \quad (3.35)$$

e $I_n(y)$ a função de Bessel modificada, cuja representação integral é dada por

$$I_n(y) = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi d\theta e^{y \cos \theta} \cos(n\theta) \quad (3.36)$$

Efetuada a integral em (3.34) (Ap.B), temos

$$J_n(\xi) = \frac{\pi^{1/2}}{16} e^{-\xi^2/8} \xi^5 \{ I_{n/2-1}(\xi^2/8) + \\ + [1 + (4/\xi^2) - (4n/\xi^2)] I_{n/2}(\xi^2/8) \} \quad (3.37)$$

Definindo o potencial médio como

$$\langle \Phi(\vec{x}|\vec{x}') \rangle = \Phi_I(\vec{x}|\vec{x}') \quad z' > \zeta(\vec{r}), \quad z > \zeta(\vec{r}) \quad (3.38a)$$

$$= \Phi_{II}(\vec{x}|\vec{x}') \quad z' > \zeta(\vec{r}), \quad z < \zeta(\vec{r}) \quad (3.38b)$$

$$= \Phi_{III}(\vec{x}|\vec{x}') \quad z' < \zeta(\vec{r}), \quad z > \zeta(\vec{r}) \quad (3.38c)$$

$$= \Phi_{IV}(\vec{x}|\vec{x}') \quad z' < \zeta(\vec{r}), \quad z < \zeta(\vec{r}) \quad (3.38d)$$

e substituindo os resultados (3.21), (3.27a), (3.27b), (3.32) e (3.24), (3.27c), (3.27d), (3.29) em (3.13a), (3.13b), (3.13c) e (3.13d), respectivamente, teremos

$$\begin{aligned} \Phi_I(\vec{x}|\vec{x}') &= (q/\alpha) \frac{1}{(\rho^2 + d^2)^{1/2}} - (q/\alpha) \left(\frac{\epsilon - 1}{\epsilon + 1} \right) \frac{1}{(\rho^2 + u^2)^{1/2}} - \\ &- 8(q/\alpha) \frac{(\epsilon - 1)^2}{(\epsilon + 1)^3} \frac{\beta^2}{\alpha^2} G_I(u, \rho) \end{aligned} \quad (3.39a)$$

$$\Phi_{II}(\vec{x}|\vec{x}') = (q/\alpha) \frac{2}{\epsilon + 1} \frac{1}{(\rho^2 + u^2)^{1/2}} + 8(q/\alpha) \frac{(\epsilon - 1)^2}{(\epsilon + 1)^3} \frac{\beta^2}{\alpha^2} \times$$

$$\times G_{II}(u, \rho) = \Phi_{III}(\vec{x}|\vec{x}') \quad (3.39b)$$

$$\begin{aligned}
\Phi_{IV}(\vec{x}|\vec{x}') &= (q/\alpha) \frac{1}{\varepsilon} \frac{1}{(\rho^2 + d^2)^{1/2}} + (q/\alpha) \frac{(\varepsilon-1)}{\varepsilon(\varepsilon+1)} \frac{1}{(\rho^2 + u^2)^{1/2}} + \\
&+ 8(q/\alpha) \frac{1}{\varepsilon} \frac{(\varepsilon-1)^2}{(\varepsilon+1)^3} \frac{\beta^2}{\alpha^2} G_{IV}(u, \rho)
\end{aligned} \tag{3.39c}$$

onde

$$\begin{aligned}
G_I(u, \rho) &= \int_0^\infty d\xi J_0(\xi \rho) \frac{e^{-\xi u}}{\xi^2} \left[\left(\varepsilon - \frac{1}{2} \right) J_0(\xi) + \right. \\
&\left. + \frac{4\varepsilon}{\varepsilon-1} J_1(\xi) - \frac{1}{2} J_2(\xi) \right]
\end{aligned} \tag{3.40a}$$

$$G_{II}(u, \rho) = \int_0^\infty d\xi J_0(\xi \rho) \frac{e^{-\xi u}}{\xi^2} \left[\frac{3}{2} J_0(\xi) - 2J_1(\xi) + \frac{1}{2} J_2(\xi) \right] \tag{3.40b}$$

$$\begin{aligned}
G_{IV}(u, \rho) &= \int_0^\infty d\xi J_0(\xi \rho) \frac{e^{-\xi u}}{\xi^2} \left[\left(\frac{\varepsilon}{2} - 1 \right) J_0(\xi) + \frac{4\varepsilon}{\varepsilon-1} J_1(\xi) + \right. \\
&\left. + \frac{\varepsilon}{2} J_2(\xi) \right]
\end{aligned} \tag{3.40c}$$

Em (3.40), $J_0(\xi\rho)$ é a função de Bessel de ordem zero

$$d = |z - z'| / \alpha \quad (3.41a)$$

$$u = (|z| + |z'|) / \alpha \quad (3.41b)$$

$$\rho = |\vec{r} - \vec{r}'| / \alpha \quad (3.41c)$$

Os termos de ordem β^2 representam a correção no potencial imagem devido à rugosidade da superfície que depende das funções $G_I(u, \rho) - G_{IV}(u, \rho)$. Em geral estas integrais devem ser feitas numericamente. Entretanto, em certos casos limites é possível obter expressões assintóticas. Isto torna mais claro o efeito da rugosidade. Então vamos considerar $\rho=0$ e $u \gg 1$ para o potencial $\Phi_I(\vec{x}|\vec{x}')$. De (3.40a) podemos observar que nesta região apenas os pequenos valores de ξ contribuem para a integral. Considerando o comportamento das funções de Bessel $I_n(\xi)$ nesta região,³³ temos

$$I_{-1}(\xi) = I_1(\xi) = \xi/4 \quad \xi \ll 1 \quad (3.42a)$$

$$I_0(\xi) = 1 \quad \xi \ll 1 \quad (3.42b)$$

$$I_{-1/2}(\xi) = \left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/2} \frac{1}{\xi^{1/2}} \quad \xi \ll 1 \quad (3.42c)$$

$$I_{1/2}(\xi) = \left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/2} \xi^{1/2} \quad \xi \ll 1 \quad (3.42d)$$

Substituindo (3.42) em (3.37) ficamos com

$$J_0(\xi) \approx \pi^{1/2} \left(\frac{1}{4} \xi^3 + \frac{1}{32} \xi^5 + O(\xi^7) \right) \quad (3.43a)$$

$$J_1(\xi) \approx \frac{1}{4} \xi^4 + O(\xi^6) \quad (3.43b)$$

$$J_2(\xi) \approx \pi^{1/2} \left(-\frac{3}{64} \xi^5 + O(\xi^7) \right) \quad (3.43c)$$

Com (3.42) temos para $G_I(u, 0)$

$$\begin{aligned} G_I(u, 0) &\approx \int_0^\infty d\xi \frac{e^{-\xi u}}{\xi^2} \left[\frac{\pi^{1/2}}{8} (2\epsilon - 1) \xi^3 + \frac{\epsilon}{\epsilon - 1} \xi^4 + \right. \\ &\quad \left. + \frac{\pi^{1/2}}{128} (2\epsilon - 5) \xi^5 + \dots \right] = \frac{\pi^{1/2}}{8} (2\epsilon - 1) \frac{1}{u^2} + \\ &\quad + \frac{2}{\epsilon - 1} \frac{\epsilon}{u^3} + \frac{3\pi^{1/2}}{64} (2\epsilon - 5) \frac{1}{u^4} + \dots \end{aligned} \quad (3.44)$$

Assim, o potencial na região $z > \zeta(\vec{r})$, $z' > 0$ e para valores de $u \gg 1$, será dado por

$$\begin{aligned} \phi_I(z|z') \approx & \frac{(q/\alpha)}{d} - \frac{\epsilon-1}{\epsilon+1} \frac{(q/\alpha)}{u} - 8(q/\alpha) \frac{(\epsilon-1)^2}{(\epsilon+1)^3} \times \\ & \times \frac{\beta^2}{\alpha^2} \times \left[\frac{\pi^{1/2}}{8} (2\epsilon-1) \frac{1}{u^2} + \frac{2\epsilon}{\epsilon-1} \frac{1}{u^3} + \right. \\ & \left. + \frac{3\pi^{1/2}}{64} (2\epsilon-5) \frac{1}{u^4} + \dots \right] \end{aligned} \quad (3.45)$$

Os termos da expansão acima correspondem aos de uma expansão em multipolos para uma distribuição de cargas na superfície. Assim, a rugosidade tem como efeito "espalhar" a carga imagem (puntual) numa distribuição de cargas.

3.2 - Rugosidade em Sistemas MOSFET

Para o cálculo da energia de ligação devido a impurezas carregadas no isolante, e da separação entre sub-bandas, os modelos citados no capítulo 1^{21,22,23} possuem um ponto em comum. Esta identidade refere-se à forma da interface isolante-semicondutor, isto é, considera-se que a mesma seja uma superfície plana.

Entretanto, no estudo das propriedades de transporte em camadas de inversão, um efeito importante tem sido atribuído à rugosidade da interface.³⁴ Isto nos leva a analisar este mesmo efeito noutras propriedades eletrônicas de uma camada de inversão.

3.2.1 - Impurezas carregadas no isolante

Consideremos num sistema MOSFET uma impureza isolada e carregada positivamente $Z=+1$, situada no óxido e próxima da interface isolante-semicondutor. Em particular tomaremos uma camada de inversão tipo-n na região $z \geq 0$, para o sistema $\text{SiO}_2 - \text{Si}[001]$

A energia potencial dos elétrons na camada de inversão é devida basicamente às seguintes contribuições:

- a) Carga imagem (V_a)
- b) Rugosidade da barreira de potencial na interface (V_b)
- c) Campo elétrico aplicado (V_c)
- d) Impureza carregada (V_d)

Nos itens acima será levado em conta, como uma perturbação, o efeito da rugosidade na interface.

Finalmente, usaremos a aproximação de massa efetiva assumindo que as transições entre os elipsóides de mais baixa energia não serão levadas em conta.

Com estas considerações, o Hamiltoniano para este sistema pode ser escrito como

$$\begin{aligned}
 H = & \frac{-\hbar^2}{2m_l} \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{\hbar^2}{2m_t} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + V_a(z) + V_b(z) + \\
 & + V_c(z) + V_d(\vec{r}, z), \quad z \geq 0, \quad (3.46)
 \end{aligned}$$

onde m_l e m_t representam as massas longitudinal e transversal.

Se tomarmos a energia em unidades de Rydberg efetivo e as distâncias em unidades de raio de Bohr efetivo dados por¹⁹

$$Ry^* = 2m_l e^4 / \hbar^2 (\epsilon_s + \epsilon_{ox})^2 \quad (3.47a)$$

e

$$a_B^* = \hbar^2 (\epsilon_s + \epsilon_{ox}) / 2m_t e^2 \quad (3.47b)$$

onde ϵ_s e ϵ_{ox} são as constantes dielétricas de semicondutor e de óxido, respectivamente, podemos escrever o Hamiltoniano do sistema como

$$H = H_0 + H_1 \quad (3.48)$$

onde

$$H_0 = -\gamma \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \delta \phi_a(z) + \lambda \phi_b(z) + \lambda \phi_c(z)$$

$$z \geq 0 \quad (3.49a)$$

e

$$H_1 = - \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \phi_d(\vec{r}, z) \quad (3.49b)$$

sendo

$$\gamma = m_t / m_l, \quad (3.50a)$$

$$\delta = \frac{\epsilon_s - \epsilon_{ox}}{4\epsilon_s} \quad (3.50b)$$

e

$$\lambda = \hbar^4 (\epsilon_s + \epsilon_{ox})^3 / 4 m_t^2 e^5 \quad (3.50c)$$

Particularmente para $\text{SiO}_2 - \text{Si}$ temos $Ry^* = 42.3 \text{ meV}$, e $a_B^* = 21.8 \text{ \AA}$.

O termo H_0 representa o Hamiltoniano para um elétron na camada de inversão sem a impureza e H_1 para o movimento no pla no perpendicular à interface.

As contribuições devido à imagem (ϕ_a) e à impureza (ϕ_d) são obtidas diretamente de (3.39a) e (3.39b). Com isto temos que

$$\phi_a(z) = \frac{1}{z} - \frac{16\epsilon_s}{\alpha} \frac{\epsilon_s - \epsilon_{ox}}{(\epsilon_s + \epsilon_{ox})^2} \frac{\beta^2}{\alpha^2} G_I(2u, 0) \quad (3.51)$$

e

$$\phi_d(\vec{r}, z) = \frac{-2}{[r^2 + (z + z_0)^2]^{1/2}} - \frac{8}{\alpha} \frac{(\epsilon_s - \epsilon_{ox})^2}{(\epsilon_s + \epsilon_{ox})^2} \frac{\beta^2}{\alpha^2}$$

$$G_{II}(u_0, \rho) \quad (3.52)$$

onde a impureza está situada no óxido a uma distância z_0 da interface, $|\vec{r}'| = 0$, $u = z/\alpha$ e $u_0 = (z+z_0)/\alpha$

Para o potencial devido ao campo elétrico tomaremos o potencial "nearly self-consistent" usado por F.J. Ohkawa e Y. Uemura⁵ (Ap.B), que é dado por

$$\phi_c(z) = \frac{-4\pi e N_{inv}}{\epsilon_s} e^{-tz} \left(\frac{1}{2} tz^2 + 2z + \frac{3}{t} \right) + \frac{4\pi e N_{depl}}{\epsilon_s} z \quad (3.53)$$

onde

$$t^3 = \frac{48m_l \pi e^2 (\omega N_{inv} + N_{depl})}{\epsilon_s \hbar^2} \quad (3.54)$$

sendo $\omega = 11/32$, N_{inv} a densidade de elétrons na camada de inversão, e N_{depl} a densidade de cargas na camada de depletion.

A contribuição da rugosidade na barreira de potencial será analisada posteriormente, no apêndice C.

Devido à rugosidade existe uma variação da densidade de cargas na camada de inversão e do campo elétrico na superfície. Estes efeitos são importantes no cálculo da mobilidade, uma vez que devemos tomar os termos de primeira ordem em $\zeta(\vec{r})$. Entretanto, no cálculo da energia de ligação apenas os termos em $\zeta(\vec{r})^2$ são importantes, e consequentemente a variação da densidade de cargas na camada de inversão e do campo elétrico na superfície não contribuem.

A energia de ligação dos elétrons da camada de inver-

são com a impureza é dada através da diferença entre a energia associada a H (3.48) e a energia associada a H_0 (3.49a). Embora o elétron esteja sujeito a um potencial estocástico, devido à rugosidade, podemos considerar energias associadas a H e H_0 como sendo bem definidas. Isto porque a distância média do elétron à superfície é muito maior que o desvio quadrático médio desta superfície (β). Assim, estas energias serão calculadas através do método variacional de Rayleigh-Ritz (item 2.1). Para isto devemos considerar autofunções $\Psi(\vec{x})$ e $f_0(z)$ que minimizem o valor médio de H e H_0 respectivamente.

Como estamos levando em conta os elétrons da camada de inversão, situados na primeira sub-banda, podemos tomar para $f_0(z)$ a forma variacional de Fang e Howard³⁵ dada por

$$f_0(z) = (b_0^3/2)^{1/2} z e^{-b_0 z/2} \quad z \geq 0 \quad (3.55)$$

onde b_0 é um parâmetro variacional. Como autofunção de H tomaremos

$$\Psi(\vec{x}) = \chi(x, y) f(z) \quad (3.56)$$

onde $f(z)$ tem a mesma forma de (3.55), com $b = b_0$ como parâmetro variacional.

