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

"CORRELAÇÕES ELETRÔNICAS EM
SISTEMAS QUASE-BIDIMENSIONAIS"

Umbelino de Freitas Neto

Tese apresentada ao Instituto de Física e Química de São Carlos, da Universidade de São Paulo, para obtenção do título de Doutor em Ciências "Física Básica".

Orientador: Prof. Dr. Nelson Studart Filho

Departamento de Física e Ciência dos Materiais

São Carlos - 1986

MEMBROS DA COMISSÃO JULGADORA DA TESE DE DOUTORADO DE _____

Umbelino de Freitas Neto

APRESENTADA AO INSTITUTO DE FÍSICA E QUÍMICA DE SÃO CARLOS, DA
UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO, EM 19 DE setembro DE 1986.

COMISSÃO JULGADORA:

Nelson Studart Filho

Dr. Nelson Studart Filho

- Orientador

Gilmar Eugênio Marques

Dr. Gilmar Eugênio Marques

Sergio

Dr. Sergio Machado Rezende

Oscar Hipólito

Dr. Oscar Hipólito

Heitor Cury Basso

Dr. Heitor Cury Basso

Este trabalho foi realizado com apoio financeiro da CAPES, através do convênio PICD/UEPB e em parte pelo CNPq, junto ao Centro de Computação do IFQSC-USP, no qual todos os cálculos numéricos aqui apresentados foram desenvolvidos.

Aos

meus pais

Dita e João Duda

A G R A D E C I M E N T O S

Ao Prof. Dr. Nelson Studart, orientador e amigo pela sugestão do tema e excelentes discussões no decorrer deste trabalho.

Aos Profs. Drs. José Pedro Rino, Gilmar Marques e Lidério Ioriatti, pelas discussões.

Ao Valdeci, pela colaboração na parte computacional.

Aos amigos, Abraham, Alfredo, Aniceta, Caparica, Dayse, Giomal, Makoto, Onody e Cecília Kehl, pelo ótimo convívio durante toda a minha permanência no IFQSC-USP.

Aos colegas da UFPb.

Aos demais colegas que direta ou indiretamente participaram deste trabalho.

Especialmente, à Teca, minha esposa, pelo constante apoio e compreensão.

Í N D I C E

LISTA DE ILUSTRAÇÕES	i
LISTA DE TABELAS	v
RESUMO	vi
ABSTRACT	viii
INTRODUÇÃO	1
CAPÍTULO I - TEORIA DE CAMPO AUTOCONSISTENTE EM SISTEMAS DE MUITAS PARTÍCULAS	10
1 - Caso Clássico	11
1.1 - Equações Cinéticas	11
1.2 - Teoria de Campo Autoconsistente	15
2 - Caso Quântico	20
CAPÍTULO II - COMPLEXOS DIPOLARES NO HÉLIO LÍQUIDO	26
2.1 - Gás de Elétrons na Superfície de Dielétricos .	27
2.2 - Sistema de Díplons	32
2.3 - Correlações e Relação de Dispersão	36
2.3.1 - Considerações Teóricas	36
2.3.2 - Resultados e Discussões	40
CAPÍTULO III - O SISTEMA DE ELÉTRONS DEGENERADO QUASE-BIDIMEN SIONAL	56
3.1 - Teoria de Campo Médio à Duas Dimensões	57
3.1.1 - Fator de Estrutura Estático	66
3.1.2 - Energia de Correlação	72
3.1.3 - Dispersão de Plasmon	73

CAPÍTULO IV - TEORIA DO LÍQUIDO DE ELÉTRONS DEGENERADO	NA
SUPERFÍCIE DE FILMES DE HÉLIO LÍQUIDO	76
4.1 - Um Novo Sistema Quântico	77
4.2 - Propriedades Estáticas	85
4.3 - Espectro de Excitação	98
CAPÍTULO V - CORRELAÇÕES ELETRÔNICAS EM HETEROJUNÇÕES	E
POÇOS QUÂNTICOS DE SEMICONDUTORES	105
5.1 - Estrutura de Poços Quânticos	106
5.2 - O Gás de Elétrons em Heterojunções e Poços	
Quânticos	111
5.2.1 - Heterojunções	111
5.2.2 - Poços Quânticos	113
5.3 - Propriedades Estáticas em Heterojunções e Po	
ços Quânticos	115
5.3.1 - Heterojunções	115
5.3.2 - Poços Quânticos	120
5.4 - Espectro de Excitações em Heterojunções e Po	
ços Quânticos	126
5.4.1 - Heterojunções	126
5.4.2 - Poços Quânticos	127
CAPÍTULO VI - CONCLUSÕES	134
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	140

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

FIGURA 1	- Representação esquemática de um MOSFET	9
FIGURA 2.1	- Diagrama esquemático de um complexo de carga sobre um filme de hélio superfluido	33
FIGURA 2.2	- Correção de campo local para um sistema de <u>dí</u> plons na aproximação STLS ($\Gamma = 0,1$)	42
FIGURA 2.3	- Correção de campo local para um sistema de <u>dí</u> plons na aproximação STLS ($\Gamma = 1$)	43
FIGURA 2.4	- Fator de estrutura estático na aproximação STLS para um sistema de <u>dí</u> plons ($\Gamma = 0,1$). Subs trato neon sólido e safira	45
FIGURA 2.5	- Fator de estrutura estático na aproximação STLS para um sistema de <u>dí</u> plons ($\Gamma = 1$). Subs trato neon sólido e safira	46
FIGURA 2.6	- Fator de estrutura estático nas aproximações STLS e RPA para um sistema de <u>dí</u> plons ($\Gamma=0,1$). Substrato neon sólido	47
FIGURA 2.7	- Fator de estrutura estático nas aproximações STLS e RPA para um sistema de <u>dí</u> plons ($\Gamma = 1$). Substrato neon sólido	48
FIGURA 2.8	- Fator de estrutura estático nas aproximações STLS e RPA para um sistema de <u>dí</u> plons ($\Gamma = 1$). Substrato metálico	49

FIGURA 2.9	- Relação de dispersão para um sistema de <u>díplons</u> nas aproximações STLS e RPA ($\Gamma=1$). Sub <u>trato</u> neon sólido	51
FIGURA 2.10	- Relação de dispersão nas aproximações STLS e RPA para um sistema de <u>díplons</u> ($\Gamma = 1$). Sub <u>trato</u> safira	52
FIGURA 3.1	- Representação do corte e polo no plano <u>comple</u> xo da função resposta $\chi(\vec{q},\omega)$	67
FIGURA 3.2	- Representação do contorno de integração para o cálculo do fator de estrutura	68
FIGURA 4.1	- Representação esquemática do aparato experi <u>mental</u> usado para deposição de elétrons em filme de <u>h</u> élio	78
FIGURA 4.2	- Diagrama de fase para elétrons sobre filme de <u>h</u> élio	81
FIGURA 4.3	- Correção de campo local para elétrons sobre um filme de <u>h</u> élio ($R_s=1$ e 20; $d=20$). Substra <u>to</u> metálico (STLS e Hubbard)	88
FIGURA 4.4	- Correção de campo local para elétrons sobre filme de <u>h</u> élio ($R_s=1$ e 20; $d=200$). Substrato metálico (STLS e Hubbard)	89
FIGURA 4.5	- Fator de estrutura para elétrons sobre um fil <u>me</u> de <u>h</u> élio ($R_s=1, 10$ e 20; $d=20$). Substrato metálico (STLS)	91
FIGURA 4.6	- Fator de estrutura para elétrons sobre um fil <u>me</u> de <u>h</u> élio ($R_s=10$ e 20; $d=20$ e $d=200$). Sub <u>trato</u> metálico (STLS)	92

FIGURA 4.7	- Fator de estrutura para elétrons sobre um filme de hélio ($R_s=10$ e $d=20$). Substrato metálico (STLS, RPA e Hubbard)	93
FIGURA 4.8	- Função correlação de pares para elétrons sobre um filme de hélio nas aproximações STLS, RPA e Hubbard	96
FIGURA 4.9	- Relação de dispersão para elétrons em filme de hélio ($R_s=20$; $d=20$ e 200). Substrato metálico (STLS)	100
FIGURA 4.10	- Relação de dispersão de plasmon para um gás de elétrons sobre um filme de hélio ($R_s=10$ e $D=20$). Substrato metálico (STLS, RPA e Hubbard)	101
FIGURA 4.11	- Relação de dispersão de plasmon para um gás de elétrons sobre um filme de hélio ($R_s=1, 10$ e 20 ; $D=20$). Substrato metálico (STLS)	102
FIGURA 4.12	- Relação de dispersão de plasmon para elétrons sobre um filme de hélio ($R_s=1, 10$ e 20 ; $D=20$ e 200). Substrato metálico (STLS)	103
FIGURA 5.1	- Diagrama de banda de energia de uma heterojunção GaAs-AlGaAs	107
FIGURA 5.2	- a) Diagrama de banda de energia de um poço isolado intrínscico	109
	b) Diagrama de banda de energia de um poço dopado	109
	c) Diagrama de banda de energia para uma super-rede	109

FIGURA 5.3	- Correção de campo local (STLS e Hubbard) para uma heterojunção ($r_s=1$ e 6) e na aproximação STLS para $r_s=1$ e 6	117
FIGURA 5.4	- Fator de estrutura para um gás de elétrons numa heterojunção (RPA, Hubbard e STLS) para $r_s=6$ e nas aproximações STLS e RPA para $r_s=1$ e 6	119
FIGURA 5.5	- Correção de campo local para um gás de elétrons num poço quântico nas aproximações STLS e Hubbard ($r_s=1$; $d=0,1$ e 4)	123
FIGURA 5.6	- Fator de estrutura (poço quântico) nas aproximações STLS, Hubbard e RPA para $r_s=6$; $d=0,2$ e na STLS para $r_s=6$; $d=0,2$ e 10	124
FIGURA 5.7	- Dispersão de plasmon (heterojunção) para $r_s=1$ e 6, na aproximação STLS	128
FIGURA 5.8	- Dispersão de plasmon (heterojunção) para $r_s=6$, nas aproximações STLS, Hubbard e RPA ..	129
FIGURA 5.9	- Dispersão de plasmon (poço quântico) para $r_s=6$; $d=0,2$ e 10, na aproximação STLS	131
FIGURA 5.10	- Dispersão de plasmon (poço quântico) na aproximação STLS para $r_s=1$; $d=0,2$ e 4	132
FIGURA 5.11	- Relação de dispersão (poço quântico) nas aproximações STLS, Hubbard e RPA para $r_s=1$ e $d=0,1$	133

LISTA DE TABELAS

TABELA 2.1 - Valor da energia de correlação por partícula para um sistema de díplons para vários substratos ($\Gamma=1$)	53
TABELA 2.2 - Valores das densidades eletrônicas, temperaturas, espessuras de filme e parâmetro de plasma relativo ao sistema de díplons, experimentalmente acessíveis	55
TABELA 4.1 - Energias de correlação para um gás de elétrons sobre um filme de hélio de espessura ($d=20, 200$ e 5000). Substrato metálico (STLS, RPA e Hubbard)	95
TABELA 5.1 - Energia de troca e energia de correlação para um gás de elétrons numa heterojunção GaAs-Al _x Ga _{1-x} As nas aproximações STLS, Hubbard e RPA para várias densidades	121
TABELA 5.2 - Energia de troca e energia de correlação para um gás de elétrons num poço quântico nas aproximações STLS, RPA e Hubbard, para várias larguras de poço e densidades eletrônicas	125

R E S U M O

Neste trabalho estudamos as propriedades estáticas e dinâmicas de quatro sistemas quase bidimensionais, utilizando o método de campo autoconsistente (STLS), desenvolvido por Singwi e co-autores. Nesta teoria as correlações de curto alcance, responsáveis pela correção de campo local, corrigem os resultados da aproximação de fases aleatórias (sistema clássico ou quântico) e Hubbard (sistema quântico). O primeiro sistema é constituído de íons imersos num filme de hélio, presos a um substrato qualquer e elétrons adsorvidos na superfície do filme. O par elétron-íon forma um complexo de carga chamado de díplon. O gás de díplons formado, constitui um novo sistema clássico bidimensional acessível experimentalmente. Nos outros três sistemas, o gás de elétrons sobre um filme de hélio adsorvido num substrato metálico, na camada de inversão da heterojunção GaAs-Al_xGa_{1-x}As e num poço quântico, formam um sistema eletrônico quase bidimensional degenerado.

Na discussão dos sistemas degenerados, introduzimos a função resposta densidade-densidade blindada $\chi_{sc}(\vec{q}, \omega)$, desenvolvendo uma teoria de campo médio, inicialmente proposta por Pines, que apresenta um diferente enfoque físico e fenomenológico daquele contido na solução aproximada da equação de movimento para o operador densidade de partícula. Usamos as transformações de Ioriatti-Isihara que permitem escrever de uma maneira simples a função resposta densidade-densidade livre e daí, obter um novo método bastante preciso de calcular o Fator de Es

estrutura Estático de um sistema bidimensional na aproximação de campo médio.

Os resultados obtidos para todos os sistemas aqui considerados, sempre recaem nos resultados do sistema estritamente bidimensional, que é usado para comparação. Em todos estes sistemas calculamos o fator de estrutura estático, a correção de campo local e a relação de dispersão nas aproximações de fases aleatórias (RPA), STLS (clássico e quântico) e Hubbard (quântico). A função correlação dos pares é apenas detalhada para o gás de elétrons adsorvidos num filme de hélio (substrato metálico), no regime quântico.

A B S T R A C T

We have studied in this work the static and dynamic properties of four quasi-bidimensional systems, by using the Self-Consistent Field Method introduced by Singwi et al. In this theory the short-range correlations that are responsible for the local field corrections, improve the results of the Random Phase Approximation (RPA) for classical or quantum systems. The classical system is formed by positive ions inside a helium film and attached to a solid substrate with an electron gas adsorbed on the film surface. The pair electron-ion forms a charge complex known as a diplon. The resulting diplon gas constitutes a new quasi-bidimensional system which is experimentally accessible. The other three systems namely: an electron gas adsorbed on helium film over a metal substrate; electrons in an inversion layer at the heterojunction $\text{GaAs-Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ and in a quantum well form a degenerate quasi-bidimensional electronic system.

In the discussion of the degenerate systems we have introduced the screened density-density response function $\chi_{\text{sc}}(\vec{q}, \omega)$ and developed a mean-field theory, originally proposed by Pines. It has a different phenomenological and physical approach as compared with the solution of the equation of motion for the particle-density operator.

We have used the Ioriatti-Isihara transformations which allow us to write, in a simple way, the non-interacting density density response function. As a result, we have gotten a new

and accurate method to calculate the Static Structure Factor of the two-dimensional system within the mean-field approximation.

The results obtained for all the systems considered here, always reproduce the two-dimensional system results which we have used for comparison. For all the systems studied, we have calculated the Structure Factor, the Local Field Correction, the Dispersion Relation and the Correlation Energies in the random phase approximation (RPA) and STLS approximation (classical and quantum system) and Hubbard (quantum system). The pair correlation function was only calculated for the electron gas adsorbed on a helium film over a metallic substrate in the quantum regime.

.1.

INTRODUÇÃO

A partir do início dos anos 70, o estudo das propriedades eletrônicas de sistemas quase-bidimensionais tem despertado enorme interesse, como atestam as últimas seis conferências internacionais bianuais⁽¹⁾ (International Conference on Electronic Properties of two-dimensional Systems) já realizadas e inteiramente devotadas a esta fundamental área de pesquisa, bem como o grande número de trabalhos nas conferências regulares de semicondutores e Física de Baixas Temperaturas. No Brasil, o Grupo de São Carlos tem se mostrado bastante ativo, desde o final da década passada, com contribuições marcantes neste campo. Nos últimos anos, o interesse local nestes sistemas tem aumentado substancialmente, devido à possibilidade de fabricação, no próprio país, dos materiais que exibem estas propriedades de confinamento espacial de portadores de carga.

Por sistemas quase-bidimensionais entendemos aqueles em que os portadores de carga estão presos em um poço de potencial em uma dimensão espacial apresentando níveis de energia quantizados, enquanto que estão livres para moverem-se nas outras duas dimensões espaciais. Deste modo, o vetor de onda é um bom número quântico em duas dimensões, mas, não para a terceira. Estes sistemas não são estritamente bidimensionais porque as funções de onda dos portadores que formam sub-bandas de energia, ao longo da direção de quantização, têm uma extensão espacial finita na terceira dimensão e o campo eletromagnético das cargas não é confinado no plano, mas suas linhas emergem na terceira dimensão.

Além da importância indiscutível destes sistemas na Física e Tecnologia de Semicondutores e Física do Hélio Líquido, a investigação de suas propriedades físicas tem conduzido a des

cobertas fundamentais na Física básica, tais como o Efeito Hall Quantizado⁽²⁾, Transição de fase polarônica⁽³⁾, Cristal de Vigner⁽⁴⁾, Efeitos de Localização⁽⁵⁾ com transição metal-isolante⁽⁶⁾, dentre outros.

Para um estudioso da Teoria de Muitos Corpos, estes sistemas oferecem uma possibilidade única de testar as várias aproximações já desenvolvidas para outros sistemas, devido ao controle experimental da densidade das partículas e da interação entre elas.

Inicialmente, o desenvolvimento da Eletrônica Quântica e a Tecnologia do silício motivaram o estudo das camadas de inversão e acumulação no silício, com grande número de publicações⁽⁷⁾. As camadas de inversão podem ser formadas na interface óxido-semicondutor (SiO_2 - Si, o mais estudado) dando origem a um transistor com a colocação de uma placa metálica junto ao óxido. Esta estrutura é conhecida como MOSFET (metal-oxide-semiconductor field effect transistor). Podemos ver, neste dispositivo, o semicondutor como a segunda placa de um capacitor, onde o óxido funciona como um dielétrico imerso entre as placas (ver Figura 1). No modo mais comum de operação, um contato positivo no eletrodo metálico ("portão") arrasta eletrons para a interface Si/SiO₂ até atingir uma densidade suficiente para induzir uma inversão local de portadores no substrato do tipo p. Além da camada de inversão com espessura da ordem de 100Å, existe uma camada de depleção, onde os sítios aceitadores ionizados proporcionam um forte isolamento elétrico das cargas na camada de inversão do resto do semicondutor. Este capacitor MOS é convertido em um transistor pela implantação de fontes e drenos n⁺ que provocam a condução eletrônica ao longo da camada de inver

são. Uma das principais razões que atraiu a atenção ao estudo do MOSFET, do ponto de vista fundamental, é a grande variação na densidade de portadores na camada de inversão de 10^{11} a 10^{13} cm^{-2} que pode ser controlada continuamente através da diferença de potencial aplicada entre o portão metálico e o substrato semiconductor. O campo elétrico gerado no interior do semiconductor provoca um enorme entortamento da banda gerando um poço de potencial quase-triangular, que quantiza o movimento dos elétrons na direção perpendicular à interface, confinando-os livremente ao longo do plano. Um grande número de impurezas no semiconductor e no óxido, bem como a rugosidade interfacial limitam a mobilidade eletrônica nos MOSFETs.

Um outro sistema quase-bidimensional, de fácil realização experimental, e de características semelhantes aos MOSFETs, mas com propriedades físicas bem diferentes é aquele formado por elétrons em estados superficiais sobre dielétricos⁽⁸⁻¹⁰⁾. Em geral, elétrons são depositados sobre filmes de hélio líquido, que por sua vez, repousa sobre um substrato sólido. O poço de potencial que confina os elétrons provém da atração eletrostática da superfície (forças imagens) e barreira de potencial repulsiva na interface. O movimento dos elétrons no plano é impedido apenas por espalhamentos de átomos de vapor e por ondas de capilaridade-gravidade superficiais. A interação entre as partículas depende fortemente da espessura do filme e da constante dielétrica do substrato que podem ser facilmente variadas na experiência. Podemos obter assim, um sistema interagente cujo potencial entre as cargas varia de um potencial usual dependendo inversamente com a distância até uma interação tipicamente dipolar. O sistema todo é imerso em um capaci

tor cujo campo elétrico determina, por uma simples aplicação da Lei de Gauss, a densidade eletrônica na superfície. Experimentalmente, densidades variando de 10^5 a 10^{11} cm^{-2} têm sido obtidas. Esta enorme variação de densidade faz com que o gás de elétrons superficiais possa apresentar comportamento de um gás clássico, em densidades tais que a energia de Fermi seja muito menor que a energia cinética média, mesmo para as baixas temperaturas de hélio líquido, bem como características de um gás quântico degenerado, a altas densidades. Assim, o sistema apresenta um diagrama de fase densidade-temperatura extremamente rico.

Na região clássica, os elétrons podem sofrer uma transição de fase líquida-sólida conduzindo ao experimentalmente observado sólido de Wigner⁽⁴⁾. Para filmes finos, prevê-se a existência de um novo líquido quântico de elétrons com interação dipolar⁽¹¹⁾.

O sistema de elétrons superficiais sobre hélio líquido pode ser enriquecido com a introdução de íons positivos dentro do filme de hélio que permanecerão localizados próximo ao substrato devido a forças imagens⁽¹²⁾. Este complexo elétron-íon é estável e possui características de uma quase-partícula denominada diplon. O gás de diplons apresenta também propriedades bastante interessantes do ponto de vista de sistema interagente e, devido à sua baixa densidade, pode ser descrito por uma estatística clássica. Constitui também um sistema quase-bidimensional que tem recebido grande atenção nos anos recentes.

Finalmente, a fabricação de heteroestruturas artificiais de semicondutores com variação de composição, geometria de interface e dopagem numa escala de precisão a nível atômico,

é uma realidade nos tempos atuais, devido ao aprimoramento de técnicas de crescimento de cristais como epitaxia por feixe molecular (MBE) e deposição química de vapor organometálico (MOCVD) (13-15). A heterojunção mais comumente estudada é aquela formada pelo GaAs e $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ onde a concentração x varia de 0,1 a 0,4. A descontinuidade do gap na interface (o gap de energia do AlGaAs é substancialmente maior do que o de GaAs e depende apenas da concentração de Al) aliada à dopagem de impurezas de silício provocam o surgimento de um poço de potencial na direção perpendicular à interface que, semelhantemente ao sistema MOS, confina os portadores próximos à heterojunção. A densidade de portadores, neste caso, é controlada pelo nível de dopagem de impurezas doadoras, ao contrário do MOS, onde a densidade é variada pelo potencial do portão. Através da técnica de dopagem por modulação é possível dopar apenas o AlGaAs, de modo que os portadores de carga no GaAs ficam espacialmente separados de suas impurezas resultando numa mobilidade eletrônica bem superior àquela em dispositivos MOS. A união de duas heterojunções do tipo AlGaAs-GaAs-AlGaAs forma uma estrutura cujo potencial confinante, no limite de baixa densidade de dopagem, pode ser mapeado por um poço quântico retangular unidimensional. Para grandes espessuras de AlGaAs, ou barreira de potencial elevada na junção, a penetração da função de onda na barreira pode ser desprezada e um único poço quântico isolado descreve muito bem as propriedades óticas observadas no sistema. Um arranjo regular de poços quânticos constitui uma super-rede. Neste caso, os efeitos de tunelamento são significativos e temos a formação de mini-bandas de energia, desde que o comprimento básico da super-rede (espessura do poço mais a da barreira)

é bem maior do que o parâmetro de rede do cristal. Na aproximação mais simples, este sistema é descrito pelo modelo de Krönig-Pénney. Neste sentido, as super-redes são um sistema fortemente anisotrópico que não se enquadra na categoria de sistemas quase-bidimensionais se os efeitos de penetração da função de onda nas barreiras são incorporados.

Esta tese é inteiramente devotada ao estudo das correlações de elétrons nestes sistemas quase-bidimensionais. Devido à facilidade de variação de densidade nos sistemas, a região de forte acoplamento entre as partículas sempre pode ser atingida e teorias mais sofisticadas devem ser usadas para descrever bem as propriedades do sistema. Além disso, as diversas formas de potencial entre partículas obtidas simplesmente pela mudança de parâmetros acessíveis experimentalmente enriquecem as propriedades de muitos corpos.

