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

EFEITOS DE MUITOS CORPOS EM
SUPERREDES SEMICONDUTORAS
E SEMICONDUTORES POLARES

Wilson Barbosa da Costa

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 - 1992

**IFSC UNIVERSIDADE
DE SÃO PAULO**
Instituto de Física e Química de São Carlos

Fone (0162) 72-6222
Fax (0162) 72-2218

Av. Dr. Carlos Botelho, 1465
Caixa Postal 369
CEP 13560.970 - São Carlos - SP
Brasil

MEMBROS DA COMISSÃO JULGADORA DA TESE DE DOUTORADO DE WILSON BARBOSA DA COSTA APRESENTADA AO
INSTITUTO DE FÍSICA E QUÍMICA DE SÃO CARLOS, DA UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO, EM 24/11/1992

COMISSÃO JULGADORA:

N. Studart

Prof. Dr. Nelson Studart Filho

M. Degani

Prof. Dr. Marcos Henrique Degani

J. Eduardo Moreira

Prof. Dr. Luiz Eduardo Moreira Carvalho de Oliveira

M. Foglio

Prof. Dr. Mario Foglio

Vera Beatriz Freitas de Campos

Profa. Dra. Vera Beatriz Freitas de Campos

Este trabalho foi preparado com a compreensão de Maria Eneide e das minhas filhas Olívia e Lorena Carla - a elas é dedicado, para compensar as horas de convívio que lhes deixei de dar por muitos e muitos meses.

AGRADECIMENTOS

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

Ao Prof. Dr. U. de Freitas do Departamento de Física da UFPb pelas proveitosas discussões e apoio e a sua esposa Cristina pela acolhida em sua casa.

Aos colegas de pós-graduação e Professores do DFCM-IFQSC pelo ótimo clima de trabalho que caracteriza este departamento.

Aos funcionários do DFCM-IFQSC-USP, em especial do seu Centro de Computação, que direta ou indiretamente contribuíram para o desenvolvimento deste trabalho.

Especialmente, aos meus pais, meus irmãos e ao meu tio Braz Nelo pelo constante apoio e incentivo.

À Prof^a Ivone Barbosa do Departamento de Enfermagem da UFSCar e ao seu esposo Walter pela acolhida em sua casa.

À Secretaria Educação e Cultura do Rio Grande do Norte, nas pessoas do Prof. Marcus Guerra e da Sr^a. Consuelo Gurgel, que me proporcionaram todas as condições necessárias para o meu afastamento.

Ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) pelo suporte financeiro.

ÍNDICE

LISTA DE ILUSTRAÇÕES	i
RESUMO	v
ABSTRACT	vi
CAPÍTULO 1 - INTRODUÇÃO.....	1
CAPÍTULO 2 - FORMULAÇÃO DIELÉTRICA DO GÁS DE ELÉTRONS.....	7
2.1 - Função dielétrica do gás de elétrons	8
2.2 - O esquema STLS	14
2.3 - Propriedades estáticas e dinâmicas	22
CAPÍTULO 3 - APROXIMAÇÃO STLS NO MODELO DE VISSCHER-FALICOV.....	27
3.1 - Caso clássico	28
3.2 - Caso quântico	34
3.3 - Ausência de correlações interplanos	40
CAPÍTULO 4 - CORRELAÇÕES ELETRÔNICAS EM SUPERREDES SEMICONDUTORAS	42
4.1 - Soluções das equações autoconsistentes no esquema STLS: Correção de campo local e fator de estrutura estático	44
4.2 - Energia de correlação	59
4.3 - Função correlação dos pares	66
4.4 - Dispersão de plasmons	73
CAPÍTULO 5 - GÁS DE POLARONS EM SEMICONDUCTORES DEGENERADOS	82
5.1 - Método variacional para a energia do estado fundamental	84
5.2 - Cálculo perturbativo	91
5.3 - Resultados	97
CAPÍTULO 6 - CONCLUSÕES	114
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	117

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Fig. 2.1 - Contribuição das excitações de partícula única (elétron-buraco) para o fator de estrutura estático na RPA para $r_s=2$	16
Fig. 2.2 - Contribuição de plasmon para o fator de estrutura estático na RPA para $r_s=2$	17
Fig. 2.3 - Soma das duas contribuições devido as excitações elétron-buraco e plasmon para o fator de estrutura estático	18
Fig. 2.4 - O vetor de onda crítico em função da densidade de elétrons	19
Fig. 2.5 - Correção de campo local nas aproximações HA e STLS para $r_s=2$	20
Fig. 2.6 - Fator de estrutura estático, nas aproximações RPA, HA e STLS para $r_s=2$	21
Fig. 4.1 - Correção de campo local na aproximação STLS para o gás de elétrons na superrede para $r_s=1$ e $\bar{d}=0.5$	50
Fig. 4.2 - Correção de campo local na aproximação STLS para o gás de elétrons na superrede para $r_s=1$ e $\bar{d}=5$	51
Fig. 4.3 - Correção de campo local na aproximação STLS para o gás de elétrons na superrede para $r_s=1$ e $\bar{d}=10$	52
Fig. 4.4 - Correção de campo local na aproximação de Hubbard para o gás de elétrons na superrede para $r_s=1$ e $\bar{d}=0.5$	54
Fig. 4.5 - Correção de campo local na aproximação de Hubbard para o gás de elétrons na superrede para $r_s=1$ e $\bar{d}=5$	55
Fig. 4.6 - Correção de campo local na aproximação de Hubbard para o gás de elétrons na superrede para $r_s=1$ e $\bar{d}=10$	56
Fig. 4.7 - Fator de estrutura estático na aproximação STLS para $r_s=4, 8$ e $\bar{d}=2, 3$..	57
Fig. 4.8 - Energia de correlação em função do espaçamento da superrede nas aproximações STLS, HA e RPA para $r_s=1$ e com correção de campo local intra e interplanos	61
Fig. 4.9 - Energia de correlação em função do espaçamento da superrede na aproximação STLS para $r_s=0.5$ e os efeitos de correlações de curto alcance são tratados de duas maneiras: (i) intra e interplanos e (ii) intraplano como foi originalmente sugerido por Miesnbock e Tosi	62

- Fig. 4.10 - Energia de correlação em função do espaçamento da superrede na aproximação STLS para $r_s=1$ e os efeitos de correlações de curto alcance são tratados de duas maneiras: (i) intra e interplanos e (ii) intraplano como foi originalmente sugerido por Miesenböck e Tosi 63
- Fig. 4.11 - Energia de correlação em função do espaçamento da superrede, nas aproximações STLS e HA para $r_s=0.5$. Considerando a correção de campo local intra e interplanos 64
- Fig. 4.12 - Energia de correlação em função do espaçamento da superrede, nas aproximações STLS e HA para $r_s=1$. Considerando a correção de campo local intra e interplanos 65
- Fig. 4.13 - Função correlação dos pares para o gás de elétrons em uma superrede na aproximação STLS para $r_s=0.5$ e $\bar{d}=0.5$ e 5 e as correlações de campo local foram levadas em conta intra e interplanos 67
- Fig. 4.14 - Função correlação dos pares para o gás de elétrons em uma superrede na aproximação STLS para $r_s=1$ e $\bar{d}=0.5$ e 5 e as correlações de campo local foram tratadas intra e interplanos 69
- Fig. 4.15 - Função correlação dos pares para o gás de elétrons na aproximação STLS para $r_s=8$ e $\bar{d}=5$ as correlações de curto alcance foram levadas em conta apenas nos planos 70
- Fig. 4.16 - Função correlação dos pares para o gás de elétrons nas aproximações STLS, HA e RPA para $r_s=0.5$ e $\bar{d}=5$ e as correlações foram tratadas apenas nos planos 71
- Fig. 4.17 - Função correlação dos pares para o gás de elétrons nas aproximações STLS, HA e RPA para $r_s=1$ e $\bar{d}=5$ e a correção de campo local foi considerada apenas nos planos 72
- Fig. 4.18 - Relação de dispersão de plasmon para um gás de elétrons na superrede para $r_s=1$, $\bar{d}=0.6$ e $\bar{q}_z=\pi r_s/6\bar{d}$ nas aproximações RPA, HA e STLS com a correção de campo local total 77
- Fig. 4.19 - Relação de dispersão de plasmons para um gás de elétrons na superrede para $r_s=1$, $\bar{d}=6$ e $\bar{q}_z=\pi r_s/6\bar{d}$ nas aproximações RPA, HA e STLS com a correção de campo local total 78
- Fig. 4.20 - Relação de dispersão de plasmon para um gás de elétrons na superrede para

$r_s=4$, $\bar{d}=0.5$ e $\bar{q}_z=0$ nas aproximações RPA, HA e STLS com a correção de campo local total	79
Fig. 4.21 - Relação de dispersão de plasmon para um gás de elétrons na superrede para $r_s=4$, $\bar{d}=5$ e $\bar{q}_z=0$ nas aproximações RPA, HA e STLS com a correção de campo local total	80
Fig. 4.22 - Relação de dispersão de plasmon para um gás de elétrons na superrede para $r_s=6$, $\bar{d}=6$ e $\bar{q}_z=\pi r_s/6\bar{d}$ nas aproximações RPA, HA e STLS com correção de campo local total	81
Fig. 5.1 - As correções para a energia do elétron devido à interação elétron-fônon. A figura mostra todos os diagramas que tem: (a) um, (b) dois e (c) três fônons	92
Fig. 5.2 - Energia de ligação polarônica como uma função da densidade de elétrons na aproximação de blindagem dinâmica	100
Fig. 5.3 - Contribuição da interação elétron-fônon para a energia do estado fundamental em função da densidade de elétrons. A função dielétrica estática sendo calculada nas várias aproximações	101
Fig. 5.4 - Comparação das energias de ligação polarônica como uma função da densidade de elétrons nas aproximações de blindagem estática e dinâmica	102
Fig. 5.5 - A massa efetiva polarônica m_R^* , calculada pela teoria de perturbação Rayleigh-Schrödinger como uma função da densidade de elétrons	104
Fig. 5.6 - A massa efetiva polarônica m_F^* , calculada pela teoria de perturbação Wigner-Brillouin como uma função da densidade de elétrons e os efeitos de blindagem estática foram tratados em diferentes aproximações	105
Fig. 5.7 - A massa efetiva do polaron como uma função da densidade de elétrons calculada pelas aproximações RPA e STLS: (a) m_R^* e (b) m_F^*	108
Fig. 5.8 - A contribuição da interação elétron-fônon para a auto-energia na aproximação de Thomas-Fermi para diferentes densidades de elétrons: (a) $n_e=2.8 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, (b) $n_e=1.2 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ e (c) $n_e=6.0 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$...	109
Fig. 5.9 - A contribuição da interação elétron-fônon para a auto-energia na aproximação de fases aleatórias para diferentes densidades de elétrons: (a) $n_e=2.8 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, (b) $n_e=1.2 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ e (c) $n_e=6.0 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$	110

- Fig. 5.10 - A contribuição da interação elétron-fônon para a auto-energia na aproximação de Hubbard para diferentes densidades de elétrons:
 (a) $n_e=2.8 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, (b) $n_e=1.2 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ e (c) $n_e=6.0 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$... 111
- Fig. 5.11 - A contribuição da interação elétron-fônon para a auto-energia na aproximação STLS para diferentes densidades de elétrons:
 (a) $n_e=2.8 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, (b) $n_e=1.2 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ e (c) $n_e=6.0 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$... 112
- Fig. 5.12 - Comparação da parte real da auto-energia como uma função do vetor de onda nas várias aproximações STLS, HA, RPA e TFA para $n_e=2.8 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ 113

RESUMO

Neste trabalho a função dielétrica da teoria de muitos corpos é desenvolvida para estudar as correlações eletrônicas no modelo de Visscher-Falicov. O modelo descreve um gás de elétrons encamado (layered electron gas-LEG) que consiste essencialmente de um arranjo infinito de um gás de elétrons de duas dimensões. Tem sido usado como um modelo para descrever as propriedades físicas de compostos de grafite intercalado com metal e de superredes semicondutoras. A aproximação do Singwi, Tosi, Land e Sjölander (STLS), que descreve as correções devido aos efeitos de troca e correlação de curto alcance através da correção de campo local dependente do fator de estrutura estático, é generalizada para o LEG. A solução completa das equações autoconsistentes STLS fornece informação a respeito das correções intraplano e interplanos e a função correlação dos pares, a energia de correlação e a relação do plasmon são calculados para vários valores de r_s e vários espaçamentos entre as camadas da superrede semicondutora de GaAs/Ga_xAl_{1-x}As. Para comparação a aproximação de fases aleatórias e a aproximação de Hubbard são também consideradas. Os resultados mostram comportamento qualitativamente diferente do gás de elétrons em duas e três dimensões.

Apresentamos um estudo teórico do acoplamento elétron-fônon em um gás de elétrons em três dimensões polar. A energia do estado fundamental do gás de polarons é determinada dentro da aproximação de blindagem dinâmica e várias aproximações para a função dielétrica. O efeito da densidade de portadores sobre as correções devido à blindagem na energia polarônica e massa efetiva é investigado pelo método perturbativo que consiste em calcular o diagrama de primeira ordem da auto-energia com uma interação efetiva elétron-fônon blindada pela função dielétrica estática do gás de elétrons. Mostra-se que as energias polarônicas apresentam valores mais baixos no método dinâmico comparado com o estático para todas as densidades eletrônicas. As massas efetivas derivadas da expansão de energia nas várias teorias de perturbação mostram resultados diferentes, que são propriamente interpretados.

ABSTRACT

In this work the dielectric formulation of the many-body theory is developed to study the electron correlations in the model of Visscher-Falicov. The model describes a layered electron gas (LEG) which consists of a periodic array of interacting two-dimensional electron gases. It has been quite useful to describe dielectric properties of metal intercalated graphite compounds and semiconductor superlattices. The Singwi, Tosi, Land and Sjölander (STLS) approach, which accounts for exchange and short-range correlation effects through a local field correction depending on the electron structure factor, is generalized to the LEG. The complete solution of the self-consistent STLS equations provides information about the intra-plane and inter-plane correlations and the pair correlation function, correlation energy and plasmon dispersion are evaluated for some typical values of the coupling constant r_s and the distance between the planes for GaAs/Ga_xAl_{1-x}As semiconductor superlattices. For comparison the random-phase approximation and the Hubbard approximation are also considered. The results show behavior qualitatively different from that of the interacting electron gas in two and three dimensions.

We also present a theoretical study of the coupled electron-phonon in a degenerate three dimensional polar electron gas. The ground-state energy of the many-polaron gas is determined within a dynamical screening treatment and several approximations for the dielectric function. The effect of the carrier densities on the static screening correction of the electron-phonon interaction to the polaronic energy and effective mass is investigated within second-order perturbation theories. Electron self-energies are also evaluated. It is shown that the polaronic energies have lower values in the dynamical approach as compared with the static one for all electron densities. Polaron effective masses derived from different perturbative schemes show quantitative different results which are properly interpreted.

CAPÍTULO 1

INTRODUÇÃO

Nos últimos anos tem sido crescente o interesse nas propriedades de muitos corpos do gás de elétrons em sistemas de dimensionalidade reduzida^[1,2]. Em particular, o gás de elétrons bidimensional (GE2D) encontrado em interfaces isolante-semicondutor e, mais recentemente, em heterojunções e poços quânticos de materiais semicondutores tem sido intensivamente investigado^[3]. O gás de elétrons encamado (layered electron gas - LEG) que consiste essencialmente de um arranjo infinito de GE2Ds espacialmente separados tem sido usado como um modelo para descrever as propriedades físicas de compostos de grafite intercalado com metal e de superredes semicondutoras. O LEG, sendo um sistema periódico de GE2Ds, situa-se em uma posição intermediária entre sistemas eletrônicos tridimensionais e bidimensionais. O modelo foi inicialmente proposto por Visscher e Falicov^[4] para estudar a blindagem dielétrica em conexão com o grafite intercalado com metais.

A importância relativa dos efeitos de muitos corpos no gás de elétrons interagente varia como uma função da densidade eletrônica. No regime de altas densidades, as interações elétron-elétron são fracas comparadas com a energia cinética e métodos perturbativos podem ser usados. O parâmetro de expansão perturbativa é usualmente designado por r_s que corresponde ao raio (em unidades do raio de Bohr efetivo) de uma esfera (disco) que envolve um volume (área) igual ao volume (área) por elétron. O método perturbativo só é rigorosamente justificado para $r_s \ll 1$. No entanto, em muitos metais os valores de r_s estão no intervalo $1 \leq r_s \leq 10$ e em sistemas semicondutores bidimensionais, heterojunções e poços quânticos, baseados no GaAs, $0.5 \leq r_s \leq 5$. Deste modo, métodos teóricos mais sofisticados devem ser desenvolvidos que, em diferentes aproximações, possam conter a física importante das propriedades que estão sendo investigadas. Vários esquemas teóricos têm sido propostos com considerável sucesso para tratar o problema de sistemas eletrônicos fortemente acoplados ($r_s \geq 1$).

O desenvolvimento dos dispositivos MIS (metal-isolante-semicondutor) permitiu um avanço considerável na compreensão dos efeitos de muitos corpos nas propriedades físicas destes sistemas. A densidade eletrônica (e portanto r_s) pode ser

continuamente variada em um grande intervalo em uma mesma amostra e os efeitos das interações de muitos corpos sobre as propriedades de partícula única, bem como as excitações coletivas podem ser estudados experimentalmente como função da densidade eletrônica. Estes experimentos constituíram-se num grande teste para a validade de vários esquemas teóricos. Embora os efeitos de correlação de curto alcance e de blindagem eletrônica sejam mais marcantes em duas do que em três dimensões, a estrutura básica da teoria das interações elétron-elétron em um gás de elétron homogêneo e isotrópico é bastante semelhante tanto em duas quanto em três dimensões.

Outro teste significativo para a teoria de muitos corpos do gás de elétrons surgiu com o advento de técnicas sofisticadas de crescimento de materiais que tornaram possível construir artificialmente estruturas semicondutoras, tal como superredes e poços quânticos. Nestas estruturas, tanto os elétrons como os buracos estão efetivamente confinados em duas dimensões. As superredes semicondutoras constituem uma nova classe de materiais compostos de diferentes camadas alternadas por dois (ou mais) diferentes constituintes. Um exemplo é a superrede GaAs-Ga_xAl_{1-x}As, onde as camadas de GaAlAs são dopadas com Si. Tendo em vista que o fundo da banda de condução do Ga_xAl_{1-x}As está significativamente acima daquele da camada de GaAs, elétrons “deslizam” para as camadas de GaAs deixando impurezas ionizadas nas camadas de Ga_xAl_{1-x}As. O poço de potencial unidimensional quantiza o movimento eletrônico ao longo da direção da superrede e a banda de condução do GaAs separa-se em uma série de subbandas, cada uma representando o movimento livre dos elétrons nos planos perpendiculares à direção da superrede. Se a densidade eletrônica não é tão grande de modo que apenas a mais baixa subbanda é ocupada e se as barreiras são suficientemente largas de modo que o tunelamento possa ser desprezado então este sistema encamado é um sistema periódico de GE2Ds. É necessário enfatizar que os efeitos de impurezas são significativamente reduzidos porque estão espacialmente separadas dos elétrons de modo que os efeitos da interação elétron-elétron podem ser estudados separadamente. Como o sistema é claramente anisotrópico e não homogêneo, espera-se que os efeitos de muitos corpos diferam consideravelmente do gás de elétrons homogêneo e isotrópico tanto em duas quanto três dimensões. Então um primeiro passo

no entendimento dos efeitos de muitos corpos em superredes e outros materiais de multicamadas consiste em aproximar o sistema por um gás de elétrons encamado (LEG).

Vários métodos que tratam o problema de líquidos de elétrons fortemente acoplados baseiam-se na formulação dielétrica da teoria de muitos corpos^[5,6]. Aproximações são implementadas na função dielétrica do sistema que é obtida a partir do desacoplamento das equações para a função distribuição de muitas partículas. Relações do tipo do teorema da flutuação-dissipação são introduzidas de modo a garantir autoconsistência no esquema proposto. A aproximação de fases aleatórias (RPA) é a mais simples aproximação que pode ser obtida dentro da formulação dielétrica e sabidamente descreve bem as propriedades dielétricas dos gases de elétrons interagentes no limite de altas densidades ($r_s \leq 1$). A correção de campo local designada por uma função $G(q)$ descreve as correções à RPA devido aos efeitos de troca e correlação e leva em conta as correlações de curto alcance tanto de sistemas quânticos quanto clássicos. Ela conduz a uma considerável melhoria da descrição sobre aproximações de campo médio do tipo RPA onde $G(q)=0$. Um método autoconsistente para a determinação de $G(q)$, proposto por Singwi et al.^[7] (aqui designado a seguir por STLS), tem sido aplicado exaustivamente com considerável sucesso em uma gama enorme de sistemas de muitos corpos da matéria condensada, fermiônicos, bosônicos ou clássicos.

A primeira parte desta tese aborda a descrição das propriedades dielétricas do modelo de Visscher-Falicov, com aplicação à superrede semicondutora de GaAs e suas ligas, baseada na aproximação STLS da formulação dielétrica. A primeira tentativa de descrever o LEG na aproximação STLS foi feita por Zhang e Tzoar^[8]. No entanto a determinação da correção de campo local $G(q)$ em STLS está incorreta e o cálculo completo autoconsistente não foi efetuado. Miesenböck e Tosi^[9] incorporaram os efeitos de correlação e troca, inspirados na aproximação STLS e como estavam interessados nos compostos de grafite introduziram aproximações semi-clássicas e desprezaram as correlações eletrônicas de curto alcance intercamadas. Deste modo usaram a correção de campo local estritamente bidimensional. Muito recentemente Gold^[10] exibiu $G(q)$ em STLS para o modelo de Visscher-Falicov, mas não conseguiu

realizar o cálculo autoconsistente, limitando-se a aproximações bastante simplificadoras. A dificuldade consiste na solução de complicadas equações integrais devido à anisotropia do modelo. Nesta tese apresentamos a solução completa autoconsistente do esquema STLS do modelo de Visscher-Falicov. Propriedades estáticas como o fator de estrutura, função correlação dos pares, energia de correlação, e dinâmicas como o espectro de plasmons são determinadas para vários valores de r_s e espaçamento entre camadas da superrede.