Na ausência de impureza, a função $\chi(x, y)$ será uma onda plana.

Para o cálculo do estado fundamental do elétron ligado à impureza, a função $\chi(x, y)$ consiste numa função de onda tipo-hidrogênio correspondente ao nível $2p_0$.³⁶ Assim, tomaremos $\chi(x, y)$ como

$$\chi(x, y) = \left(\frac{a^2}{2\pi}\right)^{1/2} e^{-ar/2} \quad (3.57)$$

onde $r = (x^2 + y^2)^{1/2}$ e a é um parâmetro variacional.

Com (3.55), o valor médio de H_0 será

$$E_0 = \int_0^\infty dz f_0(z) H_0 f_0(z) = \frac{1}{4} \gamma b_0^2 + \frac{1}{2} \delta b_0 -$$

$$-\frac{8\delta \epsilon_s}{\alpha} \frac{\epsilon_s - \epsilon_{ox}}{(\epsilon_s + \epsilon_{ox})^2} \frac{\beta^2 b_0^3}{\alpha^2} \int_{c_0}^\infty dz z^2 e^{-b_0 z}$$

$$G_I(2u, 0) + \frac{12\lambda\pi e N_{depl}}{\epsilon_s} \frac{1}{b_0} - \frac{4\lambda\pi e N_{inv}}{\epsilon_s} x$$

$$\left\{ \frac{6tb_0^3}{(t+b_0)^5} + \frac{6b_0^3}{(t+b_0)^4} + \frac{3b_0^3}{t(t+b_0)^3} \right\} + E_{rb_0}$$

(3.58)

onde E_{rb_0} é a contribuição devido à rugosidade da barreira de potencial dada por

$$E_{rb_0} = \int_0^\infty dz f(z) V_b f(z) \quad (3.59)$$

A partir de (3.55), (3.56) e (3.57) obteremos o valor médio de H como sendo

$$\begin{aligned}
E_{2p_0} = & \int dx dy dz \chi(x,y) f(z) H \chi(x,y) f(z) = \frac{1}{4} (a^2 + \gamma b^2) + \\
& + \frac{1}{2} \delta b_0 - \frac{8\delta\epsilon_s}{\alpha} \frac{\epsilon_s - \epsilon_{ox}}{(\epsilon_s + \epsilon_{ox})^2} \frac{\beta^2}{\alpha^2} b^3 \int_{c_0}^{\infty} dz z^2 e^{-bz} \times \\
& \times G_I(2u, 0) - 2 \bar{\phi}_0 - \frac{4}{\alpha} \left(\frac{\epsilon_s - \epsilon_{ox}}{\epsilon_s + \epsilon_{ox}} \right)^2 \frac{\beta^2}{\alpha^2} a^2 b^3 \int_{c_0}^{\infty} dz z^2 e^{-bz} \\
& \times \int_{c_0}^{\infty} dr r e^{-ar} G_{II}(u_0, \rho) + \frac{12\lambda\pi e N_{depl}}{\epsilon_s} \frac{1}{b} - \frac{4\lambda\pi e N_{inv}}{\epsilon_s} \\
& \times \left\{ \frac{6tb^3}{(t+b)^5} + \frac{6b^2}{(t+b)^4} + \frac{3b^3}{t(t+b)^3} \right\} + E_{rb} \quad (3.60)
\end{aligned}$$

onde

$$\bar{\phi}_0 = \frac{a^2 b^3}{2} \int_0^{\infty} dz z^2 e^{-bz} \int_0^{\infty} dr r e^{-ar} \frac{1}{[r^2 + (z+z_0)^2]^{1/2}} \quad (3.61)$$

e E_{rb} corresponde à contribuição da rugosidade da barreira de potencial dada por

$$E_{rb} = \int dx dy dz \chi(x, y) f(z) V_b \chi(x, y) f(z) \quad (3.62)$$

É importante observar que em (3.56) e (3.58) as integrais que envolvem $G_I(2u,0)$ e $G_{II}(u_0,\rho)$ são tomadas a partir de $r,z = c_0$, com $c_0 = 0.14$, que corresponde a um valor médio para a rugosidade, usado em nossos cálculos. Isto porque para $r,z \ll 1$ a rugosidade não pode ser tomada como uma perturbação. Esta aproximação é consistente, uma vez que $\Psi(\vec{r},z) \rightarrow 0$, $f_0(z) \rightarrow 0$, para $r,z \rightarrow 0$, e com isto a contribuição desta região para as integrais deve ser pequena.

Os valores de E_{rb_0} e E_{rb} são análogos e dados por

(Ap.C)

$$E_{rb_0} = \frac{12\lambda\pi e N_{inv}}{\epsilon_s} \frac{t^3 b_0^3}{(t+b_0)^5} \beta^2 \quad (3.63a)$$

e

$$E_{rb} = \frac{12\lambda\pi e N_{inv}}{\epsilon_s} \frac{t^3 b^3}{(t+b)^5} \beta^2 \quad (3.63b)$$

A equação (3.61) pode ser reescrita como

$$\bar{\phi}_0 = \frac{a^2}{2\pi} \int d^2r e^{-ar} \bar{\phi}(r) \quad (3.64)$$

sendo

$$\bar{\phi}(r) = \int_0^\infty dz \left[\frac{b^3}{2} z^2 e^{-bz} \right] \phi(r,z) \quad (3.65)$$

e

$$\phi(\vec{r}, z) = \frac{1}{[r^2 + (z + z_0)^2]^{1/2}} \quad (3.66)$$

onde $\phi(\vec{r}, z)$ corresponde ao potencial devido à impureza no óxido.

Usando a relação

$$\phi(r) = \int_0^\infty dk \, k \, \bar{\phi}(k) J_0(kr), \quad (3.67)$$

onde $\vec{k} = (k_x, k_y)$, temos que $\bar{\phi}$ é dado por

$$\begin{aligned} \bar{\phi}_0 &= \frac{a^2}{2\pi} \int_0^\infty \int_0^\infty dr \, dk \, kr \, e^{-ar} J_0(kr) \bar{\phi}(k) = \\ &= \int_0^\infty dk \, \frac{a^3 k}{(a^2 + k^2)^{3/2}} \bar{\phi}(k) \end{aligned} \quad (3.68)$$

Através de (3.65), (3.66) e (3.67) vemos que $\bar{\phi}(k)$ corresponde à equação (B9) obtida por Stern e Howard,¹⁹ para $S=0$, ou seja,

$$\bar{\phi}(k) = \frac{b^3}{(b+k)^3} \frac{1}{k} e^{-kz_0} \quad z_0 \geq 0 \quad (3.69)$$

Usando (3.63a), (3.63b) e (3.68) obtemos finalmente o valor médio de E_0 e E_{2p_0} como sendo

$$E_o = \frac{1}{4} \gamma b_o^2 + \frac{1}{2} \delta b_o - \frac{8\delta\epsilon_s}{\epsilon_s} \frac{\epsilon_s - \epsilon_{ox}}{(\epsilon_s + \epsilon_{ox})^2} \frac{\beta^2}{\alpha^2} b_o^3 \int_{c_o}^{\infty} dz z^2 e^{-b_o z}$$

$$\times G_I(2u, o) + \frac{12\lambda\pi e N_{depl}}{\epsilon_s} \frac{1}{b_o} - \frac{4\lambda\pi e N_{inv}}{\epsilon_s} G(t, b_o, \beta)$$

(3.70)

e

$$E_{2P_o} = \frac{1}{4} (a^2 + \gamma b^2) + \frac{1}{2} \delta b - \frac{8\delta\epsilon_s}{\alpha} \frac{\epsilon_s - \epsilon_{ox}}{(\epsilon_s + \epsilon_{ox})^2} \frac{\beta^2}{\alpha^2} b^3 \int_{c_o}^{\infty} dz z^2 \times$$

$$\times e^{-bz} G_I(2u, o) - 2a^3 b^3 \int_0^{\infty} dk \frac{1}{(a^2 + k^2)^{3/2}} \frac{e^{-kz_o}}{(b+k)^3} -$$

$$- \frac{4}{\alpha} \frac{(\epsilon_s - \epsilon_{ox})^2}{\epsilon_s + \epsilon_{ox}} \frac{\beta^2}{\alpha^2} a^2 b^3 \int_{c_o}^{\infty} dz z^2 e^{-bz} \int_{c_o}^{\infty} dr r e^{-ar} \times$$

$$\times G_{II}(u_o, \rho) + \frac{12\lambda\pi e N_{depl}}{\epsilon_s} \frac{1}{b} - \frac{4\lambda\pi e N_{inv}}{\epsilon_s} G(t, b, \beta)$$

(3.71)

onde

$$G(t, x, \beta) = \frac{6(1-t^2\beta^2/2)tx^3}{(t+x)^5} + \frac{6x^3}{(t+x)^4} + \frac{3x^3}{t(t+x)^3} \quad (3.72)$$

Os parâmetros b_o , a e b são determinados minimizando os valores de E_o e E_{2p_o} , isto é, tomando

$$\frac{\partial E_o}{\partial b_o} = 0 \quad (3.73)$$

e

$$\frac{\partial E_{2p_o}}{\partial a} = \frac{\partial E_{2p_o}}{\partial b} = 0 \quad (3.74)$$

Substituindo os valores de b_o , a e b obtidos em (3.73) e (3.74), em (3.70) e (3.71), podemos finalmente encontrar o valor da energia de ligação do elétron na camada de inversão, que é dado por

$$E_B = E_o - E_{2p_o} \quad (3.75)$$

3.2.2 - Efeito da rugosidade sobre a blindagem dos elétrons na camada de inversão

No cálculo da energia de ligação, apresentado na seção anterior, o efeito da blindagem devido aos elétrons da camada de inversão não foi incluído.

Considerando a interface óxido-semicondutor como plana, o potencial devido à impureza no óxido é dado apenas por ... (3.66). Este termo contribui para a energia de ligação através de $\bar{\phi}_0$ dado por (3.61).

Levando-se em conta a blindagem, (3.66) deve ser modificada a fim de incluir este efeito. Usando uma teoria de resposta linear para a blindagem, F.Stern e W.E.Howard¹⁹ calcularam a mudança no potencial da impureza. Neste aproximação O.Hipólito e V.B.Campos²³ mostraram que o termo $\bar{\phi}_0$, que contém o efeito de blindagem, ainda pode ser escrito na forma (3.68), onde $\bar{\phi}_0(k)$ é agora dado por

$$\bar{\phi}(k) = \frac{b^3}{(b+k)^3} \frac{1}{F(k)} e^{-kz_0}, \quad z_0 \geq 0 \quad (3.76)$$

onde

$$F(k) = k + S \frac{8b^3 + 9b^2k + 3k^2}{8} \frac{1}{(b+k)^3} + S \frac{\epsilon_s - \epsilon_{ox}}{\epsilon_s + \epsilon_{ox}} \frac{b^6}{(b+k)^6} \quad (3.77)$$

e S corresponde ao parâmetro de blindagem. Neste caso, E_{2p_0} é dado

$$\text{por } E_{2p_0}(S) = \frac{1}{4} (a^2 + \gamma b^2) + \frac{1}{2} \delta b - 2a^3 b^3 \int_0^\infty \frac{dk}{(a^2 + k^2)^{3/2}}$$

$$\begin{aligned} & \frac{1}{F(k)} e^{-kz_0} + \frac{12\lambda\pi e N_{\text{depl}}}{\epsilon_s} \frac{1}{b} - \\ & - \frac{4\lambda\pi e N_{\text{inv}}}{\epsilon_s} + G(t, b, 0) \end{aligned} \quad (3.78)$$

A existência da rugosidade na superfície modifica a função de onda, e conseqüentemente a blindagem, que junto com a rugosidade correspondem a perturbações sobre o potencial da impureza. Assim, podemos incorporar o efeito da rugosidade sobre a blindagem através do potencial da impureza e do potencial imagem dados por (3.51) e (3.52), respectivamente.

Termos que envolvem S e β^2 simultaneamente são de segunda ordem e podem ser desprezados. Com a rugosidade, os parâmetros a e b , que minimizam E_{2p_0} (3.78) serão alterados. Finalmente a energia E_{2p_0} para os elétrons, quando consideramos os efeitos de blindagem e rugosidade simultaneamente, é dada por

$$\begin{aligned} E_{2p_0}(S; \beta) = & \frac{1}{4} (a^2 + \gamma b^2) + \frac{1}{2} \delta b - \frac{8\delta\epsilon_s}{\alpha} \frac{\epsilon_s - \epsilon_{ox}}{(\epsilon_s - \epsilon_{ox})^2} \frac{\beta^2}{\alpha^2} b^3 \int_{c_0}^\infty \\ & \times dzz^2 e^{-bz} G_I(2u, 0) - 2a^3 b^3 \int_0^\infty dk \frac{k}{(a^2 + k^2)^{3/2}} + \\ & + \frac{1}{F(k)} e^{-kz_0} - \frac{4}{\alpha} \frac{(\epsilon_s - \epsilon_{ox})^2}{\epsilon_s + \epsilon_{ox}} \frac{\beta^2}{\alpha^2} a^2 b^3 \int_{c_0}^\infty dzz^2 e^{-bz} \times \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & \times \int_{c_0}^{\infty} dr \, r \, e^{-ar} \, G_{II}(u_0, \rho) + \frac{12\lambda\pi\epsilon N_{\text{depl}}}{\epsilon_s} \frac{1}{b} - \frac{4\lambda\pi\epsilon N_{\text{inv}}}{\epsilon_s} \times \\
 & \times G(t, b, \beta)
 \end{aligned} \tag{3.79}$$

onde $G(t, b, \beta)$ e $F(k)$ são dados por (3.72) e (3.77), respectivamente.

Os valores de a e b são obtidos minimizando ...

$E_{2p_0} [S; \beta]$ com relação a a e b simultaneamente, isto é, tomando

$$\frac{\partial E_{2p_0} [S; \beta]}{\partial a} = \frac{\partial E_{2p_0} [S; \beta]}{\partial b} = 0 \tag{3.80}$$

A energia de ligação será dada por

$$E_B [S; \beta] = E_0 - E_{2p_0} [S; \beta] \tag{3.81}$$

onde E_0 é dado por (3.70) e a condição (3.73) também é satisfeita.

3.2.3 - Energia de transição entre sub-bandas

Para o cálculo da energia de transição entre as duas primeiras sub-bandas devemos considerar o Hamiltoniano H_0 , uma vez que, na ausência de impurezas, H_1 representa o Hamilto

niano de uma partícula livre no plano $x-y$. Neste caso temos

$$H = H_0 = -\gamma \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \delta \left\{ \frac{1}{z} - \frac{16\epsilon_s}{\alpha} \frac{\epsilon_s - \epsilon_{ox}}{(\epsilon_s - \epsilon_{ox})^2} \frac{\beta^2}{\alpha^2} G_I(2u, 0) \right\} +$$

$$\frac{4\lambda\pi e N_{depl}}{\epsilon_s} z - \frac{4\lambda\pi e N_{inv}}{\epsilon_s} e^{-tz} \left\{ \frac{1}{2} \left(1 - \frac{t^2 \beta^2}{2} \right) + 2z + \frac{3}{t} \right\} \quad (3.82)$$

onde o efeito da rugosidade foi introduzido no último termo através da equação (C.10) do apêndice C.

O Hamiltoniano H_0 contém a interação elétron-elétron apenas numa aproximação de campo médio (Ap.B). Embora os efeitos de troca e correlação para os elétrons na camada de inversão sejam importantes, com o Hamiltoniano H_0 podemos analisar de um modo simples o efeito da rugosidade sobre a transição entre sub-bandas.