Dentre as teorias de muitas partículas de sistemas clássicos e quânticos, a teoria de campo autoconsistente devido a Singwi et al. (STLS)⁽¹⁶⁾, aplicada inicialmente ao gás degenerado de elétrons em densidades metálicas, tem sido largamente utilizada com grande sucesso. Ela incorpora de modo convincente as correlações de curto alcance do sistema que tem sido sistematicamente desprezadas em um sem-número de aproximações. Neste trabalho, esta teoria será aplicada a diversos sistemas quase-bidimensionais sempre com a motivação de comparar seus resultados com os de outras aproximações anteriormente desenvolvidas.

No Capítulo I, a teoria STLS é formalmente desenvolvida tanto para sistemas clássicos quanto quânticos. A partir das equações cinéticas BBGKY, procedemos ao desacoplamento da

hierarquia destas equações através da função correlação dos pares, utilizando o teorema da flutuação-dissipação para construir um esquema autoconsistente.

O Capítulo II descreve as propriedades estáticas e dinâmicas dos complexos dipolares (diplons) em filmes de hélio líquido no limite clássico, em que o sistema de partículas é descrito pela distribuição de Boltzmann. São obtidos o fator de estrutura estático, energia de correlação e relação de dispersão do sistema e comparados com a aproximação de fases aleatórias (RPA) clássica que corresponde ao método de Debye-Hückel de sistemas clássicos.

O sistema de elétrons quase-bidimensional degenerado é analisado em detalhes no Capítulo III. Aí, uma original forma de cálculo do fator de estrutura estático é introduzida através da extensão analítica de uma expressão apropriada para a função resposta densidade - densidade do sistema não interagente. Este procedimento permitirá uma grande precisão nos resultados numéricos, além da eliminação de uma das equações autoconsistentes do método STLS.

No Capítulo IV o formalismo desenvolvido é aplicado ao sistema de elétrons sobre filmes de hélio líquido na região do diagrama de fase onde pode ser considerado um gás degenerado. As propriedades estáticas, tais como fator de estrutura e seu equivalente, a função correlação dos pares, e energia de correlação e o espectro de excitação do sistema são obtidas nas aproximações STLS, Hubbard e RPA.

As correlações eletrônicas em heterojunções e poços quânticos de semicondutores são discutidas no Capítulo V através das teorias previamente apresentadas no Capítulo III. O

efeito da largura finita da função de onda eletrônica é introduzida na descrição das propriedades do sistema e os resultados para o gás de elétrons estritamente bidimensional podem ser facilmente reproduzidos.

Finalmente, no Capítulo VI, apresentamos nossas principais conclusões e sugerimos alguns problemas que poderão ser abordados proximaamente.

FIGURA 1 - Representação esquemática de um MOSFET

CAPÍTULO I

TEORIA DE CAMPO AUTOCONSISTENTE EM SISTEMAS DE MUITAS PARTÍCULAS

1. CASO CLÁSSICO

1.1. EQUAÇÕES CINÉTICAS

A descrição completa de um sistema clássico de muitas partículas é feita em termos das coordenadas $x_i(t)$ e velocidades $v_i(t)$ para cada partícula especificando a sua trajetória $X_i(t) = [x_i(t), v_i(t)]$ no espaço de fase de 6-dimensões⁽¹⁷⁾. A função distribuição

$$N(X;t) = \frac{\bar{N}}{\sum_{i=1}^{\bar{N}} \delta(x - x_i(t))} \quad (1.1)$$

caracteriza a densidade microscópica das partículas, com $\bar{N} \equiv \int N(X;t) dX$, o número total de partículas no sistema. Esta função satisfaz a equação da continuidade no espaço de fase. Explicitamente, temos

$$\frac{\partial N}{\partial t} + \vec{v} \cdot \frac{\partial N}{\partial \vec{r}} + \frac{\dot{\vec{v}}}{v} \frac{\partial N}{\partial \vec{v}} = 0 \quad (1.2)$$

Se as forças que atuam no sistema são de origem eletromagnética, como é o caso de sistemas carregados, então

$$\frac{\dot{\vec{v}}}{v} = \frac{q}{m} \left[\vec{E}(\vec{r}, t) + \frac{\vec{v}}{c} \times \vec{B}(\vec{r}, t) \right] \quad (1.3)$$

onde os campos locais elétrico e magnético consistem de duas partes: uma, inerente às distribuições microscópicas das partículas, e a outra, produzidos por fontes externas. Seja,

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = \vec{E}_{\text{ext}}(\vec{r}, t) + \vec{E}_m(\vec{r}, t) \quad (1.4)$$

$$\vec{B}(\vec{r}, t) = \vec{B}_{\text{ext}}(\vec{r}, t) + \vec{B}_m(\vec{r}, t) \quad (1.5)$$

Em geral, os campos microscópicos $\vec{E}_m(r,t)$ e $\vec{B}_m(r,t)$ devem ser determinados a partir da solução das Equações de Maxwell com a distribuição de partículas $N(X;t)$. No entanto, para sistemas não relativísticos, as interações eletromagnéticas são desprezíveis comparadas com as interações eletrostáticas, de modo que podemos aproximar os campos microscópicos por

$$\vec{E}_m(\vec{r},t) = \frac{\partial}{\partial \vec{r}} \int \phi(\vec{r}-\vec{r}') N(X',t) dX' \quad \text{e} \quad \vec{B}_m(\vec{r},t) = 0 \quad (1.6)$$

onde $\phi(r-r')$ é o potencial eletrostático entre as partículas e $n = \bar{N}/V$ é a densidade média das partículas.

Substituindo as Eqs. (1.3-1.6) na Eq. (1.2) obtém-se a equação de Klimontovich-Drupee (KD):

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} + D(X) \right] N(X;t) = \int \{ V(X;X') N(X';t) dX' \} N(X,t) \quad (1.7)$$

onde o operador $D(X)$ e $V(X,X')$ são definidos por

$$D(X) = \vec{v} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{r}} + \frac{q}{m} \left[\vec{E}_{\text{ext}} + \frac{\vec{v}}{c} \times \vec{B}_{\text{ext}} \right] \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{v}} \quad (1.8)$$

e

$$V(X,X') = \frac{n}{m} \frac{\partial}{\partial \vec{r}} \phi(\vec{r}-\vec{r}') \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{v}} \quad (1.9)$$

Embora a função distribuição obtida a partir da Eq. (1.7) forneça uma descrição precisa dos estados microscópicos de um sistema de muitas partículas, estes não devem corresponder diretamente às quantidades observáveis no mundo macroscópico. Devemos introduzir um processo de média estatística através de uma função distribuição de uma partícula de Liouville $F_N(\{\chi_i\};t)$ tal que

$$F_N(\{\chi_i\};t) d\{\chi_i\} \quad (1.10)$$

representa a probabilidade de que, em um tempo t , as coordenadas do espaço $6N$ -dimensional possuam os valores $\{\chi_1, \chi_2 \dots \chi_N\}$ no volume infinitesimal $d\chi_1 d\chi_2 \dots d\chi_N$. A função distribuição F_N satisfaz uma equação da continuidade do tipo Liouville com condição de normalização. Com esta distribuição, é possível tomar médias estatísticas sobre quantidades microscópicas $A(X, X', \dots, \{\chi_i(t)\})$. Ou seja,

$$\langle A(X, X', \dots; t) \rangle = \int d\{\chi_i\} A(X, X'; \{\chi_i(t)\}) F_N(\{\chi_i\}; t) \quad (1.11)$$

Como ao longo de uma trajetória no espaço de fase a distribuição é conservada, é suficiente tomar médias sobre as distribuições iniciais. Por exemplo,

$$\begin{aligned} \langle N(X; t) \rangle &= \int F_N(\{\chi_i(t)\}; t) N(X; \chi_i(t)) d\chi_1 d\chi_2 \dots d\chi_N \\ &= \int F_N \sum_{i=1}^N \delta(X - \chi_i(t)) d\chi_1 \dots d\chi_N \\ &= f_1(X, t) \end{aligned} \quad (1.12)$$

onde $f_1(X, t)$ é a função distribuição de uma partícula. Do mesmo modo, tomando a média do produto de duas funções distribuição microscópicas, obtemos

$$\langle N(X; t) N(X'; t) \rangle = \delta(X - X') f_1(X, t) + f_2(X, X', t) \quad (1.13)$$

Assim procedendo, podemos introduzir funções distribuição de três ou mais partículas tomando-se as médias estatísticas sobre produtos de funções distribuição microscópicas $N(X, t)$. Em geral, uma função distribuição reduzida $f_q(X; X', \dots, X^{q-1}; t)$ com um número arbitrário q de partículas pode deste modo ser definida.

A equação de movimento para a função distribuição pode então ser diretamente obtida através deste processo de média usando a distribuição F_N na equação KD. Por exemplo, a Eq. (1.7) torna-se

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} + D(X) \right] \langle N(X;t) \rangle = \int V(X,X') \langle N(X;t) N(X';t) \rangle dX' \quad (1.14)$$

Usando as Eqs. (1.12) e (1.13), a equação de movimento da função distribuição de uma partícula pode ser expressa como

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} + D(X) \right] f_1(X,t) = \int V(X,X') f_2(X,X';t) dX' \quad (1.15)$$

Este resultado pode ser facilmente generalizado se tomarmos a Equação KD para o produto de um número arbitrário de funções distribuição $N(X;t)$ e a média estatística através da distribuição de Liouville. Deste modo, chegamos a uma hierarquia de equações, as chamadas equações de Bogoliubov-Born-Green-Kirkwood-Yvon (BBGKY) que pode ser apresentada na seguinte forma compacta:

$$\begin{aligned} \left\{ \frac{\partial}{\partial t} + \sum_{I=1}^q D(I) - \sum_{I \neq J}^q V(I,J) \right\} f_q(1,2,\dots,q;t) = \\ = \sum_{I=1}^q \int V(I,q+1) f_{q+1}(1\dots q+1;t) d(q+1) \end{aligned} \quad (1.16)$$

onde, para simplificar, tomamos os numerais $I, J = 1, 2, \dots$ para identificar as coordenadas $X, X', X'', \dots$, etc.

O conjunto de equações acopladas acima constitui o arcabouço da Teoria Cinética de muitas partículas. Observemos que a equação para a função distribuição de uma partícula (Eq. 1.15)) contém a função distribuição de duas partículas, cuja equação depende, por sua vez, da função distribuição de três

partículas e assim por diante. O problema central de descrever o sistema de muitas partículas consiste em encontrar um método apropriado de quebrar a hierarquia desta infinita série de equações.

1.2. TEORIAS DE CAMPO AUTOCONSISTENTE

A maneira trivial de truncar a hierarquia das equações BBGKY é supor uma solução do tipo

$$f_q(1,2\dots q) = \prod_{I=1}^q f_1(I) \quad (1.17)$$

ou seja, um produto simples de q funções distribuição de uma partícula. Não é difícil mostrar que a substituição desta expressão na Eq. (1.16) conduz a

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} + D(X) - \int V(X, X') f_1(X', t) dX' \right] f_1(X, t) = 0 \quad (1.18)$$

que é conhecida como equação de Vlasov. Apesar da similaridade formal entre a equação KD e a equação de Vlasov, convém assinalar que elas surgem de diferentes realidades físicas; a primeira, descreve uma função distribuição microscópica levando em conta a estrutura individual de cada partícula, enquanto que a última decorre de um processo de média estatística destas funções distribuição microscópicas. A Eq. (1.18) é conhecida ainda por equação de Hartree-dependente do tempo, equação de Boltzmann sem termos colisionais, ou Aproximação de Fases Aleatórias (RPA) clássica e conduz aos mesmos resultados da aproximação de Debye-Hückel.

Uma bem sucedida teoria de muitas partículas foi pro

posta por Singwi, Tosi, Land e Sjolander (STLS)⁽¹⁶⁾ e tem seu ponto de partida na truncagem da sequência das equações BBGKY em sua primeira equação (Eq. (1.15)) através da hipótese de que a função distribuição de duas partículas $f_2(X, X'; t)$ pode ser expressa como

$$f_2(X, X'; t) = f_1(X; t) f_1(X'; t) g(\vec{r} - \vec{r}') \quad (1.19)$$

onde $g(\vec{r} - \vec{r}')$ é a função correlação dos pares, estática e de equilíbrio, que define a probabilidade de se encontrar uma partícula em $\vec{r}$, sabendo que existe uma outra em $\vec{r}'$. Deste modo, a truncagem é feita na suposição de que o acoplamento da partícula ao meio é dada pela correlação de pares. Tomando $g(\vec{r} - \vec{r}') = 1$, reproduzimos a aproximação RPA clássica onde não existe acoplamento entre a partícula em consideração e o seu redor. Substituindo a Eq. (1.19) na Eq. (1.15) e explicitando os operadores $D(X)$ e $V(X, X')$ (Eqs. 1.8-1.9) com $\vec{B}_{\text{ext}} = 0$ e $\vec{E}_{\text{ext}} = -\vec{\nabla} V_{\text{ext}}$ temos

$$\left\{ \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\vec{p}}{m} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{r}} - \frac{\partial}{\partial \vec{r}} V_{\text{ext}} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{p}} - \int g(\vec{r} - \vec{r}') f_1(\vec{r}', \vec{p}'; t) \times \right. \\ \left. \times \frac{\partial}{\partial \vec{r}} \phi(\vec{r} - \vec{r}') \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{p}} \right\} f_1(\vec{r}, \vec{p}; t) = 0 \quad (1.20)$$

O passo seguinte consiste em linearizar a Eq. (1.20) supondo um potencial externo fraco dentro do espírito da teoria da resposta linear. Portanto, podemos escrever

$$f_1(\vec{r}, \vec{p}; t) = f_0(\vec{p}) + \delta f_1(\vec{r}, \vec{p}; t) \quad (1.21)$$

onde $\delta f_1(\vec{r}, \vec{p}; t)$ representa o desvio da função distribuição de equilíbrio induzido pelo potencial externo, ou seja, representa

as flutuações do sistema. A Eq. (1.20) transforma-se em

$$\left\{ \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\vec{p}}{m} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{r}} \right\} \delta f_1(\vec{r}, \vec{p}; t) - \frac{\partial}{\partial \vec{r}} V_T(r, t) \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{p}} f_0(\vec{p}) = 0 \quad (1.22)$$

onde o potencial total V_T é a soma do potencial externo e de um potencial efetivo

$$V_T(\vec{r}, t) = V_{\text{ext}}(\vec{r}, t) + \int d\vec{r}' \delta n(\vec{r}', t) \psi(\vec{r} - \vec{r}') \quad (1.23)$$

onde

$$\frac{\partial}{\partial \vec{r}} \psi(\vec{r} - \vec{r}') = g(\vec{r} - \vec{r}') \frac{\partial}{\partial \vec{r}} \phi(\vec{r} - \vec{r}') \quad (1.24)$$

define o potencial $\psi(\vec{r} - \vec{r}')$ responsável pelos efeitos de correlação entre partículas do sistema. Na Eq. (1.23) a densidade de partícula induzida $\delta n(\vec{r}, t)$ é definida por

$$\delta n(\vec{r}, t) = \int d\vec{p} \delta f_1(\vec{r}, \vec{p}, t) \quad (1.25)$$

A Eq. (1.22) é resolvida como um simples problema de resposta linear da flutuação de densidade induzida pelo potencial externo. O resultado no espaço de Fourier é

$$\delta n(\vec{k}, \omega) = \frac{\chi_0(\vec{k}, \omega)}{1 - \psi(\vec{k}) \chi_0(\vec{k}, \omega)} V_{\text{ext}}(\vec{k}, \omega) \quad (1.26)$$

onde

$$\chi_0(\vec{k}, \omega) = \int \frac{\vec{k} \cdot \frac{\partial f_0}{\partial \vec{p}}(\vec{p}) d\vec{p}}{\frac{\vec{p}}{m} \cdot \vec{k} - \omega - i\eta} \quad (1.27)$$

A relação (Eq. (1.26)) permite-nos definir a função resposta densidade-densidade

$$\chi(\vec{k}, \omega) = \frac{\chi_0(\vec{k}, \omega)}{1 - \psi(\vec{k}) \chi_0(\vec{k}, \omega)} \quad (1.28)$$

Tomando a transformada de Fourier da Eq. (1.24) obtemos

$$\psi(\vec{k}) = \phi(\vec{k}) [1 - G(\vec{k})] \quad (1.29)$$

onde

$$G(\vec{k}) = - \frac{1}{n} \frac{1}{(2\pi)^d} \int \frac{\phi(\vec{k}')}{\phi(\vec{k})} \frac{\vec{k} \cdot \vec{k}'}{k^2} [S(\vec{k} - \vec{k}') - 1] d\vec{k}' \quad (1.30)$$

é a correção de campo local que incorpora as correlações de curto alcance do sistema. É evidente, portanto, que a aproximação STLS vai além de RPA, onde as partículas movem-se independentemente. O Fator de Estrutura Estático $S(\vec{k} - \vec{k}')$, que é uma quantidade observável, podendo ser obtida em experiências de espalhamento, define o espectro de flutuações do sistema e está diretamente relacionado com a função correlação dos pares pela transformada de Fourier,

$$S(\vec{k}) = 1 + n \int d\vec{r} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} [g(r) - 1] \quad (1.31)$$

A autoconsistência é introduzida na teoria STLS via teorema da Flutuação-Dissipação⁽¹⁸⁾, que relaciona o Fator de Estrutura Estático com a parte imaginária da Função Resposta densidade-densidade,

$$S(\vec{k}) = - \frac{\hbar}{n} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{(2\pi)} \text{Im}\chi(\vec{k}, \omega) \cotg h\left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right) \quad (1.32)$$

No limite clássico, $\hbar\omega \ll k_B T$, a Eq. (1.32) reduz-se a

$$S(\vec{k}) = - \frac{k_B T}{n} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\text{Im}\chi(\vec{k}, \omega)}{\omega} d\omega \quad (1.33)$$

a relação de Kramers-Krönig

$$\chi(\vec{k}, \omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega'}{\pi} \frac{\text{Im}\chi(\vec{k}, \omega')}{\omega' - \omega - i\eta}$$

permite resolver a integral em Eq. (1.33), relacionando o fator de estrutura estático com a função resposta densidade-densidade em $\omega = 0$,

$$\begin{aligned} S(\vec{k}) &= - \frac{k_B T}{n} \chi(\vec{q}, 0) = \\ &= - \frac{k_B T}{n} \frac{\chi_0(\vec{k}, 0)}{1 - \phi(k) [1 - G(k)] \chi_0(\vec{k}, 0)} \end{aligned} \quad (1.34)$$

As Eqs. (1.30) e (1.34) constituem um sistema de equação-integral que deve ser resolvido autoconsistentemente, de modo a determinar a correção de campo local $G(k)$ e o fator de estrutura $S(k)$.

A partir do conhecimento de $S(k)$, a energia de correlação e demais quantidades termodinâmicas do sistema podem ser determinadas. Por exemplo, a energia de correlação é dada por

$$E_c = \frac{n}{2} \int \phi(k) [S(\vec{k}) - 1] \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^d} \quad (1.35)$$

Os modos coletivos do sistema são determinados pelos polos da função resposta densidade-densidade. Assim, a equação

$$1 - \psi(k) \chi_0(\vec{k}, \omega) = 0$$

permite-nos calcular a relação de dispersão $\omega = \omega(k)$. No limite de grandes comprimentos de onda, temos a expressão

$$\omega^2 = \frac{n}{m} k^2 \psi(k) \left[1 + \frac{3k_B T}{\psi(k)} \right] \quad (1.36)$$

Esta teoria foi aplicada com sucesso ao plasma de uma componente (OCP - partículas carregadas na presença de um fundo positivo uniforme), ao sistema de elétrons confinados na superfície de hélio líquido⁽¹⁹⁾, ao plasma de Coulomb em duas dimensões⁽²⁰⁾ (interação logarítmica), bem como a sistemas de líquidos clássicos com interação de curto-alcance⁽²¹⁾.

Além da específica aproximação STLS, a expressão (1.28) para a função resposta densidade-densidade $\chi(\vec{k}, \omega)$ define uma Teoria de Campo Médio Generalizada para um sistema de muitas partículas. O problema central consiste em determinar, a partir de primeiros princípios ou de modo empírico, uma correção de campo local $G(\vec{k})$ que satisfaça de modo apropriado as regras de soma e forneça bons resultados. Em geral, deveríamos ter um campo local $G(\vec{k}, \omega)$ dependente da frequência para uma melhor descrição das propriedades dinâmicas do sistema. Porém, desde que estamos interessados em frequências muito menores do que as frequências características do sistema, o uso de $G(k)$ estático constitui uma boa aproximação.

Diversos outros esquemas autoconsistentes com diferentes graus de complexidades tem sido propostos⁽²²⁾. No entanto, o original método STLS aqui descrito, em sua simplicidade, tem fornecido bons resultados nos diversos sistemas estudados.

2. CASO QUÂNTICO

A utilização do formalismo discutido na seção I deste capítulo para a determinação da função resposta densidade-densi

dade em sistemas quânticos apoia-se na suposição de que podemos substituir todas as funções clássicas por suas equivalentes quânticas. Assim, a função resposta densidade-densidade na aproximação de Campo Médio é escrita como

$$\chi(\vec{q}, \omega) = \frac{\chi_0(\vec{q}, \omega)}{1 - \phi(q) [1 - G(q)] \chi_0(\vec{q}, \omega)} \quad (1.37)$$

onde $\chi_0(\vec{q}, \omega)$ é a função resposta densidade-densidade quântica do sistema sem interação dada por

$$\chi_0(\vec{q}, \omega) = -2 \int \frac{f^0(\vec{p}) - f^0(\vec{p} + \vec{q})}{\epsilon_{\vec{p} + \vec{q}} - \epsilon_{\vec{p}} - \omega + i\eta} \frac{d\vec{p}}{(2\pi)^d} \quad (1.38)$$

Aqui, $f^0(\vec{p})$ é a função distribuição quântica representando fermions ou bosons, ϵ representa a energia de uma partícula do sistema em um estado de momentum $\vec{p}$, e o índice superior d significa a dimensão do sistema.

Como no caso clássico, diversas funções $G(k)$ foram propostas no estudo de diversos sistemas quânticos degenerados. No caso de tomarmos $G(k)=0$ na Eq. (1.37) obtemos a Aproximação das Fases Aleatórias, desenvolvida por Bohm e Pines⁽¹⁸⁾ e interpretada diagramaticamente por Gell-Mann e Bruckner⁽²³⁾. A primeira correção de campo local no gás de elétrons degenerado foi introduzida por Hubbard que usou técnicas diagramáticas de teoria de campos⁽²⁴⁾. A seguir, veremos como a aproximação de Hubbard pode ser obtida dentro do presente formalismo.

Conforme assinalado anteriormente, o que muda na expressão para $\chi(\vec{q}, \omega)$ é a forma de $G(k)$ para as diversas aproximações. De acordo com Mahan⁽²⁵⁾, em tom jocoso, podemos dizer que " $G(k)$ é dependente do tempo por causa de seu aprimoramento ao longo dos

anos". No entanto, pelos motivos avocados, apresentaremos o cálculo formal de $G(k)$ na aproximação STLS para sistemas quânticos.

Vamos considerar um sistema de elétrons degenerado imerso em um fundo positivo uniforme de modo a garantir neutralidade de carga do sistema. O Hamiltoniano do sistema na linguagem de segunda quantização é dado por

$$H = \sum_{\vec{p}\sigma} \epsilon_{\vec{p}} c_{\vec{p},\sigma}^+ c_{\vec{p},\sigma} + \frac{1}{2V} \sum_{\substack{\vec{p}, \vec{q}, \vec{k} \\ \sigma, s}} \phi(q) c_{\vec{p}+\vec{q},\sigma}^+ c_{\vec{k}-\vec{q},s}^+ c_{\vec{k},s} c_{\vec{p},\sigma} \quad (1.39)$$

onde $\epsilon_{\vec{p}} = \frac{p^2}{2m}$, $c_{\vec{p}\sigma}^+$ e $c_{\vec{p}\sigma}$ são, respectivamente, os operadores de criação e destruição de elétrons no estado de momentum $\vec{p}$ e spin σ .