Outra classe de sistemas, onde os efeitos de muitos corpos não podem ser desprezados, é formada pelos semicondutores polares fortemente dopados^[11]. Que podem ser descritos por um sistema degenerado de muitos corpos onde a interação elétron-elétron deve ser considerada em pé de igualdade com a interação elétron-fônon. Designamos este sistema por um gás de polarons interagente, generalizando a idéia original do polaron que é uma excitação de partícula única bastante útil para descrever as propriedades físicas de um elétron em cristais iônicos e semicondutores polares^[12]. Consequentemente o estudo do sistema interagente de muitos polarons é um problema altamente não-trivial. Efeitos de blindagem são bastante importantes porque, enfraquecendo o acoplamento entre elétrons e fônons, mudam a auto-energia polarônica com sérias implicações na renormalização do gap da banda^[13]. Apesar de intensa investigação destes efeitos em sistemas bidimensionais semicondutores, os efeitos de degenerescência e blindagem têm sido desprezados, exceto em trabalhos pioneiros de Mahan^[14]. Recentemente o assunto atraiu a atenção de Das Sarma et al.^[15] que estudaram a influência da blindagem dinâmica sobre as propriedades de espalhamento em semicondutores.

A segunda parte desta tese apresenta um estudo teórico do sistema acoplado elétron-fônon-LO em um GE3D polar. Do ponto de vista teórico os cálculos apresentam uma complexidade elevada em sua extensão e aproximações devem ser feitas. Embora um tratamento dinâmico geral não seja considerado neste trabalho, efeitos dinâmicos de blindagem são incorporados de algum modo através de um método variacional. É bem conhecido que a aproximação estática para a blindagem é bastante razoável quando a frequência de plasma do gás de elétrons é muito maior do que as frequências dos fônons. Das Sarma et al.^[15] mostraram que para valores grandes das densidades

eletrônicas os resultados das taxas de amortecimento de quase-partícula em método dinâmico são bastante próximos dos resultados de blindagem estático, enquanto que a pequenas densidades, como é de se esperar, resultados tanto dinâmicos quanto estáticos estão próximos dos resultados sem blindagem.

Nosso interesse principal é estudar o efeito da densidade de portadores sobre as correções devido à blindagem na energia polarônica e massa efetiva. Os cálculos são feitos usando dois diferentes métodos. Um deles é o convencional método perturbativo que consiste em calcular o diagrama de primeira ordem da auto-energia com uma interação efetiva elétron-fônon-LO blindada pela função dielétrica estática do gás de elétrons. O outro é um método variacional^[16-18] baseado numa generalização da transformação de Lee-Low-Pines para o sistema de muitos polarons que conduz a uma expressão para a energia polarônica em termos do fator de estrutura estático $S(q)$ do gás de elétrons. Desde que $S(q)$ é obtido a partir da função dielétrica para todas as frequências, o método pode ser considerado como dinâmico em contraposição ao anterior. Contudo, como no caso anterior, o acoplamento elétron-fônon é tomado dentro do esquema de perturbação de mais baixa ordem. A função dielétrica e o fator de estrutura do gás de elétrons que fornecem as correções de blindagem para a interação elétron-fônon são calculadas nas seguintes aproximações: Hartree-Fock, Thomas-Fermi, RPA, Hubbard e STLS. É surpreendente que o tema da interação elétron-fônon blindada, que tem uma longa história, não tenha sido discutido além de RPA. Esta aproximação tem mostrado deficiências quantitativas, tanto em 3D quanto mais pronunciadamente em 2D, como valores negativos para a função correlação dos pares a pequenas distâncias, superestimativas da energia de correlação e um valor para o comprimento de blindagem, que é essencial na descrição dos efeitos de blindagem, igual ao valor do gás sem interação. Este trabalho preenche esta lacuna apresentando uma detalhada comparação entre os resultados das propriedades do estado fundamental do gás de polarons em várias aproximações^[19]. Mostra-se que as energias polarônicas apresentam valores mais baixos no método dinâmico comparado com o estático para todas as densidades eletrônicas. As massas efetivas derivadas da expansão de energia na chamada teoria de perturbação de Rayleigh-Schrödinger (TPRS) na concha de massa e na aproximação de Tamm-Dancoff da teoria de perturbação de Wigner-

Brillouin (TD-TPWB) mostram resultados diferentes que são propriamente interpretados.

Esta tese está organizada como segue. No Capítulo 2, o esquema STLS da formulação dielétrica do gás de elétrons é revisto e as expressões para as grandezas físicas relevantes do gás de elétrons são exibidas. No Capítulo 3 a aproximação STLS é desenvolvida em detalhes para o modelo de Visscher-Falicov, onde generalizamos o trabalho original de Singwi et al. para o gás de elétrons encamado. A aproximação de Miesnböck e Tosi de desprezar as correlações de curto alcance entre as camadas é também discutida. No Capítulo 4, mostramos a solução das equações autoconsistentes no esquema STLS com a obtenção de $G(q)$ e $S(q)$. A partir daí, a energia de correlação, o fator de estrutura e a dispersão de plasmons são apresentadas com parâmetros relacionados com uma superrede semicondutora baseada no GaAs. No Capítulo 5 o estudo do gás de polarons em semicondutores é apresentado. Revisamos o método generalizado de transformação canônica para calcular a energia variacional do estado fundamental do gás de polarons e discutimos o fator de estrutura nas diferentes aproximações do GE3D. Mostramos o cálculo perturbativo na aproximação estática da auto-energia devido à interação elétron-fônon, a energia polarônica e as massas efetivas de polaron na TPRS e TD-TPWB. Apresentamos os resultados numéricos para a auto-energia, energias polarônicas nos métodos estático e dinâmico e massas efetivas como função da densidade em todas as aproximações acima citadas. Finalmente, no Capítulo 6 nossas conclusões são apresentadas.

CAPÍTULO 2

FORMULAÇÃO DIELÉTRICA DO GÁS DE ELÉTRONS

Vamos iniciar neste capítulo o estudo das propriedades estáticas e dinâmicas em um sistema de elétrons tridimensional degenerado imerso em um meio uniforme neutralizante de cargas positivas. Este modelo, conhecido como modelo *jellium*, tem sido utilizado exaustivamente no estudo de metais e semicondutores dopados. Apresentamos a formulação dielétrica do problema de muitos corpos, aplicado ao tratamento do gás de elétrons degenerado tridimensional (3D). Conhecendo-se a expressão para a função dielétrica, dependente do vetor de onda e da frequência, podemos calcular uma série de importantes propriedades estáticas e dinâmicas dos sistemas de muitas partículas, como por exemplo: a energia do estado fundamental, o espectro das quase-partículas e excitações coletivas, a função correlação entre partículas, as flutuações dinâmicas de densidade de carga, dentre outras.

A descrição do gás de elétrons com relação à sua degenerescência e efeitos de muitos corpos depende fortemente da densidade de partículas. A densidade de elétrons n_e nos dá informações sobre a estatística e o grau de acoplamento entre as partículas devido à interação. É conveniente definir um parâmetro adimensional r_s , que esteja relacionado com a distância média entre as partículas, e é dado por

$$r_s = \begin{cases} \left(\frac{3}{4\pi n_e a_B^*} \right)^{1/3} & 3D \\ \left(\frac{1}{\pi n_e a_B^*} \right)^{1/2} & 2D \end{cases} \quad (2.1)$$

onde $a_B^* = \hbar^2 / m e^2$ é o raio de Bohr efetivo, m é a massa efetiva de banda do elétron, ϵ é a constante dielétrica do meio e n_e é a densidade de elétrons. Para um sistema de elétrons degenerado, o valor da energia de Fermi é inversamente proporcional ao quadrado do parâmetro de acoplamento r_s e a energia potencial é inversamente proporcional a r_s . Para sistemas muito densos a constante de acoplamento r_s é pequena e a energia cinética média prepondera. Neste caso o sistema é fracamente acoplado. No outro limite, a energia média de Coulomb prepondera. Wigner sugeriu que os

elétrons podem se cristalizar. Para os elétrons da banda de condução nos metais alcalinos, a constante de acoplamento r_s varia de 2 a 6, constituindo assim um exemplo típico de um sistema acoplado. Para elétrons em semicondutores dopados o valor da constante de acoplamento depende fundamentalmente do nível da dopagem e da sua massa efetiva de banda. A transição de fase de Wigner do líquido de elétrons para o sólido estima-se que ocorra para $r_s \simeq 110$ em sistemas tridimensionais^[20] e, para sistemas eletrônicos em duas dimensões^[21], deve ocorrer para $r_s \simeq 37$.

No limite de fraco acoplamento ($r_s \ll 1$), a teoria de perturbação descreve muito bem as propriedades destes sistemas. Para os outros intervalos de r_s devemos aplicar teorias mais sofisticadas de modo a descrever corretamente as propriedades fundamentais do sistema. A formulação dielétrica tem sido extensivamente usada em vários sistemas fortemente acoplados para estudar as propriedades dinâmicas e estáticas. Esta formulação foi desenvolvida dentro da estrutura da teoria da resposta linear, onde os efeitos de acoplamento forte são considerados através de um grande número de funções características. Em particular, Singwi, Tosi, Land e Sjölander^[7] desenvolveram uma aproximação autoconsistente para as correlações eletrônicas, que descreve o gás de elétrons degenerado tanto no regime de acoplamento fraco quanto no intermediário. No que segue designaremos esta aproximação por STLS.

A apresentação da formulação dielétrica neste capítulo será de fundamental importância no estudo das propriedades dinâmicas e estáticas do gás de elétrons encamado a ser apresentado nos Capítulos 3 e 4, e no estudo do gás de polarons no Capítulo 5.

2.1-Função dielétrica do gás de elétrons

A função dielétrica $\epsilon(q, \omega)$, que descreve a resposta de um sistema a um campo elétrico aplicado, é uma importante grandeza no estudo de muitas propriedades físicas do sistema. As propriedades metálicas que dependem fortemente das interações elétron-elétron também são estudadas em parte por meio da função dielétrica. Esta tem sido calculada em várias aproximações.

A função dielétrica $\epsilon(q, \omega)$ pode ser definida como a razão entre o potencial

externo $V_{\text{ext}}(\mathbf{q}, \omega)$ aplicado ao sistema e o potencial total $V_t(\mathbf{q}, \omega)$, ambos dependentes do vetor de onda $\mathbf{q}$ e da frequência ω , isto é,

$$V_t(\mathbf{q}, \omega) = V_{\text{ext}}(\mathbf{q}, \omega) / \epsilon(\mathbf{q}, \omega) . \quad (2.2)$$

Esta é portanto um tipo de função resposta linear. Uma formulação dielétrica, ou uma descrição das propriedades do gás de elétrons encamado em termos da função resposta dielétrica, será desenvolvida com muito mais detalhes no Capítulo 3 .

A função dielétrica $\epsilon(\mathbf{q}, \omega)$ definida pela Eq. (2.2) (dependente do vetor de onda e da frequência) é uma quantidade essencial para descrever as propriedades do gás de elétrons degenerado em metais e semicondutores dopados. Nosso principal objetivo é calcular uma expressão para a função dielétrica, que seja válida para todos os vetores de onda e todas as frequências.

Na Eq. (2.2), $V_t(\mathbf{q}, \omega)$ é o potencial total sentido por uma carga de prova e é dado por

$$V_t(\mathbf{q}, \omega) = V_{\text{ext}}(\mathbf{q}, \omega) + v(\mathbf{q}) \langle \rho(\mathbf{q}, \omega) \rangle \quad (2.3)$$

onde $v(\mathbf{q}) = 4\pi e^2 / \epsilon q^2$ é o potencial de Coulomb nu, $\langle \rho(\mathbf{q}, \omega) \rangle$ é a densidade de cargas induzida devido ao potencial externo $V_{\text{ext}}(\mathbf{q}, \omega)$, definida como

$$\langle \rho(\mathbf{q}, \omega) \rangle = \chi(\mathbf{q}, \omega) V_{\text{ext}}(\mathbf{q}, \omega) . \quad (2.4)$$

$\chi(\mathbf{q}, \omega)$ é chamada de função resposta densidade-densidade. A parte imaginária de $\epsilon(\mathbf{q}, \omega)$ está diretamente relacionada com as propriedades de espalhamento do sistema. Uma maneira de se obter informação sobre o espectro do sistema é estudando seu espectro da flutuação dependendo da frequência e do vetor de onda. Experimentalmente, o fator de estrutura dinâmico dos elétrons em metais tem sido medido através da técnica de espalhamento de raios-x ou espectroscopia da perda de energia pelo elétron^[22]. As propriedades estáticas (tais como: o fator de estrutura estático, a função de correlação dos pares e a energia do estado fundamental) podem ser analisadas com o

conhecimento dos valores de $S(\mathbf{q}, \omega)$ integrado sobre todas as frequências. Das Eqs. (2.2), (2.3) e (2.4) encontramos a relação entre a função dielétrica e a função resposta densidade-densidade,

$$\frac{1}{\epsilon(\mathbf{q}, \omega)} = 1 + v(\mathbf{q})\chi(\mathbf{q}, \omega), \quad (2.5)$$

Na aproximação de Born, a seção de choque de espalhamento inelástico está relacionada com o fator de estrutura dinâmico $S(\mathbf{q}, \omega)^{[23]}$, definido por

$$S(\mathbf{q}, \omega) = \sum_{\mathbf{n}} |(\rho_{\mathbf{q}}^+)_{\mathbf{n}0}|^2 \delta(\omega - \omega_{\mathbf{n}0}), \quad (2.6)$$

onde $(\rho_{\mathbf{q}}^+)_{\mathbf{n}0}$ é o elemento de matriz da flutuação de densidade entre o estado fundamental $|0\rangle$ com energia E_0 e o estado excitado $|n\rangle$ com energia E_n do sistema tal que $\omega_{\mathbf{n}0} = E_n - E_0$. Aqui $\mathbf{q}$ e ω são, respectivamente, o momento e a energia transferida para o sistema. $S(\mathbf{q}, \omega)$ dá informações a respeito do espectro de excitação das flutuações de densidade, sendo uma quantidade positiva e real e anula-se para valores negativos de ω à temperatura zero. Podemos mostrar que o fator de estrutura dinâmico $S(\mathbf{q}, \omega)$ está diretamente relacionado com a parte imaginária de $\chi(\mathbf{q}, \omega)$ e por consequente com a função dielétrica $\epsilon(\mathbf{q}, \omega)$. A função resposta densidade-densidade do sistema, que responde linearmente ao potencial externo^[23], pode ser escrita como

$$\chi(\mathbf{q}, \omega) = \sum_{\mathbf{n}} |(\rho_{\mathbf{q}}^+)_{\mathbf{n}0}|^2 \left(\frac{1}{\omega - \omega_{\mathbf{n}0} + i\zeta} - \frac{1}{\omega + \omega_{\mathbf{n}0} + i\zeta} \right). \quad (2.7)$$

Das Eqs. (2.5), (2.6) e (2.7), obtemos

$$\text{Im} \frac{1}{\epsilon(\mathbf{q}, \omega)} = - \frac{4\pi^2 e^2}{q^2} S(\mathbf{q}, \omega), \quad (2.8)$$

que é a expressão do conhecido teorema da flutuação-dissipação. A integral sobre todas as frequências do fator de estrutura dinâmico $S(\mathbf{q}, \omega)$ nos fornece o fator de estrutura estático

$$S(\mathbf{q}) = \frac{1}{n_e} \int S(\mathbf{q}, \omega) d\omega = - \frac{\hbar q^2}{4\pi^2 n_e e^2} \int \text{Im} \frac{1}{\epsilon(\mathbf{q}, \omega)} d\omega. \quad (2.9)$$

O conhecimento da função espectral $S(\mathbf{q}, \omega)$ permite obter informações sobre o espectro de excitação do sistema, ou seja, das flutuações de densidade.

No regime das densidades metálicas a interação elétron-elétron tem importante papel, sendo necessário considerar a correção de campo local devido aos efeitos de troca e correlação entre as partículas na função dielétrica. A correção de campo local mede o grau com que os efeitos das correlações são envolvidos na descrição das propriedades do sistema. A função resposta densidade-densidade do sistema interagente na aproximação de campo médio é expressa em termos da interação efetiva e da função densidade-densidade do sistema sem interação. As modernas teorias trataram as correções de campo local $G(\mathbf{q}, \omega)$ dependendo tanto do vetor de onda como também da frequência, como exaustivamente discutidos por Kugler^[24]. Na formulação do potencial de polarização $\chi(\mathbf{q}, \omega)$, é expressa por^[24]

$$\chi(\mathbf{q}, \omega) = \frac{\chi_{3D}^0(\mathbf{q}, \omega)}{1 - v(\mathbf{q}) [1 - G(\mathbf{q}, \omega)] \chi_{3D}^0(\mathbf{q}, \omega)}, \quad (2.10)$$

onde $\chi_{3D}^0(\mathbf{q}, \omega)$ é a função resposta do gás de elétrons livre. Muitas das teorias, incluindo a STLS a ser discutida, usam a aproximação estática para $G(\mathbf{q}, \omega) = G(\mathbf{q}, 0) = G(\mathbf{q})$. Alternativamente podemos escrever a função resposta dielétrica, usando as Eqs. (2.5) e (2.10), em termos de $G(\mathbf{q})$ como

$$\epsilon(\mathbf{q}, \omega) = 1 - \frac{v(\mathbf{q}) \chi_{3D}^0(\mathbf{q}, \omega)}{1 + G(\mathbf{q}) v(\mathbf{q}) \chi_{3D}^0(\mathbf{q}, \omega)}, \quad (2.11)$$

que é válida no tratamento das correções estáticas de campo local. A função dielétrica, na forma indicada pela Eq. (2.11), tem sido freqüentemente estudada devido à sua relativa simplicidade quando comparada à função dielétrica com correções de campo local dependente do vetor de onda e da frequência. Torna-se necessário somente conhecer a correção de campo local $G(\mathbf{q})$ para caracterizar os efeitos de forte acoplamento.

Na aproximação de Hartree-Fock (HFA), as partículas respondem à perturbação externa como partículas livres. Assim $\chi(\mathbf{q}, \omega)$ na Eq. (2.5) deve ser tomado como sendo o valor do gás sem interação. O resultado é

$$\epsilon_{\text{HFA}}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{1 + v(\mathbf{q})\chi_{3D}^0(\mathbf{q}, \omega)} \quad (2.12)$$

Na aproximação de campo médio HFA, portanto, consiste em tomar $G(\mathbf{q})=1$ para qualquer valor de $\mathbf{q}$ na Eq. (2.11). Na HFA (é conhecido que) $S(\mathbf{q})$ pode ser calculado analiticamente, e o resultado é^[23]

$$S_{\text{HFA}}(\mathbf{q}) = \begin{cases} \frac{3}{4} \frac{q}{q_F} - \frac{q^3}{16q_F^3}, & 0 < q \leq 2q_F \\ 1, & q \geq 2q_F \end{cases} \quad (2.13)$$

onde $q_F = (3\pi^2 n_e)^{1/3}$ é o vetor de onda de Fermi.

A aproximação de fases aleatórias (RPA) é essencialmente uma aproximação de fraco acoplamento. Assim sendo, descreve muito bem o gás de elétrons somente no regime de alta densidade ($r_s \ll 1$). Para densidades metálicas ($2 \leq r_s \leq 6$), a correção ao resultado de RPA necessita ser incorporado. Na RPA todas as correlações de curto alcance são desprezadas. Por isto a expressão da função dielétrica na RPA é recuperada simplesmente ao fazer $G(\mathbf{q})=0$ na Eq. (2.11). Esta aproximação descreve muito bem os modos de excitações de plasmons e os fenômenos de blindagem a grandes comprimentos de onda. Porém sua validade é limitada à região de altas densidades. Na região de densidades metálicas, a função dielétrica na RPA, usada para calcular a função correlação dos pares $g(r)$, que representa a probabilidade de encontrar uma partícula a uma distância r da outra, fornece um resultado bastante negativo para pequenas separações entre as partículas, o que é claramente um resultado incorreto. Isto acontece porque nesta aproximação não são distinguidos os efeitos de correlação de Coulomb e de buraco de Pauli, conforme descrito por Pines e Nozières^[23]. A função dielétrica na RPA ($r_s \ll 1$) é dada por

$$\epsilon_{\text{RPA}}(\mathbf{q}, \omega) = 1 - v(\mathbf{q})\chi_{3D}^0(\mathbf{q}, \omega) \quad (2.14)$$

Em todas as aproximações, a grandeza $\chi_{3D}^0(\mathbf{q}, \omega)$ é definida como

$$\chi_{3D}^0(\mathbf{q}, \omega) = \frac{2}{V\hbar} \sum_{\mathbf{p}} \frac{f_0(\mathbf{p}) - f_0(|\mathbf{p}+\mathbf{q}|)}{\omega - \omega_{\mathbf{p}\mathbf{q}} + i\mu}. \quad (2.15)$$

Aqui $f_0(\mathbf{p})$ é a função degrau, $f_0(\mathbf{p})=1$, se $p \leq q_F$ e $f_0(\mathbf{p})=0$, se $p > q_F$, que representa a função distribuição de Fermi à temperatura zero, e

$$\omega_{\mathbf{p}\mathbf{q}} = \frac{\hbar}{2m}(2\mathbf{p} \cdot \mathbf{q} + q^2), \quad (2.16)$$

representa a energia de uma partícula do sistema em um estado de momento $\mathbf{p}+\mathbf{q}$ e μ é um infinitesimal positivo.