Os níveis de energia são dados através da equação de Schrödinger

$$H_0 f_i(z) = E_i f_i(z) \quad (3.83)$$

e a energia de transição entre as sub-bandas dada por

$$E_{10} = E_1 - E_0 \quad (3.84)$$

A equação (3.83) deve ser resolvida numericamente.

Consideramos que a interação para o termo $G_I(2u, 0)$ no potencial imagem é feita a partir de $z = c_0$. Para distâncias inferiores a c_0 tomamos este termo como constante e igual a $G_I(2c_0, 0)$.

Esta aproximação é válida uma vez que a função de onda tende a zero para pequenos valores de z .

3.3 - Impurezas Doadoras no Semicondutor

Com impurezas doadoras situadas no semicondutor para o sistema $\text{SiO}_2\text{-Si}[001]$, podemos usar as mesmas aproximações do item 3.2.1. Assim, o Hamiltoniano para este sistema será dado por

$$H_s = H_{0s} + H_{1s} \quad (3.85)$$

com

$$H_{0s} = - \frac{\gamma \partial^2}{\partial z^2} + \delta \phi_a(z), \quad z \geq 0 \quad (3.86a)$$

e

$$H_{1s} = - \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\partial^2}{\partial y^2} + 2\phi_{ds}(\vec{r}, z) + V_{bs} \quad (3.86b)$$

onde γ , δ , ϕ_a são dados por (3.50a), (3.50b) e (3.51), respectivamente, e V_{bs} é a contribuição da rugosidade de barreira. O termo $\phi_{ds}(\vec{r}, z)$ corresponde ao potencial da impureza, considerando que a rugosidade da superfície dada por (3.39a), que em unidades

de Rydberg efetivo será

$$\begin{aligned} \Phi_{ds}(\vec{r}, z) = & - \frac{\epsilon_s + \epsilon_{ox}}{\epsilon_s} \frac{1}{[r^2 + (z - z_0)^2]^{1/2}} - \frac{\epsilon_s - \epsilon_{ox}}{\epsilon_s} \frac{1}{[r^2 + (z + z_0)^2]^{1/2}} \\ & + \frac{8}{\alpha} \left(\frac{\epsilon_s - \epsilon_{ox}}{\epsilon_s + \epsilon_{ox}} \right)^2 \frac{\beta^2}{\alpha^2} G_I(u_0, \rho) \end{aligned} \quad (3.87)$$

Para o nível de energia mais baixo, a função de onda do elétron é do tipo hidrogênio, associado ao nível $2p_0$. Como o campo elétrico no semiconductor é nulo, não podemos usar uma função de onda variacional da forma (3.56), ou seja, não podemos desacoplar o movimento no plano (x, y) com o movimento na direção z . Desta forma usaremos a função de onda variacional de Bell et al³⁷ normalizada, dada por

$$\Psi_{2p_0}(\vec{r}, z) = \left(\frac{a^2 b^3}{16\pi} \right)^{1/2} z \exp \left\{ - \frac{1}{2} [a^2 r^2 + b^2 z^2] \right\}^{1/2} \quad (3.88)$$

Assim, em relação à banda de condução do semiconductor, a energia de ligação do elétron devido à impureza será

$$E_B = \int_{z>0} d^3 x \Psi(\vec{r}, z) H_s \Psi(\vec{r}, z) \quad (3.89)$$

Com a função de onda (3.88), a contribuição da rugosidade na barreira do potencial $\tilde{e}$ dada por (C.16), e portanto a energia de ligação fica sendo

$$\begin{aligned}
 E_B = & \frac{3}{20} \gamma b^2 + \frac{1}{10} a^2 + \frac{3}{8} \delta b - \frac{a^2 b^3}{8} \int_0^\infty dz z^2 \int_0^\infty dr r \times \\
 & \times e^{-a^2 r^2 + b^2 z^2} \phi_s^{(0)}(\vec{r}, z) + \frac{a^2 b^2}{\alpha} \left(\frac{\epsilon_s - \epsilon_{ox}}{\epsilon_s + \epsilon_{ox}} \right)^2 \frac{\beta^2}{\alpha^2} \times \\
 & \times \int_{c_0}^\infty dz z^2 \int_{c_0}^\infty dr r e^{-a^2 r^2 + b^2 z^2} G_I(u_0, \rho) = \\
 & = \frac{2a^2 b^2 \delta}{\alpha} \times \frac{\epsilon_s - \epsilon_{ox}}{(\epsilon_s - \epsilon_{ox})^2} \frac{\beta^2}{\alpha^2} \int_{c_0}^\infty dz z^2 \int_0^\infty dr r \\
 & e^{-a^2 r^2 + b^2 z^2} \times G_I(2u, 0) - \frac{\epsilon_s + \epsilon_{ox}}{8\epsilon_s} a^2 b^3 z_o^2 e^{-bz_o}
 \end{aligned}
 \tag{3.90}$$

com

$$\phi_s^{(0)}(\vec{r}, z) = \frac{\epsilon_s + \epsilon_{ox}}{\epsilon_s} \frac{1}{[r^2 + (z - z_o)^2]^{1/2}} + \frac{\epsilon_s - \epsilon_{ox}}{\epsilon_s}$$

(3.91)

$$\frac{1}{[r^2 + (z + z_o)^2]^{1/2}}$$

Novamente os valores de a e b são obtidos minimizando a energia, isto é,

$$\frac{\partial E_B}{\partial a} - \frac{\partial E_B}{\partial b} = 0 \quad (3.92)$$

As integrais que envolvem $G_I(u, \rho)$ são tomadas a partir de $r, z = c_0$, pelas mesmas razões já discutidas na seção 3.1.2.

3.4 - Resultados e Conclusões

Os parâmetros variacionais a e b , que minimizam a energia, são calculados numericamente. Para estes cálculos, as integrais que envolvem $G_I(u, \rho)$ e $G_{II}(u, \rho)$, equações (3.71), (3.79) e (3.90) devem ser efetuadas cuidadosamente devido à função oscilante $J_0(\rho\xi)$. Assim, devemos integrar entre os zeros de $J_0(\rho\xi)$ sendo que o número de zeros a ser tomados depende basicamente da razão z/ρ . Quanto menor for esta razão, maior o número de intervalos de integração.

Os valores de c_0 e α foram tomados como 0.14 e 1.0, respectivamente, correspondendo a 3.0 Å e 21.8 Å. Estes são valores compatíveis com os que tem sido usados para o cálculo da mobilidade eletrônica, onde o efeito da rugosidade tem sido considerado.

A energia de ligação dos elétrons na camada de inversão foi calculada como uma função da densidade de elétrons nesta camada (N_{inv}), com $N_{depl} = 1.0 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ para várias distâncias da impureza à superfície e também para vários valores de β , conforme mostram as figuras (6a e 6b).

Podemos observar que a energia diminui quando β aumenta, ou seja, quando a superfície torna-se mais rugosa. Este fato pode ser compreendido através de (3.45), onde o aumento da rugosidade corresponde ao aumento da "distribuição de cargas induzidas" no óxido.

Os resultados foram comparados aos obtidos experimentalmente por Fowler e Hartstein.¹⁸ Como pode-se ver, nossos resul

tados são compatíveis com os resultados experimentais apenas para valores $\beta \gg 0.28$.

Entretanto, se a blindagem devido aos elétrons da camada de inversão for levada em conta, teremos valores associados à rugosidade próximos daqueles usados no problema da mobilidade.³²

Para $\beta = 0.0$ os valores do parâmetro de blindagem S são menores que os obtidos por Hipólito e Campos.²³ Isto porque quando usamos o potencial "nearly self-consistent" (Ap.B), a interação elétron-elétron é considerada numa aproximação de campo médio. Assim, parte da blindagem está incluída no termo de N_{inv} em (B.23).

A rugosidade da superfície diminui o efeito de blindagem, conforme pode-se notar nas figuras (6a e 6b).

No caso da separação entre as duas primeiras sub-bandas tomamos $N_{depl} = 1.0 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ (figura 7). Com $\beta = 0$, os resultados aqui obtidos são próximos aos de F.Stern.¹³ Assim, o potencial usado sem rugosidade representa, de forma razoável, a aproximação de campo médio. Como o efeito da rugosidade está representado por β , pode-se observar uma diminuição na energia de transição com o aumento de rugosidade. Isto porque a contribuição da rugosidade no potencial imagem é repulsiva. Logo, existe um aumento nos níveis de energia de cada sub-banda. E sendo o nível (E_0) o mais afetado, haverá uma diminuição na energia de transição.

Com impurezas doadoras situadas no Si, calculamos a energia de ligação como função da distância destas à interface, e os resultados são apresentados na figura (8). Com $\beta = 0$, nossos resultados coincidem com os de N.O.Lipari.⁶ Novamente observamos

uma redução no nível de energia quando β aumenta, o que pode ser justificado de modo análogo ao cálculo do nível de energia na camada de inversão.

Para distâncias acima de $z_0 = 0.3$ (aproximadamente $6.5 \text{ \AA}$), os resultados não são válidos. Nesta região a função de onda em z_0 deve conter contribuições associadas às propriedades do interior do semiconductor. Desta forma, a função de onda deve ser dada através de uma combinação linear de funções que satisfaçam a condição

$$\Psi(\vec{r}, z) \Big|_{z=0} = 0$$

Desta forma, o efeito da rugosidade na barreira não será dado por (C16), e o método variacional não levará a bons resultados.

A contribuição importante da rugosidade nos problemas aqui discutidos deve-se à mudança no potencial imagem e no potencial da impureza. A mudança na barreira não é tão significativa quanto estes outros efeitos. Tal fato está de acordo com os resultados obtidos por F. Stern³⁸ para o cálculo da energia de transição entre sub-bandas. O efeito da rugosidade na barreira de potencial é importante para o problema da mobilidade, pois neste caso devemos considerar apenas elementos de matriz de primeira ordem.³⁴

Finalmente, podemos concluir que o efeito da rugosidade é significativo em todos os problemas aqui tratados. Como a interação elétron-elétron (efeito de troca e correlação) é importante, e foi considerada apenas numa aproximação de campo médio, torna-se necessário incorporá-la a estes problemas. Deste modo, esperamos

levar em conta corretamente a blindagem dos elétrons próximos à impureza, e também obter resultados compatíveis com os experimentais no cálculo da energia de transição entre as sub-bandas.

4 - ESTADOS SUPERFICIAIS LOCALIZADOS

No capítulo 1 foram apresentadas as propriedades gerais dos elétrons na superfície de He^4 líquido. Analisaremos agora as propriedades associadas ao elétron localizado na superfície, ou seja, o anion superficial. Estamos particularmente interessados em determinar sua energia de formação e sua massa efetiva.

Estas quantidades foram inicialmente calculadas por V.B.Shikin e Yu.P.Monarkha.⁷ Neste trabalho a equação de Schrödinger para o movimento do elétron no plano, e a equação que descreve a deformação na superfície do líquido são resolvidas simultaneamente, por perturbação.

A energia de formação do anion superficial é obtida tomando-se o valor médio da energia do elétron com a energia associada à deformação do líquido. Para determinar a massa efetiva considera-se que a perturbação na superfície do líquido desloca-se com uma velocidade constante, e este movimento pode ser descrito por uma equação hidrodinâmica. Este tratamento também foi usado para calcular as propriedades do anion superficial em misturas de He^3 - He^4 .

Considerando o elétron na superfície de um filme de He líquido, sobre um substrato de CaF_2 , L.M.Sander⁸ obteve a energia de formação do anion superficial. Neste cálculo, a deformação da superfície é descrita através de uma função com dois pa

râmetros variacionais , e assim a energia de formação deste estado é obtida variacionalmente.

Para elétrons localizados na superfície de He^4 , a interação elétron-superfície é análoga à interação elétron-fonon em materiais polares. Desta forma podemos usar o método de integral de trajetória de Feynman⁵ para calcular a energia de formação e a massa efetiva do anion superficial.

No caso em que a densidade de elétrons próximo à interface é muito pequena, podemos desprezar a interação elétron - elétron e considerar o problema como sendo de um elétron sobre a interface.

4.1 - Lagrangeana dos Riplons

Um movimento qualquer da superfície de um líquido pode ser descrito em função dos modos normais de vibração desta superfície, ou seja, através de ondas de capilaridade. As quase-partículas resultantes da quantização destas ondas são chamadas de riplons.

No método de Feynman é necessário o cálculo da Lagrangeana do movimento associado à superfície, isto é, a Lagrangeana dos riplons. Para isto vamos considerar um fluido ideal incompressível, com a superfície livre em $z=0$, com profundidade L e área A . Neste fluido a velocidade pode ser expressa em termos do gradiente de um potencial $\phi(\vec{r}, z)$, que satisfaz a

equação de Laplace. Assim, para um deslocamento $U(\vec{r})$, onde $\vec{r}$ é um vetor no plano $z=0$, temos que

$$\nabla^2 \phi(\vec{r}, z) = 0 \quad (4.1)$$

onde $\vec{r}$ é um vetor paralelo à superfície $z=0$.

A velocidade na superfície livre do líquido será dada por

$$\vec{V}(\vec{r}, z) = \nabla \phi(\vec{r}, z) \cdot \vec{n} \quad (4.2)$$

sendo $\vec{n}$ o vetor normal a esta superfície.

Na superfície $z=-L$ a velocidade do líquido na direção n deve ser nula. Logo

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial z}(\vec{r}, z) \right|_{z=-L} = 0 \quad (4.3)$$

A equação (4.3) deve ser satisfeita, uma vez que a velocidade em $z=-L$ é nula.