Usemos o método da equação de movimento⁽²⁵⁾ para o operador flutuação da densidade de carga, uma vez que, na média, este nos fornecerá informações sobre o caráter coletivo do sistema. O operador densidade $\rho(\vec{q}, t)$ em termos dos operadores de criação e destruição pode ser escrito como

$$\rho(\vec{q}, t) = \sum_{\vec{p}, \sigma} c_{\vec{p}+\vec{q},\sigma}^+ c_{\vec{p},\sigma} \quad (1.40)$$

e satisfaz a seguinte equação do movimento

$$\ddot{\rho}(\vec{q}, t) = - \left[H, \left[H, \rho(\vec{q}, t) \right] \right] \quad (1.41)$$

O resultado desta dupla comutação com o Hamiltoniano é

$$\begin{aligned} \ddot{\rho}(\vec{q}, t) = & - \sum_{\vec{p}\sigma} (\epsilon_{\vec{p}+\vec{q},\sigma} - \epsilon_{\vec{p}})^2 c_{\vec{p}+\vec{q},\sigma}^+ c_{\vec{p},\sigma} - \\ & - \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}} \phi(\vec{k}) \left(- \frac{\vec{q} \cdot \vec{k}}{m} \right) \rho(\vec{k}+\vec{q}, t) \rho(-\vec{k}, t) \end{aligned} \quad (1.42)$$

O passo importante agora consiste em tratar $\rho(\vec{k}+\vec{q},t)\rho(-\vec{k},t)$ de um modo cuidadoso. Na aproximação STLS, este produto é escrito em termos da soma direta sobre as posições da partícula e a função correlação dos pares é introduzida quando da substituição da soma sobre posições por uma média no gás de elétrons. O resultado deste procedimento é a equação

$$\omega^2 \langle \rho(\vec{q},t) \rangle = \sum_{\vec{p},\sigma} (\epsilon_{\vec{p}+\vec{q}} - \epsilon_{\vec{p}})^2 \langle c_{\vec{p}+\vec{q},\sigma}^+ c_{\vec{p}} \rangle + \omega_p^2 \langle \rho(\vec{q},t) \rangle \times (1 - G(\vec{q})) \quad (1.43)$$

onde

$$G(\vec{q}) = - \frac{1}{n} \int \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^d} \frac{\phi(\vec{k})}{\phi(\vec{q})} \frac{\vec{q} \cdot \vec{k}}{q^2} [S(\vec{q}-\vec{k}) - 1] \quad (1.44)$$

que é a mesma expressão que Eq. (1.30), corroborando a nossa hipótese inicial e $\omega_p^2 = 4\pi n e^2 / m$. A Eq. (1.43) descreve as oscilações de plasma no gás de elétrons e, novamente, a função $G(\vec{k})$ indica a modificação da dispersão do plasmon devido a correlações eletrônicas. Se as desprezamos, tomando $G(k) = 0$, a Eq. (1.43) descreve o plasmon na aproximação RPA.

Devemos assinalar, no entanto, que dentro desta formulação a aproximação mais simples trata de desprezar as interações entre partículas no cálculo da função resposta, levando em conta apenas o Princípio de Exclusão de Pauli, no caso de fermions. Neste caso,

$$\chi(\vec{q},\omega) = \chi_o(\vec{q},\omega) \quad (1.45)$$

ou seja, podemos tomar $G(\vec{k}) = 1$ na Eq. (1.37). Esta substituição reproduz os resultados da aproximação de Hartree-Fock^(18,25).

A aproximação de Hubbard pode ser obtida, dentro do

presente formalismo, com o uso do fator de estrutura estático na aproximação de Hartree-Fock

$$S_{HF}(\vec{q}) = - \frac{2}{(2\pi)^{d_n}} \int d\vec{k} \int d\vec{k}' \delta(\vec{k}-\vec{k}'+\vec{q}) \quad (1.46)$$

Assim, o campo local na aproximação de Hubbard é dado por

$$G_H(\vec{q}) = \frac{2}{(2\pi)^{2d_n}} \int d\vec{k} \int d\vec{k}' \frac{\vec{q} \cdot (\vec{q}+\vec{k}-\vec{k}')}{|\vec{q}+\vec{k}-\vec{k}'|^2} \frac{\phi(\vec{q}+\vec{k}-\vec{k}')}{\phi(\vec{q})} \quad (1.47)$$

e as integrações são feitas dentro da esfera de Fermi.

Finalmente, o método autoconsistente é implementado pelo Teorema da Flutuação-Dissipação (Eq. (1.32)) que, em sua versão quântica ($T=0$) apresenta a seguinte forma

$$S(\vec{q}) = - \frac{\hbar}{\pi n} \int_{-\infty}^{+\infty} \text{Im} \chi(\vec{q}, \omega) d\omega \quad (1.48)$$

Uma outra função bastante importante é a função resposta dielétrica que está diretamente relacionada com a função resposta densidade-densidade através de

$$\frac{1}{\epsilon(\vec{q}, \omega)} - 1 = \phi(\vec{q}) \chi(\vec{q}, \omega) \quad (1.49)$$

Na aproximação do campo autoconsistente

$$\epsilon(\vec{q}, \omega) = 1 - \frac{\phi(q) \chi_o(\vec{q}, \omega)}{1 + G(q) \phi(q) \chi_o(\vec{q}, \omega)} \quad (1.50)$$

A frequência de excitação do plasmon $\omega_p(q)$ é obtida através dos zeros da função dielétrica, ou seja, pela solução da equação

$$1 - \phi(q) [1 - G(q)] \chi_o(\vec{q}, \omega) = 0 \quad (1.51)$$

Em geral, devido à rica estrutura de $\chi_o(\vec{q}, \omega)$, a oscilação do plasmon propaga-se até que encontra a borda superior do contínuo de excitações do par elétron-buraco em um determinado vetor de onda q_c .

Para resolver a Eq. (1.48) do Fator de Estrutura auto consistentemente com Eqs. (1.37) e (1.44), devemos cuidadosamente separar a contribuição devido a plasmons e a contribuição do par elétron-buraco para $q > q_c$. Assim

$$s(\vec{q}) = s_{eb}(\vec{q}) + s_p(\vec{q}) \quad (1.52)$$

onde

$$s_{eb}(\vec{q}) = - \frac{1}{\pi n \phi(q)} \int_0^{q+q^2/2} \text{Im}[\epsilon(q, \omega)]^{-1} d\omega \quad (1.53)$$

e

$$s_p(\vec{q}) = \frac{1}{\pi n \phi(q)} \left[\frac{\partial \text{Re} \epsilon(q, \omega)}{\partial \omega} \right]^{-1}_{\omega=\omega_p(q)} \quad (1.54)$$

No capítulo II, mostraremos como esta separação das duas contribuições pode ser evitada no caso de sistemas quase-bidimensionais resultando numa maior precisão numérica.

A demonstração da Teoria STLS aqui apresentada, no caso quântico corresponde ao método usual de equação de movimento para RPA simplesmente substituindo o campo de polarização $\phi(q) \langle \rho(q) \rangle$ por $\psi(q) \langle \rho(q) \rangle$ com $\psi(q)$ dado pela Eq. (1.29). No capítulo III, veremos como esta aproximação pode ser obtida no contexto de teoria de campo médio generalizada.

CAPÍTULO II

COMPLEXOS DIPOLARES NO HÉLIO LÍQUIDO

2.1. GÁS DE ELÉTRONS NA SUPERFÍCIE DE DIELETRICOS

Nos últimos vinte anos, as propriedades do sistema formado por elétrons na superfície de dielétricos, principalmente hélio líquido, mas também cristais de gases nobres e hidrogênio sólido, têm sido estudadas extensivamente. Este campo de pesquisa iniciou-se com a predição feita por Cole e Cohen⁽²⁶⁾ e independentemente por Shikin⁽²⁷⁾, de que os elétrons podiam ser aprisionados por um substrato dielétrico. O confinamento dos elétrons em um poço de potencial na direção perpendicular à superfície deve-se basicamente a dois tipos de interação: uma barreira repulsiva de curto alcance devido ao princípio de exclusão de Pauli, obrigando a função de onda do elétron extra ser ortogonal à função de onda dos elétrons presentes no átomo do substrato e a outra devido a uma interação de longo alcance resultante da polarização eletrostática da superfície. Em vista deste potencial atrativo na direção perpendicular à superfície, os elétrons apresentam-se em estados quânticos discretos nesta direção e movem-se quase-livremente na direção paralela.

Supondo que a superfície do hélio líquido seja plana, podemos desacoplar o movimento do elétron na direção perpendicular e ao longo do plano, escrevendo a função de onda eletrônica como

$$\psi_n(\vec{r}, z) = A^{-1/2} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \phi_n(z) \quad (2.1)$$

onde $\vec{r}$ e $\vec{k}$ são vetores bidimensionais, A é a área da superfície e n determina o índice do autovalor de energia. A função $\phi_n(z)$ é a solução da equação de Schroedinger devido ao potencial confinante $V(z)$,

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \phi_n(z)}{dz^2} + [E_n - V(z)] \phi_n(z) = 0 \quad (2.2)$$

O modelo mais simples para $V(z)$ consiste em supor uma barreira infinita na interface e o potencial imagem clássico, resultando em

$$V(z) = \begin{cases} -\frac{(\epsilon-1)}{4(\epsilon+1)} \frac{e^2}{z} & z > 0 \\ \infty & z \leq 0 \end{cases} \quad (2.3)$$

onde ϵ é a constante dielétrica do hélio líquido ($\epsilon = 1.057$). Com este potencial a Eq. (2.2) torna-se idêntica à equação radial do átomo de hidrogênio para ondas "s". Assim, os autoestados nesta aproximação são do tipo hidrogenóides. Uma discussão mais detalhada do tipo de espectro de energia da Eq. (2.2) com vários modelos de potencial fenomenológicos é apresentada nas referências 9, 10 e 28.

A descrição das propriedades do gás de elétrons no plano não é tão simples quanto na direção perpendicular. Naquela direção, existem basicamente dois mecanismos de espalhamento a serem considerados. Um, devido aos átomos de vapor de hélio e o outro, que ocorre a temperaturas abaixo de 0,7K, devido às ondas de capilaridade-gravidade na superfície de hélio líquido que, na sua forma quantizada recebem o nome de riplons. No caso de substratos sólidos, existe o espalhamento por rugosidade da superfície e fonons superficiais (os modos de Rayleigh).

As baixas densidades eletrônicas, o modelo de elétrons livres funciona razoavelmente, mas a interação elétron-elétron torna-se cada vez mais importante à medida que a densidade au

menta, o que conduz à necessidade de inclusão dos efeitos de correlações eletrônicas na determinação das propriedades do sistema. Este aspecto será exaustivamente estudado ao longo deste trabalho em diferentes contextos.

A primeira evidência experimental dos estados superficiais, acima descritos, foi dada por Sommer⁽²⁹⁾ que mediu uma barreira de potencial da ordem de 0.1 eV para a penetração do elétron no hélio líquido. A demonstração definitiva foi apresentada por Grimes e Brown⁽³⁰⁾ que observaram a existência dos estados superficiais num elegante experimento espectroscópico. Esta experiência consiste na medida da absorção de microondas como função do campo elétrico externo com frequência ω aplicado na direção perpendicular à camada de elétrons. Eles mediram a separação dos níveis de energia devido à transição entre estados eletrônicos diferentes no poço de potencial, observando a absorção do quantum incidente quando, variando o campo externo, a separação era posta em ressonância com a frequência da onda incidente. Extrapolando para campo zero, puderam determinar as frequências de transição. Os resultados experimentais diferem da ordem de 5% daqueles previstos pelo modelo hidrogênico. No entanto, estes resultados motivaram a inclusão, por vários autores, de modelos mais realísticos para tratar a descontinuidade do potencial imagem na interface e a altura finita da barreira⁽³¹⁾.

Uma característica interessante do gás de elétrons neste sistema é o intervalo de densidades acessível experimentalmente que estende-se de 10^4 a 10^9 cm⁻². Para estas densidades, a Energia de Fermi a duas dimensões, dada por

$$E_F = \frac{\frac{1}{2} \pi \hbar^2 n}{m} \quad (2.4)$$

($\hbar$ é a constante de Planck e m é a massa da partícula) é muito menor do que a energia cinética média do gás

$$\langle K \rangle = k_B T \quad (2.5)$$

(k_B é a constante de Boltzmann e T a temperatura absoluta do sistema) mesmo para temperaturas da ordem de milikelvins. Neste caso, dispomos de um gás de elétrons bidimensional no regime clássico. Neste regime, as propriedades do sistema são descritas pela função distribuição de Boltzmann. Temos, portanto, um plasma clássico de elétrons bidimensional embebido em um fundo positivo e uniforme para garantir neutralidade de carga. O sistema é descrito por um parâmetro de plasma dado pela razão entre a energia potencial média e a energia cinética média, ou seja

$$\Gamma = \frac{e^2}{k_B T a} \quad (2.6)$$

onde a é a distância média entre os elétrons dada por

$$\pi a^2 n = 1 \quad (2.7)$$

Para pequenos valores de Γ , a energia coulombiana é dominada pela energia cinética e, portanto, temos um sistema diluído, tipo gás, a altas temperaturas. A densidades intermediárias, $1 \leq \Gamma \leq 100$, o sistema torna-se altamente correlacionado, ou do tipo líquido. Para mais altas densidades e baixas temperaturas, Γ grande, uma transição de fase para um estado ordenado é esperada ocorrer; ou seja, a formação de um cristal de Wigner clássico. Nesta área, um dos resultados mais expressivos foi a observação por Grimes e Adams⁽⁴⁾ desta cristalização para $\Gamma = 137$. Este resultado é consistente com cálculos realizados usando si

mulações numéricas do tipo dinâmica molecular e Monte Carlo ⁽³²⁾. O que limita a densidade eletrônica na superfície de hélio líquido é o aparecimento de uma instabilidade da carga superficial em virtude das pequenas oscilações na sua densidade causadas pela interação com modos superficiais do líquido, que será discutida em detalhes no capítulo IV.

A existência destes estados superficiais eletrônicos também se observa na superfície de um filme de hélio adsorvido em um substrato de constante dielétrica ϵ_s . Novos fenômenos são observados devido à presença do substrato. Pode ser mostrado que, no limite de filmes espessos, a força sobre o elétron vindo do substrato é equivalente a um campo elétrico $E_d \sim 1/d^2$. Para filmes finos, o espectro é determinado pela contribuição das forças imagens provenientes do substrato. Neste sentido, é evidente que o substrato, dependendo da espessura do filme, muda substancialmente os níveis eletrônicos ⁽³³⁾. Do mesmo modo a interação elétron-elétron no plano é drasticamente alterada em função da largura do filme e tipo do substrato. É interessante frisar que a variação na espessura do filme permite que a densidade máxima superficial suportada pelo filme seja aumentada substancialmente atingindo valores da ordem de 10^{11} cm^{-2} . Assim, este sistema constitui-se em um dos mais ricos para o estudo das propriedades eletrônicas de um sistema bidimensional, pois variando a espessura do filme, podemos variar a densidade do gás e a interação entre partículas. É desnecessário enfatizar que os efeitos das correlações tornam-se fundamentais no cálculo de todas as propriedades do sistema.

Peeters e Platzman ⁽¹¹⁾ investigaram o diagrama de fase deste sistema e constataram a possibilidade da existência de um

novo fluido quântico a baixas densidades e $T=0$ com uma possível formação de um cristal de Wigner no regime quântico. Os efeitos das correlações na fase líquida do sistema de elétrons na superfície de filmes de hélio depositados em vários substratos foram tratados exhaustivamente por Rino et. al.⁽³⁴⁾ e na fase sólida por Peeters⁽³⁵⁾. Uma investigação detalhada deste sistema no regime quântico é descrita no capítulo IV.

2.2. SISTEMA DE DIPLONS

Atualmente existe um interesse crescente no estudo de um sistema carregado, de algum modo similar ao descrito na seção anterior. O sistema consiste de elétrons superficiais sobre filmes de hélio, ligados a íons positivos localizados no interior do filme e presos ao substrato por forças imagens. É bem conhecido o fato de que íons positivos podem ser facilmente injetados dentro de um filme de hélio tornando-se localizados próximo ao substrato sólido pela força imagem⁽³⁶⁾. Estes íons encontram-se a uma distância mínima do substrato da ordem de $7\text{\AA}$ e possuem uma mobilidade relativamente alta ($\mu = 2.3 \text{ cm}^2/\text{V.s}$) quando comparada com sua mobilidade no hélio volumétrico.

Como discutido na seção 2.1, os elétrons sobre filmes de hélio não penetram dentro do filme tornando-se localizados na superfície deste em estados quânticos. Os íons positivos e os elétrons na superfície, com densidades iguais, formam um sistema estável, possuem grandes momentos de dipolo e constituem um novo sistema carregado conhecido como complexos dipolares ou diplons (fig. 2.1)⁽³⁷⁾. Um tipo semelhante de diplons pode ser encontrado em soluções estratificadas de $\text{He}^3\text{-He}^4$, com elétrons absorvidos no He^3 ligados a íons positivos em He^4 ⁽³⁸⁾.

Investigando o comportamento da energia potencial de um íon positivo no campo de força de sua imagem no substrato e no campo eletrostático do elétron como função da distância do íon ao substrato e, considerando a condição de que os elétrons não penetram no filme, Monarkha et. al.⁽³⁹⁾ mostraram que existe uma espessura crítica da ordem de 20 a 70 Å, dependendo do substrato ser um dielétrico ou metálico, acima da qual o elétron não arranca o íon das proximidades do substrato.

FIGURA 2.1 - Diagrama esquemático de um complexo de carga em um filme de hélio superfluido. $\epsilon \approx 1$ é a constante dielétrica do hélio líquido, ϵ_s é a constante dielétrica do substrato e d é a espessura do filme.

O diplon isolado é, pois, estável para espessuras de filmes maiores que 70 Å. Karamushko et. al.⁽⁴⁰⁾ comprovaram experimentalmente a existência deste novo estado superficial mostrando que os elétrons superficiais são altamente estáveis no campo dos íons positivos e conseguiram medir a absorção de microondas destes elétrons.

Do mesmo modo que elétrons superficiais sobre hélio volumétrico, os íons, próximos ao substrato, podem também formar, a altas densidades iônicas, um cristal hexagonal, simulando assim um potencial periódico macroscópico para os elétrons super

ficiais⁽³⁷⁾. Este tópico será objeto de futuras investigações.

O potencial de interação diplon-diplon é dado por⁽¹²⁾

$$\Phi_d(\vec{r}) = \frac{4e^2}{\epsilon_s + 1} \left[\frac{1}{r} - \frac{1}{(r^2 + d^2)^{1/2}} \right] + e^2 \frac{\epsilon_s^{-1}}{\epsilon_s + 1} \left[\frac{1}{r} - \frac{1}{(r^2 + 4d^2)^{1/2}} \right] \quad (2.8)$$

onde $\vec{r}$ é a distância entre os dipolos. O primeiro termo na Eq. 2.8 surge da interação íon-íon; o segundo é a contribuição da interação elétron-elétron e suas imagens. Na expressão para o potencial, Eq. 2.8, tomamos a unidade para a constante dielétrica do hélio líquido, por simplicidade. No limite de $r \gg d$, temos

$$\Phi_d(\vec{r}) = \frac{\alpha e^2 d^2}{r^3} \quad \text{com} \quad \alpha = 4 \epsilon_s (\epsilon_s + 1)^{-1} \quad (2.9)$$

ou seja, para grandes separações entre diplons, o potencial é puramente dipolar. Para $\epsilon_s \rightarrow \infty$ e $M_+ \rightarrow 0$, temos o potencial na forma

$$\Phi_d(\vec{r}) = e^2 \left[\frac{1}{r} - \frac{1}{(r^2 + 4d^2)^{1/2}} \right] \quad (2.10)$$

que possui o seguinte limite assintótico, $r \gg d$,

$$\Phi_d(\vec{r}) = \frac{2e^2 d}{r^3} \quad (2.11)$$

e representa o sistema de elétrons sobre um filme de hélio depositado sobre um substrato metálico, conforme veremos no capítulo IV. Assim, a investigação destes dois diferentes sistemas dipolares, no regime clássico, pode ser feita simultaneamente. No limite oposto, de pequenas distâncias entre diplons, $r \ll d$, temos

$$\Phi_d(\vec{r}) = e^2 \frac{(\epsilon_s + 3)}{(\epsilon_s + 1)} \frac{1}{r} \quad (2.12)$$

que apresenta a mesma forma do potencial de interação de elétrons sobre hélio volumétrico. No entanto, a carga eletrônica aqui aparece renormalizada pelo substrato segundo a relação

$$e^* = e \left(\frac{\epsilon_s + 3}{\epsilon_s + 1} \right)^{1/2} \quad (2.13)$$

A transformada de Fourier da Eq. (2.8) é facilmente escrita como

$$\Phi_d(q) = \frac{2\pi e^2}{q} F(qd) \quad (2.14)$$

onde o fator de forma $F(qd)$ é dado por

$$F(qd) = \delta_1 (1 - e^{-qd}) + \delta_2 (1 - e^{-2qd}) \quad (2.15)$$

com

$$\delta_1 = \frac{4}{\epsilon_s + 1} \quad \text{e} \quad \delta_2 = \frac{\epsilon_s - 1}{\epsilon_s + 1} \quad (2.16)$$

No limite de grandes comprimentos de onda $2qd \ll 1$, $\Phi_d(q)$ independe do vetor de onda q e do substrato ϵ_s , através do valor constante

$$\Phi_d(q) = 4\pi e^{*2} d \quad (2.17)$$

sendo, portanto, igual para ambos os sistemas de diplons e elétrons sobre filmes de hélio acima de um metal. No limite oposto, $qd \gg 1$, recuperamos a Eq. (2.12) no espaço de Fourier, ou seja,

$$\Phi_d(q) = \frac{2\pi e^{*2}}{q} \quad (2.18)$$

Os efeitos das correlações de elétrons superficiais sobre filmes de hélio, no regime clássico foram amplamente discutidos^(10,34,41). Vamos, nas próximas seções, estudar as propriedades estáticas e oscilações de plasma do sistema de diplons na aproximação do campo autoconsistente desenvolvida no capítulo I.

2.3. CORRELAÇÕES E RELAÇÃO DE DISPERSÃO

2.3.1. CONSIDERAÇÕES TEÓRICAS

Conforme discutido no capítulo I, a função resposta densidade-densidade na aproximação do campo autoconsistente é dada por

$$\chi(\vec{q}, \omega) = \frac{\chi_0(\vec{q}, \omega)}{1 - \psi(q) \chi_0(\vec{q}, \omega)} \quad (2.19)$$

onde $\chi_0(\vec{q}, \omega)$ é a função resposta densidade-densidade do sistema ideal bidimensional que, no caso clássico, (Eq. (1.27)) assume a forma

$$\chi_0(\vec{q}, \omega) = - \frac{n}{k_B T} W \left[\frac{\omega}{k} \left(\frac{m}{k_B T} \right)^{1/2} \right] \quad (2.20)$$

onde $W(z)$ é a função dispersão do plasma dada por⁽¹⁷⁾

$$W(z) = \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{y e^{-y^2/2}}{y - z - i\eta} dy \quad (2.21)$$

Usando a identidade formal

$$\frac{1}{y - z \pm i\eta} = \mathcal{P} \frac{1}{y - z} \pm i\pi \delta(y - z)$$

podemos escrever as partes real e imaginária da função W como

$$\text{Re}W(z) = 1 - zR(z)$$

$$\text{Im}W(z) = (\pi/2)^{1/2} z \exp(-z^2/2)$$

onde

$$R(z) = \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} P \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-y^2/2} dy}{z-y}$$

e P representa o valor principal de Cauchy.