A função polarizabilidade livre dada por $Q_0(\mathbf{q}, \omega) = -v(\mathbf{q})\chi_{3D}^0(\mathbf{q}, \omega)$, também conhecida como função de Lindhard^[25], é dada por

$$Q_0(\mathbf{q}, \omega=0) = \frac{1}{2} \frac{\kappa^2}{q} \left\{ 1 + \frac{1}{q} \left(1 - \frac{q^2}{4} \right) \ln \left| \frac{q+2}{q-2} \right| \right\}. \quad (2.17)$$

q está expresso em unidades de q_F e $\kappa^2 = q_{FT}^2/q_F^2$, onde $q_{FT}^2 = \left(\frac{4me^2}{\pi\hbar^2} \right)^{1/2}$ (q_{FT} é vetor de onda de Thomas-Fermi).

As partes dinâmicas, real e imaginária de $Q_0(\mathbf{q}, \omega)$:

$$\begin{aligned} \text{Re}(Q_0(\mathbf{q}, \omega)) &= \frac{\kappa^2}{q^2} \left\{ \frac{1}{2} + (4q)^{-1} \left(1 - \left(\frac{\omega+q^2}{2q} \right)^2 \right) \ln \left| \frac{\omega+2q+q^2}{\omega-2q+q^2} \right| + \right. \\ &\quad \left. + (4q)^{-1} \left(1 - \left(\frac{\omega-q^2}{2q} \right)^2 \right) \ln \left| \frac{\omega-2q-q^2}{\omega+2q-q^2} \right| \right\}, \end{aligned} \quad (2.18)$$

$$\text{Im}(Q_0(\mathbf{q}, \omega)) = \frac{\pi}{4} \frac{\kappa^2 \omega}{q^3}, \quad \omega < 2q+q^2$$

$$\text{Im}(Q_0(\mathbf{q}, \omega)) = \frac{\pi}{4} \frac{\kappa^3}{q^3} \left\{ 1 - \left(\frac{\omega-q^2}{2q} \right)^2 \right\} \quad |2q-q^2| < \omega < 2q+q^2$$

$$\text{Im}(Q_0(\mathbf{q}, \omega)) = 0 \quad \omega > 2q+q^2 \quad (2.19)$$

onde ω está expresso em unidades de $\hbar q_F^2/2m$.

Para o tratamento do gás de elétrons no regime fortemente acoplado ($r_s \geq 1$) é necessário encontrar uma aproximação que vá além da descrição da RPA.

Hubbard^[26] modificou a forma da função dielétrica, melhorando bastante a energia de correlação do gás de elétrons no intervalo das densidades metálicas. Apesar disto, a função distribuição dos pares $g(r)$, calculada da função dielétrica de Hubbard, permanece negativa para pequenos valores de r , dentro de todo o intervalo da densidade metálica. Tal fato indica uma falha de sua aproximação. Ela consiste em incluir as correções de curto alcance, ao considerar apenas os efeitos do buraco de Pauli na RPA.

2.2- O esquema STLS

Na aproximação STLS, os efeitos de interação de Coulomb entre os elétrons são considerados autoconsistentemente no cálculo de $G(q)$. A bem sucedida aproximação STLS de muitas partículas, devido à sua simplicidade e exigüidade, tem seu ponto de partida numa aproximação semiclássica, que consiste na truncagem da seqüência das equações Bogoliubov-Born-Green-Kirkwood-Yvon (BBGKY), ao expressar a função distribuição de duas partículas $f_2(r,p;r',p',t)$ em termos da função de distribuição de uma partícula $f_1(r,p,t)$ como

$$f_2(r,p;r',p',t) = f_1(r,p,t) f_1(r',p',t) g(r-r'). \quad (2.19)$$

onde $g(r)$ é a função correlação dos pares. Usando a teoria de resposta linear e o *ansatz* acima, encontramos a expressão para a correção de campo local como um funcional do fator de estrutura estático $S(q)$

$$G_{\text{STLS}}(q) = - \frac{1}{(2\pi)^3 n_e} \int d^3q' \frac{q \cdot q'}{q'^2} (S(q-q') - 1) \quad (2.20)$$

na qual estão incorporadas as correlações de curto alcance do sistema. Fazendo a integração angular,

$$G_{\text{STLS}}(q) = - \frac{3}{4} \int q'^2 dq' \{S(q') - 1\} \left\{ 1 + \frac{q^2 - q'^2}{2q'q} \ln \left| \frac{q+q'}{q-q'} \right| \right\}, \quad (2.21)$$

onde q está expresso em unidades de q_F .

A correção estática de campo local na aproximação de Hubbard é obtida ao substituírmos $S(\mathbf{q})$ na Eq. (2.21) pela expressão do fator de estrutura estático na aproximação de Hartree-Fock, evidenciando o fato de que a aproximação de Hubbard leva em conta apenas as correlações de troca. Dessa forma, a correção estática de campo local proposta por Hubbard, é dada por

$$G_{HA}(\mathbf{q}) = \frac{1}{2} \frac{q^2}{q^2+1}. \quad (2.22)$$

O fator de estrutura $S(\mathbf{q})$, Eq. (2.9), é calculado a partir da função dielétrica, ou da sua "parente" $\chi(\mathbf{q},\omega)$, usando o teorema da flutuação-dissipação. No entanto, a integral na Eq. (2.9) deve ser feita cuidadosamente, de modo a extrair a contribuição das excitações coletivas (plasmons) que são obtidas a partir dos zeros da função dielétrica $\epsilon(\mathbf{q},\omega)=0$. A Eq. (2.9) separa-se em dois termos relativos à contribuição das excitações de partícula única (elétron-buraco) $S_{e-b}(\mathbf{q})$ e a contribuição de plasmon $S_{pl}(\mathbf{q})$. Em unidades adimensionais, obtemos as expressões :

$$S_{e-b}(\mathbf{q}) = -\frac{3q^2}{2\pi} \int_0^{q+q^2/2} \text{Im} \frac{1}{\epsilon(\mathbf{q},\omega)} d\omega \quad (2.23)$$

e

$$S_{pl}(\mathbf{q}) = \frac{3}{2} \frac{q^2}{\kappa^2} \left(\frac{\partial \text{Re} \epsilon(\mathbf{q},\omega)}{\partial \omega} \right)^{-1}_{\omega=\omega(\mathbf{q})} \quad (2.24)$$

As Eqs. (2.11), (2.21), (2.23) e (2.24) constituem um conjunto fechado de equações integrais que devem ser resolvidas de maneira autoconsistente, formando o esquema STLS.

Para clarificar este comportamento, na Fig. 2.1 mostramos o comportamento da contribuição das excitações de partícula única (elétron-buraco) dada pela Eq. (2.23) para o fator de estrutura estático $S(\mathbf{q})$ na RPA. A Fig. 2.2 apresenta o comportamento da contribuição do pólo de plasmon, a qual é extraída exatamente pela Eq. (2.14) para o fator de estrutura estático na aproximação RPA. Na Fig. 2.3

mostramos a soma dos dois termos, devido as contribuições das excitações elétron-buraco e plasmon, para um $r_s=2$.

Fig. 2.1 - Contribuição das excitações de partícula única (elétron-buraco) para o fator de estrutura de um sistema de elétrons tridimensional em RPA com constante de acoplamento $r_s=2$.

Fig. 2.2 - Contribuição de plasmon para o fator de estrutura de um sistema de elétrons tridimensional na RPA com constante de acoplamento $r_s=2$.

Fig. 2.3 - Fator de estrutura estático que resulta da soma das duas contribuições mostradas nas Figs. 2.1 e 2.2 .

É necessário frisar o comportamento bastante sensível em torno de q_c , que é o vetor de onda crítico para o qual o plasmon encontra a margem superior do contínuo de elétron-buraco. Portanto, a Fig. 2.4 mostra q_c como função de r_s .

A Fig. 2.5 mostra o comportamento da correção de campo local nas aproximações de Hubbard e STLS para $r_s=2$. Na Fig. 2.6 apresentamos o comportamento do fator de estrutura estático $S(q)$, na aproximação de fases aleatórias, na aproximação de Hubbard e na aproximação STLS, para um gás de elétrons homogêneo com parâmetro de acoplamento $r_s=2$. Como podemos observar, os efeitos das correlações de curto alcance são evidentes. Estes resultados serão considerados no Capítulo 5 ao estudarmos o gás de polarons.

No Capítulo 3, mostraremos como a separação devido às contribuições das excitações elétron-buraco e plasmon pode ser evitada, como foi originalmente proposto por Freitas et al.^[27] para o caso gás de elétrons em duas dimensões, resultando numa maior precisão numérica.

Fig. 2.4 - Vetor de onda crítico q_c em função da densidade de elétrons em RPA.

Fig. 2.5 - Correção de campo local nas aproximações de Hubbard (linhas tracejadas) e STLS (linhas cheias) para $r_s=2$.

Fig. 2.6 - Fator de estrutura estático, nas aproximações de RPA (linhas tracejadas), HA (linhas pontos-traços) e STLS (linhas cheias) com constante de acoplamento $r_s=2$.

2.3- Propriedades estáticas e dinâmicas

A função dielétrica $\epsilon(\mathbf{q}, \omega)$ do gás de elétrons, com sua forte dependência em relação à frequência e o vetor de onda, possui informações significativas sobre as propriedades físicas dos sistemas. Num limite, $\epsilon(\mathbf{q} \rightarrow 0, \omega)$ descreve as excitações coletivas do gás de elétrons - os plasmons, onde $\epsilon(\mathbf{q}, \omega)$ é usada para descrever os efeitos de blindagem devido às interações incluídas no sistema estudado.

A relação de dispersão do plasmon $\omega(\mathbf{q})$ para $\mathbf{q}$ pequeno corresponde aos pólos do fator de estrutura dinâmico $S(\mathbf{q}, \omega)$, é obtida a partir dos zeros da função dielétrica,

$$\lim_{\mathbf{q} \rightarrow 0} \epsilon(\mathbf{q}, \omega(\mathbf{q})) = 0. \quad (2.25)$$

A partir da Eq. (2.25), no limite de comprimentos de ondas longos, obtemos a seguinte expressão para a relação de dispersão no formalismo STLS

$$\omega(\mathbf{q}) = \omega_p \left\{ 1 + \left\{ \frac{9}{10} - \frac{1}{2} \gamma_0 \kappa^2 \right\} \frac{q^2}{\kappa^2} + \dots \right\}, \quad (2.26)$$

onde $\omega_p = \left(\frac{4\pi n_e e^2}{m\epsilon} \right)^{1/2}$ é a frequência de plasma e

$$\gamma_0(r_s) = -\frac{1}{2} \int d\mathbf{q} \{S(\mathbf{q}) - 1\}. \quad (2.27)$$

A correção estática de campo local se reflete em $\gamma_0(r_s)$. Por outro lado, $\gamma_0(r_s)$ é igual a 1/2 e 0, respectivamente, nas aproximações de Hubbard e na RPA.

Discutiremos um teorema útil para o cálculo da energia do estado fundamental, através do fator de estrutura estático ou da função dielétrica. O cálculo da energia do estado fundamental é bem simplificado pela aplicação deste teorema, que permite-nos determinar a energia do estado fundamental E_{ef} através da função dielétrica $\epsilon(\mathbf{q}, \omega)$ dependente do vetor de onda, frequência e da constante de acoplamento r_s (veja por exemplo, Nozières e Pines^[28]).

A energia do estado fundamental de um gás de elétrons é separada,

convencionalmente, em duas partes, a energia cinética do sistema sem interação e a energia de interação. Lembramos que a energia de interação E_{int} no estado fundamental é dada como o valor médio da energia potencial

$$E_{\text{int}} = \langle \psi_0 | \sum_{\mathbf{q}} v(\mathbf{q}) \{ \rho_{\mathbf{q}}^\dagger \rho_{\mathbf{q}} - n_e \} | \psi_0 \rangle = n_e \sum_{\mathbf{q}} v(\mathbf{q}) \{ S(\mathbf{q}) - 1 \}, \quad (2.28)$$

onde $|\psi_0\rangle$ é a função de onda do estado fundamental. Considerando a energia do estado fundamental como função da constante de acoplamento (aqui e^2) que mede a intensidade da interação elétron-elétron, podemos escrevê-la como

$$E_{\text{ef}} = \langle \psi_0 | \sum_i \frac{p_i^2}{2m_e} | \psi_0 \rangle + \langle \psi_0 | \sum_{\mathbf{q}} v(\mathbf{q}) \{ \rho_{\mathbf{q}}^\dagger \rho_{\mathbf{q}} - n_e \} | \psi_0 \rangle. \quad (2.29)$$

E diferenciando E_{ef} com respeito a constante de acoplamento e^2 , obtemos

$$\begin{aligned} \frac{\partial E_{\text{ef}}}{\partial e^2} &= \langle \psi_0 | \frac{\partial H}{\partial e^2} | \psi_0 \rangle + \langle \psi_0 | H | \frac{\partial \psi_0}{\partial e^2} \rangle + \langle \frac{\partial \psi_0}{\partial e^2} | H | \psi_0 \rangle = \\ &= \frac{E_{\text{int}}}{e^2} + E_{\text{ef}} \frac{\partial \langle \psi_0 | \psi_0 \rangle}{\partial e^2}. \end{aligned} \quad (2.30)$$

O primeiro termo do lado direito tem dependência explícita em e^2 , nos dois últimos termos a dependência de e^2 está em ψ_0 e fizemos uso da relação $H|\psi_0\rangle = E_{\text{ef}}|\psi_0\rangle$. Pelo fato da função de onda do estado fundamental ser normalizada, o último termo na Eq. (2.30) é igual a zero. Se considerarmos a constante de acoplamento entre os elétrons como alguma variável α , podemos escrever a Eq. (2.30) como

$$\frac{\partial E_{\text{ef}}}{\partial \alpha} = \frac{E_{\text{int}}(\alpha)}{\alpha}. \quad (2.31)$$

Integrando ambos os lados da Eq. (2.31) com relação a α , entre os limites $\alpha=0$ e $\alpha=e^2$, que é a usual constante de acoplamento, encontramos

$$E_{\text{ef}}(e^2) - E_{\text{ef}}(0) = \int_0^{e^2} \frac{d\alpha}{\alpha} E_{\text{int}}(\alpha). \quad (2.32)$$

$E_{ef}(e^2)$ é a energia do estado fundamental e $E_{ef}(0)$ é a energia do estado fundamental na ausência da interação, com valor $3n_e q_F^2 / 10m_e$. Dessa forma, obtemos o teorema desejado

$$E_{ef}(e^2) = \frac{3n_e q_F^2}{10m_e} + \int_0^{e^2} \frac{d\alpha}{\alpha} E_{int}(\alpha) . \quad (2.33)$$

Para calcular a energia do estado fundamental é necessário resolver a Eq. (2.28),

$$E_{int}(\alpha) = n_e \int \frac{v(q)}{(2\pi)^3} \{ S(q) - 1 \} dq , \quad (2.34)$$

Conhecendo a função dielétrica $\epsilon(q, \omega, e^2)$ do sistema em estudo, determinamos o fator de estrutura estático e assim a energia do estado fundamental E_{ef} . As expressões (2.33) e (2.34) permitem-nos determinar independentemente a contribuição da energia do estado fundamental, que surge da transferência de momento indicada por $E_{int}(q, \alpha)$.

As correlações de curto alcance do sistema de elétrons são descritas diretamente pela função correlação dos pares, $g(r)$, que é uma quantidade física que representa a probabilidade de encontrar uma partícula a uma distância r da outra. As correlações de curto alcance são mais acentuadas na função correlação dos pares, a qual descreve muito bem as correlações do sistema. Ela é definida como a transformada de Fourier de $S(q)$

$$\begin{aligned} S(q) &= 1 + n_e \int dr \exp(iq \cdot r) \{ g(r) - 1 \} \\ g(r) &= 1 + \frac{1}{n_e} \int \frac{dq}{(2\pi)^3} \exp(iq \cdot r) \{ S(q) - 1 \} , \end{aligned} \quad (2.35)$$

como $g(r)$ mede a probabilidade de se encontrar uma partícula a uma distância r da origem, espera-se que seja sempre positivo.

Seja E a energia total de um sistema de elétrons, a compressibilidade K deste sistema é proporcional ao número de partículas N e ao volume ν . A pressão P é definida como a derivada E em relação ao volume ν a N constante,

$$P = - \left(\frac{dE}{d\nu} \right)_N. \quad (2.36)$$

A compressibilidade inversa é proporcional ao volume multiplicado pela derivada da pressão P com respeito ao volume ν , sob as mesmas condições:

$$\frac{1}{K} = - \nu \left(\frac{dP}{d\nu} \right)_N. \quad (2.37)$$

Outro método de calcular K é através da regra de soma da compressibilidade. Esta nos fornece uma exata relação entre a compressibilidade e a função dielétrica estática no limite de comprimentos de ondas longos^[29]. Tomando o limite $q \rightarrow 0$ e $\omega = 0$, a função dielétrica $\epsilon(q, \omega)$ assume a forma

$$\lim_{q \rightarrow 0} \epsilon(q, \omega) = 1 + \frac{4\pi e^2 n_e^2}{q^2} K \quad (2.38)$$

onde $n_e = N/\nu$. Usando a expressão para a compressibilidade da partícula livre $K_f = 3/2n_e E_F$, (E_F é a energia de Fermi), a regra de soma da compressibilidade pode ser escrita como

$$\lim_{q \rightarrow 0} \epsilon(q, \omega) = 1 + \left(\frac{q_{FT}}{q} \right)^2 \frac{K}{K_f}. \quad (2.39)$$

Podemos escrevê-la relacionando $G(q)$ com K e lembrando que $Q_0(q, \omega \rightarrow 0) = -q_{FT}^2/q^2$, obtemos então

$$\lim_{q \rightarrow 0} \epsilon(q, \omega) = 1 - \frac{q_{FT}^2/q^2}{1 + \frac{q_{FT}^2}{q^2} G(q)}. \quad (2.40)$$

Os resultados da aplicação da aproximação STLS, como descrito anteriormente em um gás de elétrons tridimensional, na região de densidades metálicas, foram bastantes satisfatórias, especialmente com relação aos valores da função correlação $g(r)$ para pequenas separações das partículas. As aproximações RPA e Hubbard, nessa região, apresentam valores bastante negativos para $g(r)$, para pequenos

valores de r . A aproximação STLS apresenta $g(r)$ com valores sempre positivos ou levemente negativos, quando os valores negativos são (em módulos) cerca de 40 a 80 vezes menores do que os valores preditos por Hubbard e RPA, respectivamente.

Entretanto, para a compressibilidade do gás, a teoria STLS, como descrita, apresenta valores negativos em densidades tais que $r_s > 5$, o que também acontece com RPA e HA. Este fato poderia sugerir que o gás de elétrons sofreria uma transição para o estado sólido, como discutido por Wigner^[30]. Isto, entretanto, não parece ser o caso, tendo em vista as limitações do esquema STLS. A não existência de metais alcalinos com $r_s > 5$ nos parece indicar que estes sistemas seriam instáveis, justificando assim os valores negativos para a compressibilidade.

No Capítulo 5, usaremos os resultados da função dielétrica estática $\epsilon(q,0)$ e do fator de estrutura estático $S(q)$, no estudo dos efeitos de blindagem das propriedades do gás de polarons.

CAPÍTULO 3

APROXIMAÇÃO STLS NO MODELO DE VISSCHER-FALICOV

Vamos considerar o modelo de Visscher e Falicov^[4] onde gases de elétrons confinados espacialmente em duas dimensões interagem através do potencial de Coulomb nos diversos planos. O gás de elétrons 2D está confinado periodicamente em planos ordenados. Basicamente, o modelo consiste de infinitas camadas de elétrons bidimensionais igualmente espaçadas por uma distância d , cada camada, posicionada em $z=nd$ (onde $n=0, \pm 1, \pm 2, \dots$), que contem n_e elétrons por unidade de área, de massa m_e , em um fundo uniformemente positivo e neutralizante. Os planos estão dispostos perpendicularmente à direção z e todos os vetores estão representados com a notação cartesiana, isto é, $R=(r,z)$ e $Q=(q,q_z)$, sendo q_z restrito à primeira zona de Brillouin. Neste modelo não são considerados os efeitos de tunelamento entre dois diferentes planos.

O modelo de Visscher e Falicov é tradicionalmente conhecido na literatura como o gás de elétrons encamado (layered electron gas-LEG)^[31-41]. Uma característica interessante do modelo é a sua situação intermediária entre um gás de elétrons tridimensional e um gás de elétrons bidimensional. Tem sido largamente usado nos estudos de compostos de metal intercalado com grafite (para os quais foi inicialmente proposto), e das superredes semicondutoras (como discutiremos no capítulo 4).

Este modelo foi primeiramente proposto por Visscher e Falicov^[4], os quais trataram os efeitos de muitos corpos do sistema pela função dielétrica estática na aproximação RPA. Grecu^[32] e Fetter^[36] independentemente discutiram extensivamente os modos de plasmons em tais sistemas. Grecu estendeu o modelo para incluir o tunelamento de elétrons entre os planos adjacentes e calculou a frequência de plasma na aproximação RPA usando o método da equação de movimento. Fetter desprezou o tunelamento de elétrons e no seu cálculo usou a aproximação hidrodinâmica.