Considerando o fluido com densidade ρ , temos que a energia cinética T para o movimento na superfície livre é igual a

$$T = \frac{1}{2} \rho \int dV (\nabla \phi)^2 = -\frac{1}{2} \rho \int dV \phi \nabla^2 \phi + \frac{1}{2} \rho \int dS \cdot \phi \nabla \phi \quad (4.4)$$

Uma vez que o desvio da superfície do líquido é pequeno, podemos tomar a componente de velocidade na direção z . Assim a energia cinética será dada por

$$T = \frac{1}{2} \rho \int d^2 r \dot{U}(\vec{r}) \phi(\vec{r}, 0) \quad (4.5)$$

com

$$\dot{U}(\vec{r}) = \left. \frac{\partial \phi}{\partial z}(\vec{r}, z) \right|_{z=0} \quad (4.6)$$

A solução geral para (4.1) é dada por

$$\begin{aligned} \phi(\vec{r}, z) = \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \int_0^{\infty} dq J_m(qr) e^{im\phi} \left[A_m(q) e^{qz} + \right. \\ \left. + B_m(q) e^{-qz} \right] \end{aligned} \quad (4.7)$$

onde $J_m(qr)$ é a função de Bessel e os coeficientes $A_m(q)$ e $B_m(q)$ são determinados a partir das condições de contorno (4.3) e (4.6). Com esta última condição de contorno os coeficientes $A_m(q)$ e $B_m(q)$ são relacionados de tal forma que

$$B_m(q) = A_m(q) e^{-2qL} \quad (4.8)$$

Consequentemente, a velocidade e o potencial na superfície são dados por

$$\dot{U}(r) = \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \int_0^{\infty} dq q J_m(qr) e^{im\phi} [1 - e^{-2L}] A_m(q) \quad (4.9a)$$

e

$$\phi(\vec{r}, 0) = \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \int_0^{\infty} dq J_m(qr) e^{im\phi} [1 + e^{-2qL}] A_m(q) \quad (4.9b)$$

Como $e^{im\phi}$ é uma função periódica, e as funções de Bessel satisfazem a relação

$$\int_0^{\infty} dr r J_m(qr) J_m(q'r) = \frac{1}{q} \delta(q'-q) \quad (4.10)$$

os coeficientes $A_m(q)$ podem ser escritos em termos de $\dot{U}(\vec{r})$, ou seja,

$$A_m(q) = \frac{1}{2\pi} \frac{1}{[1-e^{-2qL}]} \int d^2r' \dot{U}(\vec{r}') J_m(qr') e^{-im\phi'} \quad (4.11)$$

Assim, a energia cinética (4.5) será

$$T = \frac{\rho}{4\pi} \iint d^2r d^2r' \dot{U}(\vec{r}) \dot{U}(\vec{r}') \int_0^{\infty} dq \frac{1}{\text{tgh}(qL)} \times$$

$$\times \left\{ \sum_{m=-\infty}^{+\infty} J_m(qr) J_m(qr') e^{im(\phi-\phi')} \right\} \quad (4.12)$$

Usando a relação

$$J_0(q|\vec{r}'-\vec{r}|) = \sum_{m=-\infty}^{-\infty} J_m(qr) J_m(qr') e^{im(\phi-\phi')} \quad (4.13)$$

e tomando a representação integral da função de Bessel

$$J_0(q|\vec{r}'-\vec{r}|) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\theta e^{i\vec{q} \cdot |\vec{r}'-\vec{r}|} \quad (4.14)$$

teremos para a energia cinética

$$T = \frac{\rho}{4\pi} \frac{1}{2\pi} \iint d^2r \, d^2r' \, \dot{U}(\vec{r}) \, \dot{U}(\vec{r}') \int_0^\infty dk \int_0^{2\pi} d\theta \quad x$$

$$e^{i\vec{q} \cdot (\vec{r}' - \vec{r})} \frac{1}{\text{tgh}(qL)} \quad (4.15)$$

Para um líquido com profundidade infinita, $\text{tgh}(qL) = 1$, a expressão para a energia cinética será simplesmente

$$T = \frac{\rho}{4\pi} \iint d^2r \, d^2r' \, \frac{\dot{U}(\vec{r}) \dot{U}(\vec{r}')}{|\vec{r}' - \vec{r}|} \quad (4.16)$$

obtida anteriormente por M.W.Cole.³⁹

Expandindo o deslocamento $U(\vec{r})$ e a velocidade $\dot{U}(\vec{r})$ em termos dos modos normais de vibração da superfície,

$$U(\vec{r}) = \frac{1}{A^{1/2}} \sum_{\vec{k}} Q_{\vec{k}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \quad (4.17a)$$

e

$$\dot{U}(\vec{r}) = \frac{1}{A^{1/2}} \sum_{\vec{k}} \dot{Q}_{\vec{k}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \quad (4.17b)$$

e substituindo (4.17b) em (4.15) temos que

$$T = \sum_{\vec{k}} T_{\vec{k}} = \sum_{\vec{k}} \frac{\rho}{4\pi} \dot{Q}_{\vec{k}} \frac{1}{2\pi A} \sum_{\vec{k}'} \dot{Q}_{\vec{k}'} \int d^2 q \quad \times$$

$$\times \frac{1}{q \operatorname{tgh}(qL)} \iint d^2 r d^2 r' e^{i\vec{r} \cdot (\vec{k} - \vec{q})} \times e^{i\vec{r}' \cdot (\vec{k}' + \vec{q})} \quad (4.18)$$

Integrando (4.18) teremos finalmente a energia cinética em função dos modos normais de vibração da superfície

$$T = \sum_{\vec{k}} T_{\vec{k}} = \frac{\rho}{2} \frac{1}{k \operatorname{tgh}(kL)} \dot{Q}_{\vec{k}} \dot{Q}_{-\vec{k}} \quad (4.19)$$

A energia potencial associada a um deslocamento na superfície tem contribuições da força gravitacional e da tensão superficial σ dada por

$$V = \int d^2 r \int_{-\infty}^{U(\vec{r})} dz \rho g z + \sigma \int d^2 r \{1 + [\nabla U(\vec{r})]^2\}^{1/2} \quad (4.20)$$

Para pequenos deslocamentos $|\nabla U| \ll 1$, e assim teremos para a energia potencial

$$V = V_g + \int d^2 r \left\{ \rho g U(\vec{r})^2 / 2 + \frac{\sigma}{2} [\nabla U(\vec{r})]^2 \right\} \quad (4.21)$$

onde V_g é o valor da energia potencial para o líquido em repouso.

Substituindo (4.17a) em (4.21), a energia potencial será

$$V = \sum_{\vec{k}} \frac{1}{2} (\rho g + \sigma k^2) Q_{\vec{k}} Q_{-\vec{k}} \quad (4.22)$$

Assim, de (4.19) e (4.22) a Lagrangeana dos modos normais de vibração será dada por

$$L = \sum_{\vec{k}} L_{\vec{k}} \quad (4.23)$$

onde

$$L_{\vec{k}} = \frac{\rho}{2k \operatorname{tgh}(kL)} \dot{Q}_{\vec{k}} \dot{Q}_{-\vec{k}} - \frac{1}{2} (\rho g + \sigma k^2) Q_{\vec{k}} Q_{-\vec{k}} \quad (4.24)$$

As equações (4.23) e (4.24) serão usadas a seguir, no problema do anion superficial.

4.2 - Interação Elétron-Riplon

Para o cálculo da interação de um elétron com a deformação da superfície usaremos o procedimento de V.B.Shikin e Yu.P.Monarkha.⁴⁰ Desta forma vamos considerar um elétron, sobre uma superfície de He deformada, na presença de um campo elétrico $E_{\perp}$.

A equação de Schrödinger para o elétron será

$$\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\vec{r}, z) + [E - V(\vec{r}, z) - e E_{\perp} z] \psi(\vec{r}, z) = 0 \quad (4.25)$$

onde a função de onda satisfaz as condições de contorno

$$\psi(\vec{r}, z) \Big|_{z=U(\vec{r})} = 0 \quad (4.26a)$$

e

$$\psi(\vec{r}, z) \Big|_{z \rightarrow \infty} \rightarrow 0 \quad (4.26b)$$

O potencial $V(\vec{r}, z)$ representa a interação de polarização do elétron com os átomos do He, e é dado por

$$V(\vec{r}, z) = -\frac{\Lambda_0}{\pi} \int d^2 r' \int_{-\infty}^{U(\vec{r}')} \frac{dz'}{[(\vec{r}' - \vec{r})^2 + (z' - z)^2]^2} \quad (4.27)$$

onde

$$\Lambda_0 = \frac{e^2 (\epsilon_{\text{He}} - 1)}{(\epsilon_{\text{He}} + 1)} \quad (4.28)$$

e $U(\vec{r}')$ representa a deformação da superfície com relação ao plano $z=0$, devido à pressão do elétron, satisfazendo a condição

$$\int d^2 r U(\vec{r}) = 0 \quad (4.29)$$

Para analisar as equações (4.25) e (4.27) é conveniente eliminar a perturbação $U(\vec{r})$ das condições de contorno. Efetuando a mudança de variáveis, tal que

$$\tilde{z} = z - U(\vec{r}), \quad \vec{r} = \vec{r} \quad (4.30)$$

as condições de contorno serão

$$\psi(\vec{r}, \tilde{z}) \Big|_{\tilde{z}=0} = 0 \quad (4.31a)$$

e

$$\psi(\vec{r}, \tilde{z}) \Big|_{\tilde{z} \rightarrow \infty} \rightarrow \infty \quad (4.31b)$$

A mudança na condição de contorno (4.31b) representa o efeito da barreira de potencial na superfície do líquido. Embora esta barreira seja repulsiva, a presença de um campo elétrico intenso ($E_{\perp}$) na direção z , pressionando o elétron contra a superfície, torna possível a existência do anion superficial.⁷

Nas novas variáveis, (4.25) e (4.27) são dadas por

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2}{\partial \tilde{z}^2} \psi(\vec{r}, \tilde{z}) (1 + U'(\vec{r})^2) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[r \frac{\partial}{\partial r} \psi(\vec{r}, \tilde{z}) \right] - \\ - \left[2U'(\vec{r}) \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (rU'(\vec{r})) \right] \frac{\partial}{\partial \tilde{z}} \psi(\vec{r}, \tilde{z}) + \\ + \frac{2m}{\hbar^2} \left[E - V(\vec{r}, \tilde{z}) - e E_{\perp} (\tilde{z} + U(r)) \right] \psi(\vec{r}, \tilde{z}) = 0 \end{aligned} \quad (4.32)$$

e

$$V(\vec{r}, \tilde{z}) = - \frac{\Lambda_0}{\pi} \int d^2 r' \int_{-\infty}^{U(\vec{r}') - U(\vec{r})} \frac{d\tilde{z}'}{[(\vec{r}' - \vec{r})^2 + (\tilde{z}' - \tilde{z})^2]^2} \quad (4.33)$$

onde $U'(\vec{r}) = \frac{dU}{dr}(\vec{r})$.

Como a deformação é pequena, o termo $U'^2(\vec{r})$ representa uma contribuição de segunda ordem, e desta forma será desprezado.

A equação (4.33) pode ser escrita como

$$\begin{aligned}
V(\vec{r}, \tilde{z}) &= - \frac{\Lambda_0}{\pi} \int d^2 r' \int_{-\infty}^0 \frac{d\tilde{z}'}{[(\vec{r}' - \vec{r})^2 + (\tilde{z}' - \tilde{z})^2]^2} - \\
&= - \frac{\Lambda_0}{\pi} \int d^2 r' \int_0^{U(\vec{r}') - U(\vec{r})} \frac{d\tilde{z}'}{[(\vec{r}' - \vec{r})^2 + (\tilde{z}' - \tilde{z})^2]^2} = \\
&= \frac{\Lambda_0}{\tilde{z}} - \frac{\Lambda_0}{\pi} \int d^2 r' \int_0^{U(\vec{r}) - U(\vec{r}')} \frac{d\tilde{z}'}{[(\vec{r}' - \vec{r})^2 + (\tilde{z}' - \tilde{z})^2]^2}
\end{aligned}
\tag{4.34}$$

O primeiro termo em (4.34) representa o potencial imagem clássico e o segundo representa as correções a este potencial devido às oscilações na superfície, ou seja, uma contribuição à interação elétron-riplon. Com isto, (4.32) fica sendo

$$\begin{aligned}
\frac{\partial^2 \psi}{\partial \tilde{z}^2}(\vec{r}, \tilde{z}) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[r \frac{\partial}{\partial r} \psi(\vec{r}, \tilde{z}) \right] - \left[2U'(\vec{r}) \frac{\partial}{\partial r} + \right. \\
\left. + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (rU'(\vec{r})) \right] \frac{\partial}{\partial \tilde{z}} \psi(\vec{r}, \tilde{z}) + \frac{2m}{\hbar^2} \left[E + \frac{\Lambda_0}{\tilde{z}} - \right.
\end{aligned}$$

$$\text{onde} \quad -eE_{\perp} \tilde{z} - eE_{\perp} [U(\vec{r}) - V_p(r, \tilde{z})] \psi(\vec{r}, \tilde{z}) = 0 \tag{4.35}$$

$$V_p(\vec{r}, \tilde{z}) = - \frac{\Lambda_0}{\pi} \int d^2 r' \int_0^{U(\vec{r}') - U(\vec{r})} \frac{d\tilde{z}'}{[(\vec{r}' - \vec{r})^2 + (\tilde{z}' - \tilde{z})^2]^2} \tag{4.36}$$

Os termos de perturbação que aparecem em (4.35) podem ser divididos em três tipos:

a) Perturbação da forma $\left[2U'(\vec{r}) \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial} (rU'(\vec{r})) \right] x \frac{\partial}{\partial \tilde{z}}$ resultante da transformação do operador ∇^2 . Este termo possui a seguinte propriedade: o elemento de matriz entre dois estados de um elétron, que diferem apenas da função de onda no plano x - y , é nulo. Assim, se tomarmos

$$\psi_1(\vec{r}, \tilde{z}) = f_1(\tilde{z}) \phi(\vec{r}) \quad (4.37a)$$

e

$$\psi_2(\vec{r}, \tilde{z}) = f_1(\tilde{z}) \Theta(\vec{r}), \quad (4.37b)$$

onde $f_1(\tilde{z})$ representa a função de onda na primeira sub-banda, o elemento de matriz para o termo de perturbação que estamos considerando é proporcional a

$$\int_0^\infty f_1(\tilde{z}) \frac{\partial}{\partial \tilde{z}} f_1(\tilde{z}) d\tilde{z} = \frac{1}{2} \left[f_1^2(\infty) - f_1^2(0) \right] = 0 \quad (4.38)$$

A equação acima é satisfeita em virtude das condições de contorno (4.31a) e (4.31b).

Uma vez que na análise a ser feita os elétrons en-

contram-se na primeira sub-banda, esta perturbação será excluída.

b) Perturbação devido ao campo elétrico externo. Esta perturbação está representada em (4.35) pelo termo

$$V_{E_{\perp}}(\vec{r}, \tilde{z}) = e E_{\perp} U(\vec{r}) \quad (4.39)$$

c) Perturbação devido à variação da superfície na interação de polarização, representada por (4.36). Como o intervalo de integração sobre $\tilde{z}'$ é pequeno comparado com a distância média do elétron à superfície, podemos considerar

$$\begin{aligned} V_P(r, \tilde{z}) &= - \frac{\Lambda_o}{\pi} \int d^2 r' \int_0^{U(\vec{r}) - U(\vec{r}')} \frac{d\tilde{z}'}{[(\vec{r}' - \vec{r})^2 + \tilde{z}^2]^2} = \\ &= \frac{\Lambda_o}{\tilde{z}^2} U(\vec{r}) - \frac{\Lambda_o}{\pi} \int \frac{d^2 r' U(\vec{r}')}{[(\vec{r}' - \vec{r})^2 + \tilde{z}^2]^2} \end{aligned} \quad (4.40)$$

Para calcular o segundo termo em (4.40) vamos tomar $U(\vec{r})$ dado por (4.17a). Com isto temos que

$$\begin{aligned} \frac{\Lambda_o}{\pi} \int \frac{d^2 r' U(\vec{r}')}{[(\vec{r}' - \vec{r})^2 + \tilde{z}^2]^2} &= \frac{\Lambda_o}{A^{1/2} \pi} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} Q_{\vec{k}} \int \frac{d^2 r' e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}'}}{[r'^2 + \tilde{z}^2]^2} = \\ &= \frac{\Lambda_o}{A^{1/2} \tilde{z}} \sum_{\vec{k}} Q_{\vec{k}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} K_1(k\tilde{z}) \end{aligned} \quad (4.41)$$

onde $K_1(k\tilde{z})$ é a função de Bessel modificada.