Na equação (2.19), $\psi(q)$ é o potencial efetivo entre partículas dado por

$$\psi(q) = \phi(q) [1 - G(q)] \quad (2.22)$$

com $\phi(q)$ sendo o potencial entre díplons e dado por Eq. (2.14). A correção de campo local (Eq. (1.30)) com integração explícita da variável angular pode ser escrita como

$$G(q) = - \frac{1}{(2\pi)^2 n_F(qd)} \int_0^\infty \int_0^{2\pi} k dk d\theta \frac{q + k \cos \theta}{[k^2 + q^2 + 2qk \cos \theta]^{1/2}} \times$$

$$\times F([k^2 + q^2 + 2qk \cos \theta]^{1/2}) [S(k) - 1] \quad (2.23)$$

Como discutido no capítulo I, o interessante do método do campo autoconsistente em sistemas clássicos é que a parte imaginária da função resposta $\chi(\vec{q}, \omega)$ relacionada pelo teorema da Flutuação-Dissipação com o fator de estrutura estático,

$$S(q) = - \frac{k_B T}{\pi n} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\text{Im} \chi(\vec{q}, \omega)}{\omega} d\omega$$

pode ser integrada exatamente com o auxílio das relações de Kramers-Krönig, conduzindo ao resultado

$$\chi(\vec{q}, 0) = - \frac{n}{k_B T} S(\vec{q}) \quad (2.24)$$

Esta relação permite escrever o fator de estrutura es tático em função do potencial efetivo de uma maneira simples:

$$S(q) = \frac{1}{1 + \frac{n}{k_B T} \psi(q)} \quad (2.25)$$

Deste modo, devemos resolver autoconsistentemente as Eqs. (2.23) e (2.25). Antes de assim procedermos, é convenien te analisarmos o comportamento de $S(\vec{q})$ no limite de grandes com primentos de onda. Usando as expressões para $\phi(q)$ neste limi te, $kd \ll 1$, temos

$$\lim_{q \rightarrow 0} S(q) = \frac{1}{1 + \frac{4\pi d e^2 n}{k_B T} \left[1 - G(q) \right]_{q \rightarrow 0}} \quad (2.26)$$

Na aproximação RPA, em virtude de tomarmos $G(q)=0$, o limite acima pode ser calculado exatamente. No que segue, os vetores de onda estão escritos em unidades de a^{-1} e a largura do filme em unidades de a , sendo a a distância média entre as partículas. Temos então

$$\lim_{q \rightarrow 0} S_{\text{RPA}}(q) = \frac{1}{1 + 2\Gamma(\delta_1 + 2\delta_2)d} = \frac{1}{1 + 4\Gamma d} \quad (2.27)$$

Observe que, em RPA, o comportamento de $S(q)$ na origem indepen de do substrato.

Na aproximação STLS, notamos, de imediato, o efeito das correlações de curto alcance no comportamento de $S(q)$ na ori gem que está diretamente vinculado ao comportamento de $G(q)$ no mesmo ponto. Nesta aproximação, temos

$$\lim_{q \rightarrow 0} G(q) = - \frac{1}{4d} \int_0^\infty F(kd) [S(k) - 1] dk \quad (2.28)$$

No limite de filmes espessos ($d \rightarrow \infty$), obtemos o conhecido resultado para elétrons sobre hélio volumétrico:

$$\lim_{q \rightarrow 0} G(q) = \gamma q \quad (2.29)$$

onde

$$\gamma = -(1/4) \int_0^\infty [S(k) - 1] dk.$$

No limite de filmes finos temos que $F(qd)/d = 2q$, de forma que

$$\lim_{q \rightarrow 0} G(q) = (-1/2) \int_0^\infty k [S(k) - 1] dk = 1 - g(0) \quad (2.30)$$

onde $g(0)$ é a função correlação dos pares na origem. É interessante assinalar que este comportamento de $G(q)$, obtido analiticamente, é o mesmo que no limite de pequenos comprimentos de onda para o gás de Coulomb em dimensão arbitrária. Esta é uma consequência, neste caso, do fato de que a interação entre partículas no limite de filmes finos ser independente de q , para qualquer substrato.

A partir do cálculo de $S(q)$, podemos obter a densidade de energia de correlação (Eq. (1.35)) do gás de diplons:

$$E_c/nk_B T = \frac{\Gamma}{2} \int_0^\infty dk F(kd) [S(k) - 1] \quad (2.31)$$

O espectro de excitações coletivas do plasma de diplons, obtido através dos polos da função resposta densidade-densidade, pode ser escrito no limite de grandes comprimentos de onda como

$$\left(\frac{\omega}{\omega_0}\right)^2 = \frac{q}{2\Gamma} \{ 3q + 2\Gamma [1 - G(q)] F(qd) \} \quad (2.32)$$

onde

$$\omega_0 = 2\pi n e^2 / (m k_B T)^{1/2}. \quad (2.33)$$

A partir da Eq. (2.32) podemos observar os distintos comportamentos de espectro de excitação nos limites de filmes finos e espessos. No primeiro caso, um espectro do tipo som é obtido

$$\omega_q = cq \quad (2.34)$$

com velocidade do som dada por

$$c = \left[3 + 4\Gamma(1 - G(0))d \right]^{1/2} / 2\Gamma \quad (2.35)$$

À medida que d aumenta, a relação de dispersão modifica-se até ser obtido o modo de plasmon típico de sistema bidimensional com interação $1/r$,

$$\omega_q^2 = \omega_0^2 + c^2 q^2 \quad (2.36)$$

A seguir, apresentaremos nossos principais resultados da solução autoconsistente do sistema de diplons.

2.3.2. RESULTADOS E DISCUSSÕES

A solução autoconsistente é obtida pelo método iterativo padrão. Com uma entrada inicial razoável para $S(q)$ na Eq. (2.23), obtemos a correção de campo local $G(q)$, e pela Eq. (2.25) um novo $S(q)$ é calculado. Este processo continua até que a maior diferença entre a última entrada e a anterior é menor do que um valor exigido ϵ . No nosso caso, a precisão requerida $\epsilon = 10^{-4}$. À medida que o parâmetro de plasma aumenta, surgem problemas de convergência. Para evitar isto, usamos um me

canismo de aceleração da convergência, definindo como entrada para $S(k)$ da $(N+1)$ -ésima iteração

$$S^{N+1}(q) = S^{N-1}(q) + p \left[S^{(N)}(q) - S^{(N-1)}(q) \right]$$

onde o fator de convergência p depende do valor de Γ e dos outros parâmetros. Em geral, um número variando de 6 a 120 iterações era necessário para obtermos valores de $S(q)$ e $G(q)$ com a precisão exigida.

Nossos cálculos foram realizados para vários parâmetros de plasma, diferentes espessuras do filme de hélio e distintos tipos de substrato, como, safira, neônio sólido e metal.

Nas Figuras 2.2, 2.3 mostramos o comportamento da correção de campo local $G(q)$ como função de q para várias espessuras de filmes. As linhas tracejadas correspondem ao substrato de neon sólido, enquanto que as linhas cheias do substrato de safira. As figuras acentuam as diferenças notórias de $G(q)$ para dois valores do parâmetro de plasma $\Gamma=0.1$ e $\Gamma=1$. À medida que Γ diminui, a correção de campo local torna-se desprezível até que para $\Gamma \ll 1$, podemos tomar $G(q)=0$ e recuperamos os resultados de RPA. Neste sentido, no limite de baixas densidades, a aproximação RPA é exata e a aproximação STLS tende a RPA. No entanto, já para Γ intermediários, os efeitos de correlação tornam $G(q)$ apreciável como demonstram nossos resultados. Os resultados para o substrato metálico não diferem significativamente daqueles obtidos para a safira ($\epsilon_s=19$), por isto não estão apresentados aqui. Observemos ainda a influência do substrato sobre $G(q)$ para os dois valores do parâmetro de plasma.

Nossos resultados numéricos mostram que, no limite de filme fino, $d \ll 1$, a expressão assintótica (Eq. (2.30)) é comple

FIGURA 2.2 - Correção de campo local $G(q)$ na aproximação de STLS para um sistema de diplons sobre substrato de neon sólido, $\epsilon_s = 1,24$ (linha tracejada) e safira, $\epsilon_s = 19$ (linha cheia), com parâmetro de plasma $\Gamma = 0,1$ e espessura de filme em unidades de a , $d = 0,01, 0,1, 1$ e 100 .

FIGURA 2.3 - Correção de campo local $G(q)$ na STLS para um sistema de diplons sobre substrato de neon sólido, $\epsilon_s = 1,24$ (linhas tracejadas), e safira $\epsilon_s = 19$ (linha cheia), com parâmetro de plasma $\Gamma = 1$ e espessuras de filme $d = 0,01, 0,1, 1$ e 100

tamente satisfeita, bem como a relação para grandes comprimentos de onda (Eq. (2.29)) no limite de filmes espessos. Quando q tende a zero, vemos que $G(q)$ tende para um mais rapidamente para Γ maiores. Para filmes espessos, $G(q)$ comporta-se de maneira semelhante a qualquer sistema de Coulomb em qualquer dimensão. À medida que d diminui, $G(q)$ passa a assumir valores constantes independentes de q . Este comportamento é resultado da intensa blindagem do potencial entre partículas que, para pequenas espessuras, também assume um valor constante, característica da interação dipolar. Confira as Eqs. (2.26) e (2.28). Para $d=0.01$, o efeito do substrato é desprezível.

Nas Figuras 2.4 e 2.5 mostramos o comportamento do fator de estrutura estático $S(q)$ como função de q na aproximação STLS para o sistema de diplons sobre os substratos de neon-sólido e safira e parâmetros de plasma $\Gamma=0,1$ e 1 , respectivamente. Nas Figuras 2.6 e 2.7 apresentamos os resultados de $S(q)$ para o neon-sólido com $\Gamma=0,1$ e 1 e fazemos a comparação com os resultados da RPA. A Figura 2.8 mostra $S(q)$ para um substrato tipo metálico, para $\Gamma=1$. Observa-se que este resultado praticamente não difere do obtido para o substrato do tipo safira, conforme Figura 2.5. Observando o conjunto de Figuras 2.4 a 2.8, vemos que a medida que d aumenta os valores de $S(q)$ na origem diminuem, com um consequente entortamento da curva $S(q)$. No limite de filmes finos $S(q)$ é praticamente constante e não difere do valor na RPA mesmo para $\Gamma=1$. O limite $d \ll 1$ nos leva a um sistema de diplons pouco interagente, porque o elétron só "enxerga" o íon ao qual está ligado.

FIGURA 2.4 - Fator de estrutura estático $S(q)$ na aproximação STLS, para um sistema de diplons sobre um substrato de neon sólido, $\epsilon_s = 1,24$ (linha tracejada), e safira, $\epsilon_s = 19$ (linha sólida), com parâmetro de plasma $\Gamma = 0,1$ e espessuras de filme $d = 0,01, 0,1, 1$ e 100

FIGURA 2.5 - Fator de estrutura estático $S(q)$ na aproximação de STLS, para um sistema de diplos sobre um substrato de neon sólido, $\epsilon_s = 1,24$ (linha tracejada) e safira, $\epsilon_s = 19$ (linha cheia) com parâmetro de plasma $\Gamma = 1$ e espessuras de filme $d = 0,01, 0,1, 1$ e 100

FIGURA 2.6 - Fator de estrutura $S(q)$ nas aproximações STLS (linha cheia) e RPA (linha tracejada) para um sistema de diplons sobre substrato de neon sólido, com parâmetro de plasma $\Gamma = 0,1$ e espessuras de filme $d = 0,01, 0,1, 1$ e 100

FIGURA 2.7 - Fator de estrutura $S(q)$ nas aproximações de STLS (linha cheia) e RPA (linha tracejada) para um sistema de diplons sobre um substrato de neon sólido ($\epsilon_s = 1,24$) com parâmetro de plasma $\Gamma = 1$ e espessuras de filme $d = 0,01, 0,1, 1$ e 100

FIGURA 2.8 - Fator de estrutura $S(q)$ nas aproximações STLS (linha cheia) e RPA (linha tracejada) para um sistema de diplos sobre substrato metálico, e parâmetro de plasma $\Gamma = 1$. As espessuras de filme em unidades de q são $d = 0,01, 0,1, 1$ e 100

Assim neste limite, $G(q)$ é pequeno para todo q e $S(q)$ é praticamente constante próximo de um, e as aproximações RPA e STLS não diferem muito. Os efeitos das correlações de curto alcance tornam-se acentuadas mesmo para Γ pequeno, à medida que d aumenta, conforme mostrado nas Figuras 2.6 - 2.8, onde comparamos as aproximações STLS, linha cheia, com a RPA, linha tracejada. Neste caso, também, o caso metálico não difere praticamente dos resultados obtidos para a safira (conforme figuras 2.8 e 2.9).

Convém assinalar que o comportamento na origem $S(q)$, previsto por expansões analíticas é completamente satisfeito nos resultados numéricos. Como deduzimos em RPA (Eq. (2.27)), este limite é exato e independente do tipo de substrato. Fazendo $\Gamma = 1$ e $d = 1$ na Eq. (2.27) temos $S_{RPA}(q) = 0,2$ (figuras 2.6 - 2.8).

A relação de dispersão, no limite de longos comprimentos de onda é apresentada nas Figuras 2.9 e 2.10 para $\Gamma = 1$ e substratos do tipo neon-sólido e safira respectivamente. Para espessuras de filme variando de 0,01 a 1, obtemos os modos coletivos do tipo som descritos pela Eq. (2.34). À medida que d aumenta, o usual comportamento da relação de dispersão do tipo plasmon de um sistema bidimensional é obtido. Vemos, mais uma vez que no limite de filmes finos, as aproximações RPA e STLS não diferem consideravelmente. Na Figura 2.10 mostramos que para $d \approx 10$, o modo típico de plasmon é atingido para $q \approx 0,3$. Convém observar também a influência do substrato na relação de dispersão; vemos que quanto menor ϵ_s , maior é a energia do plasmon.

A energia de correlação por partícula é mostrada na

FIGURA 2.9 - Relação de dispersão nas aproximações STLS (linha cheia) e RPA (linha tracejada) para um sistema de diplons ($\Gamma = 1$). O substrato considerado é neon sólido

FIGURA 2.10 - Relação de dispersão nas aproximações STLS (linhas cheias) e RPA (linhas tracejadas) para um sistema de diplons ($\Gamma = 1$). O substrato considerado é safira

Figura 2.11 como função da espessura do filme e $\Gamma = 0,1$. Observa-se mais uma vez que o efeito das correlações de curto alcance é mais pronunciado para substratos com menor constante dielétrica. É interessante notar que o valor da energia "satura" em valores diferentes no limite de filmes espessos. Este é um resultado consideravelmente diferente daquele obtido por Rino et. al.⁽³⁴⁾ no caso de elétrons superficiais sobre filmes de hélio em um substrato qualquer. Naquele caso, a energia de correlação "satura" para o mesmo valor independente do tipo de substrato considerado. Esta diferença de comportamento neste limite da energia de correlação entre o sistema de diplons e aquele considerado por Rino et. al. reside no fato de que no caso de diplons, os íons sempre se acoplam ao substrato mesmo para filmes espessos. Na Tabela 2.1, apresentamos, para $\Gamma = 1$ e várias espessuras alguns valores da energia de correlação por partícula.

Em todos os cálculos realizados neste capítulo, consideramos apenas $\Gamma = 0,1$ e 1 e variamos a espessura em unidades de a . Para um melhor conhecimento do intervalo das variáveis acessíveis experimentalmente, mostramos na Tabela 2.2, os valores de densidades, espessuras de filme e temperatura consideradas neste trabalho.

Em conclusão, mostramos neste capítulo que a espessura do filme de hélio e os substratos têm um papel importante nas correlações das partículas no sistema de diplons.

FIGURA 2.11 - Energia de correlação como função de d nas aproximações STLS e RPA para os substratos neon sólido, safira e "metálico" e parâmetro de plasma $\Gamma = 0,1$

TABELA 2.1 - Valor da energia de correlação $-E_c/Nk_B T$ para vá-
rias espessuras, substratos e parâmetro de plasma
 $\Gamma = 1$

d	NEON-SÓLIDO		SAFIRA		METAL	
	$-E_{RPA}$	$-E_{STLS}$	$-E_{RPA}$	$-E_{STLS}$	$-E_{RPA}$	$-E_{STLS}$
0,01	0,0179	0,0114	0,0170	0,0109	0,0169	0,0108
0,1	0,8070	0,1731	0,5667	0,1493	0,5351	0,1462
1,0	3,767	0,923	1,770	0,5950	1,556	0,5538
50	4,612	1,604	2,069	0,858	1,786	0,763
100	4,621	1,604	2,069	0,8593	1,789	0,764

TABELA 2.2 - Valores das densidades eletrônicas, temperaturas,
espessuras de filme e parâmetro de plasma relativo
ao sistema de diplons, experimentalmente acessí-
veis

$n_s \times 10^4$ (cm^{-2})	d(cm)	T(°k)	Γ
1	10^{-4}	3	0,1
	10^{-3}	0,3	1
4	10^{-2}	0,6	
	1	3	0,2
10^2	10^{-6}		1
	10^{-4}		

CAPÍTULO III

O SISTEMA DE ELÉTRONS DEGENERADO QUASE-BIDIMENSIONAL

3.1 - TEORIA DE CAMPO MÉDIO A DUAS DIMENSÕES

Os sistemas eletrônicos quase-bidimensionais são caracterizados pelo confinamento espacial dos portadores de carga em poços de potencial unidimensional na direção perpendicular à superfície (eixo-z) e com movimento livre na direção paralela, exceto pelas interações superficiais e espalhamento por impurezas. Podemos, então considerar um gás de elétrons interagente bidimensional ocupando a mais baixa sub-banda de estados na direção perpendicular.

Os sistemas quase-bidimensionais mais estudados são aqueles formados por elétrons localizados na superfície de hélio líquido e por portadores de carga confinados espacialmente junto à interface de estruturas semicondutoras. Nesta última categoria, devemos destacar as camadas de inversão produzidas na interface do sistema semicondutor-isolante-metal, o dispositivo básico MISFET (transistor devido a efeito de campo em metal-isolante-semicondutor), e na interface de uma heterojunção de semicondutores do tipo AlGaAs - GaAs ou em poços quânticos formados de várias heterojunções. Na primeira categoria, temos os elétrons depositados sobre filmes de hélio líquido adsorvidos em vários tipos de substratos e elétrons ligados a íons positivos que se encontram presos ao substrato (diplos).

Dependendo da densidade dos portadores de carga e da temperatura, o sistema pode apresentar-se no regime clássico ou quântico. As densidades envolvidas no caso de elétrons sobre filmes de hélio adsorvidos em um substrato qualquer podem variar em larga escala dependendo da espessura do filme e da espécie de substrato. O fato que limita a densidade está ligado a uma instabilidade do sistema devido ao acoplamento dos elé

trons com a deformação da superfície de hélio. Para elétrons sobre hélio volumétrico, a maior densidade obtida se situa na faixa de 10^9 cm^{-2} . Neste regime, a energia de Fermi, que em duas dimensões é dada por $E_F = \hbar^2 n/m$, é muito menor do que $k_B T$ mesmo para alguns milikelvins. Então, o gás de elétrons pode ser descrito por uma distribuição estatística clássica, como discutido no Capítulo II. No entanto, para elétrons sobre filmes de hélio, as forças provenientes do substrato alteram bastante o acoplamento dos elétrons com a deformação da superfície de hélio fazendo com que densidades bem mais elevadas possam ser atingidas (10^{11} cm^{-2}). Neste caso, estamos no regime quântico e uma boa aproximação consiste em tratar o gás de elétrons degenerado. No caso de diplons, as densidades podem variar de 10^5 a 10^7 cm^{-2} . Para o sistema de elétrons em heteroestruturas de semicondutores e interfaces semiconductor-isolante, as densidades eletrônicas dependem da concentração de impurezas e campo elétrico externo respectivamente e variam de 10^{11} a 10^{13} cm^{-2} .

Vamos considerar, neste capítulo, o sistema de elétrons degenerado ($T = 0$) quase-bidimensional. O fato comum nestes sistemas interagentes é que o potencial de interação entre partículas possui transformada de Fourier sempre dada pela expressão

$$\phi(q) = v(q)F(qd) \quad (3.1)$$

onde

$$v(q) = \frac{2\pi e^2}{q} \quad (3.2)$$

é a transformada de Fourier do potencial do gás de partículas estritamente confinado ao plano e d é alguma dimensão caracte

rística do sistema. O fator de forma $F(qd)$ depende obviamente do sistema considerado. Nos sistemas eletrônicos em semicondutores, veremos que $F(qd)$ tende para a unidade no limite de d pequeno, reproduzindo o resultado de um gás de elétrons bidimensional, mas com as linhas de campo a eles associados saindo para fora do plano, com interação $v(r) \propto 1/r$. No outro limite, o fator de forma comporta-se como $1/q$, resultado que corresponde a um gás de elétrons interagindo via potencial $\log r$ equivalente a linhas de carga em três dimensões.

Os efeitos das correlações eletrônicas em sistemas clássicos e quânticos têm sido analisados por vários autores em diversas aproximações^(42,43). O consenso geral é que os efeitos de correlação de curto alcance são mais pronunciados em duas dimensões do que em três dimensões. Neste sentido, uma teoria de gás de elétrons que leve em conta explicitamente os efeitos de curto alcance deve ser utilizada em qualquer sistema bidimensional para se obter resultados confiáveis.

Conforme foi discutido no Capítulo I, as propriedades dielétricas de um sistema de muitos corpos podem ser obtidas a partir da função resposta densidade-densidade $\chi(\vec{q}, \omega)$ ou equivalentemente, da função dielétrica generalizada $\epsilon(\vec{q}, \omega)$ definida em termos da função resposta densidade-densidade (Eq. 1.49).

Nossa discussão do gás de elétrons a duas dimensões em um fundo positivo uniforme começa com a introdução da função resposta densidade-densidade blindada $\chi_{sc}(\vec{q}, \omega)$ permitindo-nos desenvolver uma teoria de campo médio que, embora nos leve aos mesmos resultados da teoria de campo autoconsistente discutida no Capítulo I, contém um diferente enfoque físico e fenomenológico⁽⁴⁴⁾. Esta função $\chi_{sc}(\vec{q}, \omega)$ descreve a resposta do sistema

ao campo total composto do campo longitudinal externo $V_{\text{ext}}(\vec{q}, \omega)$ e do campo de polarização produzido pelas flutuações na densidade de carga. A função resposta densidade-densidade introduzida no Capítulo I, descreve apenas a resposta do sistema ao campo externo. O campo de polarização induzido pelas flutuações na densidade de carga é dado por

$$\Phi_{\text{pol}}(\vec{q}, \omega) = \Phi(q) \langle \rho(\vec{q}, \omega) \rangle \quad (3.3)$$

onde $\Phi(q)$ é dada pela Eq. (3.1) e $\langle \rho(\vec{q}, \omega) \rangle$ representa a média no ensemble quântico do operador densidade de carga. Esta teoria está relacionada à teoria do potencial de polarização, desenvolvida por Pines e coautores⁽⁴⁵⁾ e tem sido útil no tratamento de sistemas quânticos de muitas partículas.

A função resposta blindada $\chi_{\text{sc}}(\vec{q}, \omega)$ é expressa, então, por

$$\langle \rho(\vec{q}, \omega) \rangle = \chi_{\text{sc}}(\vec{q}, \omega) [V_{\text{ext}}(\vec{q}, \omega) + \Phi(q) \langle \rho(\vec{q}, \omega) \rangle] \quad (3.4)$$

Desta forma, podemos estabelecer a relação entre a função resposta densidade-densidade, definida pela Eq. (1.28)

$$\chi(\vec{q}, \omega) = \frac{\langle \rho(\vec{q}, \omega) \rangle}{V_{\text{ext}}(\vec{q}, \omega)}$$

e a função resposta blindada $\chi_{\text{sc}}(\vec{q}, \omega)$:

$$\chi(\vec{q}, \omega) = \frac{\chi_{\text{sc}}(\vec{q}, \omega)}{1 - \Phi(q) \chi_{\text{sc}}(\vec{q}, \omega)} \quad (3.5)$$

Nestes termos, a função dielétrica generalizada $\epsilon(\vec{q}, \omega)$ definida pela Eq. (1.50),

$$\frac{1}{\varepsilon(\vec{q}, \omega)} - 1 = \Phi(q) \chi(\vec{q}, \omega) \quad (3.6)$$

pode ser escrita em termos de $\chi_{sc}(\vec{q}, \omega)$ como

$$\varepsilon(\vec{q}, \omega) = 1 - \Phi(q) \chi_{sc}(\vec{q}, \omega) \quad (3.7)$$

Na aproximação de Hartree-Fock, os elétrons respondem ao campo externo como partículas livres e portanto não há sentido em definir $\chi_{sc}(\vec{q}, \omega)$ nesta aproximação. Daí, temos

$$\chi_{HFA}(\vec{q}, \omega) = \chi_o(\vec{q}, \omega) \quad (3.8)$$

onde $\chi_o(\vec{q}, \omega)$ é a função resposta livre de "Lindhard" dada⁽¹⁸⁾ por

$$\chi_o(\vec{q}, \omega) = \sum \frac{f_o(\varepsilon_{\vec{k}+\vec{q}}) - f_o(\varepsilon_{\vec{k}})}{\varepsilon_{\vec{k}+\vec{q}} - \varepsilon_{\vec{k}} - \hbar\omega + i\eta} \quad (3.9)$$

onde $f_o(\varepsilon_{\vec{k}})$ é a função de Fermi-Dirac e a soma é feita sobre todos os estados de um elétron com vetor de onda $\vec{k}$ e energia $\varepsilon_{\vec{k}} = \hbar^2 k^2 / 2m$ até o nível de Fermi $k_F = (2\pi n)^{1/2}$.