A primeira tentativa de se incorporar correlações de curto alcance no gás de elétrons encamado foi feita por Zhang e Tzoar^[8]. Usaram o esquema STLS e calcularam uma expressão para a correção estática de campo local $G(q,q_z)$, que leva em conta as correlações de curto alcance tanto intraplano como interplanos. Seu resultado,

no entanto, está claramente incorreto. Miesenböck e Tosi^[9] também desenvolveram o esquema STLS, porém, em sua expressão da correção de campo local levam em conta apenas as correlações de curto alcance intraplano. Além disto, o cálculo auto-consistente é preterido em favor de uma aproximação pseudoclássica para o fator de estrutura estático. Gold^[10] obteve uma expressão para a correção estática de campo local na aproximação STLS, onde os casos estritamente bidimensional e tridimensional são obtidos a partir da expressão de $G(q, q_z)$. No entanto, Gold não foi capaz de resolver as equações autoconsistentes do esquema STLS, limitando-se a obter resultados através de aproximações simplificadoras. Como será oportunamente observado, o esquema STLS aplicado ao modelo de Visscher e Falicov torna-se bem mais complicado de ser implementado do que quando aplicado ao gás de elétrons bidimensional e tridimensional. Esta dificuldade surge devido à perda da invariância translacional na direção z .

Neste capítulo desenvolveremos em detalhes o cálculo da função dielétrica do LEG. Nosso tratamento segue rigorosamente o trabalho original de Singwi et al^[7], onde o formalismo foi desenvolvido nos casos de sistemas clássicos e quânticos. As aproximações RPA e Hubbard são facilmente derivadas a partir do esquema STLS.

3.1-Caso clássico

A equação de movimento para a função distribuição de uma partícula clássica na presença de um potencial externo $V^{\text{ext}}(\mathbf{r}, t)$ é dada pelo primeiro membro da hierarquia BBGKY. Para nosso sistema encamado designamos a função distribuição de uma partícula na n -ésima camada como $f_n(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$, onde $\mathbf{r}$ e $\mathbf{p}$, são respectivamente os vetores posição e de momento do elétron na camada. A equação de movimento para $f_n(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$ pode ser escrita como

$$\left\{ \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}}{m_e} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} - \frac{\partial V_n^{\text{ext}}(\mathbf{r}, t)}{\partial \mathbf{r}} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \right\} f_n(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) - \sum_m \int d\mathbf{r}' d\mathbf{p}' \frac{\partial V_{n,m}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')}{\partial \mathbf{r}} \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} f_{n,m}(\mathbf{r}, \mathbf{p}; \mathbf{r}', \mathbf{p}', t) = 0 \quad (3.1)$$

onde $V^{n,m}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$ é o potencial de Coulomb devido a interação entre duas partículas carregadas nas camadas n e m , dado por

$$V^{n,m}(\mathbf{r}-\mathbf{r}') = \frac{e^2}{\sqrt{(\mathbf{r}-\mathbf{r}')^2 + (n-m)^2 d^2}} \quad (3.2)$$

e $f_{n,m}(\mathbf{r},\mathbf{p};\mathbf{r}',\mathbf{p}',t)$ é a função distribuição de duas partículas. Assim, a equação de movimento da função distribuição de uma partícula envolve a função distribuição de duas partículas. Por sua vez, a equação de movimento $f_{n,m}(\mathbf{r},\mathbf{p};\mathbf{r}',\mathbf{p}',t)$ depende da função distribuição de três partículas, e assim sucessivamente. Para resolver a Eq. (3.1) é preciso então quebrar essa seqüência infinita de equações. A hipótese básica consiste em substituir a função distribuição clássica para duas partículas $f_{n,m}(\mathbf{r},\mathbf{p};\mathbf{r}',\mathbf{p}',t)$ por um produto de funções distribuição de uma partícula, introduzindo-se nesse desacoplamento a função de correlação estática de equilíbrio dos pares $g_{n,m}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$, que expressa a probabilidade combinada de termos uma partícula em $\mathbf{r}$ e outra em $\mathbf{r}'$; assim

$$f_{n,m}(\mathbf{r},\mathbf{p};\mathbf{r}',\mathbf{p}',t) = f_n(\mathbf{r},\mathbf{p},t) f_m(\mathbf{r}',\mathbf{p}',t) g_{n,m}(\mathbf{r}-\mathbf{r}') . \quad (3.3)$$

Deste modo, o truncamento é feito ao supor que o acoplamento da partícula com o meio é determinado pela correlação dos pares. Tomando $g_{n,m}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')=1$, reproduzimos a aproximação de fases aleatórias clássica, onde não existe acoplamento entre a partícula em consideração e o seu redor. Substituindo a Eq. (3.3) na Eq. (3.1) temos

$$\left\{ \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}}{m_e} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} - \frac{\partial V_n^{\text{ext}}(\mathbf{r},t)}{\partial \mathbf{r}} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} - \sum_m \int d\mathbf{r}' d\mathbf{p}' f_m(\mathbf{r}',\mathbf{p}',t) g_{n,m}(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \frac{\partial V_{n,m}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}{\partial \mathbf{r}} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \right\} f_{n,m}(\mathbf{r},\mathbf{p},t) = 0 . \quad (3.4)$$

O passo seguinte consiste em linearizar a Eq. (3.4), supondo um potencial externo fraco, de acordo com a teoria da resposta linear. Portanto, podemos escrever

$$f_n(\mathbf{r},\mathbf{p},t) = f_n^0(\mathbf{p}) + f_n^1(\mathbf{r},\mathbf{p},t) , \quad (3.5)$$

onde $f_n^1(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$ representa o desvio da função distribuição de equilíbrio induzida pelo potencial externo, ou seja, representa as flutuações do sistema e $f_n^0(\mathbf{p})$ é o termo de equilíbrio. Depois da linearização, podemos obter a seguinte equação para $f_n^1(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$:

$$\left\{ \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \right\} f_n^1(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) - \frac{\partial V^t(\mathbf{r}, t)}{\partial \mathbf{r}} \cdot \frac{\partial f_n^0(\mathbf{p})}{\partial \mathbf{p}} = 0, \quad (3.6)$$

onde o potencial total $V^t(\mathbf{r}, t)$ é a soma do potencial externo e de um potencial efetivo,

$$V^t(\mathbf{r}, t) = V^{\text{ext}}(\mathbf{r}, t) + \sum_{\mathbf{m}} \int d\mathbf{r}' d\mathbf{p}' f_n^1(\mathbf{r}', \mathbf{p}', t) g_{n, \mathbf{m}}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') U^{n, \mathbf{m}}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') . \quad (3.7)$$

Neste ponto, define-se uma interação efetiva para a estrutura encamada ao incluir as correlações de curto alcance, tal que

$$\frac{\partial U^{n, \mathbf{m}}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{\partial \mathbf{r}} = g_{n, \mathbf{m}}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \frac{\partial V^{n, \mathbf{m}}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{\partial \mathbf{r}} , \quad (3.8)$$

onde o potencial $U^{n, \mathbf{m}}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ é responsável pelos efeitos de correlação entre as partículas do sistema e sua transformada de Fourier pode ser obtida como

$$U^{n, \mathbf{m}}(\mathbf{q}) = V^{n, \mathbf{m}}(\mathbf{q}) + \frac{1}{(2\pi)^2 n_e} \int d^2 \mathbf{q}' V^{n, \mathbf{m}}(\mathbf{q}') \frac{\mathbf{q} \cdot \mathbf{q}'}{q^2} \{ S^{n, \mathbf{m}}(\mathbf{q} - \mathbf{q}') - 1 \} , \quad (3.9)$$

na qual o segundo termo da direita representa os efeitos da correção de campo local, incorporando as correlações de curto alcance do sistema. Na Eq. (3.9) a transformada de Fourier do potencial nu é dado por

$$V^{n, \mathbf{m}}(\mathbf{q}) = v(\mathbf{q}) \exp(-q|\mathbf{n} - \mathbf{m}|d) . \quad (3.10)$$

onde $v(\mathbf{q}) = 2\pi e^2 / \epsilon q$ (o potencial de Coulomb em duas dimensões). O fator de estrutura estático $S^{n, \mathbf{m}}(\mathbf{q} - \mathbf{q}')$, que é uma quantidade observável 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

$$S^{n,m}(\mathbf{q}) = \delta_{n,m} + n_e \int d\mathbf{r} \exp(i(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r})) \{g_{n,m}(\mathbf{r}) - \delta_{n,m}\} . \quad (3.11)$$

O fator de estrutura estático está relacionado com a função dielétrica do gás de elétrons encamado através do teorema da dissipação-flutuação pela seguinte relação

$$S^{n,m}(\mathbf{q}) = - \frac{q^2}{4\pi n_e e^2} \int d\omega \text{Im} \frac{1}{\epsilon^{n,m}(\mathbf{q}, \omega)} . \quad (3.12)$$

A função dielétrica $\epsilon^{n,m}(\mathbf{q}, \omega)$, que será brevemente definida, é uma funcional de $S^{n,m}(\mathbf{q})$. Devido a linearidade da Eq. (3.6), sua solução pode ser encontrada considerando-se apenas uma componente de Fourier para o potencial externo

$$V^{\text{ext}}(\mathbf{r}, t) = V^{\text{ext}}(\mathbf{q}, \omega) \exp[i(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r} - \omega t)] + \text{c.c.} . \quad (3.13)$$

Ao calcular a transformada de Fourier das Eqs. (3.6) e (3.8) encontramos

$$\begin{aligned} \{ \omega - \mathbf{q} \cdot \mathbf{v} \} f_n^1(\mathbf{q}, \mathbf{p}, \omega) - V^{\text{ext}}(\mathbf{q}, \omega) \mathbf{q} \cdot \frac{\partial f_n^0(\mathbf{p})}{\partial \mathbf{p}} - \\ - \sum_m \mathbf{q} \cdot \frac{\partial f_n^0(\mathbf{p})}{\partial \mathbf{p}} U^{n,m}(\mathbf{q}) \int d\mathbf{p}' f_m^1(\mathbf{q}', \mathbf{p}', \omega) = 0 . \end{aligned} \quad (3.14)$$

A densidade de partícula induzida $\rho_n(\mathbf{r}, t)$ na n -ésima camada é definida por

$$\rho_n(\mathbf{q}, \omega) = \int d\mathbf{p} f_n^1(\mathbf{q}, \mathbf{p}, \omega) \quad (3.15)$$

e a sua equação integral explícita pode ser obtida da Eq. (3.14) por

$$\rho_n(\mathbf{q}, \omega) = \chi_{2D}^n(\mathbf{q}, \omega) \left\{ V^{\text{ext}}(\mathbf{q}, \omega) + \sum_m U^{n,m}(\mathbf{q}) \rho_m(\mathbf{q}, \omega) \right\} \quad (3.16)$$

onde

$$\chi_{2D}^n(\mathbf{q}, \omega) = \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^2} \frac{\mathbf{q} \cdot \frac{\partial f_n^0(\mathbf{p})}{\partial \mathbf{p}}}{\omega - \mathbf{q} \cdot \mathbf{v} + i\delta} . \quad (3.17)$$

A relação (Eq. (3.16)) permite-nos definir a função resposta densidade-densidade com interação $\chi(\mathbf{q}, q_z, \omega)$. Para determiná-la, lembramos que o modelo do gás de elétrons encamado exige uma periodicidade d na direção z . Dessa forma, usamos o seguinte *ansatz* para a Eq. (3.16) :

$$\rho_n(\mathbf{q}, q_z, \omega) = \rho(\mathbf{q}, \omega) \exp(iq_z n d) \quad (3.18)$$

e

$$\chi_{2D}^n(\mathbf{q}, q_z, \omega) = \chi_{2D}^0(\mathbf{q}, \omega) \exp(iq_z n d) . \quad (3.19)$$

Devido a periodicidade do sistema na direção z , o vetor de onda q_z é restrito a primeira zona de Brillouin, isto é, $-\pi/d < q_z < \pi/d$. Com este *ansatz*, a Eq. (3.16) torna-se

$$\rho(\mathbf{q}, q_z, \omega) = \frac{\chi_{2D}^0(\mathbf{q}, \omega) V^{\text{ext}}(\mathbf{q}, \omega)}{1 - \chi_{2D}^0 U(\mathbf{q}, q_z)} , \quad (3.20)$$

onde $\chi_{2D}^0(\mathbf{q}, \omega)$ é a função resposta densidade-densidade sem interação e $U(\mathbf{q}, q_z)$ é a transformada de Fourier devido a interação efetiva dada por

$$U(\mathbf{q}, q_z) = \sum_{\mathbf{m}} U^{\mathbf{n}, \mathbf{m}}(\mathbf{q}) \exp(iq_z (\mathbf{n} - \mathbf{m}) d) , \quad (3.21)$$

o potencial efetivo pode ser escrito em função da correção de campo local $G(\mathbf{q}, q_z)$ como

$$U(\mathbf{q}, q_z) = V(\mathbf{q}, q_z) \{1 - G(\mathbf{q}, q_z)\} , \quad (3.22)$$

onde

$$V(\mathbf{q}, q_z) = \frac{2\pi e^2}{\epsilon q} \frac{\sinh(qd)}{\cosh(qd) - \cos(q_z d)} = \frac{2\pi e^2}{q} F(\mathbf{q}, q_z) \quad (3.23)$$

é o potencial de Coulomb $V(\mathbf{q}, q_z)$ devido à interação entre os elétrons em diferentes planos e $F(\mathbf{q}, q_z)$ é o fator de forma. Veremos que $F(\mathbf{q}, q_z)$ tende para a unidade no

limite de $qd \gg 1$, reproduzindo o resultado do potencial de Coulomb de um gás de elétrons bidimensional. No outro limite, $V(\mathbf{q}, q_z)$ comporta-se como $4\pi e^2 / \epsilon(q^2 + q_z^2)$, este resultado corresponde a um gás de elétrons interagindo via potencial de Coulomb tridimensional em coordenadas cilíndricas. Encontramos $G(\mathbf{q}, q_z)$ substituindo a Eq. (3.9) na Eq. (3.21), tomando a transformada de Fourier para $V^{\mathbf{n}, \mathbf{m}}(\mathbf{q})$ e $S^{\mathbf{n}, \mathbf{m}}(\mathbf{q}-\mathbf{q}')$ e comparando com a Eq. (3.22), temos

$$G(\mathbf{q}, q_z) = - \frac{d}{(2\pi)^3 n_e} \int_{-\pi/d}^{\pi/d} dq'_z \int d^2 \mathbf{q}' \frac{(\mathbf{q}' \cdot \mathbf{q} + q'_z q_z) V(\mathbf{q}', q'_z)}{(q^2 + q_z^2) V(\mathbf{q}, q_z)} \times \\ \times \{S(\mathbf{q}' - \mathbf{q}, q'_z - q_z) - 1\}, \quad (3.24)$$

onde

$$S(\mathbf{q}, q_z) = \sum_{\mathbf{n}} \exp\{i q_z d(\mathbf{n} - \mathbf{m})\} S^{\mathbf{n}, \mathbf{m}}(\mathbf{q}). \quad (3.25)$$

Este é o principal resultado para a correção de campo local do gás de elétrons encamado no esquema STLS. As flutuações da densidade de carga $\rho(\mathbf{q}, q_z, \omega)$, induzidas pelo potencial externo $V^{\text{ext}}(\mathbf{q}, \omega)$, são determinadas por

$$\rho(\mathbf{q}, q_z, \omega) = \chi(\mathbf{q}, q_z, \omega) V^{\text{ext}}(\mathbf{q}, q_z, \omega). \quad (3.26)$$

A generalização do formalismo de potencial de polarização para o gás de elétrons encamado permite escrever a função resposta densidade-densidade do sistema com interação como

$$\chi(\mathbf{q}, q_z, \omega) = \frac{\chi_{2D}^0(\mathbf{q}, \omega)}{1 - V(\mathbf{q}, q_z) \{1 - G(\mathbf{q}, q_z)\} \chi_{2D}^0(\mathbf{q}, \omega)}. \quad (3.27)$$

Assim, $\chi(\mathbf{q}, q_z, \omega)$ do LEG é escrita em termos da susceptibilidade $\chi_{2D}^0(\mathbf{q}, \omega)$ do sistema de elétrons bidimensional livre, levando em consideração as correlações de curto alcance tanto interplanos como intraplano. O ponto essencial de nossos resultados é que a solução das Eqs. (3.24) e (3.27) junto com a relação

$$S(\mathbf{q}, q_z) = - \frac{1}{\pi \hbar_e} \int d\omega \text{Im} \chi(\mathbf{q}, q_z, \omega) \quad (3.28)$$

quando resolvidas autoconsistentemente, fornecem a resposta dielétrica para o gás de elétrons encamado.

3.2-Caso quântico

A utilização do formalismo discutido na seção 3.1 deste capítulo para a determinação da função resposta densidade-densidade 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

$$\chi(\mathbf{q}, q_z, \omega) = \frac{\chi_{2D}^0(\mathbf{q}, \omega)}{1 - V(\mathbf{q}, q_z) \{1 - G(\mathbf{q}, q_z)\} \chi_{2D}^0(\mathbf{q}, \omega)} \quad (3.29)$$

onde $\chi_{2D}^0(\mathbf{q}, \omega)$ é a função resposta densidade-densidade quântica do sistema sem interação dada por

$$\chi_{2D}^0(\mathbf{q}, \omega) = -2 \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^2} \frac{f_{\mathbf{q}+\mathbf{p}} - f_{\mathbf{p}}}{E_{\mathbf{p}+\mathbf{q}} - E_{\mathbf{p}} - \hbar\omega + i\zeta} \quad (\zeta \rightarrow 0) \quad (3.30)$$

Aqui, $f_{\mathbf{p}}$ é a função distribuição quântica representando fermions ou bosons, $E_{\mathbf{p}}$ representa a energia de uma partícula do sistema em um estado de momento $\mathbf{p}$.

Como no caso clássico, diversas funções $G(\mathbf{Q})$ foram propostas no estudo de diversos sistemas quânticos degenerados. No caso de tomarmos $G(\mathbf{q}, q_z)=0$ na Eq. (3.29) obtemos a aproximação de fases aleatórias, desenvolvida por Bohm e Pines^[42] e interpretada diagramaticamente por Gell-Mann e Bruckner^[43]. A primeira correção de campo local no gás de elétrons degenerado foi introduzida por Hubbard^[26] que usou técnicas diagramáticas de teoria de campos.

Conforme assinalado anteriormente, o que muda na expressão para $\chi(\mathbf{q}, q_z, \omega)$ é a forma de $G(\mathbf{Q})$ para diversas aproximações. De acordo com Mahan^[11], em tom jocoso, podemos dizer que " $G(\mathbf{Q})$ é dependente do tempo por causa de seu

aprimoramento ao longo dos anos". No entanto, apresentamos o cálculo formal de $G(q, q_z)$ na aproximação STLS para sistemas quânticos.

O Hamiltoniano do sistema de elétrons degenerado imerso em um fundo positivo e uniforme de modo a garantir a neutralidade de cargas do sistema, na linguagem de segunda quantização é indicado por (para unidades em que $\hbar=1$)

$$H = \sum_{\mathbf{p}, n} E_{\mathbf{p}, n} c_{\mathbf{p}, n}^\dagger c_{\mathbf{p}, n} + \frac{1}{2A} \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{k}, \mathbf{q}} \sum_{n, m} V^{n, m}(\mathbf{q}) c_{\mathbf{p}+\mathbf{q}, n}^\dagger c_{\mathbf{k}-\mathbf{q}, m}^\dagger c_{\mathbf{k}, m} c_{\mathbf{p}, n}, \quad (3.31)$$

onde $c_{\mathbf{p}, n}^\dagger$ e $c_{\mathbf{p}, n}$ são respectivamente os operadores de criação e aniquilação de elétrons no estado de momento $\mathbf{p}$ da n -ésima camada, e $V^{n, m}(\mathbf{q})$ é dado pela Eq. (3.10), A é a área da camada e $E_{\mathbf{p}, n} = p^2/2m_e$.

Usemos o método da equação de movimento^[11] 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 flutuação da densidade $\rho(\mathbf{q}, t)$, em termos dos operadores de criação e destruição, pode ser escrito como

$$\rho_n(\mathbf{q}, t) = \sum_{\mathbf{p}} c_{\mathbf{p}+\mathbf{q}, n}^\dagger c_{\mathbf{p}, n}. \quad (3.32)$$

Sua primeira derivada no tempo é

$$\frac{\partial \rho_n(\mathbf{q}, t)}{\partial t} = -[H, \rho_n(\mathbf{q}, t)] = \sum_{\mathbf{p}} (E_{\mathbf{p}+\mathbf{q}, n} - E_{\mathbf{p}, n}) c_{\mathbf{p}+\mathbf{q}, n}^\dagger c_{\mathbf{p}, n}, \quad (3.33)$$

a qual é independente da interação de Coulomb. Portanto, a segunda derivada no tempo de $\rho_n(\mathbf{q}, t)$ permite-nos expressar a inclusão das interações elétron-elétron:

$$\begin{aligned} -\frac{\partial^2 \rho_n(\mathbf{q}, t)}{\partial t^2} &= [H, [H, \rho_n(\mathbf{q}, t)]] = \sum_{\mathbf{p}} (E_{\mathbf{p}+\mathbf{q}, n} - E_{\mathbf{p}, n})^2 c_{\mathbf{p}+\mathbf{q}, n}^\dagger c_{\mathbf{p}, n} + \\ &+ \frac{1}{A} \sum_{\mathbf{q}'} \sum_{m} \frac{2\pi e^2}{q'} \exp(-\mathbf{q}' | \mathbf{n}-\mathbf{m} | d) \frac{\mathbf{q} \cdot \mathbf{q}'}{m_e} \rho_n(\mathbf{q}-\mathbf{q}', t) \rho_m(\mathbf{q}', t), \end{aligned} \quad (3.34)$$

onde o primeiro somatório representa a contribuição da energia cinética e o segundo surge das interações entre as partículas.