Tomando de (4.39) a (4.41) e $U(\vec{r})$ dado por (4.16a), a interação do elétron com a superfície (elétron-riplon) V_{e-r} será

$$V_{e-r}(\vec{r}, \tilde{z}) = \frac{1}{A^{1/2}} \sum_{\vec{k}} \left(e E_{\perp} + \frac{\Lambda_0}{\tilde{z}^2} - \frac{\Lambda_{0k}}{\tilde{z}} K_1(k\tilde{z}) \right) Q_{\vec{k}} e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} \quad (4.42)$$

Para campos elétricos fortes ($E_{\perp} \gtrsim 400\text{V/cm}$) o primeiro termo em (4.42) é o mais importante. Além disto, estamos numa região onde $q \ll \tilde{z} \ll 1$ ($\tilde{z}$ é a distância média do elétron à superfície), e neste caso podemos tomar $K_1(k\tilde{z}) \sim \frac{1}{k\tilde{z}}$. Desta forma os dois últimos termos se cancelam, e teremos a interação elétron-riplon dada por

$$V_{e-r}(r) = \frac{1}{A^{1/2}} \sum_{\vec{k}} e E_{\perp} Q_{\vec{k}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \quad (4.43)$$

Se considerarmos um filme de He^4 , com espessura L , sobre um substrato de constante dielétrica ϵ_s , a interação devido ao potencial imagem clássico, $V_I = \frac{\Lambda_0}{z}$, será modificada. Neste caso temos⁴⁰

$$V_I(z, L) = -\frac{\Lambda_0}{z} - \Lambda_1 \sum_{\ell=1}^{\infty} \frac{(-a)^{\ell-1}}{z + \ell L} \quad (4.44)$$

onde

$$\Lambda_1 = \frac{e^2 \epsilon_{\text{He}} (\epsilon_s - \epsilon_{\text{He}})}{(1 + \epsilon_{\text{He}}) (\epsilon_{\text{He}} + \epsilon_s)} \quad (4.45)$$

e

$$a = \frac{(\epsilon_{\text{He}} - 1)(\epsilon_s - \epsilon_{\text{He}})}{(1 + \epsilon_{\text{He}})(\epsilon_s + \epsilon_{\text{He}})} \quad (4.46)$$

Para um substrato metálico Λ_1 é igual a ⁴¹ $\Lambda_1 =$
 $= \frac{e^2 \epsilon_{\text{He}}}{(1 + \epsilon_{\text{He}})^2}$ em (4.45).

Considerando apenas o termo $\ell=1$, a mudança de variáveis (4.30), e expandindo até primeira ordem em $U(\vec{r})$, teremos a contribuição do substrato na interação elétron-riplon dada por

$$V_s(\vec{r}, \tilde{z}) = \frac{\Lambda_1}{(\tilde{z}+L)^2} \quad U(\vec{r}) = \frac{1}{A^{1/2}} \sum_{\vec{k}} \frac{\Lambda_1}{(\tilde{z}+L)^2} Q_{\vec{k}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \quad (4.47)$$

Como tomaremos filmes onde $L \gg \langle \tilde{z} \rangle$, a interação elétron-riplon para um filme de He^4 finalmente será

$$V_{e-r}(\vec{r}) = \frac{1}{A^{1/2}} \sum_{\vec{k}} \left(eE_1 + \frac{\Lambda_1}{L^2} \right) Q_{\vec{k}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \quad (4.48)$$

4.3 - Energia de Formação do Anion Superficial em Filmes de He Líquido

Nas seções 4.1 a 4.2 calculamos a Lagrangeana dos riplons (4.23) e a interação elétron-riplons (4.48). Para o elétron vamos considerar seu movimento restrito ao plano x - y , uma vez que tomaremos apenas os elétrons na primeira sub-banda. Desta forma, a Lagrangeana para o sistema elétron-superfície será

$$L(\vec{r}(t), \dot{\vec{r}}(t), Q_1, \dots, Q_N, \dot{Q}_1, \dots, \dot{Q}_N) = \frac{1}{2} m \dot{\vec{r}}^2(t) + \sum_{\vec{k}} L_{\vec{k}} \quad (4.49)$$

onde

$$L_{\vec{k}} = \frac{M_{\vec{k}}}{2} (\dot{Q}_{\vec{k}} \dot{Q}_{-\vec{k}} - \omega_{\vec{k}}^2 Q_{\vec{k}} Q_{-\vec{k}}) + \gamma_{\vec{k}}(t) Q_{\vec{k}} \quad (4.50)$$

com

$$M_{\vec{k}} = \frac{\rho}{k \operatorname{tgh}(kL)} \quad (4.51a)$$

$$\omega_{\vec{k}}^2 = (g k + \frac{\sigma}{\rho} k^3) \operatorname{tgh}(kL) \quad (4.51b)$$

$$\gamma_{\vec{k}}^{\rightarrow}(t) = A^{-1/2} \left(e E_{\perp} + \frac{\Lambda_1}{L^2} \right) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}(t)} \quad (4.51c)$$

Como podemos observar, a Lagrangeana dada por (4.49) é formalmente idêntica à obtida para um sistema elétron-fonon em materiais polares.

A partir de (2.28) e (2.29), o propagador entre dois estados, para este sistema, será

$$\begin{aligned} K(\vec{r}'', Q''_1 \dots Q''_N, t''; \vec{r}', Q'_1, \dots, Q'_N, t') &= \\ &= \int \dots \int D\vec{r}(t) DQ_1(t) \dots DQ_N(t) \exp\left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t'}^{t''} dt \times \right. \\ &\quad \left. L(\vec{r}(t), \dot{\vec{r}}(t), Q_1, \dots, Q_N, \dot{Q}_1, \dots, \dot{Q}_N, t) \right\} \end{aligned} \quad (4.52)$$

Usando (4.48) e (4.49) temos que

$$\begin{aligned} K(\vec{r}'', Q''_1, \dots, Q''_N, t''; \vec{r}', Q'_1, \dots, Q'_N, t') &= \int D\vec{r}(t) \times \\ &\exp\left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t'}^{t''} \frac{m}{2} \dot{\vec{r}}^2(t) dt \right\} * \prod_{\vec{k}} K(Q''_{\vec{k}}, t''; \\ &Q'_{\vec{k}}, t') \gamma_{\vec{k}}^{\rightarrow}(t) \end{aligned} \quad (4.53)$$

onde

$$K(Q''_{\vec{k}} t''; Q'_{\vec{k}} t') \gamma_{\vec{k}}(t) = \int DQ_{\vec{k}}(t) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t'}^{t''} dt L_{\vec{k}}(Q_{\vec{k}}, \dot{Q}_{\vec{k}}, t) \right\} \quad (4.54)$$

Consideraremos o propagador do sistema definido em (2.14), introduzindo as variáveis $\tau'' = it''$ e $\tau' = it'$.

Assim podemos escrever (4.53) como

$$K(\vec{r}'', Q'', \dots, Q_N'', \tau''; \vec{r}', Q', \dots, Q_N', \tau') = \sum_{n=0}^{\infty} \phi_n(\vec{r}'', Q_1'', \dots, Q_N'')$$

$$Q_N'') \phi_n^*(\vec{r}', Q_1', \dots, Q_N') e^{-E_n(\tau'' - \tau')/\hbar} \quad (4.55)$$

A energia de formação do anion, isto é, o estado fundamental E_0 , do sistema elétron-riplon, representa a razão de decaimento em (4.55), se tomarmos $\tau'' - \tau' = \beta \rightarrow \infty$. Este limite $\beta \rightarrow \infty$ estará implícito nos cálculos a seguir.

Se multiplicarmos (4.55) por uma função de Q''_i e Q'_i , não ortogonal a $\phi_0(\vec{r}'', Q''_1, \dots, Q''_N) \phi_0^*(\vec{r}', Q'_1, \dots, Q'_N)$, a razão de decaimento E_0 não será afetada. Desta forma, podemos simplificar os cálculos para E_0 se tomarmos o propagador onde o estado inicial e final dos riplons é o estado fundamental. Isto corresponde a substituir cada propagador $K(Q''_{\vec{k}} t''; Q'_{\vec{k}} t') \gamma_{\vec{k}}(t)$ em (4.53) por

$$G_{00}^{\vec{k}} = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} dQ_{\vec{k}}^y dQ_{\vec{k}}^z \phi_0(Q_{\vec{k}}^y) K(Q_{\vec{k}}^y t''; Q_{\vec{k}}^z t') \gamma_{\vec{k}}(t) \times$$

$$\times \phi_0(Q_{\vec{k}}^z) \quad (4.56)$$

onde $\phi_0(Q_{\vec{k}})$ é função de onda do estado fundamental para o oscilador harmônico simples. Com a Lagrangeana da forma (4.50) temos que

$$G_{00}^{\vec{k}} = \exp \left\{ \frac{1}{4M_{\vec{k}}\omega_{\vec{k}}\hbar} \int_0^\beta \int_0^\beta d\tau ds \gamma_{\vec{k}}(t) \gamma_{\vec{k}}^*(s) e^{-\omega_{\vec{k}}|\tau-s|} \right\} \quad (4.57)$$

Usando (4.53) e (4.57) teremos o propagador (4.52)

$$K_{00}(\vec{r}''\beta; \vec{r}') = \int D \vec{r}(\tau) \exp \left\{ -\frac{m}{2\hbar} \int_0^\beta d\tau \left(\frac{d\vec{r}}{d\tau} \right)^2 \right\} \times$$

$$\times \prod_{\vec{k}} G_{00}^{\vec{k}} = \int D \vec{r}(\tau) \exp \left\{ -\frac{m}{2\hbar} \int_0^\beta d\tau \left(\frac{d\vec{r}}{d\tau} \right)^2 + \right.$$

$$+ \frac{(eE_L + \Lambda_1/L^2)^2}{4\rho\hbar} \int \frac{d^2\vec{k}}{(2\pi)^2} \frac{k \tanh(kL)}{\omega_{\vec{k}}} \int_0^\beta \int_0^\beta d\tau ds \times$$

$$\times e^{-\omega_{\vec{k}}|\tau-s|} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{r}(\tau) - \vec{r}(s))} \left. \right\} \quad (4.58)$$

A equação (4.58) pode ser escrita como

$$K_{00}(\vec{r}''\beta; \vec{r}') = \int D \vec{r}(\tau) e^{S/\hbar} \quad (4.59)$$

onde a "ação" S é dada por

$$S = - \frac{m}{2\hbar} \int_0^\beta d\tau \left(\frac{d\vec{r}}{d\tau} \right)^2 + \frac{(eE_\perp + \Lambda_1/L^2)^2}{16\pi^2 \rho \hbar} \int d^2k \quad x$$

$$x \frac{k \tanh(kL)}{\omega_{\vec{k}}} \int_0^\beta \int_0^\beta d\tau ds e^{-\omega_{\vec{k}}(\tau-s)} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{r}(\tau) - \vec{r}(s))}$$

(4.60)

Equações (4.59) e (4.60) nos dão o propagador para o movimento do elétron, onde as coordenadas associadas aos ríplons foram eliminadas do problema.

Uma vez que a razão de decaimento (E_0) em (4.55) também é independente de $\vec{r}''$ e $\vec{r}'$, podemos tomar $\vec{r}'' = \vec{r}' = \vec{r}(0)$ e integrar esta equação em $\vec{r}(\tau)$. Assim, temos

$$e^{-\beta E_0/\hbar} = \int \int_{\vec{r}(0)}^{\vec{r}(0)} d^2r \mathcal{D} \vec{r}(\tau) e^{S/\hbar} \quad (4.61)$$

onde a constante que é resultante da integração da função no lado direito de (4.55) está incluída no fator de normalização de $D\vec{r}(\tau)$.

A equação (4.61) corresponde a (2.32) onde o limite $\beta \rightarrow \infty$ foi tomado.

Como o sistema em consideração é isotrópico, a integral sobre as trajetórias independe de $\vec{r}(0)$. Com isto tomamos $\vec{r}(0)=0$, e a integração sobre $\vec{r}(\tau)$ representa a área do sistema. Logo, podemos escrever (4.61) como

$$e^{-\beta E_0/\hbar} = \int D \vec{r}(\tau) e^{S/\hbar} \quad (4.62)$$

onde novamente a constante de integração no espaço está incluída em $D\vec{r}(\tau)$, e na integral sobre as trajetórias o ponto inicial é igual ao ponto final.

Introduzindo variáveis adimensionais $\vec{r} = \vec{r}/r_0$, $L = L/r_0$, $\vec{k} = \vec{k} r_0$, $\tau = \tau/\tau_0$, $\vec{w}_k = \vec{w}_k \tau_0$, $E_0 = E_0(\tau_0/\hbar)$ e $\beta = \beta/\tau_0$, onde τ_0 é dado por⁴²

$$\tau_0 = \frac{2\pi\hbar\sigma}{(eE_\perp)^2} \quad (4.63)$$

e

$$r_0 = \left(\frac{\hbar\tau_0}{m} \right)^{1/2} \quad (4.64)$$

a equação (4.62) fica sendo

$$e^{-E_0\beta} = \int D \vec{r}(\tau) e^S \quad (4.65)$$

sendo a "ação" S

$$S = -\frac{1}{2} \int_0^\beta \left(\frac{d\vec{r}}{d\tau} \right)^2 d\tau + \alpha \int d^2k \frac{k t g h(kL)}{\omega_k} \int_0^\beta \int_0^\beta d\tau ds \quad x$$

$$x e^{-\omega_k |\tau-s|} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{r}(s) - \vec{r}(\tau))} \quad (4.66)$$

onde

$$\alpha = \frac{(eE_1 + \Lambda_1/L^2)^2 \tau_0^3}{16\pi^2 \hbar \rho r_0} \quad (4.67)$$

é a constante de acoplamento para o sistema elétron-riplon.

O cálculo da integral em (4.65) é bastante complexo. O método de perturbação não é aplicável devido à forma da "ação" (4.66). Isto nos leva a tratar o problema usando o método variacional de Feynman.

Uma vez que as ações que contêm termos quadráticos apresentam cálculo relativamente simples, consideremos uma "ação" variacional S' da forma

$$S' = -\frac{1}{2} \int_0^\beta \left(\frac{d\vec{r}}{d\tau} \right)^2 d\tau - \frac{C}{2} \int_0^\beta \int_0^\beta d\tau ds e^{-\Omega|\tau-s|} \times \\ \times (\vec{r}(\tau) - \vec{r}(s))^2 \quad (4.68)$$

onde C e Ω são parâmetros variacionais.

O valor de C representa uma medida da interação do elétron com os riplons, relacionando-se portanto à constante de acoplamento α . O parâmetro Ω corresponde a um corte na interação dada em (4.68), e é importante para compensar a diferença entre (4.66) e (4.68). Então, a equação que representa o princípio variacional (2.46), para o problema do anion superficial, será

$$E_0 \leq E'(C, \Omega) - \delta \quad (4.69)$$

com

$$E'(C, \Omega) = \frac{1}{\beta} \ln \int_D \vec{r}(\tau) e^{S'} \quad (4.70)$$

$$\delta = \frac{1}{\beta} \langle S - S' \rangle \quad (4.71)$$

Comparando (4.66) e (4.68), podemos tomar δ como

$$\delta = A + B \quad (4.72)$$

onde

$$A = \frac{\alpha}{\beta} \int d^2k \frac{k \tanh(kL)}{\omega_{\vec{k}}} \int_0^\beta \int_0^\beta d\tau ds e^{-\omega_{\vec{k}} |\tau-s|} \times$$

$$\times \langle e^{i\vec{k} \cdot (\vec{r}(\tau) - \vec{r}(s))} \rangle \quad (4.73)$$

e

$$B = \frac{C}{2\beta} \int_0^\beta \int_0^\beta d\tau ds e^{-\Omega |\tau-s|} \langle (\vec{r}(\tau) - \vec{r}(s))^2 \rangle \quad (4.74)$$

Como vemos, para calcular A e B devemos obter de início $\langle e^{i\vec{k} \cdot (\vec{r}(\tau) - \vec{r}(s))} \rangle$ e $\langle (\vec{r}(\tau) - \vec{r}(s))^2 \rangle$.