O cálculo explícito de $\chi_o(\vec{q}, \omega)$, a temperatura zero para um gás de elétrons bidimensional foi feito inicialmente por Stern.⁵⁹ O resultado é

$$\begin{aligned} \text{Re}\chi_o(\vec{q}, \omega) = & -\frac{mk_F}{h^2 \pi q} \left[\frac{q}{k_F} + \text{sgn}(\alpha_+) \theta(\alpha_+^2 - 1) (\alpha_+^2 - 1)^{1/2} + \right. \\ & \left. + \text{sgn}(\alpha_-) \theta(\alpha_-^2 - 1) (\alpha_-^2 - 1)^{1/2} \right] \end{aligned} \quad (3.10)$$

e

$$\text{Im}\chi_o(\vec{q}, \omega) = \frac{mk_F}{\pi \hbar^2 q^2} [\theta(1 - \alpha_-^2) (1 - \alpha_-^2)^{1/2} - \theta(1 - \alpha_+^2) (1 - \alpha_+^2)^{1/2}] \quad (3.11)$$

onde a função sinal é definida por

$$\text{sgn}(x) = x/|x|$$

e a função degrau unitário é dada por

$$\theta(x) = \begin{cases} 1 & x > 0 \\ 0 & x < 0 \end{cases}$$

e

$$\alpha_{\pm} = \pm \frac{m\omega}{\hbar k_F q} - \frac{q}{2k_F} \quad (3.12)$$

A aproximação das fases aleatórias (RPA) consiste em tomar a função resposta blindada como a função livre de modo que os elétrons respondem ao campo blindado (a soma do campo externo mais campo de polarização) como partículas livres

$$\chi_{sc}^{RPA}(\vec{q}, \omega) = \chi_o(\vec{q}, \omega) \quad (3.13)$$

Deste modo reproduziremos o conhecido resultado

$$\chi^{RPA}(\vec{q}, \omega) = \frac{\chi_o(\vec{q}, \omega)}{1 - \phi(q) \chi_o(\vec{q}, \omega)} \quad (3.14)$$

ou

$$\epsilon_{RPA}(\vec{q}, \omega) = 1 - \phi(q) \chi_o(\vec{q}, \omega) \quad (3.15)$$

De modo a incorporar os efeitos de correlação e troca devemos ir além de RPA. Seguindo o "espírito" das aproximações de campo médio devemos modificar Eq. (3.13) de modo que as partículas respondam ao campo blindado como partículas interagentes. Daí, definimos

$$\chi_{sc}(\vec{q}, \omega) = \frac{\chi_0(\vec{q}, \omega)}{1 - f^S(\vec{q}) \chi_0(\vec{q}, \omega)} \quad (3.16)$$

Tal aproximação equivale a substituir na Eq. (3.3) o potencial $\phi(q)$ pelo potencial efetivo $\psi(q)$ dado por

$$\psi(q) = \phi(q) + f^S(q) = \phi(q) [1 - G(q)] \quad (3.17)$$

onde introduzimos a função adimensional

$$G(q) = -\frac{f^S(q)}{\phi(q)} \quad (3.18)$$

que é a nossa conhecida correção de campo local estática. O potencial $f^S(q)$ é fenomenológico e deve descrever a modificação na força restauradora proveniente das correlações de curto alcance que evitam que os elétrons sintam totalmente o efeito da interação de Coulomb a curtas distâncias. É um potencial sempre atrativo. O ideal seria a introdução de um potencial efetivo dependente da frequência, mas desde que as frequências características associadas com as correlações de curto alcance sejam grandes comparadas com as frequências para as quais Eq. (3.3) pode ser aplicada, então o campo estático fornece uma boa aproximação.

Substituindo Eq. (3.18) na Eq. (3.16) obtemos

$$\chi_{sc}(\vec{q}, \omega) = \frac{\chi_0(\vec{q}, \omega)}{1 + \phi(q) G(q) \chi_0(\vec{q}, \omega)} \quad (3.19)$$

e da Eq. (3.5) temos

$$\chi(\vec{q}, \omega) = \frac{\chi_0(\vec{q}, \omega)}{1 - \phi(q) [1 - G(q)] \chi_0(\vec{q}, \omega)} \quad (3.20)$$

A correção de campo local $G(q)$ possui várias formas dependendo da aproximação. Em nosso trabalho, consideraremos aquelas referentes às aproximações de Hubbard e STLS discutidas no Capítulo I. Na expressão (3.20), a função resposta densidade-densidade livre possui partes real e imaginárias dadas pelas Eqs. (3.10) e (3.11).

Para o cálculo do fator de estrutura $S(\vec{q})$ que está relacionado com $\text{Im}\chi(\vec{q}, \omega)$ pelo Teorema da Flutuação-Dissipação, devemos fazer integração sobre as frequências evitando as descontinuidades de $\chi_0(\vec{q}, \omega)$ de uma maneira apropriada^(*). Um método mais eficiente e acurado será descrito para o cálculo numérico de $S(\vec{q})$. Para isto no entanto, precisamos escrever de uma outra forma, seguindo a análise de Ioriatti⁽⁴⁶⁾.

Como em todos os sistemas a serem considerados os estados de um elétron formam um contínuo e a soma presente na Eq. (3.9) pode ser transformada numa integral, cujo resultado para a parte imaginária pura da frequência é:

$$\chi_0(\vec{q}, i\omega) = -4 \int \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^2} f_0(\epsilon_{\vec{k}}) \frac{\epsilon_{\vec{k}+\vec{q}} - \epsilon_{\vec{k}}}{(\epsilon_{\vec{k}+\vec{q}} - \epsilon_{\vec{k}})^2 + \hbar^2 \omega^2} \quad (3.21)$$

Reescrevendo a integral (3.10) na forma:

$$\chi_0(q, i\omega) = -\frac{2}{\pi} \int_0^\infty k f_0(k) dk \int_0^\infty dt \text{sen}\left(\frac{\hbar^2 q^2}{2m} t\right) J_0\left(\frac{\hbar^2 k q}{2m} t\right) e^{-\hbar \omega t} \quad (3.22)$$

onde $J_0(x)$ é a função de Bessel de ordem zero; definindo as variáveis

(*) As expressões explícitas de $\chi_0(\vec{q}, \omega)$ não são adequadas para tal procedimento.

$$x = \frac{\hbar^2 q^2}{2m} t, \quad \rho = \frac{2k_F}{q} \quad \text{e} \quad z = \frac{2m}{\hbar q^2} \omega \quad (3.23)$$

e integrando sobre k temos:

$$\chi_0(\rho, z) = \frac{nm}{\pi \hbar^2} \int_0^\infty \frac{\sin x}{x} e^{-|z|x} J_1(x\rho) dx \quad (3.24)$$

onde $J_1(x)$ é a função de Bessel de primeira ordem.

A Eq. (3.24) representa o fluxo passando através de um disco de raio ρ a uma distância $|z|$ de um disco condutor de raio unitário e carga $m^2/\pi \hbar^4$. Escolhamos portanto, um sistema de coordenadas esferoidais oblatas, tendo em vista a analogia acima mencionada:

$$\rho = \cos h \xi \sin \theta \quad (3.25)$$

$$|z| = \sin h \xi \cos \theta \quad (3.26)$$

onde

$$0 \leq \theta \leq \frac{\pi}{2} \quad \text{e} \quad 0 \leq \xi \leq \infty$$

Integrando sobre a variável x , resulta uma expressão muito simples para a função resposta densidade-densidade li
vre (47)

$$\chi_0(\theta) = -\frac{m}{\pi \hbar^2} (1 - \cos \theta) . \quad (3.27)$$

A simplicidade a que conduziram essas transformações permitem, de uma maneira muito transparente a expansão em ba
xas e altas densidades da energia de correlação em RPA (48). Na teoria de campo auto-consistente, como veremos a seguir, este resultado proporcionar-nos-á uma notável simplificação nos nos

so_s cálculos autoconsistentes.

3.1.1 - FATOR DE ESTRUTURA ESTÁTICO

De posse da função resposta densidade-densidade expressa pela Eq. (3.20) podemos, utilizando a versão quântica do teorema da flutuação-dissipação, relacionar o fator de estrutura com a parte imaginária de $\chi(\vec{q}, \omega)$ (Eq. (1.48)), ou seja,

$$S(\vec{q}) = -\frac{\hbar}{\pi n} \int_0^{\infty} \text{Im} \chi(\vec{q}, \omega) d\omega \quad (3.28)$$

Como se sabe, no limite de q pequeno, a função resposta, onde consideraremos o potencial efetivo $\psi(q) = \phi(q) [1 - G(q)]$ independente da frequência, possui dois tipos de singularidades no plano complexo ω ; uma é um corte a partir de $\omega = 0$ até $\omega = qv_F$ que está associado à excitação do contínuo de pares elétrons-buracos, e a outra, ao modo de plasmon localizado acima do contínuo em $\omega = \omega_q$ e dado pelos zeros da Eq. (1.51) na sua versão bidimensional. Da Eq. (3.9) vemos que $\chi(\vec{q}, \omega)$ é calculada usando condições de contornos retardadas, pois as frequências carregam parte imaginária infinitesimal $i\eta$. Vamos portanto, denotar $\chi^+(\vec{q}, \omega)$ para $\chi(\vec{q}, \omega)$ retardada; por outro lado, $\chi(\vec{q}, \omega)$ também pode ser calculada usando condições de contorno avançadas, isto é, substituindo $i\eta$ por $-i\eta$ na Eq. (3.9). Neste caso, $\chi^-(\vec{q}, \omega)$ será denominada por $\chi(\vec{q}, \omega)$ avançada.

As funções $\chi^+(\vec{q}, \omega)$ são analíticas nos semi-planos superior e inferior respectivamente, e da Eq. (3.9) podemos ver que $\chi^+(\vec{q}, \omega)$ é o complexo conjugado de $\chi^-(\vec{q}, \omega)$. Portanto a parte imaginária de $\chi^+(\vec{q}, \omega)$ está relacionada a $\chi^+(\vec{q}, \omega)$ e $\chi^-(\vec{q}, \omega)$ por

$$\text{Im}\chi^+(\vec{q},\omega) = \frac{1}{2i}[\chi^+(\vec{q},\omega) - \chi^-(\vec{q},\omega)] \quad (3.29)$$

com estas considerações, o fator de estrutura (Eq. 3.38) torna-se

$$S(\vec{q}) = -\frac{h}{2i\pi n} \int_0^\infty d\omega [\chi^+(\vec{q},\omega) - \chi^-(\vec{q},\omega)] \quad (3.30)$$

Na Figura 3.1 mostramos o corte e o polo no plano ω da função resposta $\chi(\vec{q},\omega)$ e ainda os contornos de integração que deverão ser considerados pela integral (3.30).

FIGURA 3.1

A figura 3.1 apresenta o corte da função $\chi(\vec{q},\omega)$ associado ao contínuo de excitação elétron-buraco, o polo ω_q dado pelos zeros da Eq. (1.51) e os contornos C^+ e C^- referente aos caminhos de integração das funções $\chi^+(\vec{q},\omega)$ e $\chi^-(\vec{q},\omega)$ respectiva

mente. Assim

$$S(\vec{q}) = -\frac{\hbar}{2i\pi n} \int_{C^+} d\omega \chi^+(\vec{q}, \omega) + \frac{\hbar}{2i\pi n} \int_{C^-} d\omega \chi^-(\vec{q}, \omega) \quad (3.31)$$

Com as devidas precauções, quanto à escolha dos contornos de integração não é necessário considerar a diferença entre χ^+ e χ^-

$$S(\vec{q}) = \frac{\hbar}{2\pi i n} \int_{C^- - C^+} \chi(\vec{q}, \omega) d\omega \quad (3.32)$$

Distorcendo o contorno de integração, (Figura 3.2):

FIGURA 3.2

temos

$$\int_{C^- - C^+} + \int_{C_3} + \int_{C_\infty^+} + \int_{C_\infty^-} = 0$$

o comportamento assintótico ($\omega \rightarrow \infty$) de $\chi(\vec{q}, \omega)$ garante que

$$\int_{C_{\infty}^{+}} = \int_{C_{\infty}^{-}} = 0$$

logo

$$\int_{C^{-} - C_3} = - \int_{C_3}$$

e temos

$$S(\vec{q}) = - \frac{\hbar}{2\pi i n} \int_{C_3} d\omega \chi(\vec{q}, \omega) \quad (3.33)$$

fazendo $\omega \rightarrow i\omega$ temos finalmente

$$S(\vec{q}) = - \frac{\hbar}{\pi n} \int_0^{\infty} d\omega \chi(\vec{q}, i\omega) \quad (3.34)$$

Deste modo escrevemos o Fator de Estrutura Estático em termos da função resposta densidade-densidade calculada ao longo do eixo complexo. Com esta nova forma, do Teorema da Flutuação-Dissipação podemos utilizar a expressão para $\chi(\vec{q}, i\omega)$ em termos das novas coordenadas (ρ, ξ) de $\chi_0(\vec{q}, i\omega)$ (Eq. 3.27), ou seja

$$\chi_0(q, i\omega) \rightarrow \chi_0(\rho, Z) = - \frac{m}{\pi \hbar^2} (1 - \cos \theta) \quad (3.35)$$

onde

$$\rho = \frac{2k_F}{q} = \cos h \xi \sin \theta \quad (3.36)$$

e

$$Z = \frac{2m\omega}{\hbar^2 q} = \sin h \xi \cos \theta \quad (3.37)$$

de modo que

$$d\omega = \frac{\hbar^2 q^2}{2m} \left(\frac{dz}{d\theta} \right) d\theta \quad (3.38)$$

onde

$$z = \frac{\hbar^2 q^2 n}{2m} \sqrt{1 - \frac{\sin^2 \theta}{\rho^2}} \cot \theta \quad (3.39)$$

Com essas mudanças de variáveis e utilizando a relação entre $\chi(\vec{q}, \omega)$ e $\chi_0(\vec{q}, \omega)$ na aproximação de campo médio (Eq.3.20) podemos escrever o fator de estrutura estático como:

$$S(q) = \frac{4}{\pi n^2} \int_0^{\alpha(\rho)} d\theta \left\{ [\rho^2 - \sin^2 \theta]^{1/2} + \frac{\rho^2 \cot^2 \theta}{[\rho^2 - \sin^2 \theta]} \right\} \frac{1 - \cos \theta}{1 + \frac{m}{\pi \hbar^2} \psi(q) (1 - \cos \theta)} \quad (3.40)$$

onde o limite superior da integração $\alpha(\rho)$ é dado por,

$$\alpha(\rho) = \begin{cases} \arcsin\left(\frac{1}{\rho}\right) & \rho > 1 \\ \pi/2 & \rho \leq 1 \end{cases} \quad (3.41)$$

A expressão para $S(q)$ é de fundamental importância em nosso trabalho. De início, é interessante assinalar que a Eq. (3.40) contém uma integral simples em um domínio finito; logo é susceptível a um cálculo numérico bastante preciso.

Como sabemos, o potencial efetivo $\psi(q)$ é dado por

$$\psi(q) = \phi(q) [1 - G(q)] \quad (3.42)$$

onde $G(q)$, na sua versão bidimensional é dado por

$$G(q) = -\frac{1}{n} \int \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^2} \frac{\phi(k)}{\phi(q)} \frac{\vec{k} \cdot \vec{q}}{q^2} [S(\vec{q} - \vec{k}) - 1] \quad (3.43)$$

As Eqs. (3.40) e (3.43), com a relação (3.42), formam o conjunto de equações a serem resolvidas auto-consistentemente. É necessário enfatizar a diferença e simplicidade marcantes, que as transformações consideradas na referência 47 para a função resposta livre no sistema bidimensional descritas no parágrafo anterior, introduziram no cálculo auto-consistente. Observemos que a contribuição devido aos polos de plasmon presentes no fator de estrutura, já está automaticamente incluída e que, à duas dimensões, não é necessário calcular as derivadas da parte real da função dielétrica como expresso pela Eq. (1.54). Com isto eliminou-se uma das equações a serem resolvidas autoconsistentemente, reduzindo-se a apenas duas equações, (3.43) e (3.46). Tal fato permitiu assegurar um tempo de cálculo muito menor e, uma redução no número de iterações necessárias para a convergência do cálculo autoconsistente. A integração na Eq. (3.40) resolvida com método de quadratura de Gauss Legendre estende-se sobre um domínio finito e portanto com elevado grau de precisão.

A partir da Eq. (3.40), é trivial obter o Fator de Estrutura na aproximação de Hartree-Fock. É suficiente tomar $G(q)=1$. Neste caso, o resultado é

$$S_{\text{HFA}}(q) = \begin{cases} \frac{2}{\pi} \sin^{-1}(1/\rho) + \frac{2}{\rho} [1-\rho^2]^{1/2} & \text{se } \rho > 1 \\ 1 & \text{se } \rho < 1 \end{cases} \quad (3.44)$$

A correção de campo local na aproximação de Hubbard pode ser obtida substituindo a Eq. (3.34) para $S_{\text{HFA}}(q)$ na Eq. (3.43) e o resultado depende do potencial "nu" do sistema. A integral é não-trivial e deve ser resolvida numericamente. Este resultado, quando substituído na Eq. (3.40) fornece o fator de

estrutura na aproximação de Hubbard. Como exemplo consideraremos um potencial de interação tal que $F(q) = \frac{1}{\epsilon}$. Neste caso temos um gás de elétrons num plano, imerso no meio de constante dielétrica ϵ com interação $1/r$. Fazendo na Eq. (3.43) $\vec{p} = \vec{q} - \vec{k}$ temos

$$G_H(q) = -\frac{1}{4\pi^2 n} \int_0^\pi d\phi \int_0^{2k_F} p dp \frac{q - p \cos \phi}{q^2 + p^2 - 2pq \cos \phi} [S_{HFA}(p) - 1] \quad (3.45)$$

Mesmo com $F(q) = 1/\epsilon$, a integral na Eq. (3.45) só pode ser resolvida numericamente; no entanto se aproximarmos $q^2 + p^2 - 2pq \cos \phi \approx q^2 + k_F^2$ chegaremos ao resultado

$$G_H(q) = \frac{1}{2} \frac{q}{(q^2 + k_F^2)^{1/2}} \quad (3.46)$$

que neste caso difere muito pouco do resultado numérico⁽⁴²⁾.

Para calcular o fator de estrutura em RPA, como vimos, basta tomar na Eq. (3.40), $G(q)=0$. A integral resultante deve ser resolvida numericamente.

Qualquer um dos resultados aproximados do fator de estrutura pode ser utilizado como partida para o cálculo auto-consistente para obter $G(q)$ na aproximação STLS. Daí prossegue-se com o método iterativo convencional descrito na Seção 2.3.2.

3.1.2 - ENERGIA DE CORRELAÇÃO

A energia de um gás de elétrons é separada, convencionalmente, em duas partes, a energia cinética do sistema sem interação e a energia de correlação e troca E_{cT} que é calculada pelo teorema da energia do estado fundamental⁽¹⁸⁾ e é dada por

$$E_{cT} = \int_0^2 \frac{e^2 E_{int}(\lambda)}{\lambda} d\lambda, \quad (3.47)$$

onde λ é um parâmetro relacionado com a carga eletrônica.

Substituindo a média no estado fundamental da Hamiltoniana de interação do sistema na Eq. (3.47) obtemos, em geral a relação

$$E_{cT} = \frac{1}{2} \int_0^\infty \frac{dq F(qd)}{(2\pi)^2} \int_0^{e^2} [S_\lambda(q) - 1] \frac{\phi_\lambda(q)}{\lambda} d\lambda \quad (3.48)$$

A energia de correlação, em qualquer aproximação é definida como a energia de correlação e troca, menos a energia de troca, que é dada pela expressão (3.48) calculada com $S_\lambda(q)$ na aproximação de Hartree-Fock.

3.1.3 - DISPERSÃO DE PLASMON

Convém mais uma vez enfatizar que a frequência de excitação do plasmon $\omega_p(\vec{q})$ é obtida através dos zeros da função dielétrica, ou equivalentemente dos polos da função resposta $\chi(\vec{q}, \omega)$; assim os modos coletivos do gás de elétrons são dados pela relação

$$1 - \phi(q) [1 - G(q)] \chi_0(q, \omega) = 0 \quad (3.49)$$

conduzindo à

$$1 - \psi(q) \text{Re} \chi_0(q, \omega) = 0 \quad (3.50)$$

e

$$\text{Im} \chi_0(q, \omega) = 0 \quad (3.51)$$

onde consideramos os modos auto-sustentáveis, sem dissipação.

Escalando q em unidades de k_F e ω em unidades de $E_F/\hbar$, e considerando agora as fórmulas explícitas para a função

resposta $\chi_0(q, \omega)$ (Eq. 3.10) obtemos

$$1 - \frac{2\pi\alpha_D}{q^2} F(qd) (1-G(q)) [q - \text{sgn}(\alpha_+) \theta(\alpha_+^2 - 1) (\alpha_+^2 - 1)^{1/2} - \text{sgn}(\alpha_-) \theta(\alpha_-^2 - 1) (\alpha_-^2 - 1)^{1/2}] = 0 \quad (3.52)$$

com

$$\alpha_{\pm} = \pm \frac{\omega}{2q} - q/2 \quad (3.53)$$

e

$$\alpha_D = \frac{r_s}{\sqrt{2} \pi} \quad (3.54)$$

onde r_s é definido como o raio de um círculo cuja área é ocupada por um elétron, em unidades do raio de Bohr efetivo, $a_B = \frac{\hbar^2}{m^* e^2}$ (m^* é a massa efetiva do elétron). Ou seja

$$r_s = \frac{1}{(\pi n)^{1/2} a_B} \quad (3.55)$$

Para $\omega > k + k^2/2$, $\text{Im}\chi_0(q, \omega) = 0$ (ver Eq. 3.11), a condição expressa pela equação (3.50) é reduzida à equação

$$(\alpha_+^2 - 1)^{1/2} - (\alpha_-^2 - 1)^{1/2} = -q(qB(q) + 1) \quad (3.56)$$

onde $B(k)$ é dado por

$$B(k) = [2\pi\alpha_D F(qd) (1-G(q))]^{-1} \quad (3.57)$$

Deste modo, obtemos a expressão (43)

$$\omega_p^2(q) = \frac{q}{2B(q)} \frac{[1 + qB(q)]^2 [4 + 2q^2 B(q) + B^2(q) q^4]}{1 + \frac{qB(q)}{2}} \quad (3.58)$$

que descreve o espectro de excitação de plasmons em um líquido

degenerado quase-bidimensional de elétrons na aproximação de
campo médio.