No segundo somatório, o termo com $q'=q$ corresponde ao termo da interação que aparece na RPA:

$$\sum_{\mathbf{m}} \frac{2\pi e^2 q n_e}{m_e} \exp(-q|\mathbf{n}-\mathbf{m}|d) \rho_{\mathbf{m}}(\mathbf{q},t) = \omega^2(\mathbf{q}) \sum_{\mathbf{m}} \exp(-q|\mathbf{n}-\mathbf{m}|d) \rho_{\mathbf{m}}(\mathbf{q},t), \quad (3.35)$$

onde $\omega(\mathbf{q})$ é a relação de dispersão de plasmon, expressa por $\omega^2(\mathbf{q})=2\pi e^2 q n_e/m_e$ para o GE2D. A soma, abrangendo os termos $q' \neq q$, que não é considerada em RPA, corresponde a uma correção pequena, porque apresenta produtos de flutuações da densidade $\rho_{\mathbf{n}}(\mathbf{q})$, cada uma delas expressa por uma soma sobre fases aleatórias.

As Eqs. (3.34) e (3.35) podem ser escritas como

$$\begin{aligned} -\frac{\partial^2 \rho_{\mathbf{n}}(\mathbf{q},t)}{\partial^2 t} &= \sum_{\mathbf{p}} (E_{\mathbf{p}+\mathbf{q},\mathbf{n}} - E_{\mathbf{p},\mathbf{n}})^2 c_{\mathbf{p}+\mathbf{q},\mathbf{n}}^\dagger c_{\mathbf{p},\mathbf{n}} + \\ &+ \omega^2(\mathbf{q}) \sum_{\mathbf{m}} \exp(-q|\mathbf{n}-\mathbf{m}|d) \rho_{\mathbf{m}}(\mathbf{q},t) + \\ &+ \frac{1}{A} \sum_{\mathbf{q}' \neq \mathbf{q}} \sum_{\mathbf{m}} \frac{2\pi e^2}{q'} \exp(-q'|\mathbf{n}-\mathbf{m}|d) \frac{\mathbf{q} \cdot \mathbf{q}'}{m_e} \rho_{\mathbf{n}}(\mathbf{q}-\mathbf{q}',t) \rho_{\mathbf{m}}(\mathbf{q}',t). \end{aligned} \quad (3.36)$$

Separamos o termo RPA e a correção de campo local, respectivamente o primeiro e o segundo somatório do lado direito. Se o último somatório do lado direito da equação for nulo, a matriz densidade $\rho_{\mathbf{n}}(\mathbf{q},t)$ vai oscilar com frequência de plasma $\omega(\mathbf{q})$.

Para incluir as correlações de curto alcance, o termo não linear na Eq. (3.36) (isto é, o terceiro termo do lado direito) deve ser conservado. O passo importante agora consiste em tratar $\rho_{\mathbf{n}}(\mathbf{q}-\mathbf{q}',t) \rho_{\mathbf{m}}(\mathbf{q}',t)$ de 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 as posições por uma média no gás de elétrons. Se expressarmos $\rho_{\mathbf{n}}(\mathbf{q},t)$ em termos das coordenadas eletrônicas, isto é, $\rho_{\mathbf{n}}(\mathbf{q},t) = \sum_{\mathbf{i}} \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_{\mathbf{i}}(\mathbf{n}))$, podemos obter

$$\rho_{\mathbf{m}}(\mathbf{q}') \rho_{\mathbf{n}}(\mathbf{q}-\mathbf{q}') = \left\{ \sum_{\mathbf{i}} \exp[i\mathbf{q}' \cdot \mathbf{r}_{\mathbf{i}}(\mathbf{m})] \right\} \left\{ \sum_{\mathbf{j}} \exp[i(\mathbf{q}-\mathbf{q}') \cdot \mathbf{r}_{\mathbf{j}}(\mathbf{n})] \right\}$$

$$\rho_m(q')\rho_n(q-q') = \left\{ \sum_i \exp[iq \cdot r_i(m)] \right\} \left\{ \sum_j \exp[(iq-q') \cdot (r_j(n) - r_i(m))] \right\}$$

$$\rho_m(q')\rho_n(q-q') = \rho_m(q,t) S^{n,m}(q-q') . \quad (3.37)$$

A Eq. (3.36) pode ser reescrita como

$$\frac{\partial^2 \rho_n(q,t)}{\partial t^2} = - \sum_p (E_{p+q,n} - E_{p,n})^2 c_{p+q,n}^\dagger c_{p,n} -$$

$$- \frac{q^2 n_e}{m_e} \sum_m U^{n,m}(q) \rho_m(q',t) , \quad (3.38)$$

onde

$$U^{n,m}(q) = V^{n,m}(q) + \frac{1}{(2\pi)^2 n_e} \int d^2 q' V^{n,m}(q') \frac{q \cdot q'}{q^2} \{ S^{n,m}(q-q') - 1 \} \quad (3.39)$$

que é a mesma expressão da Eq. (3.9).

O fator de estrutura estático $S(q, q_z)$, Eq. (3.28), é uma quantidade física de fundamental importância na determinação das propriedades de blindagem do sistema de elétrons interagentes. $S(q, q_z)$ está relacionado pela função resposta densidade-densidade $\chi(q, q_z, \omega)$ dependente da frequência e do vetor de onda através de

$$S(q, q_z) = - \frac{\hbar}{\pi n_e} \int_0^\infty d\omega \operatorname{Im} \chi(q, q_z, \omega) . \quad (3.40)$$

que é uma das maneiras de escrever o teorema da flutuação-dissipação.

É do nosso conhecimento que a função resposta densidade-densidade $\chi(q, q_z, \omega)$ possui dois tipos de singularidades no plano complexo ω : uma está associado à excitação do contínuo de pares elétrons-buracos, e a outra ao modo de plasmon localizado acima do contínuo. Podemos escrever o fator de estrutura da seguinte maneira

$$S(q, q_z) = - \frac{\hbar}{\pi n_e} \int_0^\infty d\omega \chi(q, q_z, i\omega) . \quad (3.41)$$

Portanto, pela aproximação de campo médio, podemos reescrever o fator de estrutura da seguinte maneira

$$S(\mathbf{q}, q_z) = - \frac{\hbar}{\pi \hbar_e} \int_0^\infty d\omega \frac{\chi_{2D}^0(\mathbf{q}, \omega)}{1 - V(\mathbf{q}, q_z) \{1 - G(\mathbf{q}, q_z)\} \chi_{2D}^0(\mathbf{q}, \omega)} \quad (3.42)$$

Apesar da expressão para a resposta livre $\chi_{2D}^0(\mathbf{q}, i\omega)$ ter sido calculada explicitamente por Stern^[44], a mesma causa dificuldades numéricas quando é usada no integrando da Eq. (3.42). O procedimento usual dos cálculos numéricos consiste em separar o fator de estrutura em dois termos, um desses termos surge das contribuições dos pares elétrons-buracos e o outro das contribuições de plasmons. Para calcular o fator de estrutura $S(\mathbf{q}, q_z)$ devemos fazer a integração sobre as frequências evitando as descontinuidades em $\chi(\mathbf{q}, q_z, \omega)$ de uma maneira apropriada. Para isto no entanto, precisaremos escrever de uma outra forma $\chi(\mathbf{q}, q_z, \omega)$, seguindo a análise de Ioriatti e Isihara^[45,46].

Para nossos propósitos é conveniente extrair da função resposta não interagente, indicada pela Eq. (3.30), a parte imaginária pura da frequência. Assim

$$\chi_{2D}^0(\mathbf{q}, i\omega) = -4 \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^2} f_0(\mathbf{p}) \frac{A(\mathbf{p}, \mathbf{q})}{A^2(\mathbf{p}, \mathbf{q}) + \hbar^2 \omega^2}, \quad (3.43)$$

onde

$$A(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \frac{\hbar^2 q^2}{2m_e} + \frac{\hbar^2 \mathbf{p} \cdot \mathbf{q}}{m_e}. \quad (3.44)$$

Ioriatti e Isihara^[45,46] mostraram que esta expressão para $\chi_{2D}^0(\mathbf{q}, i\omega)$ tem a mesma forma que o fluxo elétrico passando através de um disco de raio $\rho = 2q_F/p$ (q_F é o vetor de onda de Fermi) a uma distância $z = 2m_e\omega/\hbar q^2$ de um disco condutor de raio unitário. Reescrevendo a integral da Eq. (3.43), obtemos

$$\chi_{2D}^0(\mathbf{q}, i\omega) = \frac{2}{\pi^2} \int p \, dp \, f_0(p) \int_0^\infty dx \sin\left(\frac{\hbar^2 q^2}{2m_e} x\right) J_0\left(\frac{\hbar^2 q p}{2m_e} x\right) \exp(-\hbar \omega x) \quad (3.45)$$

onde $J_0(x)$ é a função de Bessel de ordem zero. Definindo as variáveis $u = \hbar^2 q^2 x / 2m_e$, $\rho = 2q_F/q$ e $|z| = 2m_e\omega/\hbar q^2$ e integrando na variável p obtemos

$$\chi_{2D}^0(\rho, z) = \frac{n_e m_e}{\pi \hbar^2} \int_0^\infty dx \frac{\sin(x)}{x} \exp(-|z|x) J_1(\rho x) \quad (3.46)$$

onde $J_1(x)$ é a função de Bessel de primeira ordem. Tendo em vista a analogia mencionada acima, escolhe-se um sistema de coordenadas esferoidais oblatas em que

$$\rho = \frac{2q_F}{q} = \cosh \zeta \sin \theta \quad (3.47)$$

e

$$|z| = \frac{2m_e \omega}{\hbar q^2} = \sinh \zeta \cos \theta, \quad (3.48)$$

onde $0 \leq \theta \leq \pi/2$ e $0 \leq \zeta \leq \infty$. Integrando sobre a variável x obtemos uma expressão muito simples para a função resposta densidade-densidade livre:

$$\chi_{2D}^0(q, i\omega) \rightarrow \chi_{2D}^0(\theta) = - \frac{m_e}{\pi \hbar^2} \{1 - \cos(\theta)\}. \quad (3.49)$$

Note que esta expressão não contém a variável ζ . Através de um cálculo direto mostra-se que o fator de estrutura pode ser escrito como

$$S(q, q_z) = - \frac{m_e}{\pi^2 n_e \hbar} \int_0^{\alpha(q)} \left(\frac{d\omega}{dz} \right) \left(\frac{dz}{d\theta} \right) \frac{(1 - \cos \theta) d\theta}{1 + V(q, q_z) \{1 - G(q, q_z)\} \frac{m_e}{\pi \hbar^2} \{1 - \cos(\theta)\}} \quad (3.50)$$

ou explicitamente

$$S(q, q_z) = - \frac{q^2}{2\pi^2 n_e} \int_0^{\alpha(\rho)} \left\{ \sqrt{\rho^2 - \sin^2 \theta} + \frac{\rho^2 \cot^2 \theta}{\sqrt{\rho^2 - \sin^2 \theta}} \right\} \times \\ \times \left\{ \frac{(1 - \cos \theta) d\theta}{1 + V(q, q_z) \{1 - G(q, q_z)\} \frac{m_e}{\pi \hbar^2} \{1 - \cos(\theta)\}} \right\} \quad (3.51)$$

onde

$$\alpha(\rho) = \begin{cases} \frac{\pi}{2}, & \text{para } \rho > 1 \\ \sin^{-1}(\rho), & \text{para } \rho < 1, \end{cases} \quad (3.52)$$

Estas transformações permitem, de uma maneira muito eficiente, o cálculo da energia de correlação, nos regimes de baixa e alta densidade, na aproximação de RPA^[45]. Como veremos a seguir, este resultado nos proporcionará uma notável simplificação nos nossos cálculos autoconsistentes. Finalmente para o plano $n=0$, o fator de estrutura toma a forma

$$S_{n=0}(\mathbf{q}) = -\frac{d}{2\pi} \int_{-\frac{\pi}{d}}^{\frac{\pi}{d}} dq_z S(\mathbf{q}, q_z), \quad (3.53)$$

As Eqs. (3.24), (3.51) constituem um sistema de equações-integrais que devem ser resolvidas autoconsistentemente, de modo a determinar a correção estática de campo local $G(\mathbf{q}, q_z)$ e o fator de estrutura estático $S(\mathbf{q}, q_z)$.

3.3-Ausência de correlações interplanos.

Em vários casos (a distância interplanos é bem maior que a distância inter-elétrons no plano de referência, p. ex.), as correlações de curto alcance intraplano são muito mais importantes do que aquelas interplanos. Deste modo é possível desprezar as correlações de curto alcance entre os planos como sugerido por Miesenböck e Tosi^[9]. Esta aproximação envolve uma razoável diminuição dos cálculos numéricos. Se na definição do potencial efetivo dado pelas Eqs. (3.9) e (3.39), tomarmos o segundo termo independente dos diversos planos, isto é, $V^{\mathbf{n}, \mathbf{m}}(\mathbf{q}') = v(\mathbf{q}')$, e usando o mesmo procedimento anteriormente desenvolvido, podemos escrever a expressão da interação efetiva $U(\mathbf{q}, q_z)$, como sendo

$$U(\mathbf{q}, q_z) = V(\mathbf{q}, q_z) - v(\mathbf{q}) G(\mathbf{q}), \quad (3.54)$$

e a função resposta densidade-densidade é dada por

$$\chi(\mathbf{q}, q_z, \omega) = \frac{\chi_{2D}^0(\mathbf{q}, \omega)}{1 - \frac{2\pi e^2}{q} \{F(\mathbf{q}, q_z) - G(\mathbf{q})\} \chi_{2D}^0(\mathbf{q}, \omega)}, \quad (3.55)$$

que leva em conta apenas correlações de curto alcance intraplano. A expressão de $G(\mathbf{q})$

em sua versão estritamente bidimensional, Eq. (3.24), é dada por

$$G(\mathbf{q}) = - \frac{1}{(2\pi)^2 n_e} \int d^2 \mathbf{q}' \frac{\mathbf{q} \cdot \mathbf{q}' v(\mathbf{q}')}{q^2 v(\mathbf{q})} \{ S(\mathbf{q} - \mathbf{q}') - 1 \}. \quad (3.56)$$

A Eq. (3.56) é a expressão da correção de campo local em 2D. A Eq. (3.56) é uma funcional do fator de estrutura estático do sistema. O fator de estrutura do sistema $S(\mathbf{q}, q_z)$ pode ser representado como a soma das contribuições das várias camadas. Assim

$$S(\mathbf{q}, q_z) = \sum_{\mathbf{n}} S_{\mathbf{n}}(\mathbf{q}) \exp(-i q_z n d). \quad (3.57)$$

Finalmente, o fator de estrutura estático, para $n=0$, nesta aproximação, é dado por

$$S_{n=0}(\mathbf{q}) = - \frac{q^2 d}{4\pi^3 n_e} \int_{-\frac{\pi}{d}}^{\frac{\pi}{d}} dq_z \int_0^{\alpha(\rho)} \left\{ \sqrt{\rho^2 - \sin^2 \theta} + \frac{\rho^2 \cot^2 \theta}{\sqrt{\rho^2 - \sin^2 \theta}} \right\} \times \\ \times \left\{ \frac{(1 - \cos \theta) d\theta}{1 + \frac{2\pi e^2}{q} \{ F(\mathbf{q}, q_z) - G(\mathbf{q}) \} \frac{m_e}{\pi \hbar^2} \{ 1 - \cos(\theta) \}} \right\}. \quad (3.58)$$

No caso geral, as Eqs. (3.56) e (3.58) constituem um sistema de equações-integrais que devem ser resolvidas autoconsistentemente, de modo a determinar a correção de campo local $G(\mathbf{q})$ e o fator de estrutura estático $S(\mathbf{q})$.

Estes resultados que acabamos de deduzir serão usados no Capítulo 4 ao estudarmos as propriedades estáticas e dinâmicas de uma superrede semicondutora.

CAPÍTULO 4

CORRELAÇÕES ELETRÔNICAS EM SUPERREDES SEMICONDUTORAS

Neste capítulo, prosseguimos o estudo do sistema do gás de elétrons encamado, apresentando e discutindo os resultados para suas propriedades estáticas e dinâmicas nas várias aproximações, RPA, HA e STLS no caso de superredes semicondutoras.

Aqui nos deteremos ao estudo das propriedades de muitos corpos numa superrede composta pelos materiais, GaAs-Ga_xAl_{1-x}As em que a lacuna entre bandas no GaAs é menor do que em Ga_xAl_{1-x}As, dando origem a uma descontinuidade em ambas as bandas de condução e valência do sistema da superrede resultante. Se doparmos as camadas de Ga_xAl_{1-x}As com impurezas doadoras (é feito pelo método de dopagem por modulação), os elétrons serão liberados para o lado do GaAs deixando impurezas ionizadas nas camadas de Ga_xAl_{1-x}As. O poço de potencial unidimensional quantiza o movimento dos elétrons na direção z, e assim a banda de condução do GaAs será dividida em uma série de sub-bandas (se as funções de onda do elétron em poços de potencial adjacentes não se sobrepõem) ou minibandas (se o fazem). Cada uma representa um contínuo de estados tipo elétrons livres no plano x-y. Se as funções de onda do elétron da camada adjacente não se sobrepõem, então os poços quantizados dão origem a sub-bandas. A função de onda apropriada para o elétron com (no plano x-y) momento q , na s -ésima sub-banda e na n -ésima camada é

$$|s,n,q\rangle = \exp(iq.r) \zeta_s(z-nd) , \quad (4.1)$$

r e q são os vetores de onda bidimensionais no plano x-y. A função envelope $\zeta_s(z-nd)$ designa o confinamento dos elétrons na n -ésima camada, as quais estão posicionadas em $z=nd$ com $n = \pm 1, \pm 2, \pm 3$, etc. O elétron está essencialmente preso na camada. Por outro lado, se as funções de onda do elétron nas camadas adjacentes se sobrepõem, é mais apropriado usar uma soma do tipo acoplamento-forte dos estados, de maneira que o elétron é considerado como tendo um movimento quase livre na direção z. As funções de onda no modelo de acoplamento forte são da seguinte forma

$$|s, q_z, q\rangle = \sum_n \exp(iq_z n d) |s, n, q\rangle, \quad (4.2)$$

onde d é o parâmetro de rede da superrede. Porém, neste trabalho nos restringimos apenas ao caso onde o tunelamento de elétrons entre as camadas adjacentes pode ser desprezado.

Seguiremos nossa discussão no limite das mini-bandas planas, em que os portadores estão confinados em poços quânticos. A razão pela qual as mini-bandas são chamadas planas é que a energia do elétron não depende do momento p_z , de maneira que a velocidade na direção z , $\partial E / \partial p_z$, anula-se^[47]. Dessa forma, as mini-bandas tornam-se sub-bandas, e as funções de onda do elétron em adjacentes camadas não se sobrepõem. As funções de onda do elétron são dadas pela Eq. (4.1) e assumiremos que a estrutura da sub-banda é a mesma em todos os poços. Em nossa aproximação escolhemos

$$|\zeta_s(z-nd)|^2 = \delta(z-nd). \quad (4.3)$$

Desta forma, estamos assumindo que cada camada seja estritamente bidimensional e não esteja havendo sobreposição entre camadas adjacentes. Os elétrons em diferentes planos interagem somente via interação de Coulomb, e desprezamos o termo de interação devido ao potencial imagem, pois o mesmo depende da diferença entre as constantes dielétricas dos dois materiais e, para o caso de GaAs e AlGaAs, essas constantes são muito próximas. Este termo induz uma correção comprovadamente muito pequena. Estamos também desprezando a possibilidade de acoplamento elétron-fônon-LO e consideramos a temperatura igual a zero, indicando que a mais baixa sub-banda esteja totalmente preenchida.

Estes sistemas semicondutores exibem consideráveis propriedades físicas, que foram intensivamente estudadas nas últimas duas décadas. Os modos coletivos ou de plasmons de uma única camada^[44] apresentam sua relação de dispersão $\omega(q)$ proporcional a raiz quadrada do vetor de onda q no limite de comprimentos de ondas longos. Por outro lado, a frequência de plasma tridimensional^[23] no limite de comprimentos de ondas longos tem um valor constante independente do vetor de onda.

As propriedades, tanto de transportes como ópticas, são profundamente afetadas ao reduzir a dimensionalidade do sistema, conduzindo-nos a interessantes efeitos físicos. Stern^[44] foi o primeiro a mostrar que o espectro das oscilações de plasmons do gás de elétrons confinado em duas dimensões não apresenta lacuna e a frequência de plasmon é proporcional à raiz quadrada do vetor de onda bidimensional. Das Sarma e Quinn^[33], dentre outros^[31-41], utilizaram o modelo de Visscher-Falicov para discutir os modos de plasmons nas superredes semicondutoras.

Freitas e Studart^[48] estudaram os efeitos das excitações coletivas em heteroestruturas e poços quânticos na presença da largura finita da camada eletrônica e, ao considerar as correlações eletrônicas, foram além da RPA. Experimentalmente, as oscilações de plasmons em superredes foram estudadas por espectroscopia de Raman. Olego et al.^[39] observaram as excitações de plasmons de um gás de elétrons encamado (LEG) por espalhamento inelástico de luz em heteroestruturas do tipo GaAs-(AlGa)As, e seus resultados mostram o comportamento previsto teoricamente.

4.1-Solução das equações autoconsistentes no esquema STLS: Correção de campo local e fator de estrutura estático.