Devido à forma da "ação" S temos⁴³

$$\langle e^{i\vec{k} \cdot (\vec{r}(\tau) - \vec{r}(s))} \rangle = \exp\left\{ -\frac{k^2}{2v^2} F(|\tau-s|) \right\} \quad (4.75)$$

onde tomamos

$$F(u) = \frac{v^2 - \Omega^2}{v^2} (1 - e^{-vu}) + \Omega^2 u \quad (4.76)$$

e

$$v^2 = \Omega^2 + \frac{4C}{\Omega} \quad (4.77)$$

O cálculo de $\langle (\vec{r}(\tau) - \vec{r}(s))^2 \rangle$ pode ser feito usando-se a relação

$$\langle (\vec{r}(\tau) - \vec{r}(s))^2 \rangle = - \nabla_{\vec{k}}^2 e^{i\vec{k} \cdot (\vec{r}(\tau) - \vec{r}(s))} \Big|_{\vec{k}=0} \quad (4.78)$$

Assim,

$$\langle (\vec{r}(\tau) - \vec{r}(s))^2 \rangle = \frac{2}{v^2} F(|\tau - s|) \quad (4.79)$$

Desta forma teremos:

$$A = 2\pi \frac{\alpha}{\beta} \int_0^\beta dk \frac{k^2 \operatorname{tgh}(kL)}{\omega_{\vec{k}}} \int_0^\beta \int_0^\beta d\tau ds e^{-\omega_{\vec{k}} |\tau - s|} \times \quad (4.80)$$

$$\times \exp\{ -(k^2 / 2v^2) F(|\tau - s|) \}$$

e

$$B = \frac{C}{2\beta} \int_0^\beta \int_0^\beta d\tau ds e^{-\Omega |\tau - s|} \frac{2}{v^2} F(|\tau - s|) \quad (4.81)$$

Nestas expressões a integração em τ e s é da forma⁴³

$$\int_0^\beta \int_0^\beta d\tau ds g(|\tau-s|) = 2 \int_0^\beta du (\beta-u) g(u) \quad (4.82)$$

onde a função $g(u) \rightarrow 0$ para $u \rightarrow \infty$. Como estamos considerando o limite $\beta \rightarrow \infty$, a contribuição $ug(u)$ na integral pode ser desprezada na presença do termo $\beta g(u)$. Assim, os valores de A e B serão finalmente dados por

$$A = 4\pi\alpha \int_0^\beta \int_0^\beta du dk \frac{k^2 \operatorname{tgh}(kL)}{\omega_k} e^{-\omega_k u} e^{-(k^2/2v^2)F(u)} \quad (4.83)$$

e

$$B = \frac{2C}{v\Omega} \quad (4.84)$$

O cálculo de $E'(C, \Omega)$ em (4.69) pode ser efetuado derivando (4.70) com relação a C . Com isto obteremos a seguinte equação diferencial:

$$C \frac{dE'}{dC}(C, \Omega) = B \quad (4.85)$$

Como $E'(C, \Omega) = 0$ para $C=0$, (4.85) pode ser integrada,

$$E'(C, \Omega) - B = \frac{1}{2v} (v - \Omega)^2 \quad (4.86)$$

Finalmente, as equações (4.83) e (4.86) nos dizem que a energia de formação do anion superficial satisfaz a relação

$$E_0 \leq E(v, \Omega) \quad (4.87)$$

onde

$$E(v, \Omega) = \frac{1}{2v} (v - \Omega)^2 - A \quad (4.88)$$

representa a energia calculada variacionalmente. Os valores de v e Ω são obtidos minimizando $E(v, \Omega)$, isto é, através da condição

$$\frac{\partial E(v, \Omega)}{\partial v} = \frac{\partial E(v, \Omega)}{\partial \Omega} = 0 \quad (4.89)$$

4.4 - Massa Efetiva do Anion Superficial

em Filmes de He Líquido

Para o estudo das propriedades dinâmicas associadas ao anion superficial, é de fundamental interesse o cálculo de sua massa. No formalismo que estamos usando, esta quantidade corresponde à massa efetiva do elétron na presença dos riplons.

Para um elétron livre, cuja posição inicial é $\vec{r}' = 0$ em $\tau' = 0$, e final é $\vec{r}'' = \vec{r}$ em $\tau'' = \beta$, a soma sobre as trajetórias é

$$\exp(-\vec{V}^2 \beta) \quad (4.90)$$

onde definimos

$$\vec{r} = \vec{V} \beta \quad (4.91)$$

Devemos observar que $\vec{V}$ não corresponde à velocidade real do elétron, uma vez que β é um parâmetro que não está associado a um intervalo de tempo.

Assim, podemos calcular a massa efetiva do elétron para nosso sistema analisando a razão de decaimento do propagador (4.65) para o caso em que $\vec{r}'' = \vec{V} \beta$. Considerando pequenos valores para $\vec{r}''$, (4.65) será

$$e^{-(E_0 + \frac{1}{2} m V^2) \beta} = \int_D \vec{r}(\tau) e^S \quad (4.92)$$

onde m representa a massa efetiva do elétron, e a integral sobre as trajetórias deve ser efetuada entre $r' = 0$ e $r'' = \vec{V}\beta$.

O método de Feynman para a massa efetiva consiste em efetuar o cálculo de (4.92) através da ação variacional S' (4.68). Para isto considera-se que a energia do sistema elétron-riplon $E(\vec{V})$, para o elétron com "velocidade" $\vec{V}$, é dada por

$$E(\vec{V}) = E'(C, \Omega, \vec{V}) - \delta(\vec{V}) \quad (4.93)$$

onde

$$E'(C, \Omega, \vec{V}) = \frac{1}{\beta} \int_D \vec{r}(\tau) e^{S'} \quad (4.94)$$

e

$$\delta(\vec{V}) = \frac{1}{\beta} \langle S - S' \rangle_{\vec{V}} \quad (4.95)$$

sendo que as integrais de trajetória acima são efetuadas tomando-se $\vec{r}' = 0$ e $\vec{r}'' = \vec{V}\beta$. Os parâmetros variacionais C e Ω são obtidos minimizando a energia do estado fundamental do sistema elétron-riplon.

A equação (4.93) não representa um princípio variacional para o cálculo da massa efetiva. Isto se deve a dois fatos:

a) os parâmetros C e Ω são obtidos minimizando a energia do estado fundamental;

b) o ponto $\vec{r}'' = \vec{V}\beta$ não é fixo quando tomamos o limite

$\beta \rightarrow \infty$.

Para um elétron num sistema polar, V.Sa-Yakamit⁴⁴ mostrou que o resultado do cálculo de Feynman corresponde a desprezar a estrutura interna associada ao polaron.

Comparando (4.66) e (4.68) podemos tomar

$$\delta(\vec{V}) = A(\vec{V}) + B(\vec{V}) \quad (4.96)$$

onde

$$A(\vec{V}) = \frac{\alpha}{\beta} \int d^2 k \frac{k}{\omega_{\vec{k}}} \operatorname{tg} h(kL) \int_0^\beta \int_0^\beta d\tau ds e^{-\omega_{\vec{k}}(\tau-s)} \times$$

$$\times \langle e^{i\vec{k} \cdot (\vec{r}(\tau) - \vec{r}(s))} \rangle_{\vec{V}} \quad (4.97)$$

e

$$B(\vec{V}) = \frac{C}{2\beta} \int_0^\beta \int_0^\beta d\tau ds e^{-\Omega(\tau-s)} \langle (\vec{r}(\tau) - \vec{r}(s))^2 \rangle_{\vec{V}} \quad (4.98)$$

Devido à mudança da condição de contorno sobre as integrais de trajetória⁴⁵

$$\langle e^{i\vec{k} \cdot (\vec{r}(\tau) - \vec{r}(s))} \rangle_{\vec{V}} = \exp \left\{ - \frac{k^2}{2v^2} (F((\tau-\sigma) + \right.$$

$$\left. i\vec{k} \cdot \vec{V}(\tau-\sigma)) \right\} \quad (4.99)$$

Usando (4.78) temos que

$$\langle (\vec{r}(\tau) - \vec{r}(s))^2 \rangle_{\vec{V}} = \frac{2}{v^2} F(|\tau-s|) + \vec{V}^2 (\tau-s)^2 \quad (4.100)$$

e usando (4.99) e (4.100) obteremos

$$A(\vec{V}) = 2\alpha \int d^2k \frac{k \tanh(kL)}{\omega_k} \int_0^\beta du e^{-\omega_k u} \exp \left\{ -\frac{k^2}{2v^2} (F(u) + i\vec{k} \cdot \vec{V}u) \right\} \quad (4.101)$$

e

$$B(\vec{V}) = \frac{2C}{v} + \frac{2C\vec{V}^2}{\Omega^3} \quad (4.102)$$

Para $E'(C, \Omega, \vec{V})$ temos uma equação diferencial análoga a (4.85), ou seja,

$$C \frac{d}{dC} E'(C, \Omega, \vec{V}) = B(\vec{V}) \quad (4.103)$$

com a condição inicial

$$E'(C, \Omega, \vec{V}) = \frac{1}{2} \vec{V}^2 \quad (4.104)$$

para $C = 0$.

Integrando (4.103) temos que

$$E'(C, \Omega, \vec{V}) - B(\vec{V}) = \frac{1}{2} \vec{V}^2 + \frac{1}{2v} (v - \Omega)^2 \quad (4.105)$$

Como estamos considerando baixas velocidades, podemos expandir $A(\vec{V})$ até segunda ordem. Assim,

$$A(\vec{V}) = A - \frac{\vec{V}^2}{2} A(\vec{V}^2) \quad (4.106)$$

com

$$A(\vec{V}^2) = (2\pi\alpha) \int_0^\beta \int_0^\beta du dk \frac{k^4 \operatorname{tgh}(kL)}{\omega_k} e^{-\omega_k u} \times \\ \times e^{-(k^2/2v^2)F(u)} \quad (4.107)$$

sendo nulo o termo de primeira ordem, devido à integração em $\vec{k}$ do produto escalar $\vec{k} \cdot \vec{V}$, e A é dado por (4.83).

Usando (4.105) e (4.106) podemos escrever a energia como

$$E(\vec{V}) = E(v, \Omega) + \frac{\vec{V}^2}{2} (1 + A(\vec{V}^2)) \quad (4.108)$$

onde $E_n(v, \Omega)$ é a energia do estado fundamental dada por (4.88).

O termo em $\vec{V}^2$ em $E(\vec{V})$ representa a energia cinética associada ao movimento do elétron. Assim, a massa efetiva do elétron, isto é, a massa do anion na superfície, será

$$M_A(L) = 1 + A(\vec{V}^2) \quad (4.109)$$

onde os parâmetros v e Ω são obtidos através de (4.89).

4.5 - Anion Superficial na Interface He³-He⁴

Para anions localizados na interface He³-He⁴, o cálculo da energia de formação e da massa efetiva é análogo ao do elétron na superfície de He⁴ (seções 4.3 e 4.4). Desta forma, apresentaremos apenas as diferenças básicas entre os dois sistemas.

Vamos considerar um sistema constituído por He³ na região $z \geq 0$ e He⁴ em $z \leq 0$. O movimento da superfície de separação pode ser descrito em função dos modos normais de vibração da superfície. Assim, o cálculo da Lagrangeana dos riplons é análogo ao descrito na seção 4.1.

A energia cinética total dos riplons será a soma das energias para os dois líquidos, dada por

$$T = \sum_{\vec{k}} \frac{\rho_4 + \rho_3}{2k} \dot{Q}_{\vec{k}} \dot{Q}_{\vec{k}} \quad (4.110)$$

onde $\dot{Q}_{\vec{k}}$ é dado por (4.17b) e ρ_3 e ρ_4 correspondem à densidade do He³-He⁴, respectivamente.

Na energia potencial associada à deformação da superfície, a contribuição da força gravitacional é modificada em virtude da presença de He^3 em $z \geq 0$. Neste caso, o termo associado à energia potencial gravitacional será a diferença entre as contribuições derivadas do He^4 e He^3 . Deste modo, teremos para a energia potencial

$$V = \sum_{\vec{k}} \frac{1}{2} \{ (\rho_4 - \rho_3) g + \sigma' k^2 \} Q_{\vec{k}} Q_{-\vec{k}} \quad (4.111)$$

onde $Q_{\vec{k}}$ é dado por (4.17a) e σ' é a tensão superficial da interface $\text{He}^3\text{-He}^4$.

Então, a Lagrangeana dos riplons, na interface $\text{He}^3\text{-He}^4$ será

$$L = \sum_{\vec{k}} \frac{\rho_4 + \rho_3}{2k} \{ \dot{Q}_{\vec{k}} \dot{Q}_{-\vec{k}} - \omega_{\vec{k}}'^2 Q_{\vec{k}} Q_{-\vec{k}} \} \quad (4.112)$$

onde

$$\omega_{\vec{k}}'^2 = \frac{(\rho_4 - \rho_3)}{\rho_4 + \rho_3} gk + \frac{\sigma' k^3}{\rho_4 + \rho_3} \quad (4.113)$$

Com altas densidades de elétrons na superfície, a relação de dispersão dos riplons $\omega_{\vec{k}}'$ é modificada.¹ Entretanto, este fato não será usado, uma vez que estamos considerando o problema de um elétron.

Se considerarmos grandes valores para o campo elétrico ($E_{\perp}$), perpendicular à interface, a energia de interação do elétron com a superfície será dada por (4.43), isto é,

$$V_{e-r}(\vec{r}) = \frac{1}{A^{1/2}} \sum_{\vec{k}} e E_{\perp} Q_{\vec{k}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}$$

Então, a Lagrangeana para o sistema elétron-riplon na interface $\text{He}^3\text{-He}^4$ fica sendo

$$L = \frac{1}{2} m \dot{\vec{r}}^2(t) + \sum_{\vec{k}} L_{\vec{k}} \quad (4.114)$$

onde

$$L_{\vec{k}} = \frac{M'_{\vec{k}}}{2} (\dot{Q}_{\vec{k}} \dot{Q}_{-\vec{k}} - \omega'^2_{\vec{k}} Q_{\vec{k}} Q_{-\vec{k}}) + \gamma'_{\vec{k}}(t) Q_{\vec{k}} \quad (4.115a)$$

$$M'_{\vec{k}} = \frac{\rho_4 + \rho_3}{k} \quad (4.115b)$$

e

$$\gamma'_{\vec{k}}(t) = \frac{1}{A^{1/2}} e E_{\perp} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}(t)} \quad (4.115c)$$

A energia de formação e a massa efetiva podem então ser calculadas através do método de Feynman (seções 4.3 e 4.4). Obtemos assim, para a energia de formação,

$$E'(v, \Omega) = \frac{1}{2v} (v - \Omega)^2 - A' \quad (4.116)$$

onde

$$A' = 4\pi\alpha' \int_0^\beta \int_0^\beta du \, dk \frac{k^2}{\omega_{\vec{k}}} \exp \left\{ -\omega'_{\vec{k}} u - (k^2/2v^2) F(u) \right\} \quad (4.117)$$

e

$$\alpha' = \frac{(eE_\perp)^2 \tau_o^3}{16\pi^2 \hbar (\rho_+ + \rho_-) r_o^3} \quad (4.118)$$

τ_o e r_o foram definidos em (4.63) e (4.64), respectivamente, e $F(u)$ é dado por (4.76).