CAPÍTULO IV

TEORIA DO LÍQUIDO DE ELÉTRONS DEGENERADO NA SUPERFÍCIE DE
FILMES DE HÉLIO LÍQUIDO

4.1 - UM NOVO SISTEMA QUÂNTICO

Nas experiências realizadas no hélio líquido volumétrico ou filmes espessos, como já foi enfatizado anteriormente, os elétrons comportam-se como um sistema clássico por causa da máxima densidade crítica n_c que pode ser depositada na superfície do hélio ($n_c = 10^9 \text{ cm}^{-2}$). Um aumento desta densidade acarreta uma instabilidade eletrohidrodinâmica na superfície⁽⁴⁹⁾. Esta

instabilidade na distribuição uniforme de cargas superficiais em relação a pequenas flutuações em sua densidade, surge quando se considera a influência dos elétrons na relação da dispersão dos modos superficiais, os riplons. Mostra-se que a frequência de riplons com vetor de onda em torno de q_c (q_c é o inverso do comprimento de capilaridade) é consideravelmente diminuída com o aumento da densidade. Para $n > n_c$ a frequência torna-se imaginária, sugerindo que a superfície torna-se instável em virtude das deformações. No entanto para elétrons em filme de hélio (Figura 4.1) a interação de van der Waals entre o hélio e o substrato é incorporada na relação de dispersão de riplons, acarretando um aumento considerável em n_c . A relação de dispersão para as excitações superficiais de He, num filme de hélio de espessura d carregado com uma densidade de elétrons n e adsorvido num substrato de constante dielétrica ϵ_s é^(50,53)

$$\omega_q^2 = q \left\{ \left[\frac{3\alpha}{\rho d^4} + g \right] + \frac{\tau}{\rho} q^2 - \frac{4\pi n^2 e^2}{\rho} q \frac{1 + \delta e^{-2qd}}{1 - \delta e^{-2qd}} \right\} \tanh qd \quad (4.1)$$

onde $\delta = (\epsilon_s - 1) / (\epsilon_s + 1)$, $\rho = 0.145 \text{ g cm}^{-3}$ e $\tau = 0.378 \text{ erg cm}^{-2}$ são a densidade de massa do hélio e a tensão superficial do hélio respectivamente, g é a constante gravitacional e α é a constante de acoplamento para a força de van der Waals entre o dielétrico

FIGURA 4.1 - Esquema do aparato experimental usado para deposição de elétrons em filme de hélio. Elétrons são emitidos pelo aquecimento de um filamento F, no interior de um capacitor plano; o campo elétrico $\vec{E}$ perpendicular mantém os elétrons presos à superfície do hélio líquido.

sólido e o hélio. No limite de hélio volumétrico temos

$$\omega_q^2 = g + \frac{\tau}{\rho} q^2 - \frac{4\pi e^2 n}{\rho} q \quad (4.2)$$

assim

$$n_c = \frac{\tau}{4\pi^2 e^2} g \rho \approx 10^9 \text{ cm}^{-2}. \quad (4.3)$$

No caso de filme fino e substrato metálico temos

$$n_c = \left(\frac{3\alpha}{4\pi e^2} \right)^{1/2} \delta^{-3/2} = 99,2 d^{-3/2} \quad (4.4)$$

Uma análise mais detalhada para o caso de um substrato qualquer está na referência 35. Deste modo, vemos que a variação na espessura do filme na presença de um substrato qualquer, aumenta consideravelmente a densidade crítica n_c de elétrons de positados sobre a superfície do hélio. Recentemente Etz et al. (51) mediram densidades eletrônicas sobre filme de hélio à temperatura de 1.6k, depositado sobre um substrato de hostaphen ($\epsilon_s=3.4$), da ordem de 10^{11} cm^{-2} . Para estas densidades, e tempe raturas de hélio líquido, a energia de Fermi dos elétrons super ficiais é maior do que sua energia térmica. Portanto obtemos neste regime um novo sistema quântico (11). Com o exposto aci ma, vemos claramente que o sistema de elétrons depositados so bre a superfície do hélio líquido adsorvido num substrato qual quer constitui um dos mais ricos sistemas de estudo das proprie dades eletrônicas bidimensionais. Variando a espessura do fil me e a densidade eletrônica podemos obter neste sistema, tanto um comportamento clássico quanto o quântico, e ainda estudar o comportamento do limiar entre os dois regimes.

Recentemente Peeters e Platzman (11,35) obtiveram uma

estimativa da forma e natureza do diagrama de fase (Figura 4.2) do sistema de elétrons sobre filme de hélio líquido adsorvido num substrato qualquer usando um argumento dimensional e a teoria de Kosterlitz-Thouless-Halperin-Nelson (KTHN)⁽⁵²⁾ da fusão para sistemas bidimensionais.

O diagrama da Figura 4.2 foi obtido usando o critério de fusão de Linderman⁽⁵³⁾ que estabelece que a fusão ocorre quando a energia cinética dos sistemas, excede sua energia potencial por uma fração $1/\Gamma$. Então $\Gamma = \langle v \rangle / \langle k \rangle$ determina o diagrama de fase. Para elétrons sobre hélio volumétrico, a teoria de fusão mediada por deslocação (KTHN) estabelece que

$$\Gamma = \frac{(2\pi)^{3/2} \cdot 3^{1/4}}{(c_t/c_o)^2 (1 - c_t^2/c_\ell^2)} \quad (4.5)$$

onde $c_o^2 = e^2/b$ com b a constante de rede, c_t e c_ℓ são as velocidades de som transversal e longitudinal. Usando os valores de c_t e c_ℓ para um sólido bidimensional a $T=0$, Thouless⁽⁵⁴⁾ estimou $\Gamma=79$. Em seguida, Morf⁽³²⁾ mostrou, usando simulações de dinâmica molecular que, calculando a dependência da velocidade de som com a temperatura, o valor experimental $\Gamma = 137$ poderia ser explicado. Um simples argumento dimensional foi, então usado por Peeters e Platzman para obter a dependência de Γ com a espessura do filme, ou seja,

$$\frac{\Gamma(d)}{\Gamma(\infty)} = \frac{[c_t(\infty)/c_t(d)]^2}{1 - [c_t(d)/c_\ell(d)]^2} \quad (4.6)$$

onde $c_t(d)$ e $c_\ell(d)$ são as velocidades de som do sólido de elétrons sobre filmes de hélio. Como $\langle v \rangle$ e $\langle k \rangle$ dependem da densidade e temperatura do sistema e levando em conta a dependência

FIGURA 4.2 - Diagrama de fase para o hlio volumtrico e para o filme de espessura de $100 \text{ \AA}$. O filme est deposi-
tado em dois substratos (safira, $\delta=0.9$ e metal, $\delta=1$).

de Γ com a espessura foi possível determinar o diagrama de fase da Figura 4.2. Neste diagrama de fase para a Cristalização de Wigner as densidades e temperatura estão em unidades de

$$n_c = \frac{4}{\pi a_B^2} \frac{1}{\Gamma^2} \quad (4.7)$$

e

$$T_c = \frac{2e^2}{k_B a_B} \frac{1}{\Gamma^2} \quad (4.8)$$

onde a_B é o raio de Bohr efetivo. Os resultados da Figura 4.2 são para filmes de hélio depositados sobre um substrato do tipo safira ($\delta = 0.9$) e para um substrato metálico ($\delta = 1$), bem como para hélio volumétrico. A linha tracejada $E_F = k_B T$ delimita as regiões de degenerescência do sistema, tal que se $E_F \ll k_B T$, o sistema pode ser considerado clássico, isto é não-degenerado, e no outro limite o sistema pode ser considerado completamente degenerado.

O efeito da espessura no diagrama de fase é marcante. Consideremos a região de baixa temperatura e baixa densidade. Para hélio volumétrico esta região corresponde ao regime clássico enquanto que para filmes isto é verdade apenas se $\delta > 1$ pois sempre um limite clássico existe para $T \rightarrow 0$. Para um substrato metálico ($\delta = 1$) o comportamento é completamente diferente. Mesmo no limite de $T=0$, a baixas densidades, o sistema encontra-se na fase líquida. A medida que a espessura do filme diminui, a região de fase sólida diminui consideravelmente. O resultado mais interessante é que para uma espessura de filme menor que uma certa espessura crítica d_c , que foi estimada ser igual a $60 \text{ \AA}$, a região sólida reduz-se a um único ponto. Neste

caso, dispomos de um novo fluido quântico, formado por elétrons na superfície de filmes de hélio sobre substrato metálico.

Na região I, onde o sistema pode ser tratado classicamente, os efeitos das correlações dos elétrons depositados na superfície do hélio volumétrico e também sobre filme de hélio adsorvido em vários substratos, já foram amplamente discutidos^(19,34). Assim como na região onde o sistema forma um cristal de elétrons clássicos^(35,55). Neste capítulo estudaremos as propriedades estáticas e o espectro de excitação deste sistema na fase líquida, correspondente à região II do diagrama de fase, para várias espessuras de filme, no caso de um substrato metálico e para vários valores de densidade, compatíveis com a aproximação STLS. Os resultados das aproximações RPA e Hubbard também são apresentados, como um caso particular da aproximação STLS.

Para determinar o potencial de interação entre os elétrons sobre a superfície do hélio, devemos resolver a equação de Poisson com as condições de contorno apropriadas⁽⁵⁶⁾. Este potencial, como já frisamos anteriormente, depende fortemente da constante dielétrica do substrato ϵ_s , da constante dielétrica do filme de hélio ϵ , e da espessura do filme d ⁽⁵⁷⁾. O resultado é

$$\Phi(r) = \frac{e^2}{(-\frac{\epsilon}{2})r} - \frac{2\epsilon e^2}{(1+\epsilon)^2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\delta^n \left(\frac{1-\epsilon}{1+\epsilon}\right)^{n-1}}{\sqrt{r^2 + (2nd)^2}} \quad (4.9)$$

cuja transformada de Fourier é do tipo expressa pela equação (3.1)

$$\Phi(q) = \frac{2\pi e^2}{q} F(qd) \quad (4.10)$$

com

$$F(qd) = 2 \left[\frac{1 - \delta \exp(-2qd)}{(1 + \epsilon) - (1 - \epsilon) \delta \exp(-2qd)} \right] \quad (4.11)$$

Daqui em diante, tomaremos a constante dielétrica do hélio ($\epsilon = 1.057$) igual a unidade, e consideraremos um substrato metálico ($\delta = 1$). Neste caso temos,

$$\Phi(r) = e^2 \left[\frac{1}{r} - \frac{1}{[r^2 + 4d^2]^{1/2}} \right] \quad (4.12)$$

e

$$F(qd) = 1 - \exp(-2qd) \quad (4.13)$$

Na Eq. (4.12) o segundo termo surge unicamente da blindagem do substrato. Para pequenas distâncias entre as partículas ($r \ll d$), a blindagem é desprezível e temos conseqüentemente um potencial Coulombiano

$$\Phi(r) = \frac{e^2}{r} + \dots \quad (4.14)$$

Por outro lado, se os elétrons na superfície encontramse muito distantes $r \gg d$, temos

$$\Phi(r) = \frac{2e^2 d^2}{r^3} + \dots \quad (4.15)$$

que implica num potencial essencialmente dipolar. No espaço recíproco, os limites expressos pelas Eqs. (4.14) e (4.15) são obtidos pela análise da função $F(qd)$. Assim, no limite de pequenos comprimentos de ondas, $2qd \gg 1$, $F(qd) = 1$ resultando em

$$\Phi(q) = \frac{2\pi e^2}{q} \quad (4.16)$$

e, no limite oposto,

$$F(qd) = 2qd \quad (4.17)$$

resultando em

$$\Phi(q) = 4\pi e^2 d \quad (4.18)$$

que é independente de q caracterizando assim um potencial di polar. Estes resultados mostram claramente que, variando a es pessa do filme, a interação entre partículas é completamente variada.

4.2 - PROPRIEDADES ESTÁTICAS

Nesta seção discutiremos as propriedades estáticas de um fluido degenerado de elétrons com interação entre partículas dadas pela Eq. (4.12). Neste limite quântico o parâmetro Γ_Q que especifica o sistema é definido como

$$\Gamma_Q = \frac{\langle v \rangle}{E_F} = \frac{(\pi n)^{-1/2}}{a_B} = r_s \quad (4.19)$$

em analogia com o gás de elétrons degenerado tridimensional. O vetor de Fermi pode então ser escrito como

$$k_F = \frac{\sqrt{2}}{r_s a_B} \quad (4.20)$$

Substituindo a Eq. (4.10) com $F(qd)$ dada pela Eq. (4.13) e, no que segue escrevendo q em unidades de k_F e d em unidades de a_B podemos reescrever a Eq. (3.43) como

$$G(q) = - \frac{1}{\pi} \int_0^\infty k dk \int_0^\pi d\phi \frac{(q + k \cos \phi)}{(q^2 + k^2 + 2qk \cos \phi)} \frac{F(|\vec{k} + \vec{q}|d)}{F(qd)} (S(k) - 1) \quad (4.21)$$

onde

$$F(qd) = 1 - \exp\left(-\frac{2\sqrt{2}d}{r_s}q\right) \quad (4.22)$$

No limite de longos comprimentos de onda temos

$$\lim_{q \rightarrow 0} G(q) = -\frac{r_s}{2\sqrt{2}d} \int_0^\infty \left(1 - \exp\left(-\frac{2\sqrt{2}}{r_s}k\right)\right) [S(k) - 1] dk \quad (4.23)$$

neste caso a correção de campo local na origem independe de q , e é proporcional à razão $\frac{r_s}{d}$. Para $d \rightarrow \infty$ temos o resultado $G(0) \rightarrow 0$. No limite de filmes finos temos

$$G(0) = -\int_0^\infty k[S(k) - 1] dk \quad (4.24)$$

ou

$$G(0) = 1 - g(0) \quad (4.25)$$

onde $g(0)$ é a função correlação de pares na origem. Para $q \rightarrow \infty$ temos o resultado usual

$$\lim_{q \rightarrow \infty} G(q) = 1 - g(0) \quad (4.26)$$

ou seja o mesmo limite é obtido, pois, como veremos, neste caso, $G(q)$ tende a um valor constante.

Para obter $G(q)$ na aproximação de Hubbard, basta substituir a expressão de $S(q)$, na aproximação de Hartree-Fock, na Eq. (4.21). O comportamento de $G_H(q)$ na origem é dado pela Eq. (4.23) com $S_{HF}(q)$. No limite de filmes finos e grandes comprimentos de onda podemos resolver a Eq. (4.24) exatamente, neste caso temos

$$\lim_{\substack{d \rightarrow 0 \\ q \rightarrow \infty}} G_H(q) = 1/2 \quad (4.27)$$

É interessante notar a influência da espessura na cor
reção de campo local na aproximação de Hubbard e STLS. À medi
da que a espessura do filme diminui, os efeitos de correlação
tornam-se mais importantes para todos os valores de comprimento
tos de ondas. Para filmes espessos temos o comportamento de um
gás de elétrons bidimensional com interação $1/r$, ou seja $G_H(q)$
aproxima-se do resultado expresso pela Eq. (3.46); a saber,

$$G_H(q) = \frac{1}{2} \frac{q}{(q^2 + 1)^{1/2}} \quad (4.28)$$

Nas figuras (4.3) e (4.4) mostramos o comportamento da
correção de campo local nas aproximações de STLS e Hubbard para
 $r_s = 1$ e 20 ; $d = 20$ (Figura 4.1) e $d = 200$, (Figura 4.2). O efeito
to de blindagem ($r_s \gg d$) é aparente.

O fator de estrutura, Eq. (2.40), em unidades adimensionais
sionais toma a forma

$$S(q) = \frac{2q^2}{\pi} \int_0^{\alpha(q)} \left[\sqrt{1 - \frac{q^2}{4} \sin^2 \theta} + \frac{\cot^2 \theta}{\sqrt{1 - \frac{q^2}{4} \cos^2 \theta}} \right] \times$$

$$\times \frac{(1 - \cos \theta) d\theta}{q + \sqrt{2} r_s F(qd) (1 - \cos \theta) (1 - G(q))} \quad (4.29)$$

No limite de longos comprimentos de onda temos

$$\lim_{q \rightarrow 0} S(q) = \frac{2q}{\pi} I(d, r_s) \quad (4.30)$$

onde

$$I(d, r_s) = \int_0^{\pi/2} \frac{(1 - \cos \phi) d\phi}{(1 + 2\sqrt{2} r_s d (1 - \cos \phi)) \sin^2 \phi} \quad (4.31)$$

FIGURA 4.3 - Correção de campo local para um sistema de elétrons sobre um filme de hélio (substrato metálico). Nas aproximações STLS (linhas cheias) e de Hubbard (linhas tracejadas). A espessura do filme em unidades de a_B é $D = 20$; $R_S = 1$ e 20 .

FIGURA 4.4 - Correção de campo local para um sistema de elétrons sobre um filme de hélio (substrato metálico) nas aproximações STLS (linhas cheias) e de Hubbard (linhas tracejadas). A espessura do filme em unidades de a_B é $D = 200$; $R_S = 1$ e 20 .

Assim, próximo à origem $S(q)$ é linear com q . No limite oposto, temos

$$\lim_{q \rightarrow \infty} S(q) = \frac{2q}{\pi} \int_0^{\sin^{-1}(2/q)} \left\{ \sqrt{1 - q^4/4 \sin^2 \theta} + \frac{\cot^2 \theta}{\sqrt{1 - q^4/4 \cos^2 \theta}} \right\} \times (1 - \cos \theta) d\theta \quad (4.32)$$

ou

$$\lim_{q \rightarrow \infty} S(q) = 1 \quad (4.33)$$

No limite de filme fino, $S(q)$ também é linear com q na origem e tende a 1 quando $q \rightarrow \infty$.

Na Figura 4.5 mostramos o comportamento do fator de estrutura na aproximação de STLS para espessura $d=20$; à medida que r_s aumenta, o fator de estrutura aproxima-se mais rapidamente da unidade; este comportamento não é verificado na RPA. Na Figura 4.6 plotamos $S(q)$, para $d=20$ e 200, e o mesmo r_s . Para $q \geq 0.8 k_F$ as duas curvas coincidem quando $r_s=10$. Para $r_s=20$ as diferenças são mais acentuadas. No entanto, para $q > 2k_F$, as curvas são praticamente indistinguíveis. Na Figura 4.7 apresentamos, o comportamento do fator de estrutura nas aproximações de STLS, Hubbard e RPA para $r_s=10$ e $d=20$. O efeito das correlações de curto alcance é evidente.

A energia do estado fundamental é essencialmente escrita como uma soma da energia cinética e da energia de interação, correspondente aos termos de correlação e troca. A energia de correlação e troca, Eq. (3.48), em unidades de Rydbergs efetivos $1 \text{ Ryd}^* = m^* e^4 / 2 \epsilon^2 \hbar^2$, é dada por:

FIGURA 4.5 - Fator de estrutura para um sistema de elétrons sobre um filme de hélio (substrato metálico) na aproximação STLS. A espessura do filme em unidades do raio de Bohr é $D = 20$; $R_S = 1, 10$ e 20 .

FIGURA 4.6 - Fator de estrutura para um sistema de elétrons sobre um filme de hélio (substrato metálico) na STLS. As espessuras dos filmes são $D=20$ e 200 . Na parte superior o parâmetro $R_s = 10$ e na inferior $R_s = 20$.

FIGURA 4.7 - Fator de estrutura para um sistema de elétrons sobre um filme de hélio (substrato metálico) nas aproximações STLS, RPA e de Hubbard. A espesura do filme, em unidades de a_B , é $D = 20$; $R_s = 10$.

$$E_{CT}(r_s) = \frac{2^{1/2}}{r_s^2} \int_0^{r_s} dr'_s \int_0^\infty [S_{r'_s}(q) - 1] F_{r'_s}(qd) dq \quad (4.34)$$

onde $F_{r_s}(qd)$ é dada pela Eq. (4.25). A energia de correlação, que é a correção em relação à energia obtida na aproximação de Hartree-Fock é dada por

$$E_C = E_{CT} - E_T \quad (4.35)$$

onde

$$E_T(r_s) = \frac{2^{1/2}}{r_s^2} \int_0^{r_s} dr'_s \int_0^\infty [S_{r'_s}^{HF}(q) - 1] F_{r'_s}(qd) dq \quad (4.36)$$

Na Tabela 4.1 mostramos diversos valores de energia de correlação e troca, para vários valores de r_s . Os efeitos das correlações de curto alcance são importantes e verificamos na tabela que as aproximações RPA e de Hubbard superestimam a energia de correlação.

A função correlação de pares que descreve bem as correlações do sistema, como vimos no Capítulo I, é obtida da transformada de Fourier do fator de estrutura $S(q)$. Em unidades adimensionais temos

$$g(r) = 1 + \int_0^\infty k dk J_0(kr) [S(k) - 1] \quad (4.37)$$

onde r está em unidades de k_F^{-1} . Como $g(r)$ mede a probabilidade de se encontrar uma partícula a uma distância r da origem, espera-se que seja sempre positiva.

Na Figura 4.8 mostramos o comportamento da função correlação de pares na aproximação STLS (parte inferior) para

TABELA 4.1 - Energias de correlação nas aproximações STLS, Hubbard e RPA para um gás de elétrons sobre um filme de hélio de espessura D sobre um substrato metálico.

###	D = 20			D = 200			D = 5000		
R_s	$-E_{RPA}$	$-E_{Hub}$	$-E_{STLS}$	$-E_{RPA}$	$-E_{Hub}$	$-E_{STLS}$	$-E_{RPA}$	$-E_{Hub}$	$-E_{STLS}$
1	0.371	0.248	0.208	0.371	0.248	0.208	0.390	0.261	0.210
2	0.307	0.210	0.154	0.307	0.210	0.154	0.322	0.221	0.156
3	0.267	0.186	0.124	0.267	0.186	0.124	0.280	0.195	0.126
4	0.240	0.168	0.104	0.240	0.168	0.104	0.251	0.177	0.106
5	0.219	0.155	0.090	0.219	0.155	0.090	0.299	0.163	0.092
6	0.203	0.144	0.079	0.203	0.145	0.080	0.212	0.151	0.081
7	0.189	0.135	0.071	0.190	0.136	0.072	0.198	0.142	0.073
8	0.178	0.128	0.065	0.179	0.128	0.066	0.187	0.134	0.067
9	0.168	0.121	0.059	0.169	0.122	0.060	0.177	0.128	0.061
10	0.160	0.116	0.055	0.161	0.117	0.056	0.166	0.122	0.056

FIGURA 4.8 - Função correlação de pares para um sistema de elétrons sobre um filme de hélio (substrato metálico) na aproximação STLS (parte inferior) para $D = 200$ e $R_s = 1, 10$ e 20 ; e na STLS, RPA e de Hubbard (parte superior) para $R_s = 10$ e $D = 20$.

$d=200$ e $r_s=1, 10$ e 20 . Na parte superior mostramos para comparação os resultados das aproximações STLS, Hubbard e RPA para $d=20$ e $r_s=10$. Na aproximação de STLS constatamos que, mesmo para $r_s=20$, $g(0) \approx -0,1$. Nas aproximações de Hubbard ($r_s=10$ e $d=20$) $g(0) \approx -3,0$ e em RPA $g(0) \approx -5,0$. Portanto, com estes resultados vemos que o efeito das correções de campo local na função correlação de pares é marcante. Quando se compara a diferença do comportamento na origem da função correlação dos pares entre as aproximações STLS e RPA ou STLS e Hubbard para este sistema e o tratado por Singwi et al ⁽¹⁶⁾, nota-se que esta diferença é mais positiva para o sistema aqui tratado. Estes resultados, vêm reforçar os resultados obtidos por Jonson ⁽⁴²⁾ de que os efeitos das correlações de curto alcance são mais relevantes em duas do que em três dimensões.

Embora não exista uma medida direta da função correlação de pares, Labert e Richards ⁽⁵⁸⁾ fizeram o primeiro teste experimental para $g(r)$ calculados teoricamente para um sistema clássico de elétrons no hélio volumétrico. Eles mediram a desordem local na posição relativa dos elétrons usando técnicas espectroscópicas. Acreditamos que esta experiência possa ser estendida ao gás de elétrons degenerado aqui discutido.

4.3 - ESPECTRO DE EXCITAÇÃO

O espectro de excitação do sistema é obtido diretamente da Eq. (3.58), com

$$B(q) = [2\pi\alpha_D (1 - e^{-2\pi\alpha_D qd}) (1 - G(q))]^{-1} \quad (4.38)$$

com α_D definido pela Eq. (3.54), a saber

$$\alpha_D = \frac{r_s}{\sqrt{2} \pi}$$

Assim, a relação de dispersão em unidades da energia de Fermi é dada por:

$$\omega_p(q) = [1 + qB(q)] \left\{ \frac{q(1 + 1/2 B(q)q^3 + 1/4 B^2(q)q^4)}{2B(q)(1 + \frac{B(q)}{2}q)} \right\}^{1/2} \quad (4.39)$$

Os efeitos das correções de campo local estão diretamente incluídas na relação de dispersão de plasmon através da função $B(q)$. Para $G(q)$ igual a zero, como já frisamos antes, estes resultados reproduzem a relação de dispersão em RPA.