A expressão do fator de estrutura estático, dado pelas Eqs. (3.51) e (3.53), é reproduzida aqui :

$$S_{n=0}(\bar{q}) = \frac{d}{2\pi} \int_{-\frac{\pi}{d}}^{\frac{\pi}{d}} dq_z S(\bar{q}, q_z) \quad (4.4)$$

onde

$$S(\bar{q}, q_z) = \frac{\sqrt{2}\bar{q}}{\pi} \int_0^{\alpha(\bar{q})} d\theta \left\{ \sqrt{1 - \frac{\bar{q}^2}{8} \sin^2 \theta} + \frac{\cot^2 \theta}{\sqrt{1 - \frac{\bar{q}^2}{8} \sin^2 \theta}} \right\} \times$$

$$\times \left\{ \frac{1 - \cos \theta}{1 + \frac{2r_s}{\bar{q}} F(\bar{q}, q_z) \{1 - G(\bar{q}, q_z)\} \{1 - \cos(\theta)\}} \right\}. \quad (4.5)$$

Nas equações acima $\bar{q} = q r_s a_B^*$ (onde a_B^* é o raio de Bohr efetivo). O limite superior da integração $\alpha(\bar{q})$ na Eq. (4.5) é dado por

$$\alpha(\bar{q}) = \begin{cases} \frac{\pi}{2}, & \text{para } \bar{q} < 2\sqrt{2} \\ \sin^{-1}\left(\frac{\sqrt{8}}{\bar{q}}\right), & \text{para } \bar{q} > 2\sqrt{2}. \end{cases} \quad (4.6)$$

A expressão para $S(q)$ é de fundamental importância em nosso trabalho. A princípio, é interessante assinalar que a Eq. (4.5) contém uma integral simples em um domínio finito. Tal fato permite um cálculo numérico bastante preciso e possibilitou a solução numérica das equações do esquema STLS.

Como mostramos no Capítulo 3, a expressão da correção estática de campo local (Eq. (3.24)) é dada por:

$$\begin{aligned} G_{\text{STLS}}(q, q_z) = & - \frac{d}{8\pi^3 n_e} \frac{q}{q^2 + q_z^2} \frac{1}{F(q, q_z)} \int_{-\pi/d}^{\pi/d} dk_z \int dk \{S(k, k_z) - 1\} \times \\ & \times \int_{-\pi}^{\pi} d\phi \frac{q^2 - qk\cos(\phi) + qq_z^2 - k_z q_z}{\sqrt{q^2 + k^2 - 2qk\cos(\phi)}} \times \\ & \times \left\{ \frac{\sinh(\sqrt{q^2 + k^2 - 2qk\cos(\phi)} d)}{\cosh(\sqrt{q^2 + k^2 - 2qk\cos(\phi)} d) - \cos((q_z - k_z)d)} \right\} \end{aligned} \quad (4.7)$$

onde n_e é a densidade de elétrons na camada bidimensional e usamos a expressão para o fator de forma $F(q, q_z)$ [Eq. (3.23)]. Embora a Eq. (4.7) tenha que ser resolvida numericamente, alguns resultados analíticos podem ser obtidos. Para vetores de onda pequenos e $q_z d = 0$, obtemos

$$\begin{aligned} G_{\text{STLS}}(q \ll 2/a_B^*, q d \ll 1, q_z d = 0) = & - \frac{q^2 d^2}{8\pi^2 n_e} \int dk \int_0^{\pi/d} dk_z \{S(k, k_z) - 1\} \times \\ & \times \left\{ \frac{\sinh(kd)}{\cosh(kd) - \cos(k_z d)} \right\}, \end{aligned} \quad (4.8)$$

e para $q_z d = \pi/2$ obtemos

$$G_{\text{STLS}}(q \ll 2/a_B^*, qd \ll 1, q_z d = \pi/2) = -\frac{1}{4\pi^2 n_e} \int dk \int_{-\pi/d}^{\pi/d} dk_z \{S(k, k_z) - 1\} \times \\ \times \left\{ 1 - \frac{2k_z d}{\pi} \right\} \left\{ \frac{\sinh(kd)}{\cosh(kd) - \cos(k_z d)} \right\}. \quad (4.9)$$

Como podemos observar, $G_{\text{STLS}}(q \ll 2/a_B^*, qd \ll 1, q_z d = \pi/2)$ independe de q . No mesmo limite e $q_z d = \pi$ obtemos

$$G_{\text{STLS}}(q \ll 2/a_B^*, qd \ll 1, q_z d = \pi) = -\frac{1}{\pi^2 n_e} \int dk \int_0^{\pi/d} dk_z \{S(k, k_z) - 1\} \times \\ \times \left\{ \frac{\sinh(kd)}{\cosh(kd) - \cos(k_z d)} \right\}. \quad (4.10)$$

Para grandes vetores de onda, obtemos

$$G_{\text{STLS}}(q \gg 2/a_B^*, qd \gg 1, d) = -\frac{d}{2\pi^2 n_e} \int k dk \int_0^{\pi/d} dk_z \{S(k, k_z) - 1\}. \quad (4.11)$$

A Eq. (4.7) reproduz os seguintes limites $1/d \simeq 0$ (sistema bidimensional) e $d \simeq 0$ (sistema tridimensional). Portanto, para $1/d \simeq 0$ notamos que, da Eq. (3.23), $V(q, q_z) = v(q) = 2\pi e^2/q$ é o potencial de Coulomb bidimensional. Neste mesmo caso, para q_z aproximando-se de zero, da Eq. (4.7) encontramos a equação-integral para o sistema de elétrons bidimensional como

$$G_{\text{STLS}}(q, q_z = 0) = -\frac{1}{4\pi^2 n_e} \int_{-\pi}^{\pi} d\phi \int_0^{\infty} k dk \frac{q - k \cos(\phi)}{\sqrt{q^2 + k^2 - 2qk \cos(\phi)}} \times \\ \times \{S(k, k_z = 0) - 1\}, \quad (4.12)$$

na qual $G(q) = G(q, q_z = 0)$ é a correção estática de campo local em duas dimensões. Vamos agora analisar o caso de pequenos espaçamentos entre as camadas, ou seja,

$d \simeq a_B^*$. Da Eq. (3.23) encontramos que $V(\mathbf{q}, q_z) = 4\pi e^2 / (q^2 + q_z^2)$, sendo este o potencial de Coulomb tridimensional em coordenadas cilíndricas. Definindo uma densidade efetiva $N_e = n_e/d$ obtemos da Eq. (3.24) que

$$G_{\text{STLS}}(\mathbf{q}, q_z) = - \frac{1}{(2\pi)^3 N_e} \int_{-\infty}^{\infty} dq_z \int d^2 \mathbf{q}' \frac{(\mathbf{q} \cdot \mathbf{q}' + q_z q'_z) V(\mathbf{q}', q'_z)}{(q^2 + q_z^2) V(\mathbf{q}, q_z)} \times \\ \times \{S(\mathbf{q} - \mathbf{q}', q_z - q'_z) - 1\}. \quad (4.13)$$

A Eq. (4.13) representa $G(\mathbf{q})$ para o sistema de elétrons tridimensional em coordenadas cilíndricas. Da Eq. (4.13) extraímos a correção estática de campo local $G(\mathbf{q})$ em três dimensões

$$G_{\text{STLS}}(\mathbf{q}) = - \frac{1}{(2\pi)^3 N_e} \int d^3 \mathbf{q}' \frac{\mathbf{q} \cdot \mathbf{q}' V(\mathbf{q}')}{q^2 V(\mathbf{q})} \{S(\mathbf{q} - \mathbf{q}') - 1\}, \quad (4.14)$$

como deduzida no Capítulo 2.

As Eqs. (4.5) e (4.7) devem ser resolvidas de uma maneira autoconsistente. É necessário enfatizar a simplicidade marcante que as transformações consideradas na Ref. 45 introduziram no cálculo autoconsistente. Observamos que a contribuição devida aos pólos de plasmons presentes no fator de estrutura já está automaticamente incluída e que não é necessário calcular as derivadas da parte real da função dielétrica. Com isto eliminou-se uma das equações a serem resolvidas autoconsistentemente reduzindo-se a apenas duas equações. Tal fato permitiu um tempo de cálculo muito menor e uma redução no número de iterações necessárias para a convergência do cálculo autoconsistente.

As integrais foram resolvidas com o método de quadratura de Gauss-Legendre, e como estendem-se sobre um domínio finito podem se determinar com elevado grau de precisão. A solução autoconsistente é obtida pelo método iterativo padrão. Com uma entrada inicial razoável para $S(\mathbf{q}, q_z)$ na Eq. (4.7), obtemos a correção de campo local $G(\mathbf{q}, q_z)$, e um novo $S(\mathbf{q}, q_z)$ é calculado. Este processo continua até que a maior diferença entre a última entrada e a anterior é menor do que um valor exigido η . No nosso caso, a precisão requerida correspondeu a $\eta = 10^{-3}$. Para obter a

convergência é necessário em geral mais de dez iterações. À medida que o parâmetro de densidade r_s aumenta, surgem problemas de convergência. Para evitar isto, usamos um mecanismo para acelerar a convergência, no qual a entrada para $S(q, q_z)$ da $(n+1)$ -ésima iteração é definida por

$$S_{n+1}(q, q_z) = S_{n-1}(q, q_z) + \alpha \{S_n(q, q_z) - S_{n-1}(q, q_z)\}. \quad (4.15)$$

onde α é o parâmetro de convergência que depende fortemente dos valores de r_s .

A partir da Eq. (4.5) é trivial obter o fator de estrutura na aproximação de Hartree-Fock, sendo suficiente tomar $G(\bar{q}, q_z)=1$. Neste caso, o resultado é

$$S(q) = \begin{cases} 1, & \text{para } q > 2q_F \\ \frac{2}{\pi} \left\{ \arcsin\left(\frac{q}{2q_F}\right) + \frac{q}{2q_F} \sqrt{1 - \frac{q^2}{4q_F^2}} \right\}, & \text{para } q < 2q_F. \end{cases} \quad (4.16)$$

Na aproximação de Hubbard, a correção estática de campo local para o gás de elétrons encamado é obtida ao substituírmos $\{q^2 + k^2 - 2qk \cos(\phi)\}^{1/2}$ por $\{q^2 + k^2\}^{1/2}$ na Eq. (4.7) e $S(\bar{q})$ pela expressão do fator de estrutura estático, do gás de elétrons bidimensional, na aproximação de Hartree-Fock. O resultado é

$$G_{HA}(\bar{q}, \bar{q}_z) = \frac{1}{2} \left\{ \frac{\bar{q}}{(\bar{q}^2 + 2)^{1/2}} \right\} \left\{ \frac{\cosh(\bar{q} \bar{d} / r_s) - \cos(\bar{d} \bar{q}_z / r_s)}{\sinh(\bar{q} \bar{d} / r_s)} \right\} \times \\ \times \left\{ \frac{\bar{q}^2 + \bar{q}_z^2 r_s^2 - (\bar{q}_z r_s^2 / \bar{d}^2) \sin(\bar{q}_z) \operatorname{arccotg}\{\sinh(\bar{q}^2 + 2)^{1/2} \bar{d} / r_s\}}{\bar{q}^2 + \bar{q}_z^2 r_s^2 / \bar{d}^2} \right\} \quad (4.17)$$

onde $\bar{q}_z = q_z r_s a_B^*$ e $\bar{d} = d / a_B^*$. Para $\bar{q} \bar{d} \ll 1$, obtém-se a correção de campo local na aproximação de Hubbard para um gás de elétrons bidimensional

$$G_{HA}(\bar{q}) = \frac{1}{2} \frac{\bar{q}}{\sqrt{\bar{q}^2 + 2}}. \quad (4.18)$$

Nossos resultados vão além do tratamento da RPA. Incluímos não somente

os efeitos de campo médio como também os efeitos das correlações de curto alcance nas flutuações de densidade. Os resultados, tirados da função dielétrica para o gás de elétrons encamado, fornecem uma descrição mais exata para as propriedades dielétricas, tais como: as excitações coletivas, a função correlação dos pares e a energia de correlação. Os cálculos numéricos para $\epsilon(q, q_z, \omega)$ são dados em termos da solução autoconsistente das equações integrais acopladas para $S(q, q_z)$ e $G(q, q_z)$, na forma como já foi descrita. Devemos tornar evidente que a solução numérica em nosso caso é mais complicada do que no caso 3D devido à perda da invariância translacional na direção z . Consideramos em nossos cálculos numéricos alguns valores típicos do parâmetro adimensional de densidade, relacionados com elétrons em poços quânticos de GaAs para $r_s \simeq 0.5-1.0$ e vários espaçamentos interplanos em unidades de $a_B^* \simeq 100 \text{ \AA}$ para GaAs.

Nas Figs. 4.1, 4.2 e 4.3 mostramos o comportamento da correção de campo local, $G(q, q_z)$, dado pela Eq. (4.7). Na Fig. 4.1 a distância entre os diferentes planos é igual 0.5 e para as Figs. 4.2 e 4.3, $\bar{d} = 5$ e 10 respectivamente. O ponto interessante destes resultados é a forte interferência. Observamos que para d pequeno a correção de campo local é fortemente dependente do vetor de onda q_z , como visto na Fig. 4.1. À medida que d aumenta $G(q, q_z)$ assume o comportamento $G(q)$ do tipo bidimensional para qualquer valor de q_z . Porém mesmo para $\bar{d} = 10$ é evidente que a dependência com q_z para a correção de campo local não pode ser desprezada, como visto na Fig. 4.3. Notamos que nossos resultados numéricos reproduzem com grande precisão os limites assintóticos analiticamente obtidos e dados pelas Eqs. (4.8) - (4.11). $G(q, q_z)$ sempre se anula quando q e q_z vão a zero como mostrado analiticamente. Em ambas as figuras usamos como constante de acoplamento $r_s = 1$.

Podemos agora comparar nossos resultados com aqueles obtidos por Zhang e Tzoar^[8], que estão claramente errados. Dois argumentos podem ser apresentados para evidenciar o erro. O primeiro argumento diz respeito ao limite $d \simeq 0$. O limite da Eq. (49) do trabalho de Zhang e Tzoar para $1/d \simeq 0$ é correto. Por outro lado, o limite para $d \simeq 0$ é errado. Para $d \simeq 0$ não se pode alcançar a correção estática de campo local para o sistema de elétrons tridimensional, pois falta na Eq. (49) da Ref. 8 o fator $[\cosh(qd) - \cos(q_z d)] / \sinh(qd)$. Este fator tem um importante papel para $d \simeq 0$, mas não é

importante para $1/d \simeq 0$. O segundo argumento diz respeito ao comportamento da correção estática de campo local para vetores de onda pequeno. No trabalho de Zhang e Tzoar, $G(\mathbf{q} \ll q_F, q_z d) \simeq q$ para qualquer valor de q_z . Este é um resultado para sistemas bidimensionais, como foi analisado por Jonson^[49]. Portanto, para $q_z d = 0$, todas as partículas nos planos da superrede estão em fase e a mesma comporta-se como um sistema tridimensional^[7]: $G(\mathbf{q} \ll q_F, q_z d = 0) \simeq q^2$.

Fig. 4.1 - Correção de campo local $G(\mathbf{q}, q_z)$ na aproximação STLS para o gás de elétrons na superrede, com constante de acoplamento $r_s = 1$ e distância entre os diferentes planos $\bar{d} = 0.5$.

Fig. 4.2 - Correção de campo local $G(q, q_z)$ na aproximação STLS para o gás de elétrons na superrede, com constante de acoplamento $r_s=1$ e distância entre os diferentes planos $\bar{d} = 5$.

Fig. 4.3 - Correção de campo local $G(q, q_z)$ na aproximação STLS para o gás de elétrons na superrede, com constante de acoplamento $r_s=1$ e distância entre os diferentes planos $\bar{d} = 10$.

Nas Figs. 4.4, 4.5 e 4.6 mostramos o comportamento da correção estática de campo local na aproximação de Hubbard. O espaçamento entre duas diferentes camadas e a constante de acoplamento possuem importantes papéis na correção estática de campo local. Nesta figuras (Figs. 4.4-4.6) usamos como valor para constante de acoplamento $r_s=1$. Na Fig. 4.4 apresentamos os resultados numéricos para $\bar{d}=0.5$ e para as Figs. 4.5 e 4.6 $\bar{d}=5$ e 10, respectivamente. O comportamento geral das curvas é o mesmo que em STLS, porém os valores numéricos para $G(q, q_z)$ são consideravelmente menores, indicando que a HA é uma aproximação mais precisa que RPA, porém nem todos os efeitos de correlação de curto alcance estão incluídos como na STLS.

Na Fig. 4.7 apresentamos o comportamento do fator de estrutura estático como função de $\bar{q}$ para o gás de elétrons na superrede na aproximação STLS, determinado pelas Eqs. (4.4) e (4.7). Nesta figura, a curva de linha tracejada representa $S(q)$ para $r_s=4$ e $\bar{d}=2$ e a curva de linha cheia corresponde aos valores $r_s=8$ e $\bar{d}=3$. Convém assinalar que o comportamento na origem de $S(q)$, previsto por expansões analíticas, é completamente satisfeito nos resultados numéricos. Podemos tomar $G(q, q_z)=0$ e recuperamos os resultados da RPA. O comportamento de $S(q)$ é semelhante aos sistemas 2D e 3D.

Uma aproximação conveniente, sugerida por Miesenböck e Tosi^[9], consiste em desprezar as correlações de curto alcance entre os planos. Assim se fizermos $V(q, q_z)G(q, q_z) \simeq v(q)G(q)$ na Eq. (3.29), como já discutimos exaustivamente no Capítulo 3, podemos escrever a função resposta densidade-densidade, da seguinte maneira

$$\chi(q, q_z, \omega) = \frac{\chi_{2D}^0(q, \omega)}{1 - \frac{2\pi e^2}{q} (F(q, q_z) - G(q)) \chi_{2D}^0(q, \omega)}, \quad (4.19)$$

onde $G(q)$ é a correção de campo local na sua versão bidimensional. Assim, a correção de campo local em unidades adimensionais é dada por

$$G(\bar{q}) = -\frac{1}{2\pi} \int_0^\pi d\phi \int_0^\infty \bar{x} d\bar{x} \frac{\bar{q} - \bar{x} \cos(\phi)}{\sqrt{\bar{q}^2 + \bar{x}^2 - 2\bar{q}\bar{x}\cos(\phi)}} \{S(\bar{q}) - 1\}. \quad (4.20)$$

Fig. 4.4 - Correção de campo local $G(q, q_z)$ na aproximação de Hubbard para o gás de elétrons na superrede, com constante de acoplamento $r_s=1$ e distância entre os diferentes planos $\bar{d} = 0.5$.

Fig. 4.5 - Correção de campo local $G(q, q_z)$ na aproximação de Hubbard para o gás de elétrons na superrede, com constante de acoplamento $r_s=1$ e distância entre os diferentes planos $\bar{d} = 5$.

Fig. 4.6 - Correção de campo local $G(q, q_z)$ na aproximação de Hubbard para o gás de elétrons na superrede, com constante de acoplamento $r_s=1$ e distância entre os diferentes planos $\bar{d}=10$.

Fig. 4.7 - Fator de estrutura estático na aproximação STLS para $r_s=4$ e $\bar{d}=2$ (linha tracejada) e $r_s=8$, $\bar{d}=3$ (linha cheia) .

Utilizando as mesmas mudanças de variáveis, na forma como foi discutida no Capítulo 3 e substituindo a função resposta do gás de elétrons livre $\chi_{2D}^0(\mathbf{q}, \omega)$ na função resposta densidade-densidade $\chi(\mathbf{q}, q_z, \omega)$, podemos escrever o fator de estrutura estático, na ausência das correlações de curto alcance na direção z , como sendo:

$$S_{n=0}(\bar{q}) = \frac{\bar{d}}{2\pi r_s} \int_{-\frac{\pi r_s}{\bar{d}}}^{\frac{\pi r_s}{\bar{d}}} d\bar{q}_z S(\bar{q}, \bar{q}_z), \quad (4.21)$$

onde

$$S(\bar{q}, \bar{q}_z) = \frac{\sqrt{2}\bar{q}}{\pi} \int_0^{\alpha(\bar{q})} d\theta \left\{ \sqrt{1 - \frac{\bar{q}^2}{8} \sin^2 \theta} + \frac{\cot^2 \theta}{\sqrt{1 - \frac{\bar{q}^2}{8} \sin^2 \theta}} \right\} \times$$

$$\times \left\{ \frac{1 - \cos \theta}{1 + \frac{2r_s}{\bar{q}} \{F(\bar{q}, \bar{q}_z) - G(\bar{q})\} \{1 - \cos(\theta)\}} \right\}, \quad (4.22)$$

e os limites de integração $\alpha(\bar{q})$, são os mesmos da Eq. (4.6).

Para calcular o fator de estrutura na RPA, basta fazer na Eq. (4.22), $G(\bar{q})=0$. A integral resultante deve ser resolvida numericamente. A expressão do fator de estrutura estático $S_{n=0}(\mathbf{q})$ é de fundamental importância em nossos cálculos. Através desta expressão podemos calcular a energia de correlação, a relação de dispersão de plasmons e a função de correlação dos pares, desprezando todas as correlações de curto alcance entre os planos do gás de elétrons. Qualquer um dos resultados aproximados do fator de estrutura pode ser utilizado como ponto de partida para o cálculo autoconsistente da correção estática de campo local $G(\bar{q})$, como feito no caso anterior. Podemos obter a correção de campo local na aproximação de Hubbard através da Eq. (4.20). Nesta equação a integral só pode ser resolvida numericamente. No entanto, se aproximarmos $(\bar{q}^2 + \bar{k}^2 - 2\bar{k}\bar{q}\cos(\phi))^{1/2}$ por $\sqrt{\bar{q}^2 + 2}$, e $S(\bar{q})$ pelo fator de estrutura estático do gás de elétrons bidimensional livre (aproximação Hartree-Fock), chegaremos ao resultado estritamente bidimensional dado pela Eq. (4.18).

As diferenças entre os resultados usando $G(\mathbf{q}, q_z)$ e $G(\mathbf{q})$, na aproximação de

desprezar as correlações de curto alcance, serão mostrados no cálculo da energia de correlação.

4.2-Energia de correlação

Nesta seção apresentamos os resultados da energia de correlação do gás de elétrons na superrede nas aproximações STLS, HA e RPA. A energia de correlação de um gás de elétrons é uma importante quantidade na determinação da energia do estado fundamental em um sistema de muitas partículas.