Os parâmetros v e Ω são obtidos através da relação

$$\frac{\partial}{\partial v} E'(v, \Omega) = \frac{\partial}{\partial \Omega} E'(v, \Omega) = 0 \quad (4.119)$$

Para a massa efetiva do anion teremos

$$M_A = 1 + 2\pi\alpha' \int_0^\beta \int_0^\beta du \, dk \frac{k^4}{\omega_{\vec{k}}} \exp \left\{ -\omega'_{\vec{k}} u - (k^2/2v^2) F(u) \right\} \quad (4.120)$$

onde v e Ω são determinados por (4.119).

4.6 - Resultados e Conclusões

No caso de elétrons na superfície de filmes de He^4 , a massa efetiva e a energia de formação do anion superficial foram calculadas em função do campo elétrico aplicado $E_{\perp}$ e da espessura do filme. Os resultados obtidos foram comparados com os de Shikin e Monarkha ⁷ e de L.M.Sander ⁸, aqui referidos como (I) e (II), respectivamente.

Os resultados encontrados para um filme de espessura infinita são mostrados nas figuras (9 e 10).

Nosso cálculo para massa efetiva coincide com (I) para $E \lesssim 10.0 \times 10^3$ V/cm. Para campos maiores os resultados diferem em até 5%.

Na região de $E \lesssim 6.0 \times 10^3$ V/cm, a deformação da superfície é pequena, o que torna próximas as formas usadas para a deformação em (I) e (II). Consequentemente, os resultados para a energia de formação do anion superficial em (I) e (II) apresentam valores da mesma ordem. Como o método de Feynman é válido nesta região de $E_{\perp}$ nossos resultados são também próximos aos obtidos por (I) e (II). Para valores de $E_{\perp} \gtrsim 15.0 \times 10^3$ V/cm, nossos resultados aproximam-se dos obtidos por (II). Este fato indica que a deformação da superfície usada por (I) não deve ser válida nesta região de $E_{\perp}$.

Em filmes finos de He^4 líquido, apresentamos a razão $M_A(L)/M_A(\infty)$ como função da espessura do filme L (fig. 11).

Como podemos observar, quando a espessura do filme diminui, a massa efetiva do anion superficial aumenta. Para $L \sim 5.0 \times 10^3 \text{ \AA}$ a razão das massas independe do campo $E_{\perp}$, significando que o substrato não contribui nesta região. Para espessuras menores, este fato não é verdadeiro, pois nesta região a contribuição devida ao substrato em α (4.67) não pode ser desprezada. O aumento na massa efetiva pode ser analisado se considerarmos um sistema de referência sobre o anion superficial. Neste referencial a deformação na superfície $U(\vec{r})$, associada ao anion, estará imóvel e o líquido terá, a uma distância infinita do anion, uma velocidade $\vec{V}$. Calculando o potencial $\phi(\vec{r}, 0)$ (4.6), a energia cinética do anion pode ser obtida através de (4.5). Assim, uma diminuição na espessura corresponde a um aumento no potencial $\phi(\vec{r}, 0)$ e, portanto, na energia cinética. Consequentemente, a massa do anion superficial aumenta quando L diminui.

O resultado de (I), para a razão acima mencionada, foi obtido considerando-se apenas a mudança na condição de contorno de $z \rightarrow -\infty$ para $z = -L$ na equação de movimento do anion na superfície. A diferença entre os resultados indica que, para filmes com espessura finita, a deformação da superfície usada em (I) deve ser modificada de modo a incluir este fato.

Para profundidades finitas do filme de hélio líqui-do a energia de formação foi calculada usando-se dois substratos CaF^2 e metal), como função de L , tomando-se $E_{\perp} = 5.0 \times 10^3 \text{ V/cm}$ e $E_{\perp} = 20.0 \times 10^3 \text{ V/cm}$. Os resultados são apresentados nas figs (12) e (13). Para espessura $L \lesssim 500 \text{ \AA}$, a contribuição do substrato na constante de acoplamento torna-se importante. Assim, para

$L \approx 50 \text{ \AA}$ o termo devido ao campo (e E_1) é pequeno comparado com (Λ_1/L^2) . Desta forma, os valores da energia de formação são próximos para os dois campos.

A energia de formação do anion no substrato de CaF_2 é menor que no substrato metálico. Este resultado deve-se à menor polarização do substrato de CaF_2 , comparada ao metálico.

Conforme pode-se observar, os resultados obtidos são próximos aos de (II). Podemos assim concluir que os resultados de (II) devem ser considerados para grandes valores da constante de acoplamento, isto é, campos elétricos intensos ou pequenas espessuras de filmes.

Em misturas de $\text{He}^3\text{-He}^4$ a massa e a energia de formação do anion superficial foram calculadas em função de E_1 , conforme mostrado nas figuras (14) e (15), respectivamente.

A tensão superficial nesta interface é menor que na interface vácuo- He^4 . Para um mesmo campo aplicado, a deformação da superfície será maior na interface $\text{He}^3\text{-He}^4$. Este fato explica um maior valor de massa e da energia de formação do anion superficial em mistura de $\text{He}^3\text{-He}^4$, quando comparadas com os valores obtidos para o elétron na superfície de He^4 .

Para o sistema $\text{He}^3\text{-He}^4$, considera-se em (I) que a pressão do elétron sobre a interface é nula para um raio R_0 maior que o volume do anion superficial. Assim, a diferença entre os resultados obtidos indica que esta hipótese deve ser reformulada.

Outro método usado para o cálculo da energia do estado fundamental, de um elétron que interage com uma superfí-

cie, e que é válido para qualquer constante de acoplamento, é o de W.J.Huybrechts.⁴⁵ Entretanto, a extensão deste método para o cálculo da massa efetiva ainda não foi formulada. Assim, sob este aspecto o método de Feynman representa uma vantagem significativa, uma vez que a massa efetiva pode ser calculada de um modo relativamente simples, e o resultado é válido para qualquer constante de acoplamento.

Nos cálculos de (I) e (II) e de Feynman, a coordenada do elétron na direção perpendicular não foi considerada. Este fato é importante em filmes com pequena espessura. Desta forma, estamos atualmente interessados num tratamento mais geral para este problema, levando-se em conta o movimento do elétron na direção perpendicular.

O método de Feynman pode também ser usado para o estudo de outras propriedades de elétrons próximos a uma interfície. Em particular, esperamos usá-lo para o cálculo da mobilidade de elétrons em função da temperatura, e para campos elétricos de grande intensidade.

APÊNDICE A

Cálculo da Integral $J_n(\xi)$

Para calcular a integral dada em (3.34)

$$J_n(\xi) = e^{-\xi^2/4} \int_0^\infty dy e^{-y^2/\xi^2} y^2 I_n(y) \quad (A.1)$$

onde $I_n(y)$ é a função de Bessel modificada, vamos partir da relação

$$\int_0^\infty dy e^{-py^2} I_n(y) = \frac{\pi^{1/2}}{2p^{1/2}} e^{1/8 p} I_{n/2}(1/8p) \quad (A.2)$$

Derivando (A.2) com relação a p , obtemos

$$\begin{aligned} \int_0^\infty dy e^{-py^2} I_n(y) y^2 &= \left(\frac{\pi}{p^5} \right)^{1/2} e^{1/8 p} \{ p I_{n/2}(1/8p) + \\ &+ \frac{1}{4} I_{n/2}(1/8p) + \frac{1}{4} I'_{n/2}(1/8p) \} \end{aligned} \quad (A.3)$$

Das propriedades da função de Bessel modificada temos

$$I'_{n/2}(1/8p) = \frac{1}{2} (I_{n/2+1}(1/8p) + I_{n/2-1}(1/8p)) \quad (A.4)$$

Tomando $p = 1/\xi^2$, e usando a relação de recorrência

$$I_{n/2 + 1}(x) = I_{n/2 - 1}(x) - \frac{n}{x} I_{n/2}(x), \quad (\text{A.5})$$

podemos então escrever $J_n(\xi)$ como

$$J_n(\xi) = \frac{\pi^{1/2}}{16} e^{-\xi^2/8} \xi^5 \left[I_{n/2 - 1}(\xi^2/8) + (1 + 4/\xi^2 - 4n/\xi^2) I_{n/2}(\xi^2/8) \right] \quad (\text{A.6})$$

APÊNDICE B

Potencial na camada de inversão com a solução
variacional para o limite elétrico quântico

Assumindo para a camada de inversão do Si-[001] a aproximação de massa efetiva, a função de onda para uma sub-banda qualquer pode ser escrita como

$$\psi_i(x, y, z) = f_i(z) \exp \left[i(k_x x + k_y y) \right] \quad (\text{B.1})$$

onde $\vec{k} = (k_x, k_y)$ é medido a partir do mínimo de banda e $f_i(z)$ é a solução da equação

$$\frac{d^2}{dz^2} f_i(z) + \frac{2m_l}{\hbar^2} \left[E''_i + e \phi(z) \right] f_i(z) = 0 \quad (\text{B.2})$$

O potencial $\phi(z)$ é obtido através da equação de Poisson

$$\frac{d^2 \phi(z)}{dz^2} = -4\pi\rho/\epsilon_s, \quad (\text{B.3})$$

sendo a densidade de cargas dada por ¹⁹

$$\rho(z) = \rho_{\text{depl}}(z) + \rho_{\text{inv}}(z), \quad (\text{B.4})$$

onde

$$\rho_{\text{depl}}(z) = -e(N_A - N_D) \quad 0 < z < d_{\text{depl}}, \quad (\text{B.5a})$$

$$\rho_{\text{depl}}(z) = 0 \quad z > d_{\text{depl}}, \quad (\text{B.5b})$$

com

$$d_{\text{depl}} = \left[\epsilon_s |\phi(0)| / 2\pi e |N_A - N_D| \right]^{1/2} \quad (\text{B.6})$$

$$\rho_{\text{inv}}(z) = -e \sum_i N_i |f_i(z)|^2 \quad (\text{B.7})$$

e N_A e N_D correspondem à densidade de impurezas aceitadoras e doadoras, respectivamente.

Se apenas a sub-banda inferior está ocupada,

$$\rho_{\text{inv}}(z) = -e N_{\text{inv}} |f_o(z)|^2 \quad (\text{B.8})$$

onde N_{inv} corresponde à densidade de elétrons na camada de inversão.

Substituindo (B.5a), (B.5b) e (B.8) na equação de Poisson, teremos

$$\frac{d^2\phi(z)}{dz^2} = \frac{4\pi e}{\epsilon_s} \left[e(N_A - N_D) - e N_{inv} |f_0(z)|^2 \right] \quad (B.9)$$

Uma solução aproximada de $f_0(z)$ pode ser obtida através de uma solução variacional. Para isto tomaremos

$$f_0(z) = \left(\frac{1}{2} t^3\right)^{1/2} z e^{-1/2 tz}, \quad (B.10)$$

com o parâmetro t a ser determinado quando minimizamos a energia do estado fundamental.

Substituindo (B.10) em (B.9) obtemos

$$\phi'(z) - \phi'(0) = \frac{4\pi e}{\epsilon_s} \left\{ (N_A - N_D)z + N_{inv} \int_0^z dz \left(\frac{1}{2} t^3\right) x z^2 e^{-tz} \right\} \quad (B.11)$$

ou seja,

$$\phi'(z) - \phi'(0) = \frac{4\pi e}{\epsilon_s} \left\{ (N_A - N_D)z + \frac{N_{inv}}{2} t^3 \left[\frac{2}{t^3} - e^{-tz} \left(\frac{z^2}{t} + \frac{2z}{t^2} + \frac{2}{t^3} \right) \right] \right\} \quad (B.12)$$

Para grandes valores de z , o campo elétrico é nulo, uma vez que em seu interior o semiconductor está em equilíbrio. Tomando $z \rightarrow \infty$ em (B.12) encontraremos

$$-\phi'(0) = F_s = \frac{4\pi e}{\epsilon_s} \{N_{depl} + N_{inv}\} \quad (B.13)$$

onde $N_{\text{depl}} = (N_A - N_D) d_{\text{depl}}$ e F_s é o campo em $z=0$.

Substituindo (B.13) em (B.12), e efetuando a integração, ficamos com

$$\phi(z) - \phi(0) = \frac{4\pi e}{\epsilon_s} \left\{ -N_{\text{depl}} z + (N_A - N_D) \frac{z^2}{2} - \frac{N_{\text{inv}} t^3}{2} A(z) \right\} \quad (\text{B.14a})$$

onde

$$A(z) = \frac{6}{t^4} - e^{-tz} \left\{ \frac{z}{t^2} + \frac{4z}{t^3} + \frac{6}{t^4} \right\} \quad (\text{B.14b})$$

Como o potencial é determinado a menos de uma constante, vamos tomar $\phi(0)=0$ e assim teremos

$$\phi(z) = \frac{4\pi e}{\epsilon_s} \left\{ -N_{\text{depl}} z - \frac{N_{\text{inv}} t^3}{2} A(z) + \frac{(N_A - N_D)}{2} z^2 \right\} \quad (\text{B.15})$$

Usando $\phi(z)$ dado por (B.15), a energia $E_0(t)$ será dada por

$$\begin{aligned} E_0(t) &= \int_0^\infty dz f_0(z) \left(-\frac{\hbar^2}{2m_l} \frac{d^2}{dz^2} - e \phi(z) \right) f_0(z) = \\ &= \int_0^\infty dz \left(-\frac{\hbar^2 t^3}{2m_l} \right) z e^{-t/2} \frac{d^2}{dz^2} (z e^{-tz/2}) + \\ &+ \int_0^\infty dz (-e \phi(z)) \left(\frac{t^3}{2} \right) z e^{-tz} \end{aligned}$$

(B.16)

O primeiro termo de (B.16), que corresponde à energia cinética, será

$$E_c(t) = \frac{\hbar^2 t^2}{8m_l} \quad (\text{B.17})$$

O segundo termo de (B.16) pode ser separado em três partes, correspondentes à contribuição da camada de "depletion", à interação elétron-elétron (termo de Hartree) e ao efeito da curvatura na camada de "depletion", isto é,

$$E_{\text{depl}}(t) = \frac{4\pi e^2}{\epsilon_s} N_{\text{depl}} \int_0^\infty dz \frac{t^3}{2} z^3 e^{-tz} = \frac{12\pi e^2}{\epsilon_s} N_{\text{depl}}, \quad (\text{B.18a})$$

$$E_{\text{el-el}}(t) = \frac{4\pi e^2}{\epsilon_s} N_{\text{inv}} \left(\frac{t^3}{2} \right)^2 \int_0^\infty dz A(z) z^2 e^{-tz} = \frac{4\pi e^2}{\epsilon_s} N_{\text{inv}} \left[\frac{3}{t} - \frac{3}{16t} - \frac{6}{16t} - \frac{6}{16t} \right], \quad (\text{B.18b})$$

$$E_{\text{curv}}(t) = -\frac{4\pi e^2}{\epsilon_s} \left(\frac{N_A - N_D}{2} \right) \frac{t^3}{2} \int_0^\infty dz e^{-tz} z^4 = -\frac{4\pi e^2}{\epsilon_s} (N_A - N_D) \cdot \frac{6}{t^2}, \quad (\text{B.18c})$$

Então, a energia será dada por

$$E_o(t) = \frac{\hbar^2 t^2}{8m_l} + \frac{12\pi e^2}{\epsilon_s t} \left\{ N_{\text{depl}} + \frac{11}{16} N_{\text{inv}} - \frac{2}{t} (N_A - N_D) \right\}. \quad (\text{B.19})$$

O termo que contém N_{inv} representa a interação entre as densidades de carga, e deste modo para calcular o valor correto que minimiza $E_o(t)$, devemos tomar este coeficiente como $11/32$.¹³ O último termo representa o efeito da curvatura da camada de "depletion", que para Si pode ser desprezada.