O comportamento assintótico da Eq. (4.38) pode ser facilmente analisado. No limite de longos comprimentos de ondas temos

$$\omega(q) = 2[(1 - G(q))F(qd)] \frac{r_s}{\sqrt{2}} q^{1/2} \quad (4.40)$$

Para $d \rightarrow \infty$ temos $F(qd) = 1$, assim,

$$\lim_{q \rightarrow 0} \omega(q) = 2[(1 - G(q)) \frac{r_s}{\sqrt{2}}]^{1/2} q^{1/2}, \quad (4.41)$$

refletindo o comportamento do gás estritamente bidimensional. Es

te tipo de comportamento foi obtido pela primeira vez por Stern⁽⁵⁹⁾ no estudo da polarizabilidade de um gás de elétrons bidimensional com fundo positivo uniforme e imerso num meio in finito de constante dielétrica ϵ . Para $d \rightarrow 0$ temos

$$\omega(q) = (8d)^{1/2} q \quad (4.42)$$

Assim, para um substrato metálico, no limite de filmes finos, a relação de dispersão de plasmon é linear com q e in depende da densidade. Esta relação de dispersão é do tipo som. Este é um fato decorrente da grande blindagem do substrato que modifica o potencial de interação e obriga ao elétron a intera gir fundamentalmente com a sua imagem.

A Figura 4.9 mostra a dispersão de plasmon na STLS pa ra $d=20$ e 200 , e $r_s=20$. Vemos que os plasmons propagam-se até encontrar o ramo superior do contínuo de excitação de pares elé tron-buraco a um dado vetor de onda q_c , tal que

$$\omega(q_c) = \frac{1}{2} q_c^2 + q_c \quad (4.43)$$

Notemos que o valor de q_c , em torno de $1,25 k_F$, é o mesmo para as duas espessuras de filme consideradas.

Na Figura 4.10 é mostrada a relação de dispersão de plasmon na aproximação RPA, Hubbard e STLS. Observemos que o efeito das correlações é marcante, pois há uma considerável re dução no valor de q_c na aproximação de STLS. Na Figura 4.11 apresentamos a dispersão de plasmon na aproximação de STLS para $d=20$ e $r_s=1, 10$ e 20 . A medida que a densidade diminui temos a propagação de modos coletivos com comprimento de ondas cada vez menores. Na Figura 4.12 temos a relação de dispersão de plas mon na aproximação de STLS para $d=20$ e 200 e $r_s=1, 10$ e 20 . É

FIGURA 4.9 - Espectro de excitação em STLS para $D = 20$ e 200 e $R_s = 20$. Na ordenada, a energia do plasmon está em unidades da energia de Fermi. Observa-se que o comportamento de gás bidimensional é atingido para $q \approx 0,8 k_F$. O efeito da espessura é aparente apenas na origem. A área hachurada representa a região de excitação da contínua de partícula-buraco. O valor de q para o qual não há mais plasmon é $q_c \approx 1,3 k_F$. A curva superior tem um comportamento tipo $q^{1/2}$ na origem, enquanto que a curva inferior tem um comportamento quase linear.

FIGURA 4.10 - Relação de dispersão de plasmon para um sistema de elétrons sobre um filme de hélio (substrato metálico) nas aproximações STLS, RPA e de Hubbard. A espessura do filme, em unidades de a_B , é $D = 20$; $R_s = 10$.

FIGURA 4.11 - Relação de dispersão de plasmon para um sistema de elétrons sobre um filme de hélio (substrato metálico) na aproximação STLS. A espessura do filme, em unidades de a_B , é $D = 20$; $R_s = 1, 10$ e 20 .

FIGURA 4.12 - Relação de dispersão de Plasmon para um sistema de elétrons sobre um filme de hélio (substrato metálico) na aproximação STLS. As espessuras dos filmes, em unidades de a_B , são $D = 20$ e 200 ; $R_s = 1, 10$ e 20 . As abscissas estão em unidades de K_F .

interessante notar que o efeito da espessura é mais pronunciado a medida que a densidade diminui. Os comportamentos linear e proporcional a $q^{1/2}$ são transparentes.

Concluindo, vemos que o efeito da espessura do filme de hélio acima do substrato metálico não é relevante no regime de altas densidades, onde as aproximações RPA e Hubbard e STLS dão resultados confiáveis. No entanto, a medida que a densidade diminui, estes efeitos tornam-se cada vez mais importantes; e os efeitos das correlações de curto alcance devem ser necessariamente incluídos, onde a correlação de pares é muito negativa na origem indicando a *falha* das aproximações RPA e Hubbard neste regime.

CAPÍTULO V

CORRELAÇÕES ELETRÔNICAS EM HETEROJUNÇÕES E
POÇOS QUÂNTICOS DE SEMICONDUTORES

5.1. ESTRUTURAS ARTIFICIAIS DE SEMICONDUTORES

Com o aprimoramento de técnicas de crescimento de cristais como epitaxia por feixe molecular (molecular beam epitaxy-MBE) e deposição de vapor químico organometálico (metalorganic chemical vapor deposition - MOCVD), tornou-se possível a fabricação de estruturas artificiais de semicondutores com variação de composição, geometria de interface e dopagem numa escala de precisão a nível atômico. Estas técnicas permitem o crescimento, camada por camada de um material do tipo B sobre outro, do tipo A, com aproximadamente o mesmo parâmetro de rede, permitindo assim um casamento quase perfeito na interface do material AB. É possível ainda, durante o crescimento, dopar seletivamente o material A ou B. Esta técnica, conhecida como dopagem modulada (MD) foi demonstrada para uma grande variedade de materiais do grupo III-V da tabela periódica. No entanto, a maior parte dos dados experimentais concentram-se na heterojunção GaAs-AlGaAs, onde o silício é preferido como dopante tipo n. Diferentemente da dopagem uniforme, onde o crescimento é feito com um feixe de Si dirigido continuamente sobre a amostra, a dopagem modulada é obtida pela sincronização dos fluxos de Si e Al de modo que apenas a camada de $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ é deliberadamente dopada com impurezas de Si. A Figura 5.1 mostra o diagrama de banda de energia de uma heterojunção GaAs-AlGaAs. A presença de dopagem no AlGaAs e a variação na composição dos materiais dão origem a uma descontinuidade no gap da banda na interface. Esta descontinuidade surge da diferença de gaps entre o GaAs (gap menor) e AlGaAs (gap maior). O potencial na interface é gerado ainda pelas impurezas doadoras que, para manter o nível de Fermi constante através da junção transferem as cargas para a ban-

FIGURA 5.1 - Diagrama de banda de energia de uma heterojunção GaAs-AlGaAs

da de condução do GaAs cuja energia é da ordem de 250 a 300 meV menor do que a energia da banda de condução do $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ para uma concentração variando entre $x=0.19$ a $x=0.29$. Esta transferência de carga provoca campos elétricos internos bastante intensos (10^5 V/cm) que causam um entortamento de banda bastante significativo nas proximidades da interface. O potencial quase-triangular pode confinar os elétrons próximo à interface e produzem efeitos quânticos semelhantes àqueles observados nas camadas de inversão de semicondutores (MOSFET) e em elétrons sobre filmes de hélio líquido a altas densidades. Uma diferença marcante existente entre os elétrons na camada de inversão em dispositivos MOS e nestas heterojunções reside na possível separação espacial dos portadores de carga de suas impurezas doadoras. Tal fato acarreta um aumento da ordem de 1000 na mobilidade dos elétrons nas heterojunções.

Duas heterojunções podem ser combinadas para formar um poço quântico, por exemplo, uma camada fina de GaAs delimitada por duas camadas de AlGaAs. A Figura 5.2 mostra um poço quântico isolado intrínseco formado por um "sanduiche" acima descrito. A origem do poço de potencial é também facilmente entendida a partir da seguinte visão simplificada. Os componentes do poço tem gaps $E_g(1)$ e $E_g(2)$ e espessuras d_1 e d_2 , onde 2 corresponde à camada de AlGaAs e 1 corresponde à camada de GaAs. A diferença no gap de energia é

$$V_o = E_g(2) - E_g(1) \quad (5.1)$$

Esta diferença é dividida em duas partes: uma que aparece através da descontinuidade na borda da banda de condução, que pode ser representada por V_{oc} , e a outra que corresponde à

FIGURA 5.2 - a) diagrama de banda de energia para um poço in
trínstico isolado; b) para um poço dopado; c) pa
ra uma super-rede

descontinuidade da banda de valência(Figura 5.2). A razão desta diferença alocada para a banda de condução e de valência ainda é alvo de controvérsia na literatura, existem vários valores para esta proporção, dentre os quais 85:15 e 60:40, obtidos em experiências óticas tais como fotoluminescência, absorção ótica e eletroreflectância⁽⁶¹⁾. A dopagem modulada, como enfatizado anteriormente provoca o entortamento das bandas dos materiais que constituem o poço (Figura 5.2b)⁽¹⁴⁾. Os elétrons cedidos pelas impurezas possuem movimento livre no material de gap menor ao longo do plano perpendicular à direção de crescimento das camadas, e nesta direção permanecem em estados quantizados em subbandas determinadas pela estrutura do poço. Se muitos poços são combinados em um arranjo regular temos uma super-rede, sistema inicialmente proposto por Esaki e Tsu⁽⁶²⁾ no começo da década de 70 e posteriormente fabricado por Cho e Arthur⁽⁶³⁾, bem como por Esaki e Chang⁽⁶⁴⁾. Cada nível de energia presente no poço isolado combinam-se para na super-rede formar mini-bandas, da mesma maneira que os níveis de energia dos átomos individuais de um cristal combinam-se para formar bandas de energia. A dopagem modulada feita nas super-redes permite a formação de camadas de elétrons e buracos de alta mobilidade no plano perpendicular à direção da super-rede⁽⁶⁵⁾.

Concluindo, vemos que as técnicas MBE e MOCVD permitem a construção de sistemas quase-bidimensionais; sistemas fortemente anisotrópicos que são muito ricos em suas propriedades eletrônicas. Conforme discutido no capítulo III, as propriedades estáticas e dinâmicas de um gás de elétrons confinados a um plano já foram exhaustivamente estudadas. Neste capítulo procederemos à análise da largura finita da camada ele

trônica próximo à heterojunção e em poços quânticos com estrutura do tipo GaAs-AlGaAs nas correlações eletrônicas baseado nas teorias desenvolvidas no capítulo III.

5.2. O GÁS DE ELÉTRONS EM HETEROJUNÇÕES E POÇOS QUÂNTICOS

5.2.1. HETEROJUNÇÕES

Numa heterojunção, como discutido na seção anterior, os elétrons possuem movimento quase livre na direção paralela à interface enquanto permanecem quantizados em um poço de potencial quase-triangular na direção perpendicular.

A interação elétron-elétron neste sistema quase-bidimensional pode ser escrita como

$$V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) = \frac{e^2}{\epsilon} \int dz \int dz' \frac{|\xi(z)|^2 |\xi(z')|^2}{[r^2 + (z - z')^2]^{1/2}} \quad (5.2)$$

onde $\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$ é o vetor bidimensional separando os dois elétrons no plano e $\xi(z)$ é a função de onda envelope do elétron descrevendo a quantização na direção z . Na Eq. (5.2), estamos desprezando o termo devido ao potencial imagem, já que este termo depende da diferença entre as constantes dielétricas dos dois materiais e para o caso de GaAs e AlGaAs são muito próximas. Este termo induz uma correção comprovadamente muito pequena. Para baixas temperaturas, somente a mais baixa sub-banda está ocupada, de modo que tomaremos apenas a função de onda do estado fundamental. A função de onda, em princípio, deve ser determinada pela solução autoconsistente da equação de Schroedinger e da equação de Poisson com condições de contorno apropriadas na interface. Entretanto, cálculos autoconsistentes de Stern e Das Sarma⁽⁶⁰⁾ mostraram que a aproximação variacional de Stern-

Howard⁽⁷⁾ para $\xi(z)$ constitui uma excelente aproximação para a função de onda da mais baixa sub-banda. Esta função variacional, proposta inicialmente para cálculos na camada de inversão, pode ser escrita como

$$\xi(z) = \left(\frac{b^3}{2}\right)^{1/2} z \exp(-bz/2) \quad (5.3)$$

onde b é um parâmetro variacional relacionado com a largura média das cargas próximo à interface e deve ser determinado pela minimização da energia total do sistema para valores dados da densidade eletrônica e densidade de íons. O resultado é

$$b^3 = \frac{48\pi m^* e^2 N^*}{\epsilon \hbar^2} \quad (5.4)$$

onde

$$N^* = N_d + 11/32 N_s \quad (5.5)$$

Na Eq. (5.5), N_d representa a densidade de carga de depleção no GaAs e N_s é a densidade eletrônica bidimensional na camada; m^* é a massa efetiva do elétron. Substituindo a Eq. (5.3) na Eq. (5.2) temos

$$V(r) = \frac{e^2}{\epsilon} \int_0^\infty dq J_0(qr) F(q) \quad (5.6)$$

onde

$$F(q) = \frac{b}{8} \left[\frac{8b^2 + 9bq + 3q^2}{(b+q)^3} \right] \quad (5.7)$$

Assim, a transformada de Fourier do potencial entre elétrons necessária para os nossos cálculos é dada por

$$V(q) = \frac{2\pi e^2}{\epsilon q} F(q) \quad (5.8)$$

que apresenta a mesma forma geral discutida na Eq. (3.1). Observamos que quando $b \rightarrow \infty$, $F(q) \rightarrow 1$, obtendo-se $V(q) = 2\pi e^2/q$, o nosso conhecido resultado estritamente bidimensional. Para $b \rightarrow 0$, temos $F(q) \approx (1+C/q)^{-1}$ resultando em um potencial do tipo logarítmico que representa a interação entre linhas de carga.

5.2.2. POÇOS QUÂNTICOS

Em poços quânticos representados pela Figura 5.2, do mesmo modo, os portadores de carga estão presos na direção perpendicular em um poço quadrado unidimensional de largura d e barreira de potencial V_0 . Se a camada de AlGaAs é espessa e o potencial V_0 é grande, os efeitos de tunelamento são desprezíveis e constitui uma boa aproximação tomar um único poço isolado com barreira de potencial infinita, conforme demonstram algumas experiências de absorção ótica. Neste caso, é suficiente determinar uma largura efetiva do poço na aproximação de barreira infinita de modo que a energia do estado fundamental calculada nesta aproximação coincida com a energia do mais baixo nível em um poço finito. Neste sentido, podemos considerar as funções de onda eletrônica como aquelas de um poço de potencial com barreira infinita. Deste modo, supondo que apenas a mais baixa sub-banda é ocupada podemos escrever

$$\xi(z) = \left(\frac{2}{d}\right)^{1/2} \sin\left(\frac{\pi z}{d}\right) \quad (5.9)$$

A Eq. (5.2) pode ser reescrita como

$$V(r) = \frac{e^2}{\epsilon} \int_0^\infty \frac{J_0(kr)}{k} dk \int_0^\infty \int_0^\infty dz dz' |\xi(z)|^2 |\xi(z')|^2 e^{-k|z-z'|} \quad (5.10)$$

de modo que a transformada de Fourier é facilmente calculada resultando em⁽⁶⁶⁾

$$V(q) = \frac{2\pi e^2}{\epsilon q} H(q) \quad (5.11)$$

onde

$$H(q) = \int_0^\infty dz \int_0^\infty dz' |\xi(z)|^2 |\xi(z')|^2 \quad (5.12)$$

ou explicitamente, pela substituição da Eq. (5.9)

$$H(q) = \frac{3}{u^2 + 4\pi^2} (1 - e^{-u}) + \frac{u}{u^2 + 4\pi^2} - \left[\frac{u^2 - 4\pi^2}{(u^2 + 4\pi^2)^2} (1 - e^{-u}) \right] + \\ + \frac{2}{u} \left[1 - \frac{1}{u} (1 - e^{-u}) \right] \quad (5.13)$$

onde $u = qd$. É interessante analisar o comportamento de $H(u)$ para u pequeno

$$\lim_{u \rightarrow 0} H(u) = 1 - u/5 \quad (5.14)$$

Para $d \rightarrow 0$, temos que $H(u)$ tende para 1 e reproduzimos mais uma vez o comportamento do gás de elétrons com largura zero, ou seja, uma densidade eletrônica representada na direção z por uma função delta. Para poços largos ($d \rightarrow \infty$) obtemos

$$\lim_{d \rightarrow \infty} H(u) = \frac{3}{u} \quad (5.15)$$

de modo que

$$V(q) \approx \frac{6\pi e^2}{\epsilon q^2} \quad (5.16)$$

que nos fornece um potencial do tipo $\log r$.

A seguir, estudaremos as propriedades estáticas e espectro de excitação deste gás de elétrons quase-bidimensional em heterojunções e poços quânticos nas aproximações de RPA, Hubbard e STLS.

5.3. PROPRIEDADES ESTÁTICAS EM HETEROJUNÇÕES E POÇOS QUÂNTICOS

5.3.1. HETEROJUNÇÕES

Como já enfatizamos antes (capítulo III), a forma geral do potencial de um sistema quase bidimensional é

$$V(q) = \frac{2\pi e^2}{q} F(q),$$

onde $F(q)$ é o fator de forma relativo às inclusões de efeitos fora do plano. Assim todo o formalismo desenvolvido no capítulo III aplica-se, exceto quando o potencial efetivo não é estático, aos sistemas quase bidimensionais.

A correção de campo local escalada nas unidades adimensionais definidas no capítulo IV é

$$G(q) = - \frac{1}{\pi} \int_0^\infty k dk \int_0^\pi \frac{d\theta (q + k \cos \theta)}{(q^2 + k^2 + 2qk \cos \theta)^{1/2}} \frac{F(|\vec{q} + \vec{k}|)}{F(q)} (S(k) - 1) \quad (5.17)$$

onde, o fator de forma nas mesmas unidades é dado por:

$$F(q) = \frac{A(r_s)}{8(A(r_s) + \frac{\sqrt{2}q}{r_s})^3} \left\{ 8A^2(r_s) + \frac{9A(r_s)\sqrt{2}q}{r_s} + \frac{6q^2}{r_s^2} \right\} \quad (5.18)$$

onde

$$A(r_s) = \left\{ 48 \left(\frac{\pi n_1}{100} + \frac{11}{32r_s^2} \right) \right\}^{1/3} \quad (5.19)$$

Na Eq. (5.19) consideramos $N_d = n_1 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$, que é a densidade típica de elétrons na camada de depleção do GaAs - $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ e o raio de Bohr efetivo da ordem de $100 \text{ \AA}$ ⁽¹³⁾. No limite de longos comprimentos de ondas temos:

$$\lim_{q \rightarrow 0} G(q) = \alpha q \quad (5.20)$$

onde

$$\alpha = - \frac{1}{2} \int_0^\infty F(q) (S(q) - 1) dq \quad (5.21)$$

No limite oposto, $q \rightarrow \infty$, temos

$$\lim_{q \rightarrow \infty} G(q) \rightarrow 1 \quad (5.22)$$

como era esperado.

Na Figura 5.3 mostramos o comportamento da função correção de campo local $G(q)$ (parte inferior) na aproximação de STLS para r_s variando de 1 a 6. Observa-se que quanto mais baixa a densidade (r_s maior), os efeitos introduzidos no potencial efetivo $\psi(q)$ são maiores. Na parte superior é mostrado, para valores $r_s = 1$ e $r_s = 6$, correção de campo local $G(q)$ na aproximação STLS e de Hubbard. É interessante notar que praticamente a aproximação de Hubbard é insensível às variações de densidade no sistema.

O fator de estrutura $S(q)$ é dado por:

$$S(q) = \frac{2q^2}{\pi} \int_0^{\alpha(q)} \left\{ \left[1 - \frac{q^2}{4} \sin^2 \theta \right]^{1/2} + \cot^2 \theta \left(1 - \frac{q^2}{4} \sin^2 \theta \right)^{-1/2} \right\} x \left[\frac{(1 - \cos \theta) d\theta}{q + \sqrt{2} r_s (1 - G(q)) (1 - \cos \theta) F(q)} \right] \quad (5.23)$$

FIGURA 5.3 - Correção de campo local (parte superior) na aproximação STLS (linhas tracejadas) e Hubbard (linhas cheias) para uma heterojunção, para $r_s = 1$ e 6. Na parte inferior $S(q)$ é plotado apenas na aproximação STLS para r_s , de 1 a 6.

com $\alpha(q)$ definido pela Eq. (3.41). No limite de longos comprimentos de onda temos

$$S(q) \simeq \frac{\sqrt{2}}{\pi r_s} q^2$$

Na Figura 5.4 mostramos o comportamento do fator de estrutura $S(q)$ nas aproximações STLS e RPA para $r_s = 1$ e $r_s = 6$ (parte inferior). Na parte superior mostramos o comportamento de $S(q)$, para $r_s = 6$, nas três aproximações consideradas. A linha tracejada refere-se ao caso estritamente bidimensional.

O fator de estrutura que está relacionado à função correlação de pares pela transformada de Fourier da Eq. (1.31)

$$g(r) = 1 + \frac{1}{n} \int d\vec{k} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} [S(\vec{k}) - 1] \quad (5.24)$$

fornece-nos informações acerca da validade da aproximação considerada. Nota-se que, para $r = 0$, $g(0)$ é tão menor quanto maior for a área acima da curva $S(q)$. Portanto a função correlação dos pares para heterojunção apresenta resultados semelhantes aos mostrados no capítulo IV para o sistema de elétrons sobre hélio, se compararmos as características de $g(r)$ na origem para as diversas aproximações. Isto é, a função correlação dos pares $g(r)$ nas aproximações de Hubbard e RPA é negativa na origem mesmo para $r_s = 1$, enquanto que na aproximação STLS é apenas ligeiramente negativa para $r = 0$, mesmo para $r_s = 6$. Isto vem reforçar mais uma vez a superioridade da aproximação STLS sobre as outras duas consideradas. Podemos notar ainda, pela Figura 5.4, que $g(0)$ para o sistema estritamente bidimensional, é mais negativa do que para a heterojunção.

Na Tabela 5.1 apresentamos a energia de troca (Hartree-

FIGURA 5.4 - Fator de estrutura para uma heterojunção nas aproximações STLS, Hubbard e RPA (parte superior) para $r_s = 6$ e na STLS e RPA (parte inferior) para $r_s = 1$ e 6. A linha tracejada é o fator de estrutura para um sistema bidimensional na aproximação RPA (parte superior)

Fock) e as energias de correlação nas três aproximações para a heterojunção $\text{GaAs-Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ bem como para um sistema estritamente bidimensional. Este sistema é constituído de um plano de elétrons, neutralizado por um fundo positivo uniforme, com interação $1/r$ e imerso num meio dielétrico infinito de constante dielétrica igual a da heterojunção aqui considerada. Observamos na Tabela 5.1, que os efeitos das correlações são mais pronunciadas no sistema bidimensional, do que no quase bidimensional. Este efeito está inteiramente relacionado ao alcance da interação que no caso bidimensional proíbe a presença de um elétron nas vizinhanças de outro. No caso quase bidimensional a blindagem eletrônica é mais acentuada e a repulsão coulombiana é reduzida resultando num menor buraco de correlação e troca.

5.3.2. POÇOS QUÂNTICOS

Ao contrário do sistema de elétrons numa heterojunção, onde a largura finita da função de onda é diretamente dependente da densidade, no caso de poços quânticos, temos como parâmetros do sistema de elétrons, a sua densidade e a largura do poço onde estão confinados.