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} (correspondente aos termos de correlação e troca). Como vimos no Capítulo 2, a mesma é calculada pelo teorema da energia do estado fundamental e indicada por

$$E_{CT} = \int_0^{\epsilon^2} d\lambda \frac{E_{int}(\lambda)}{\lambda}, \quad (4.23)$$

onde λ é um parâmetro relacionado com a carga eletrônica.

Substituindo a média no estado fundamental do Hamiltoniano de interação do sistema na Eq. (4.23) obtemos a relação

$$E_{CT} = \frac{1}{2} \int \frac{dQ}{(2\pi)^3} \int_0^{\epsilon^2} d\lambda (S_\lambda(\mathbf{q}, \mathbf{q}_z) - 1) \frac{V(\mathbf{q}, \mathbf{q}_z)}{\lambda}. \quad (4.24)$$

A energia de correlação em qualquer aproximação é definida como a diferença entre a energia de correlação e troca e a energia de troca. Determinamos a energia de troca quando, na expressão (4.24), substituímos o fator de estrutura estático $S_\lambda(\mathbf{q}, \mathbf{q}_z)$ pelo equivalente na aproximação de Hartree-Fock. A energia de correlação e troca, Eq. (4.24), é dada em unidades de Rydberg efetivo ($1\text{Ryd}^* = \frac{m^* e^4}{2\pi^2 \hbar^2} \simeq 5\text{meV}$ para o GaAs) como :

$$E_{CT} = \frac{\bar{d}}{2\pi r_s^2} \int_0^{r_s} \frac{dr_s^z}{r_s^z} \int_0^\infty d\bar{q} \int_{-\frac{\pi r_s^z}{\bar{d}}}^{\frac{\pi r_s^z}{\bar{d}}} d\bar{q}_z F(\bar{q}, \bar{q}_z) \{S(\bar{q}, \bar{q}_z, r_s^z) - 1\} \text{Ryd}^*. \quad (4.25)$$

A energia de correlação, que é a correção em relação à energia obtida na aproximação de Hartree-Fock, é dada por

$$E_C = E_{CT} - E_T, \quad (4.26)$$

onde

$$E_T = \frac{\bar{d}}{2\pi r_s^2} \int_0^{r_s} \frac{dr_s'}{r_s'} \int_0^\infty d\bar{q} \int_{-\frac{\pi r_s'}{\bar{d}}}^{\frac{\pi r_s'}{\bar{d}}} d\bar{q}_z F(\bar{q}, \bar{q}_z) \{S_{HFA}(\bar{q}, \bar{q}_z, r_s') - 1\} \text{Ryd}^*. \quad (4.27)$$

A Fig. 4.8 apresenta a energia de correlação em função do espaçamento $\bar{d}$ da superrede, em várias aproximações (STLS, HA e RPA), para $r_s=1$. Observem que a forte dependência de E_C com $\bar{d}$ para pequenos valores de $\bar{d}$. O limite 3D não é obtido porque não permitimos que os elétrons tunelem e portanto ocorre o comportamento do tipo divergente quando $\bar{d} \rightarrow 0$. A curva cheia corresponde à aproximação RPA, a curva tracejada corresponde à aproximação de Hubbard, onde apenas os efeitos de troca são considerados tanto interplanos como intraplano. A curva traço-ponto corresponde a aproximação STLS. Podemos observar que as aproximações RPA e de Hubbard subestimam a energia de correlação comparada à aproximação STLS. Isto vem reforçar mais uma vez a superioridade da aproximação STLS. Ao tratar as correlações de curto alcance, usamos o $G(q, q_z)$ total. Para $\bar{d} \geq 2.0$, a energia de correlação aproxima-se dos resultados do gás de elétrons estritamente bidimensional, mostrando assim que nossos resultados estão de acordo com os de Jonson^[49] e Freitas e Studart^[48]. No entanto nota-se que E_C em STLS apresenta comportamento ainda crescente enquanto HA e RPA já reproduzem os valores constantes bidimensionais.

Nas Figs. 4.9 e 4.10 mostramos a energia de correlação em unidades de Rydberg efetivo em STLS, para $r_s=0.5$ e 1.0 , respectivamente. Em ambas as figuras, a curva tracejada corresponde aos efeitos de correção de campo local intraplano e a curva cheia aos efeitos de correção de campo local intraplano e interplanos. Observamos que os resultados são muito próximos, mostrando que para cálculos de E_C , a aproximação de Miesenböck e Tosi^[9] é bastante razoável. Novamente podemos observar que, à

medida que o espaçamento entre os diferentes planos aumenta, a energia de correlação aproxima-se dos resultados do gás de elétrons em duas dimensões.

Fig. 4.8 - Energia de correlação em função do espaçamento da superrede nas aproximações STLS (linha traço-ponto), HA (linha tracejada) e RPA (linha cheia), para a constante de acoplamento $r_s=1$. Considera-se a correção de campo local intra e interplanos.

Nas Figs. 4.11 e 4.12 mostramos o comportamento da energia de correlação nas aproximações de HA e STLS em função de $\bar{d}$ para valores de $r_s=0.5$ e 1.0, respectivamente. Podemos observar que a aproximação de Hubbard, comparada à aproximação STLS, subestima a energia de correlação. Isto reforça a superioridade da aproximação STLS. Nas figuras as curvas cheias correspondem à aproximação de Hubbard e as tracejadas à aproximação STLS. Em ambos os resultados levamos em conta correções de campo local tanto interplanos como intraplano.

Fig. 4.9 - Energia de correlação em função do espaçamento da superrede na aproximação STLS para $r_s=0.5$. A curva cheia corresponde à correção de campo local intra e interplanos e a curva tracejada corresponde à correção de campo local intraplano como foi originalmente sugerido por Miesenböck e Tosi.

Fig. 4.10 - Energia de correlação em função do espaçamento da superrede na aproximação STLS para $r_s=1$. A curva cheia corresponde à correção de campo local intra e interplanos e a curva tracejada corresponde à correção de campo local intraplano como foi originalmente sugerido por Miesenböck e Tosi.

Fig. 4.11 - Energia de correlação em função do espaçamento da superrede, nas aproximações STLS (linha tracejada), HA (linha cheia) para a constante de acoplamento $r_s=0.5$. Considera-se a correção de campo local intra e interplanos.

Fig. 4.12 - Energia de correlação em função do espaçamento da superrede, nas aproximações STLS (linha tracejada), HA (linha cheia) para a constante de acoplamento $r_s=1$. Considera-se a correção de campo local intra e interplanos.

4.3-Função Correlação dos Pares

O fator de estrutura estático $S(q)$, que é uma quantidade observável, pode ser obtido em experiências de espalhamento. Ele define o espectro de flutuações do sistema e está diretamente relacionado com a função correlação dos pares pela transformada de Fourier

$$S(q) = 1 + n_e \int dr \exp(iq \cdot r) (g(r) - 1) . \quad (4.28)$$

As correlações de curto alcance, entre os elétrons na superrede mostram-se mais acentuadamente na função correlação dos pares $g(r)$, que descreve muito bem as correlações do sistema, sendo obtida pela transformada inversa de Fourier do fator de estrutura estático $S(\bar{q})$. Para distâncias em unidades de $a_B^* r_s$ temos que

$$g(\bar{r}) = 1 + \frac{1}{2} \int_0^\infty \bar{q} J_0(\bar{q} \bar{r}) \{S(\bar{q}) - 1\} d\bar{q}, \quad (4.29)$$

$g(\bar{r})$ mede a probabilidade de se encontrar uma partícula a uma distância $\bar{r}$ da origem.

Apesar de não existirem medidas da função correlação dos pares, resultados confiáveis devem mostrar uma função correlação dos pares positiva, para todo o valor de $\bar{r}$, e espera-se que no limite de altas densidades $g(\bar{r})$ seja corretamente dada pela aproximação RPA.

Nossos resultados, apresentados nas Figs. 4.13 e 4.14 para a função correlação dos pares na aproximação STLS, foram obtidos da Eq. (4.29). Determinamos o fator de estrutura estático através das Eqs. (4.5) e (4.7). Em ambos os cálculos, consideramos os efeitos de correção de campo local intraplano e interplanos. Em ambas as curvas da Fig. 4.13, usamos $r_s=0.5$ como parâmetro de densidade para o gás de elétrons na superrede. Na Fig. 4.13, a curva cheia corresponde a uma distância $\bar{d}=0.5$ entre os diferentes planos e a curva tracejada corresponde a uma distância $\bar{d}=5.0$. A Figura 4.14 mostra o comportamento da função correlação dos pares para $r_s=1$, a curva tracejada corresponde a $\bar{d}=0.5$ e a curva cheia a $\bar{d}=5.0$. Para $r_s < 1$ há poucas diferenças entre os resultados para diferentes espaçamentos. Para $r_s > 1$, $g(\bar{r})$ mostra o

início de comportamento oscilatório indicando que os efeitos de correlação entre partículas do sistema tornam-se mais acentuados.

Fig. 4.13 - Função correlação dos pares para o gás de elétrons em uma superrede com constante de acoplamento $r_s=0.5$. A linha cheia corresponde ao valor de $\bar{d}=0.5$ e a linha tracejada ao valor de $\bar{d}=5$. O efeitos das correlações de campo local intra e interplanos foram tratados pela aproximação STLS .

Na Fig. 4.15 mostramos o comportamento da função correlação dos pares na aproximação STLS, usando $G(q)$ do sistema bidimensional dado pela Eq. (4.20) para $r_s=8$ e $\bar{d}=5$. Para valores de r_s desta ordem o cálculo computacional utilizando o esquema STLS total torna-se bastante demorado. Note o aparecimento de valores negativos de $g(\bar{r})$ para $\bar{r}$ em torno de zero. Nas Figs. 4.16 e 4.17 mostramos para comparação os resultados da função correlação dos pares nas aproximações RPA, HA e STLS para diferentes densidades eletrônicas quando são desprezadas as correlações de curto alcance interplanos. Nestes resultados observamos que o efeito das correções estáticas de campo local na função correlação dos pares é marcante. Observe que para $r_s=0.5$ todas as aproximações consideradas apresentam valores positivos de $g(\bar{r})$ na origem. No entanto, para $r_s=1.0$ as aproximações HA e RPA já apresentam valores significativamente negativos enquanto $g(0)$ em STLS é positivo. Como vimos na Fig. 4.15 o esquema STLS apresenta esta deficiência para grandes valores de r_s , mas os valores de $g(\bar{r})$ são menos negativos em STLS do que nas demais aproximações consideradas.

Fig. 4.14 - Função correlação dos pares para o gás de elétrons em uma superrede com constante de acoplamento $r_s=1$. A linha tracejada corresponde ao valor de $\bar{d}=0.5$ e a linha cheia ao valor de $\bar{d}=5$. Os efeitos das correlações de campo local intra e interplanos foram tratados pela aproximação STLS.

Fig. 4.15 - Função correlação dos pares para o gás de elétrons na aproximação STLS para $r_s=8$ e $\bar{d}=5$, as correlações de curto alcance foram levadas em conta apenas nos planos.

Fig. 4.16 - Função correlação dos pares para o gás de elétrons nas aproximações STLS (linha ponto-traço), HA (linha tracejada) e RPA (linha cheia) para $r_s=0.5$ e $\bar{d}=5$. A correção de campo local é levada em conta apenas nos planos.

Fig. 4.17 - Função correlação dos pares para o gás de elétrons nas aproximações STLS (linha ponto-traço), HA (linha tracejada) e RPA (linha cheia) para $r_s=1$ e $\bar{d}=5$. A correção de campo local é levada em conta apenas nos planos.

4.4-Dispersão de Plasmons

As propriedades eletrônicas de um gás de elétrons encamado (LEG) têm merecido grande atenção. Em particular, a relação de dispersão de plasmons para o LEG é completamente diferente das obtidas para o plasmon em um gás de elétrons bidimensional, ou mesmo tridimensional. As excitações coletivas em materiais encamado têm sido estudadas por teóricos e experimentais, tanto no gás de elétrons bidimensional (GE2D)^[1] como também em sistemas com infinitas camadas de GE2D^[31-41].

Como foi mostrado por Stern^[44], o espectro das oscilações de plasmons do gás de elétrons, confinado em duas dimensões, não apresenta lacuna e a frequência de plasmon é proporcional à raiz quadrada do vetor de onda bidimensional. O comportamento coletivo de um plasma de elétrons de baixa dimensionalidade é completamente diferente do tridimensional. Todas as propriedades dinâmicas e estáticas do gás de elétrons na superrede, são completamente descritas pela função dielétrica, a qual é dada por :

$$\epsilon^{-1}(\mathbf{q}, \mathbf{q}_z, \omega) = 1 + v(\mathbf{q})\chi(\mathbf{q}, \mathbf{q}_z, \omega), \quad (4.30)$$

onde $v(\mathbf{q})$ é o potencial de Coulomb e $\chi(\mathbf{q}, \mathbf{q}_z, \omega)$ é a função resposta densidade-densidade, a qual pode ser escrita como

$$\chi(\mathbf{q}, \mathbf{q}_z, \omega) = \frac{\chi_{2D}^0(\mathbf{q}, \omega)}{1 - V(\mathbf{q}, \mathbf{q}_z) (1 - G(\mathbf{q}, \mathbf{q}_z)) \chi_{2D}^0(\mathbf{q}, \omega)} \quad (4.31)$$

A frequência de excitação do plasmon $\omega(\mathbf{q})$ é obtida através dos zeros da função dielétrica ou, equivalentemente, dos pólos da função resposta $\chi(\mathbf{q}, \mathbf{q}_z, \omega)$. Assim, os modos coletivos do gás de elétrons na superrede, considerando as correlações de curto alcance intra e interplanos são dados pela relação

$$1 - V(\mathbf{q}, \mathbf{q}_z) \{1 - G(\mathbf{q}, \mathbf{q}_z)\} \chi_{2D}^0(\mathbf{q}, \omega(\mathbf{q})) = 0. \quad (4.32)$$

O cálculo explícito de $\chi_{2D}^0(q, \omega)$ para um gás de elétrons estritamente bidimensional, foi inicialmente calculado por Stern^[44]. Embora as transformações definidas no Capítulo 3 para obter uma nova expressão para a função resposta densidade-densidade do gás de elétrons, conduzem a uma dramática melhoria nos cálculos numéricos do esquema STLS, esta forma não é apropriada para obtermos os pólos de $\chi(q, q_z, \omega)$. Para isto escrevemos o resultado

$$\begin{aligned} \text{Re}\chi_{2D}^0(q, \omega) = & \frac{2\pi\alpha_D}{q^2} \left\{ q + \text{sgn}(\nu_+) \theta(\nu_+^2 - 1) (\nu_+^2 - 1)^{1/2} + \right. \\ & \left. + \text{sgn}(\nu_-) \theta(\nu_-^2 - 1) (\nu_-^2 - 1)^{1/2} \right\} \end{aligned} \quad (4.33)$$

e

$$\text{Im}\chi_{2D}^0(q, \omega) = \frac{2\pi\alpha_D}{q^2} \left\{ \theta(1 - \nu_+^2) (1 - \nu_+^2)^{1/2} + \theta(1 - \nu_-^2) (1 - \nu_-^2)^{1/2} \right\} \quad (4.34)$$

onde $\alpha_D = r_s / \pi\sqrt{2}$, $\nu_{\pm} = \pm \frac{\omega}{q} - \frac{q}{2}$, q está em unidades de q_F e ω em unidades de $2E_F/\hbar$, definimos a função degrau unitária por: $\theta(x)=1$, se $x>0$ e $\theta(x)=0$, se $x<0$.

Considerando as fórmulas explícitas para a função resposta $\chi_{2D}^0(q, \omega)$ obtemos para a Eq. (4.32)

$$\begin{aligned} 1 - F(q, q_z) (1 - G(q, q_z)) \frac{2\pi\alpha_D}{q^2} \left\{ q + \text{sgn}(\nu_+) \theta(\nu_+^2 - 1) (\nu_+^2 - 1)^{1/2} + \right. \\ \left. + \text{sgn}(\nu_-) \theta(\nu_-^2 - 1) (\nu_-^2 - 1)^{1/2} \right\} = 0 \end{aligned} \quad (4.35)$$

na qual r_s é definido como o raio de um círculo, cuja área é ocupada por um elétron. Para $\omega > q + \frac{q^2}{2}$, $\text{Im}\chi_{2D}^0(q, \omega)=0$, a condição expressa pela Eq. (4.35) é reduzida à equação

$$(\nu_+^2 - 1)^{1/2} - (\nu_-^2 - 1)^{1/2} = -q(qB(q, q_z) + 1) \quad (4.36)$$

onde $B(q, q_z)$ é dado por

$$B(q, q_z) = \frac{1}{2\pi\alpha_D F(q, q_z) \{1 - G(q, q_z)\}} \quad (4.37)$$

As correções de campo local estão diretamente incluídas na relação de dispersão de plasmon através da função $B(q, q_z)$. O resultado apresentado pela Eq. (4.37) corresponde aos efeitos das correções de campo local intraplano e interplanos. Quando consideramos apenas as correções de campo local intraplano, a função $B(q, q_z)$ é diferente da expressão dada pela Eq. (4.37) e é dada por

$$B(q, q_z) = \frac{1}{2\pi\alpha_D \{F(q, q_z) - G(q)\}} \quad (4.38)$$

Deste modo, obtemos a expressão

$$\omega^2(q, q_z) = \frac{q}{2B(q, q_z)} \frac{(qB(q, q_z) + 1)^2}{\left(\frac{qB(q, q_z)}{2} + 1\right)} \times \left\{ \frac{q^4 B^2(q, q_z)}{4} + \frac{q^3 B(q, q_z)}{2} + 1 \right\}, \quad (4.39)$$

que descreve o espectro das excitações de plasmon em uma superrede.

Como podemos observar da Eq.(4.39), os modos coletivos dependem dos vetores de onda paralelo e perpendicular aos planos. A dependência em q_z influencia profundamente a estrutura dos modos coletivos. A principal razão para isto é evidentemente física, visto que q_z está diretamente relacionado aos aspectos da terceira dimensão do sistema. De fato, a variável física, tal como as flutuações das densidades eletrônicas, está relacionada com as camadas adjacentes por uma fase $\exp(iq_z d)$. As excitações coletivas $\omega(q, q_z)$ reduzem-se ao comportamento tanto bidimensional como tridimensional, nos casos em que $qd \gg 1$ ou $qd \ll 1$. A partir do nosso resultado, podemos obter dois limites para $\omega(q, q_z)$ de uma superrede: O limite de acoplamento forte ($qd \ll 1$) e o outro, no limite oposto, implicando em acoplamento fraco ($qd \gg 1$). Vamos considerar explicitamente o limite em que $qd \ll 1$ na Eq. (4.39) e em primeiro lugar a situação $q_z \neq 0$. Para $qd \ll 1$ e em comprimentos de ondas longos $q \rightarrow 0$:

$$\omega(q, q_z) = q \sqrt{\frac{d}{a_B^*}} \sqrt{\frac{1 - G(q, q_z)}{1 - \cos(q_z d)}} \quad (4.40)$$

Para $q_z=0$ e através da Eq. (4.39), obtemos a seguinte solução no limite de $qd \rightarrow 0$:

$$\omega(q, q_z) = r_s \sqrt{\frac{a_B^*}{d}} \{1 - G(q, q_z)\} \quad (4.41)$$

No mesmo limite de $qd \ll 1$ e na ausência de correções de campo local entre os planos, o que corresponde a usar a função $B(q, q_z)$, dada pela Eq. (4.38), temos que para $q_z \neq 0$,

$$\omega(q, q_z) = \sqrt{q^2 \frac{d}{a_B^*} \frac{1}{1 - \cos(q_z d)} - \frac{q r_s}{(2)^{1/2}} G(q)} \quad (4.42)$$

e para $q_z=0$,

$$\omega(q, q_z) = \sqrt{\frac{r_s^2 a_B^*}{d} - \frac{q r_s}{(2)^{1/2}} G(q)} \quad (4.43)$$

Para simplicidade de análise tomemos a aproximação RPA para qualquer valor q_z . Fazendo $G(q, q_z)=0$ na Eq. (4.39) temos que $\omega(q, q_z)$ em RPA é dado por

$$\omega(q, q_z) = \left\{ \frac{r_s}{2} \frac{q \sinh(qd)}{(2)^{1/2} \cosh(qd) - \cos(q_z d)} \right\}^{1/2} \quad (4.44)$$

A Eq. (4.44) exemplifica o comportamento de transição entre os regimes de diferentes dimensionalidades. Para grandes separações entre diferentes planos ($qd \gg 1$) a relação de dispersão de plamon reduz-se ao plasma 2D com $\omega(q, q_z)$ variando com a raiz quadrada de q . Para ($qd \ll 1$) e com todos os elétrons dos planos oscilando em fase ($q_z=0$), a relação de dispersão de plasmon tem comportamento similar a que é obtida para um sistema 3D. Portanto, quando $q_z \neq 0$, as contribuições dos campos elétricos induzidos em diferentes planos cancelam-se^[8].

Nas Figs. 4.18 e 4.19 mostramos nossos resultados numéricos para os modos coletivos da superrede para $r_s=1$ e valores de $\bar{d}=0.6$ e 6.0 . Observe que o comportamento dos plasmons na superrede é semelhante ao plasma em sistema 2D. Os

limites assintóticos de comprimentos de ondas longos são obtidos em nossos cálculos numéricos como pode ser observado das Figs. 4.18 e 4.19. Note o comportamento bastante diferente $\omega(q) \simeq q^{1/2}$ para $\bar{d}=6.0$ e $\omega(q) \simeq q$ para $\bar{d}=0.6$, podemos notar que, para valores menores da distância entre os planos há um aumento no valor do vetor de onda crítico q_c .