Com estas considerações, a energia da sub-banda de mais baixa ordem será

$$E_o(t) = \frac{\hbar^2 t^2}{8m_l} + \frac{12\pi e^2}{\epsilon_s t} \{ N_{depl} + \frac{11}{32} N_{inv} \} \quad (B.20)$$

Para que $E_o(t)$ seja mínima devemos ter

$$\frac{dE_o}{dt}(t) = 0 = \frac{\hbar^2 t}{4m_l} - \frac{12\pi e^2}{\epsilon_s t^2} \{ N_{depl} + \frac{11}{32} N_{inv} \} \quad (B.21)$$

Logo,

$$t = \left[(48\pi e^2 m_l / \hbar^2 \epsilon_s) (N_{depl} + \frac{11}{32} N_{inv}) \right]^{1/3} \quad (B.22)$$

Desprezando o termo de curvatura da camada de "depletion" teremos finalmente o potencial "nearly self consistent", a menos de uma constante, dado por

$$\phi(z) = \frac{4\pi e N_{inv}}{\epsilon_s} e^{-tz} \left\{ \frac{1}{2} tz^2 + 2z + \frac{3}{t} \right\} - \frac{4\pi e}{\epsilon_s} N_{depl} z. \quad (B.23)$$

APÊNDICE C

Efeito da Rugosidade na Barreira de Potencial

Para calcular a contribuição da rugosidade na barreira de potencial, usaremos uma aproximação apresentada por T.Ando.³⁴ Para isto vamos considerar $\zeta(\vec{r})$ como sendo o desvio da interface com relação ao plano ideal x - y . A mudança na barreira de potencial é dada por

$$V_b(\vec{r}, z) = V_o \left[\theta(z) - \theta(z - \zeta(\vec{r})) \right] \quad (C.1)$$

onde V_o representa a barreira de potencial, e será considerado suficientemente grande comparado com as energias envolvidas, de modo que podemos considerar a função de onda do elétron nula na superfície.

Uma vez que $\zeta(\vec{r})$ é pequeno, podemos expandir (C.1) em potências de $\zeta(\vec{r})$. Com isto temos

$$V_b(\vec{r}, z) = V_o \left[\frac{\partial}{\partial z} \theta(z) \right] \zeta(\vec{r}) - \frac{1}{2} \left[V_o \frac{\partial^2}{\partial z^2} \theta(z) \right] \zeta(\vec{r})^2 \quad (C.2)$$

Como $\langle \zeta(\vec{r}) \rangle = 0$, vamos analisar apenas os termos em $\langle \zeta(\vec{r})^2 \rangle$. Tomando a média sobre os valores de $\zeta(\vec{r})$ ficamos com

$$V_b(\vec{r}, z) = - \frac{1}{2} \left[V_o \frac{\partial^2}{\partial z^2} \theta(z) \right] \beta^2 \quad (C.3)$$

O elemento de matriz que estamos interessados em calcular é da forma

$$\langle \Psi | V_b | \Psi \rangle \sim \langle \Psi | \frac{\partial^2}{\partial z^2} \theta(z) | \Psi \rangle$$

Assim, vamos escrever este elemento de matriz em termos da energia potencial para uma superfície plana.³⁴ Esta energia, na região ($z > 0$) é dada por

$$V(\vec{r}, z) = V_0 [1 - \theta(z)] + V'(\vec{r}, z) \quad z > 0 \quad (C.4)$$

onde o primeiro termo representa a barreira, e $V'(\vec{r}, z)$ é a energia potencial devido a todas as outras contribuições, tais como campo elétrico, impurezas, etc.

O valor médio de $\nabla^2 V(\vec{r}, z)$ representa o valor médio da carga, isto é,

$$\langle \Psi | \nabla^2 V_T | \Psi \rangle = Q_e \quad (C.5)$$

Então,

$$\langle \Psi | \nabla^2 \{ V_0 [1 - \theta(z)] + V'(\vec{r}, z) \} | \Psi \rangle = Q_e \quad (C.6)$$

ou seja,

$$\langle \Psi | -V_0 \frac{\partial^2}{\partial z^2} \theta(z) | \Psi \rangle = -\langle \Psi | \nabla^2 V'(\vec{r}, z) | \Psi \rangle + Q_e \quad (C.7)$$

Como Q_e é uma constante, e estamos interessados apenas em diferenças de energia, temos que a contribuição da rugosidade na barreira de potencial é dada por

$$E_b = \frac{1}{2} \beta^2 \langle \Psi | -V_0 \frac{\partial^2}{\partial z^2} \theta(z) | \Psi \rangle =$$

$$- \frac{1}{2} \beta^2 \langle \Psi | \nabla^2 V' \Psi(\vec{r}, z) | \Psi \rangle \quad (C.8)$$

Como podemos observar, apenas cargas reais na região $z > 0$ contribuem.

I - Rugosidade da barreira de potencial para elétrons na camada de inversão

Para impurezas no óxido e elétrons na camada de inversão, apenas o termo devido aos elétrons pode contribuir. Isto por que o termo proporcional a z^2 , devido às cargas na camada de "depletion", foi desprezado no potencial, conforme visto no Apêndice B.

Deste modo, o potencial que contribui é dado por

$$V_{inv}(\vec{r}, z) = -\frac{4\pi e^2}{\epsilon_s} N_{inv} e^{-tz} \left\{ \frac{1}{2} tz^2 + 2z + \frac{3}{t} \right\} \quad (C.9)$$

e

$$\nabla_{\text{inv}}^2(\vec{r}, z) = -\frac{4\pi e^2}{\epsilon_s} N_{\text{inv}} \left(\frac{t^3}{2} z^2 e^{-tz} \right) \quad (\text{C.10})$$

Como (C.10) depende apenas de z , as contribuições da rugosidade da barreira E_{rb} , para E_0 (3.56) e para E_{2p_0} são análogas e dadas por

$$E_{\text{rb}} = -\frac{1}{2} \beta^2 \left(-\frac{4\pi e^2 N_{\text{inv}}}{\epsilon_s} \right) \int_0^\infty dz f(z) \frac{t^3}{2} z^2 e^{-tz} f(z) \quad (\text{C.11})$$

onde $f(z)$ é dado por (3.53).

Finalmente temos

$$E_{\text{rb}} = \frac{12\lambda\pi e N_{\text{inv}}}{\epsilon_s} \frac{t^3 b^3}{(t+b)^5} \beta^2 \quad (\text{C.12})$$

em unidades de Rydberg efetivo.

II - Efeito da barreira para impurezas no semiconductor

Para impurezas no semiconductor temos que

$$V'(\vec{r}, z) = - \frac{e^2}{\epsilon_z} \frac{1}{|\vec{x} - \vec{x}_0|} = - \frac{e^2}{\epsilon_s} \frac{1}{[r^2 + |z - z_0|^2]^{1/2}} \quad (C.13)$$

com $\vec{x}_0 = (0, z_0)$. Logo,

$$\nabla^2 V'(\vec{r}, z) = \frac{4\pi e^2}{\epsilon_s} \delta(\vec{x} - \vec{x}_0) \quad (C.14)$$

e

$$\begin{aligned} E_{rb} &= -\frac{1}{2} \beta^2 \int dx dy dz \psi(\vec{x}) \nabla^2 V'(\vec{x}, z) \psi(\vec{x}) = \\ &= - \frac{2\pi e^2}{\epsilon_s} \beta^2 \psi^2(\vec{x}_0) \end{aligned} \quad (C.15)$$

Usando (3.88) teremos

$$E_{rb} = - \frac{\epsilon_s + \epsilon_{ox}}{8\epsilon_s} \beta^2 a^2 b^3 z_0^2 e^{-bz_0} \quad (C.16)$$

em unidades de Rydberg efetivo.

LEGENDA DAS FIGURAS

Figura 1 -

Esquema ilustrativo de um sistema MOSFET.

Figura 2 -

Diagrama dos níveis de energia no Si tipo-p, na presença de um campo elétrico aplicado, com (a) uma camada de "depletion" e (b) uma camada de inversão.

Figura 3 -

Forma das sub-bandas elétricas ao longo dos eixos principais, para um campo elétrico na direção z .

Figura 4 -

Elipsóides de energia constante para os elétrons no Si.

Figura 5 -

Esquema ilustrativo de uma interface rugosa de SiO_2 -Si. O parâmetro α é a distância de correlação transversal, e β é a raiz quadrática média do desvio da interface com relação à superfície plana.

Figura 6 -

Energia de ligação, como função de N_{inv} , para vários valores de S e β , com (a) $z_0=0.0$ e (b) $z_0=0.14$. Os pontos representam os valores experimentais obtidos por Fowler e Hartstein.¹⁸

Figura 7 -

Separação entre as duas primeiras sub-bandas elétri-

cas, na camada de inversão de Si tipo-p, como função de N_{inv} , para vários valores de β . Os resultados de Stern¹³ (---) e os de Kneschaurek¹⁵ (.....) são apresentados para comparação.

Figura 8 -

Energia de ligação como função da distância entre a interface SiO_2-Si , e a impureza ionizada localizada no semiconductor, para vários valores de β . A curva $\beta=0$ corresponde aos resultados obtidos por O.Lipari.⁶

Figura 9 -

Massa efetiva do anion superficial, em unidades de massa de He^4 , como função de $E_{\perp}$, para um filme com profundidade infinita.

Figura 10 -

Energia de formação do anion superficial, como função de $E_{\perp}$, para um filme com profundidade infinita. Os resultados de Shikin e Monarkha (---)⁷ e os de Sander⁸ (.....) são apresentados para comparação.

Figura 11 -

Razão $M_A(L) / M_A(\infty)$ como função da profundidade do filme de He^4 . A curva tracejada representa o resultado de Shikin e Monarkha.⁷

Figura 12 -

Energia de formação do anion superficial como função da profundidade do filme de He^4 , para um substrato de CaF_2 . As curvas (.....) e (---) representam os resultados para $E_{\perp} = 20.0 \times 10^3$ V/cm e

$E_{\perp} = 5.0 \times 10^3$ V/cm, respectivamente.. Os resultados de Sander⁶ para estes mesmos valores são mostrados nas curvas contínuas e tracejadas.

Figura 13 -

Energia de formação do anion superficial como função da profundidade do filme de He^4 , para um substrato metálico. Para a curva contínua $E_{\perp} = 20.0 \times 10^3$ V/cm, e para a curva tracejada $E_{\perp} = 5.0 \times 10^3$ V/cm.

Figura 14 -

Massa efetiva do anion superficial em unidades da massa de He^4 , com função de $E_{\perp}$, para a mistura He^3 He^4 . A curva tracejada representa o resultado de Shikin e Monarkha.⁷

Figura 15 -

Energia de formação do anion superficial como função de $E_{\perp}$, para a mistura He^3 - He^4 .

FIGURA 1

FIGURA 2

FIGURA 3

FIGURA 4

FIGURA 5

FIGURA 6(a)

FIGURA 6(b)

FIGURA 7

FIGURA 8

FIGURA 9

FIGURA 10

FIGURA 11

FIGURA 12

FIGURA 13

FIGURA 14

FIGURA 15

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

1. M.Wanner & P.Leiderer - Phys.Rev.Lett.42,315 (1979)
2. K.Gottfried - Quantum Mechanics, v.1, p.375
3. R.P.Feynman & A.R.Hibbs - Quantum mechanics and path inte
gral. McGraw-Hill, 299 (1965)
4. T.S.Rahman & A.A.Maradudin - Phys.Rev.B (a ser publicado)
5. F.J.Ohkawa & Y.Uemura - J.Phys.Soc.Jap. 43,917 (1977)
6. N.O.Lipari - J.Vac.Sci.Technol. 15(4),1412 (1978)
7. V.B.Shikin & Yu.P.Monarkha - Sov.Phys.JETP 38(2),373 (1974)
8. L.M.Sander - Phys.Rev.B, 11,4350 (1975)
9. J.R.Schrieffer - Semiconductor surface physics. Pennsylvania
nia Press, 55 (1957)
10. A.B.Fowler; F.F.Fang; W.E.Howard & P.J.Stiles - Phys.Rev.
Lett. 16,901 (1966)
11. B.Vinter - Phys.Rev.B 15,3947 (1977)
12. T.Ando - Phys.Rev.B 13,3468 (1976)
13. F.Stern - Phys.Rev.B 5,4891 (1972)
14. T.Ando - Sol.St.Comm 21,133 (1977)
15. P.Kneschaurek; A.Kamgar & J.F.Koch - Phys.Rev.B 14,1610
(1976)
16. F.Neppl; J.P.Kotthaus & J.F.Koch - Phys.Rev.B 16,1519
(1977)
17. L.J.Sham & M.Nakayama - Surf.Sci. 73,272 (1978)
18. A.B.Fowler & A.Hartstein - Surf.Sci. 73,19 (1978)
19. F.Stern & W.E.Howard - Phys.Rev. 163,816 (1967)

20. B.G.Martin & R.F.Wallis - Proceeding of the 13th International Conference on the Physics of Semiconductors, Rome, 792 (1976)
21. G.M.Kramer; B.G.Martin & R.F.Wallis - Surf.Sci. 73,96 (1978)
22. B.Vinter - Sol.St.Comm. 28,861 (1978)
23. O.Hipolito & V.B.Campos - Phys.Rev.B 19,3083 (1979)
24. M.W.Cole - Phys.Rev.B 2,4239 (1970)
25. F.Stern - Phys.Rev.B 17, 5009 (1978)
26. O.Hipolito; J.R.D.Felício & G.A.Farias - Sol.St.Comm. 26, 365 (1978)
27. C.C.Grimes & T.B.Brown - Phys.Rev.Lett. 32,280 (1974)
28. P.M.Platzman & G.Beni - Phys.Rev.Lett. 36,626 (1976)
29. A.P.Volodin; M.S.Khaikin & V.S.Edelman - JETP Lett. 23, 478 (1976)
30. S.A.Rydbalko & Yu.Z.Kovdria - Sov.J.Low Temp.Phys. 1,498 (1975)
31. T.D.Schultz - Polarons and Excitons. Ed. by C.G.Kuper e G.D.Whitfield, 71 (1963)
32. Y.C.Chang & E.A.Sullivan - Surf.Sci. 34, 717 (1973)
33. M.Abromowitz & I.A.Stegum - Handbook of Mathematical Functions. Dover Publ. 355-435 (1970)
34. T.Ando - J.Phys.Soc.Jap. 43,1616 (1977)
35. F.F.Fang & W.E.Howard - Phys.Rev.Lett. 16,797 (1966)
36. A.A.Karpushin - Sov.Phys.Sol.St. 11.1748 (1970),
37. R.J.Bell; W.T.Bousman; G.M.Goldman & D.G.Rathbun - Surf. Sci. 1,293 (1967)

- 38. F.Stern - Sol.St.Comm 21,163 (1977)
- 39. M.W.Cole - Phys.Rev.B 2,4239 (1970)
- 40. V.B.Shikin & Yu.P.Monarka - J.Low Temp.Phys. 16,193 (1974)
- 41. M.W.Cole - Phys.Rev.B 3,4418 (1971)
- 42. V.B.Shikin - Surf.Sci. 73,396 (1978)
- 43. R.P.Feynman - Statistical Mechanics. Ed.By W.A.Benjamin, 237
(1972)
- 44. V.Sa.Yakamit - Phys.Rev.B 19,2377 (1979)
- 45. W.J.Huybrechts - J.Phys.C: Sol.St.Phys. 9,L211 (1976)