A função correção de campo local, neste caso, é dada pela Eq. (5.17)

$$G(q) = -\frac{1}{\pi} \int_0^\infty k dk \int_0^\pi \frac{d\theta (q+k\cos\theta)}{(q^2+k^2+2kq\cos\theta)^{1/2}} \frac{H(|\vec{q}+\vec{k}|d)}{H(qd)} (S(k)-1) \quad (5.25)$$

onde o fator de forma $H(q)$, escalado nas unidades adimensionais, é dado pela Eq. (5.13) com

$$u = 2\sqrt{2} qd/R_s, \quad (5.26)$$

TABELA 5.1 - Energia de troca e energia de correlação para um gás de elétron na camada de inversão de uma heterojunção GaAs-Al_xGa_{1-x}As nas aproximações STLS, Hubbard e RPA. As energias estão expressas em Ryd*. (1Ryd* = 5.25mev)

R _s	HETEROJUNÇÃO				SISTEMA BIDIMENSIONAL (M. Jonson)			
	-E _{TRO}	-E _{RPA}	-E _{HUB}	-E _{STLS}	-E _{TRO}	-E _{RPA}	-E _{HUB}	-E _{STLS}
1	0,710	0,079	0,062	0,061	1,200	0,397	0,272	0,211
2	0,396	0,089	0,074	0,071	0,600	0,325	0,228	0,155
3	0,282	0,090	0,074	0,069	--	--	--	--
4	0,221	0,090	0,073	0,065	0,300	0,252	0,181	0,108
5	0,183	0,089	0,072	0,061	--	--	--	--
6	0,155	0,088	0,070	0,056	--	--	--	--
8	0,122	0,087	0,068	0,051	0,150	0,188	0,137	0,066
10	0,100	0,086	0,066	0,046	--	--	--	--
14	0,074	0,081	0,064	0,040	--	--	--	--

onde d é a largura do poço em unidades do raio de Bohr efetivo a_β^* . No limite de longos comprimentos de onda temos

$$\lim_{q \rightarrow 0} G(q) = \beta q \quad (2.27)$$

onde

$$\beta = -\frac{1}{2} \int_0^\infty H(kd) (S(k)-1) dk \quad (2.28)$$

apresentando o mesmo tipo de comportamento de $G(q)$ na heterojunção.

Na Figura 5.5 apresentamos a correção de campo local nas aproximações STLS (linha cheia) e Hubbard (linha pontilhada) para $r_s = 1$ (parte inferior) e $r_s = 6$ (parte superior). As larguras do poço são $d = 0,1$ e $d = 4$ para $r_s = 1$; $d = 0,2$ e $d = 10$ para $r_s = 6$. Observemos que o efeito da largura é mais marcante para altas densidades. O fator de estrutura é dado pela Eq. (5.21) simplesmente trocando $F(q)$ por $H(q)$. No limite de longos comprimentos de onda, $H(q) \rightarrow 1 - q/5$, de modo que o comportamento de $S(q)$ na origem é do mesmo tipo do comportamento de $S(q)$ na heterojunção; Eq. (5.21). Na Figura 5.6 plotamos o fator de estrutura para um gás de elétrons num poço quântico nas três aproximações aqui consideradas (parte superior) para $r_s = 6$ e $d = 0,2$. Na parte inferior é mostrado o efeito da largura do poço na aproximação STLS para $r_s = 6$ e $d = 10$. Para uma largura do poço fixa e várias densidades, o comportamento de $S(q)$ é semelhante ao da heterojunção.

Na Tabela 5.2 apresentamos o valor da energia de troca (Hartree-Fock) e das energias de correlação nas aproximações STLS, Hubbard e RPA para vários valores de r_s e largura do poço. A energia de correlação na aproximação RPA para um sistema

FIGURA 5.5 - Correção de campo local para um sistema de elétrons num poço quântico de espessura d nas aproximações STLS (linhas tracejadas) e Hubbard para $r_s = 1$; $d = .1$ e 4 (parte superior) e $r_s = 6$; $d = .2$ e 10 (parte inferior). d é escalado em unidades de raio de Bohr efetivo

FIGURA 5.6 - Fator de estrutura para um sistema de elétrons num poço quântico nas aproximações STLS, Hubbard e RPA (parte superior) para $r_s = 6$ e $d = .2$ e na STLS (parte inferior) para $r_s = 6$; $d = 0,2$ e 10

TABELA 5.2 - Energia de troca e energias de correlação para um gás de elétrons num poço quântico, nas aproximações STLS, Hubbard e RPA. As energias estão expressas em Ryd*. (1 Ryd* = 5.25mev)

R_S	$-E_{TRO}$	$-E_{RPA}$	$-E_{HUB}$	$-E_{STLS}$	$-E_{RPA}$ (BI)	D
1	1,181	0,382	0,276	0,218	0,397	0,01
2	0,595	0,310	0,220	0,158	0,325	
3	0,398	0,267	0,192	0,126	0,275	
4	0,299	0,241	0,174	0,106	0,252	
5	0,239	0,223	0,159	0,092	0,234	
1	1,067	0,302	0,229	0,201	--	.1
2	0,561	0,266	0,197	0,151	--	
3	0,381	0,239	0,176	0,123	--	
4	0,289	0,219	0,162	0,104	--	
5	0,233	0,204	0,149	0,091	--	
1	0,825	0,159	0,126	0,138	--	.5
2	0,475	0,171	0,132	0,124	--	
3	0,336	0,168	0,128	0,106	--	
4	0,261	0,161	0,124	0,093	--	
5	0,213	0,156	0,118	0,083	--	
1	0,672	0,086	0,064	0,085	--	1.
2	0,413	0,116	0,094	0,099	--	
3	0,301	0,123	0,096	0,091	--	
4	0,234	0,124	0,096	0,082	--	
5	0,197	0,123	0,095	0,075	--	

de elétrons num plano e interação $1/r$ também é mostrada para comparação. À medida que a espessura do poço diminui, a energia de correlação aproxima-se mais da energia de correlação do gás de elétrons bidimensional. Mais uma vez constatamos que o efeito das correlações é mais importante num sistema estritamente bidimensional do que num quase-bidimensional. Para r_s fixo vemos que a energia de correlação aproxima-se de zero à medida que a largura do poço aumenta.

5.4. ESPECTRO DE EXCITAÇÕES DOS ELÉTRONS EM HETEROJUNÇÕES E POÇOS QUÂNTICOS

5.4.1. HETEROJUNÇÕES

A relação de dispersão, dada pelos polos da função resposta densidade-densidade, para um gás de elétrons numa heterojunção é

$$\omega_p(q) = (1+B(q)q) \left\{ \frac{q}{2B(q)} \frac{1 + \frac{1}{2} B(q)q^3 + \frac{1}{4} B(q)^2 q^4}{(1 + \frac{B(q)}{2} q)} \right\}^{1/2}, \quad (5.29)$$

onde

$$B(q) = \frac{2\pi\alpha_D}{(1-G(q)F(q))} \quad (5.30)$$

No limite de longos comprimentos de onda temos

$$\lim_{q \rightarrow 0} F(q) = 1 - \frac{15\sqrt{2}}{8r_s F(r_s)} q \quad (5.31)$$

Portanto,

$$B(q) = \frac{2\pi\alpha_D}{1 - G(q)} \left(1 + \frac{15\sqrt{2}}{8r_s F(r_s)} q \right) \quad (5.32)$$

Assim

$$\lim_{q \rightarrow 0} \omega_p(q) \simeq \frac{\sqrt{2}}{4r_s} (q^{1/2} + (\frac{15\sqrt{2}}{8r_s F(\ell_s)} + \sqrt{2} r_s) q^{3/2}) \quad (5.33)$$

Na Figura 5.7 mostramos a relação de dispersão para elétrons na camada de inversão de uma heterojunção GaAs-Al_xGa_{1-x}As para $r_s = 6$ e $r_s = 1$ na aproximação STLS. O ramo superior do contínuo de excitação elétron-buraco também é apresentado. Observa-se, como esperado, uma redução marcante no valor de q_c quando a densidade é aumentada. Na Figura 5.8 plotamos a relação de dispersão para $r_s = 6$ nas aproximações STLS, Hubbard e RPA. O efeito das correlações de curto alcance é evidente.

5.4.2. POÇOS QUÂNTICOS

A relação de dispersão para um sistema de elétrons num poço quântico é dada pela Eq. (5.29) com

$$B(q) = \frac{2\pi\alpha_D}{1-G(q)H(qd)} \quad (5.34)$$

No limite de longos comprimentos de onda temos;

$$\lim_{q \rightarrow 0} H(q) \simeq 1 - qd/5, \quad (5.35)$$

portanto,

$$\lim_{q \rightarrow 0} \omega_p(q) = \frac{\sqrt{2}}{4r_s} (q^{1/2} - (0,2d - \sqrt{2} r_s) q^{3/2}) \quad (5.36)$$

Vemos que gerando $q \rightarrow 0$ ambas as relações de dispersão, para a heterojunção e para o poço quântico, têm o mesmo comportamento $q^{1/2}$ relativo do gás de elétrons bidimensional⁽⁵⁹⁾. O

FIGURA 5.7 - Dispersão de plasmon para elétrons na camada de inversão numa heterojunção, na aproximação STLS para $r_s = 1$ e 6. O ramo superior do contínuo de excitações partícula-buraco também está plotado.

FIGURA 5.8 - Dispersão de plasmon para elétrons na camada de inversão de uma heterojunção nas aproximações STLS, Hubbard e RPA para $r_s = 6$

fator de forma faz-se presente somente a partir do segundo termo da expansão, como pode ser visto nas Eqs. (5.33) e (5.34).

A Figura 5.9 apresenta a relação de dispersão para um gás de elétrons num poço quântico de largura d , na aproximação STLS para $r_s = 6$ e larguras $D = 0,2$ e $D = 10$. A Figura 5.10 é a mesma que a anterior para valores de $r_s = 1$ e $d = 0,1$ e 4 . Na Figura 5.11 é mostrada a dispersão do plasmon nas aproximações STLS, Hubbard e RPA para $r_s = 1$ e $d = 0,1$. É relevante o efeito da espessura do poço no espectro de excitação do gás de elétrons. Um acréscimo na espessura implica num decréscimo na energia de excitação. Observa-se também um considerável aumento no valor de q_c quando a densidade do sistema diminui.

Como já foi observado antes, para larguras de poços $d \ll 1$, os resultados da energia de correlação aproximam-se de valores obtidos para um gás de elétrons bidimensional. Este efeito também é notado na relação de dispersão. Para espessura $d = 0,2$ a relação de dispersão é praticamente idêntica à daquele sistema. À medida que d aumenta, o efeito quase-bidimensionalidade torna-se presente, resultando numa redução do espectro de excitação do sistema. Para densidades altas (Figura 5.10) esta redução é menor do que à densidades baixas (Figura 5.9). Este comportamento também é verificado para o caso de elétrons na camada de inversão de uma heterojunção, reforçando os resultados obtidos por Jonson para o caso de elétrons na camada de inversão em MOSFET.

FIGURA 5.9 - Relação de dispersão de plasmon para elétrons num poço quântico na aproximação STLS para $r_s = 6$; $d = 0,2$ e 10 .

FIGURA 5.10 - Relação de dispersão de plasmon para elétrons num poço quântico, na aproximação STLS para $r_s = 1$ e $d = 0,2$ e 4 (linha cheia).

FIGURA 5.11 - Relação de dispersão de plasmon para elétrons num poço quântico nas aproximações STLS, Hubbard e RPA para $r_s = 1$ e $d = .1$

CAPÍTULO VI

CONCLUSÕES

A teoria de muitos corpos, aplicada ao estudo do gás de elétrons tem uma longa história. Inicialmente usada com vistas ao líquido de elétrons de condução em metais mapeados pelo modelo "jellium" (elétrons interagindo em um fundo positivo uniforme), teve o interesse renovado pela descoberta de novos sistemas, onde este modelo representa fielmente a realidade experimental. Entre estes novos sistemas surgidos, uma grande parte pode ser descrito pelo conhecido plasma de uma componente (OCP) no regime clássico, enquanto que outros podem ser descritos no regime quântico a temperatura zero.

Neste trabalho preocupamo-nos em estudar o comportamento de um sistema de partículas com interação de longo alcance em ambos os regimes, clássico e quântico degenerado. Para isto utilizamos a formulação dielétrica da Teoria de Muitos Corpos que tem sido aplicada com sucesso ao gás de elétrons a densidades metálicas, a sistemas bosônicos com interação tanto de curto, quanto de longo alcance e a líquidos clássicos. O fato de que esta teoria poderia ser aplicada com sucesso aos sistemas bidimensionais aqui tratados confirmam as nossas expectativas. Realmente, a teoria STLS conduz a um sensível aprimoramento das correlações de curto alcance nos sistemas quando comparada às aproximações de Hubbard, que leva em conta apenas as correlações de troca de buracos, e RPA que despreza qualquer correlação de curto alcance.

No caso clássico, a aproximação STLS produz uma acentuada melhoria nos resultados de RPA clássica que não incorpora correlação de curto alcance entre as partículas.

Nos sistemas eletrônicos formado por heterojunções e poços quânticos a introdução da largura finita da camada eletrô

nica, embora sem diferença com o sistema estritamente bidimensional para grandes distâncias entre os portadores de carga, torna o potencial menos singular a pequenas distâncias comparadas com a extensão da função de onda na direção perpendicular ao plano de carga. Confirmamos os resultados de Jonson de que as aproximações RPA e Hubbard funcionam "pior" em duas dimensões do que em três.

Tratamos pela primeira vez estes sistemas quânticos em três aproximações, RPA, Hubbard e a teoria autoconsistente STLS. Concluimos que para baixas densidades é necessário ir além de RPA e Hubbard para descrever corretamente os efeitos de muitos corpos do sistema.

Desenvolvemos nesta tese um método eficiente de tratar o fator de estrutura estático do sistema bidimensional pela continuação analítica da função resposta densidade-densidade para todas as teorias que incluam uma correção de campo local estática. As transformações de Ioriatti-Isihara permitem uma nova maneira de escrever $S(q)$ evitando uma criteriosa separação para as contribuições de plasmon e do contínuo da excitação elétron-buraco.

No sistema clássico de díplons aqui tratado, nas aproximações STLS e RPA, obtivemos o fator de estrutura estático, energia de correlação e relação de dispersão. Ficou evidente de nossos cálculos a superioridade da aproximação STLS para baixas densidades sobre a RPA. No limite de altas densidades, $\Gamma \ll 1$ vimos que as aproximações STLS e RPA não diferem significativamente. Mostramos também como as propriedades deste sistema modificaram-se como função do tipo de substrato usado bem como da espessura do filme de hélio. Para qualquer substrato a

relação de dispersão dos díplons é do tipo som no limite de filmes finos e do tipo plasmon bidimensional para filmes espessos. O efeito do substrato neste sistema também se reflete na energia de correlação. Esta no limite de filme espesso tende a valores constantes diferentes, dependendo do tipo de substrato "visto" pelos íons.

Para o sistema de elétrons sobre filmes de hélio depositado num substrato metálico calculamos suas propriedades estáticas e dinâmicas (relação de dispersão) nas três aproximações; STLS, RPA e Hubbard. Mais uma vez constatamos a superioridade da aproximação STLS sobre as aproximações de Hubbard e RPA no regime de baixas densidades, conforme atestam os comportamentos do fator de estrutura e função correlação dos pares. Notamos que o efeito da espessura de filme é mais pronunciado no regime de baixas densidades $r_s \gg 1$. Os efeitos do substrato, não mostrados neste trabalho, foram calculados e verificamos que neste regime de densidades não são significativos. No entanto, na aproximação RPA, quando considerados no regime de baixas densidades ($r_s \ll 1$), estes efeitos tornam-se marcantes. O espectro de excitação apresenta dois comportamentos no limite de longos comprimentos de onda. No limite de filmes finos a relação de dispersão é do tipo som, enquanto que no limite oposto, reflete as propriedades do sistema de elétrons sobre o hélio volumétrico. Na região de densidades $r_s \leq 30$ não observamos uma redução no valor de q_c para espessuras diferentes. O comportamento de elétrons sobre hélio volumétrico também é notado nos cálculos da energia de correlação; os nossos resultados, para $d \geq 5000$ concordam exatamente com aqueles obtidos por Jonson no caso do gás de elétrons estritamente bidimensional.

Os resultados obtidos por Jonson no cálculo das propriedades estáticas e dinâmicas de um gás de elétrons na camada de inversão num MOSFET foram totalmente confirmados por nós, quando calculamos estas mesmas propriedades para um gás de elétrons na heterojunção GaAs - $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, isto é, os efeitos das correlações de curto alcance, apesar de pronunciados, são menos marcantes para este sistema do que para o estritamente bidimensional; observamos ainda uma redução no espectro de excitação do gás de elétrons quase bidimensionais, devido ao enfraquecimento do potencial, quando este sistema é comparado com o estritamente bidimensional.

Para o gás de elétrons num poço quântico, vimos que os resultados do sistema bidimensional foram obtidos no limite de largura $d \ll 1$. A medida que a largura do poço aumenta, isto é, quando os efeitos quase bidimensionais tornam-se mais marcantes, ocorre uma redução no espectro de excitação do sistema. Notamos ainda, que a energia de correlação aproxima-se de zero com o aumento da largura do poço.

Finalmente, sugerimos alguns problemas para trabalhos futuros:

- . Aplicação da aproximação de campo autoconsistente no cálculo das propriedades estáticas e dinâmicas de um gás de elétrons em camadas (aplicação às super-redes).
- . Introdução de blindagem na energia de ligação de impurezas, além da RPA, em poços quânticos.
- . Tratamento do gás de elétrons bidimensional polarizado na STLS.

- . Obtenção dos efeitos do substrato nas propriedades estáticas e dinâmicas de um gás de elétrons degenerado à baixas densidades.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

1. Proceedings of VI International Conference on the Electronic Properties of two-dimensional systems, T. Ando, ed., Surf. Sci. 170 (1986).
2. K. von KLITZING; G. DORDA; M. PEPPER. Phys. Rev. Lett. 45, 494 (1980).
3. E.Y. ANDREI. Phys. Rev. Lett. 52, 1449 (1984).
4. C.C. GRIMES e G. ADAMS. Phys. Rev. Lett. 42, 795 (1979).
5. E. ABRAHAMS; P.W. ANDERSON; D.C. LICCIARDELLO; T. V. RAMA KRISHNAN. Phys. Rev. Lett. 42, 673 (1979).
6. N.F. MOTT; M. PEPPER; S. POLLITT; R.H. WALLIS; C.J. ADKINS. Proc. R. Soc. A 345, 169 (1975).
7. T. ANDO; A.B. FOWLER; F. STERN. Rev. Mod. Phys. 54, 437 (1982).
8. C.C. GRIMES. Surf. Sci. 73, 379 (1978).
9. Yu. P. MONARKHA e V.B. SHIKIN. Sov. J. Low. Temp. Phys. 8, 279 (1982).
10. N. STUDART e O. HIPOLITO. Rev. Bras. Fís. 16, 194 (1986).
11. F.M. PEETERS e P.M. PLATZMAN. Phys. Rev. Lett. 50, 2021 (1983).
12. Yu. P. MONARKHA. Sov. J. Low. Temp. Phys. 8, 571 (1982).
13. M.J. KELLY e R.J. NICHOLAS. Rep. Prog. Phys. 48, 1699 (1985).
14. H.L. STÖRMER. Surf. Sci. 142, 130 (1984).

15. L. ESAKI. In Proc. 17 Int. Conf. on Phys. Semic., J. D. Chadi and W.A. Harrison, eds. p. 473, Springer-Verlag (1985).
16. K.S. SINGWI; M.P. TOSI; R.H. LAND e A. SJÖLANDER. Phys. Rev. 176, 589 (1968).
17. S. ICHIMARU. Basic Principles of Plasma Physics (Benjamin, N.York (1973)).
18. D. PINES e P. NOZIERES. The Theory of Quantum Liquids (Benjamin, N. York, 1966).
19. N. STUART e O. HIPOLITO. Phys. Rev. A 19, 1790 (1979); A 22, 2860 (1980).
20. R. CALINON; K.I. GOLDEN; G. KALMAN; D. MERLINI. Phys. Rev. A 20, 329 (1979); 20, 336 (1979).
21. N.K. AILAWADI. Phys. Rep. 57, 241 (1980).
22. S. ICHIMARU. Rev. Mod. Phys. 54, 1017 (1982).
23. M. GELL-MANN e K.A. BRUECKNER. Phys. Rev. 106, 364 (1957).
24. J. HUBBARD. Proc. R. Soc. A, 243, 366 (1957).
25. G.D. MAHAN. Many-Particle Physics, Plenum, N.Y. (1981).
26. M.W. COLE e M.H. COHEN. Phys. Lett. 23, 1238 (1969).
27. V.B. SHIKIN. Sov. Phys. JETP 31, 936 (1970).
28. M.W. COLE. Rev. Mod. Phys. 46, 451 (1974).
29. W.T. SOMMER. Phys. Rev. Lett. 12, 271 (1964).

30. C.C. GRIMES e T.R. BROWN. Phys. Rev. Lett. 32, 280 (1974).
31. O. HIPOLITO; J.R.D. FELICIO; G. FARIAS. Solid St. Comm. 26, 365 (1978).
32. R.H. MORF. Phys. Rev. Lett. 43, 931 (1979).
33. A.M. GABOVICH; L.G. II'CHENKO e E.A. PASHITSKII. Sov. Phys. JETP 54, 1089 (1981).
34. J.P. RINO; N. STUDART e O. HIPOLITO. Phys. Rev. B 29, 2584 (1984).
35. F.M. PEETERS. Phys. Rev. 30, 159 (1984).
36. B. MARAVIGLIA. Phys. Lett. A 25, 99 (1969).
37. Yu. P. MONARKHA. Sov. J. Low.Temp. Phys. 8, 571 (1982).
38. Yu. P. MONARKHA; S.S.SOKOLOV. Sov. J. Low. Temp. Phys. 7, 22 (1981).
39. Yu. P. MONARKHA e Yu.Z. KOVDRYA. Sov. J. Low. Temp. Phys. 8, 107 (1982).
40. V.I. KARAMUSHKO; Yu. Z. KOVDRYA; F.F. MENDE e V.A. NIKOLAENKO. Sov. J. Low. Temp. Phys. 8, 109 (1982).
41. Yu. P. MONARKHA. Sov. J. Low. Temp. Phys. 1, 258 (1975).
42. M. JONSON. J. Phys. C 9, 3055 (1976).
43. J.S. THAKUR; K.N. PATHAK. J. Phys. E 16, 6551 (1983).
44. N. IWAMOTO; D. PINES. Phys. Rev. B 29, 3924 (1984).
45. N. IWAMOTO; E. KROTSCHECK e D. PINES. Phys. Rev. B 29, 3936 (1984).

46. L. IORIATTI. Comunicação particular.
47. L. IORIATTI, A. ISIHARA. Z. Phys. B 44, 1 (1981).
48. A. ISIHARA e L. IORIATTI. Phys. Rev. B 22, 214 (1980).
49. L.P. GORKOV e D.M. CHERNIKOVA. JETP Lett. 18, 68 (1973).
50. H. IKEZI e P.M. PLATZMAN. Phys. Rev. B 23, 1145 (1981).
51. H. ETZ; W. GOMBERT; W. IDSTEIN e P. LEIDERER. Phys. Rev. Lett. 53, 2567 (1984).
52. B. HALPERIN e D. NELSON. Phys. Rev. B 19, 2457 (1979).
53. F. LINDEMAN. Z. Phys. 11, 609 (1910).
54. D.J. THOULESS. J. Phys. C 11, L 189 (1978).
55. L. BONSALL e A.A. MARADUDIN. Phys. Rev. B 15, 1959 (1977).
56. W.R. SMYTHE. Static and Dynamical Electricity - Mc Graw Hill, N. York, p. 192 (1950).
57. J.P. RINO. em "Estudo das Correlações em Líquidos Clássicos". Tese de doutoramento, IFQSC-USP (1983).
58. D.K. LAMBERT e P.L. RICHARDS. Phys. Rev. Lett. 44, 1427 (1980).
59. F. STERN. Phys. Rev. Lett. 18, 546 (1967).
60. F. STERN e S. DAS SARMA. Phys. Rev. B 30, 840 (1984).
61. R.C. MILLER; D.A. KLEIMMAN e A.C. GOSSARD. Phys. Rev. B 29, 7085 (1984).

- 62. L. ESAKI e R. TSU. IBM Research Note RC-2418 (1984).
- 63. A.Y. CHO e J.R. ARTHUR. Progress in Solid State Chemistry, ed. J.O. Mc Caldin e G. Samorjwi (Pergamon), Vol. 10, p. 157 (1976).
- 64. L. ESAKI e L.L. CHANG. Thin Solid Films 36, 285 (1976).
- 65. K. PLOOG e G.H. DOHLER. Adv. Phy. 32, 285 (1983).
- 66. R.J. PRICE. Phys. Rev. B 30, 2234 (1984).