Fig. 4.18 - Relação de dispersão de plasmons para $r_s=1$, $\bar{d}=0.6$ e $\bar{q}_z=\pi r_s/6\bar{d}$. A linha ponto corresponde à aproximação de fases aleatórias, a linha ponto-traço a aproximação de Hubbard e a linha tracejada, à correção de campo local do tipo $G_{STLS}(q, q_z)$.

Fig. 4.19 - Relação de dispersão de plasmons para $r_s=1$, $\bar{d}=6$ e $\bar{q}_z=\pi r_s/6\bar{d}$. A linha ponto corresponde à aproximação de fases aleatórias, a linha ponto-traço a aproximação de Hubbard e a linha tracejada a aproximação STLS com a correção de campo local total.

As Figs. 4.20 e 4.21 apresentam a relação de dispersão para $r_s=4$ e $\bar{q}_z=0$ nas aproximações STLS, Hubbard e RPA. Podemos observar que, neste caso a relação de dispersão comporta-se como no caso das excitações de um gás de elétrons tridimensional apresentando uma lacuna em $q=0$. Note, no entanto, que a lacuna é significativamente reduzida quando se aumentam as distâncias entre os planos. Observando as Figs. 4.18-4.21, podemos notar que, para valores de r_s pequeno, como já se esperava, há uma redução marcante no valor de q_c .

A Fig. 4.22 mostra a dispersão de plasmons para $r_s=6$ e na ausência de correlações de curto alcance interplanos e mesmos parâmetros da Fig. 4.18. Observamos que para valores grandes de r_s , significativas diferenças surgem ao se tratar o problema com diferentes aproximações. No entanto, no limite de comprimentos de ondas longos, os resultados em STLS, HA e RPA são os mesmos.

Fig. 4.20 - Relação de dispersão de plasmons para $r_s=4$, $\bar{d}=0.5$ e $\bar{q}_z=0$. A linha ponto corresponde à aproximação de fases aleatórias, a linha ponto-traço, à aproximação de Hubbard e a linha tracejada, à aproximação STLS com a correção de campo local total.

Fig. 4.21 - Relação de dispersão de plasmons para $r_s=4$, $\bar{d}=5$ e $\bar{q}_z=0$. A linha ponto corresponde à aproximação de fases aleatórias, a linha ponto-traço, à aproximação de Hubbard e a linha tracejada, à aproximação STLS com a correção de campo local total.

Fig. 4.22 - Relação de dispersão de plasmons para $r_s=6$, $\bar{d}=6$ e $\bar{q}_Z=\pi r_s/6\bar{d}$. A linha ponto corresponde à aproximação de fases aleatórias, a linha ponto-traço, à aproximação de Hubbard e a linha tracejada, à aproximação STLS, as correlações de curto alcance foram consideradas apenas nos planos.

CAPÍTULO 5

GÁS DE POLARONS EM SEMICONDUTORES DEGENERADOS

Neste capítulo analisaremos as propriedades do estado fundamental para o modelo de um semiconductor polar dopado, onde elétrons interagem com fônons longitudinais ópticos através do Hamiltoniano de Fröhlich e entre si via interação de Coulomb blindada. Este problema é de considerável interesse devido à interação intermediária entre os elétrons e o campo de fônons-LO. Este acoplamento pode ser ilustrado através do elétron interagindo com uma nuvem de fônons (isto é, as ondas associadas com a polarização do meio) e o sistema combinado (elétron mais a nuvem de fônons associada) é conhecido como um polaron.

Em grande parte, a teoria de Fröhlich tem sido desenvolvida para o caso de um único elétron interagindo com a nuvem de fônons (ou bosons, no caso geral). No entanto, existem sistemas nos quais a interação elétron-elétron deve ser considerada juntamente com a interação elétron-fônon. Como exemplo, muitos semicondutores polares, dopados com impurezas, apresentam um gás de elétrons que formam, juntamente com os fônons, o gás de polarons. Este modelo tem sido também considerado em sistemas de baixa dimensionalidade, constituídos por compostos dos grupos III-V e II-VI, onde a influência dos fônons nas propriedades do gás degenerado de elétrons, formado na interface, não pode ser descartada^[50-54]. Em geral, trata-se este problema por uma interação efetiva blindada (dinâmica e estática), através da função dielétrica do gás de elétrons.

Os efeitos de muitos corpos na interação elétron-fônon-LO em estruturas semicondutoras quasi-bidimensionais foram analisados primeiramente por Das Sarma^[51]. O mesmo incluiu, na teoria de um polaron, os efeitos de blindagem, via aproximação de Thomas-Fermi e logo depois a RPA estática (aproximação de fases aleatórias). Wu, Peeters e Devreese^[17] calcularam a energia de ligação polarônica de um gás de polarons, além dos efeitos de blindagem dinâmica, através da resposta dielétrica dependendo de todas as frequências. Também consideraram os efeitos da largura finita na terceira dimensão. Degani et al.^[55] foram os primeiros a levarem em

conta os feitos das correlações de curto alcance ao analisarem os efeitos de blindagem dinâmica nas interações elétron-fônon em sistemas quase-bidimensionais de muitos polarons.

Quando impurezas são adicionadas num semiconductor, surgem portadores de carga. Algumas impurezas adicionam estados eletrônicos na banda de condução, enquanto outras adicionam estados carregados positivamente na banda de valência, nominalmente buracos^[56]. Estes portadores têm massa efetiva m_b menor do que a unidade (a grande maioria da ordem de 0.1 da massa do elétron livre). A massa efetiva menor está relacionada com o valor alto da constante dielétrica estática ϵ_0 de muitos semicondutores (da ordem de 10), influenciando a interação elétron-elétron. O raio efetivo de Bohr de um estado de impureza tipo hidrogênico é $a_B^* = \hbar^2 \epsilon_0 / e^2 m_b = a_B \epsilon_0 m_e / m_b$. As interações elétron-fônon-LO são afetadas pelas interações elétron-elétron. Isto é mais óbvio nos metais, onde as interações elétron-elétron blindam as interações elétron-íon. Estes efeitos são igualmente importantes em um semiconductor com uma grande concentração de elétrons.

Nosso principal interesse neste trabalho é estudar o efeito da blindagem devido aos portadores de cargas na energia polarônica e na massa efetiva. Nossos cálculos são efetuados por dois diferentes métodos. Um é o método perturbativo usual ao considerar o diagrama de ordem principal da auto-energia com a interação efetiva elétron-fônon blindada pela função dielétrica estática do gás de elétrons. O outro é um método variacional^[16,17] baseado em uma extensão da técnica de Lee-Low-Pines para o sistema de muitos polarons, a qual nos fornece uma expressão da energia polarônica em termos do fator de estrutura estático $S(q)$ do gás de elétrons. Visto que $S(q)$ é obtido através da função resposta densidade-densidade, ou de sua semelhante função dielétrica, para todas as frequências, o método pode ser considerado como uma aproximação dinâmica em contraste com o anterior. Portanto, como no caso anterior, consideramos apenas a mais baixa ordem para o acoplamento elétron-fônon. A função dielétrica e o fator de estrutura do gás de elétrons que fornecem as correções de blindagem na interação elétron-fônon, são calculados nas seguintes aproximações da teoria de muitos corpos: a aproximação de Hartree-Fock (HFA), a aproximação de Thomas-Fermi (TFA), a aproximação de fases aleatórias (RPA), a aproximação de Hubbard (HA) e a

aproximação (STLS). Comparamos os resultados das propriedades do estado fundamental do gás de polaron entre as várias aproximações e vimos que a energia polarônica na aproximação dinâmica apresenta valores menores quando comparado ao caso estático em todo o intervalo de densidade de elétrons. A massa efetiva do polaron calculada da expansão de energia na teoria de perturbação de Rayleigh-Schrödinger (TPRS) e na aproximação Tamm-Dancof (que consiste em resolver a teoria de perturbação de Brillouin-Wigner com um único fônon na auto-energia) (TD-TPWB) mostra quantitativamente diferentes resultados quando interpretados. Por simplicidade e sem perda de generalidade, poderíamos nos restringir neste trabalho ao caso de temperatura zero e aos parâmetros específicos de ZnS.

Lemmens, Devreese e Brosens^[16], ao desenvolverem a teoria de transformação canônica, aplicada a sistemas de muitos polarons, determinaram a energia do estado fundamental variacionalmente em termos do fator de estrutura estático do gás de elétrons na aproximação de Hartree-Fock. Esta aproximação, como é bem conhecido, não fornece bons resultados para sistemas de partículas interagentes.

Discutiremos, em detalhes, a técnica de transformação canônica para a eliminação das coordenadas de fônons no Hamiltoniano e o método variacional para a determinação da energia no caso dinâmico. Também detalharemos o cálculo perturbativo na aproximação estática da mais baixa ordem da auto-energia devido à interação elétron-fônon, para a energia de ligação polarônica e da massa efetiva na TPRS e TD-TPWB e por último apresentaremos os resultados numéricos para a auto-energia, as energias de ligação polarônica na aproximação de blindagem dinâmica e estática e das massas efetivas como função da densidade de elétrons dentro das aproximações de muitos corpos, como foram discutidas no Capítulo 2.

5.1-Método variacional para a energia do estado fundamental

A transformação unitária de Lee-Low-Pines foi generalizada por Lemmens et al.^[16] para o estudo da energia do estado fundamental de um gás de polaron 3D em um semicondutor degenerado. O método é perturbativo (no acoplamento elétron-fônon) por natureza. Para tornar clara a diferença entre este e o método de perturbação

revisaremos a idéia principal deste método. O Hamiltoniano total, para um sistema de muitos polarons à temperatura zero, com um fundo homogêneo neutralizante, é

$$H = H_0 + H_{\text{ele-f}} + H_{\text{ele-ele}} \quad (5.1)$$

$$H_0 = \sum_{\mathbf{k}} \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_b} c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{q}} \hbar \omega_{\text{LO}} a_{\mathbf{q}}^\dagger a_{\mathbf{q}} \quad (5.2)$$

$$H_{\text{ele-f}} = \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} M_{\mathbf{q}} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger c_{\mathbf{k}} (a_{\mathbf{q}}^\dagger + a_{-\mathbf{q}}) \quad (5.3)$$

$$H_{\text{ele-ele}} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{p}, \mathbf{p}'} v(\mathbf{k}) c_{\mathbf{p}+\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{p}'-\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{p}'} c_{\mathbf{p}} \quad (5.4)$$

Aqui $a_{\mathbf{q}}^\dagger$ ($c_{\mathbf{k}}^\dagger$) e $a_{\mathbf{q}}$ ($c_{\mathbf{k}}$) são os operadores de campo de fônons-LO (elétron) com vetores de onda $\mathbf{q}$ ($\mathbf{k}$) respectivamente. A massa de banda do elétron é designada por m_b e a energia do fônon-LO é $\hbar \omega_{\text{LO}}$. $v(\mathbf{k}) = 4\pi e^2 / \epsilon k^2$ é a transformada de Fourier do potencial elétron-elétron. A expressão do coeficiente de interação $M_{\mathbf{q}}$ é

$$M_{\mathbf{q}} = \frac{i\hbar \omega_{\text{LO}}}{q} \left(\frac{4\pi\alpha}{\Omega} \right)^{1/2} \left(\frac{\hbar}{2m_b \omega_{\text{LO}}} \right)^{1/4} \quad (5.5)$$

A constante adimensional, chamada α , desempenha a função de uma constante de acoplamento na teoria do polaron, que mede a interação entre o elétron e os fônons longitudinais óticos. O termo H_0 descreve os sistemas não interagentes de elétrons e fônons. A parte $H_{\text{ele-f}}$ é devida à interação elétron-fônon-LO e $H_{\text{ele-ele}}$ é o Hamiltoniano da interação elétron-elétron. O método consiste em submeter o Hamiltoniano acima a uma transformação unitária dada por:

$$U = \exp(Q) \quad (5.6)$$

onde

$$Q = \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} f_{\mathbf{q}} (a_{\mathbf{q}} - a_{-\mathbf{q}}^\dagger) c_{\mathbf{q}}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} \quad (5.7)$$

e $f_{\mathbf{q}}$ são funções variacionais a serem determinadas. O momento transformado P_j , do j -ésimo elétron é dado por:

$$U^{-1} P_j U = p_j + \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} \hbar \mathbf{q} (f_{\mathbf{q}} a_{\mathbf{q}} + f_{\mathbf{q}}^* a_{-\mathbf{q}}^\dagger) c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}. \quad (5.8)$$

O Hamiltoniano transformado contém vários termos que surgem das interações entre os elétrons e os fônons. A transformação do Hamiltoniano pode ser obtida através dos operadores transformados:

$$U^{-1} a_{\mathbf{q}} U = a_{\mathbf{q}} - \sum_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{q}}^* c_{\mathbf{q}}^\dagger c_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} \quad (5.9)$$

$$U^{-1} a_{\mathbf{q}}^\dagger U = a_{\mathbf{q}}^\dagger - \sum_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{q}} c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}, \quad (5.10)$$

ao inserir $U^{-1}U=1$ entre cada operador e usando as propriedades de transformação da Eqs. (5.9) e (5.10), o Hamiltoniano transformado fica representado por

$$U^{-1} H U = H_{\text{kin}} + H_{\text{ele-f}} + H_{\text{ele-ele}} + H_{\text{f-f-ele}} + H_{\text{f}} + H_{\text{n}}, \quad (5.11)$$

no qual o termo cinético é

$$H_{\text{kin}} = \sum_{\mathbf{k}} \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_b} c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}}. \quad (5.12)$$

O termo $H_{\text{ele-f}}$ descreve a interação entre os elétrons e os fônons-LO

$$\begin{aligned} H_{\text{ele-f}} = & \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{k}} (M_{\mathbf{q}} - \hbar \omega_{\text{LO}} f_{\mathbf{q}}) a_{\mathbf{q}} c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \\ & - \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{k}} (M_{\mathbf{q}}^* - \hbar \omega_{\text{LO}} f_{\mathbf{q}}^*) a_{\mathbf{q}}^\dagger c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + \\ & + \sum_{\mathbf{q}', \mathbf{k}} \sum_j \frac{\hbar \mathbf{q}' \cdot \mathbf{p}_j}{2m_b} (f_{\mathbf{q}'} a_{\mathbf{q}'} + f_{-\mathbf{q}'}^* a_{-\mathbf{q}'}^\dagger) c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}'} + \\ & + \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{k}} \sum_j \frac{\hbar \mathbf{q} \cdot \mathbf{p}_j}{2m_b} (f_{\mathbf{q}} a_{\mathbf{q}} + f_{\mathbf{q}}^* a_{-\mathbf{q}}^\dagger) c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}. \end{aligned} \quad (5.13)$$

A interação entre os elétrons, torna-se

$$H_{\text{ele-ele}} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{p}, \mathbf{p}'} v_{\text{ef}}(\mathbf{q}) c_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}^\dagger c_{\mathbf{p}'-\mathbf{q}}^\dagger c_{\mathbf{p}'} c_{\mathbf{p}} \quad (5.14)$$

onde $v_{\text{ef}}(\mathbf{q})$ é expresso por

$$v_{\text{ef}}(\mathbf{q}) = v(\mathbf{q}) - 2 (M_{\mathbf{q}} f_{\mathbf{q}}^* + M_{\mathbf{q}}^* f_{-\mathbf{q}} - \hbar\omega_{\text{LO}} f_{\mathbf{q}} f_{-\mathbf{q}}^*) . \quad (5.15)$$

A parte de fônons livres do Hamiltoniano transformado é indicado por

$$H_{\text{f}} = \sum_{\mathbf{q}} \hbar\omega_{\text{LO}} a_{\mathbf{q}}^\dagger a_{\mathbf{q}} . \quad (5.16)$$

O termo $H_{\text{f-f-ele}}$ descreve a interação entre os fônons interferidos pelos elétrons:

$$\begin{aligned} H_{\text{f-f-ele}} = & \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{q}', \mathbf{k}, \mathbf{k}'} \frac{\hbar \mathbf{q}' \cdot \mathbf{q}}{2m_b} (f_{\mathbf{q}} f_{\mathbf{q}'} a_{\mathbf{q}} a_{\mathbf{q}'} + f_{-\mathbf{q}}^* f_{-\mathbf{q}'}^* a_{-\mathbf{q}}^\dagger a_{-\mathbf{q}'}^\dagger) c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} c_{\mathbf{k}'}^\dagger c_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}'} + \\ & + \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{k}, \mathbf{q}', \mathbf{k}'} \frac{\hbar^2 \mathbf{q}' \cdot \mathbf{q}}{2m_b} (f_{\mathbf{q}} f_{\mathbf{q}'}^* a_{\mathbf{q}}^\dagger a_{\mathbf{q}} + f_{\mathbf{q}}^* f_{\mathbf{q}'} a_{\mathbf{q}}^\dagger a_{\mathbf{q}'}) c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} c_{\mathbf{k}'}^\dagger c_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}'} . \end{aligned} \quad (5.17)$$

O termo restante H_{n} contém somente operadores número N ,

$$H_{\text{n}} = - \sum_{\mathbf{q}} (M_{\mathbf{q}}^* f_{\mathbf{q}} + M_{\mathbf{q}} f_{\mathbf{q}}^*) N + \sum_{\mathbf{q}} \left(\hbar\omega_{\text{LO}} + \frac{\hbar^2 q^2}{2m_b} \right) f_{\mathbf{q}} f_{\mathbf{q}}^* N. \quad (5.18)$$

Muitos semicondutores polares, que podem ser facilmente dopados, possuem acoplamento relativamente fraco com os fônons LO. O número médio de fônons virtuais (isto é, a deformação da rede devida à presença dos elétrons) na nuvem de polaron é proporcional à constante de acoplamento α , que é pequena. Portanto, é razoável assumir que a parte de fônon da função de onda do estado fundamental pode ser descrita satisfatoriamente por

$$| \Psi_{\text{ef}} \rangle = | \text{vac} \rangle | \Psi_{\text{ele}} \rangle \quad (5.19)$$

onde $| \text{vac} \rangle$ designa o estado de vácuo do fônon e $| \Psi_{\text{ele}} \rangle$ é a função de onda dos elétrons no estado fundamental. As amplitudes $f_{\mathbf{q}}$ são funcionais da função de onda

$|\Psi_{\text{ele}}\rangle$. Usando a Eq. (5.19) para a função de onda do estado fundamental, o Hamiltoniano transformado pode ser reduzido a H_{red} :

$$H_{\text{red}} = \langle \text{vac} | U^{-1} H U | \text{vac} \rangle \quad (5.20)$$

$$\begin{aligned} H_{\text{red}} = & \sum_{\mathbf{k}} \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_b} c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{p}, \mathbf{p}'} v_{\text{EF}}(\mathbf{q}) c_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}^\dagger c_{\mathbf{p}'-\mathbf{q}}^\dagger c_{\mathbf{p}'} c_{\mathbf{p}} - \\ & - \sum_{\mathbf{q}} (M_{\mathbf{q}}^* f_{\mathbf{q}} + M_{\mathbf{q}} f_{\mathbf{q}}^*) N + \sum_{\mathbf{q}} \left(\hbar \omega_{\text{LO}} + \frac{\hbar^2 \mathbf{q}^2}{2m_b} \right) f_{\mathbf{q}}^* f_{\mathbf{q}} N \end{aligned} \quad (5.21)$$

onde N é o número total de elétrons.

O Hamiltoniano reduzido Eq. (5.21) é da mesma forma que o de um gás de elétrons homogêneo com uma interação interpartícula dada pela Eq. (5.15).

O fator de estrutura $S(\mathbf{q})$ ^[23]

$$S(\mathbf{q}) = \frac{1}{2} \langle \Psi_{\text{ele}} | v(\mathbf{q}) c_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}^\dagger c_{\mathbf{p}'-\mathbf{q}}^\dagger c_{\mathbf{p}'} c_{\mathbf{p}} | \Psi_{\text{ele}} \rangle, \quad (5.22)$$

é uma quantidade fundamental na determinação das propriedades de blindagem do sistema de elétrons. O valor médio do Hamiltoniano reduzido H_{red} sobre o estado fundamental eletrônico $|\Psi_{\text{ele}}\rangle$ é dado por

$$E = \langle \Psi_{\text{ele}} | H_{\text{red}} | \Psi_{\text{ele}} \rangle, \quad (5.23)$$

onde a energia do estado fundamental é uma função de $f_{\mathbf{q}}$:

$$\begin{aligned} E = & N E_{\text{kin}} + \frac{N}{2} \sum_{\mathbf{q}} v(\mathbf{q}) \{S(\mathbf{q}) - 1\} + N \sum_{\mathbf{q}} \left\{ \hbar \omega_{\text{LO}} S(\mathbf{q}) + \frac{\hbar^2 \mathbf{q}^2}{2m_b} \right\} f_{\mathbf{q}} f_{\mathbf{q}}^* - \\ & - N \sum_{\mathbf{q}} (M_{\mathbf{q}} f_{\mathbf{q}}^* + M_{\mathbf{q}}^* f_{\mathbf{q}}) S(\mathbf{q}). \end{aligned} \quad (5.24)$$

A energia mínima é encontrada ao anular a derivada funcional de E com respeito a $f_{\mathbf{q}}^*$ e resolvendo a seguinte equação para $f_{\mathbf{q}}$

$$\frac{\partial E}{\partial f_q^*} = \left\{ \hbar\omega_{LO} S(q) + \frac{\hbar^2 q^2}{2m_b} \right\} f_q - M_q S(q) = 0, \quad (5.25)$$

f_q é então dada por

$$f_q = \frac{M_q}{\hbar\omega_{LO} + \frac{\hbar^2 q^2}{2m_b S(q)}}. \quad (5.26)$$

É interessante notar que o termo de recuo na Eq. (5.26) tem a mesma forma da expressão de Feynman-Byl para as excitações em Hélio IV^[57]. A expressão resultante para a energia do estado fundamental é então dada por

$$E = NE_{kin} + \frac{N}{2} \sum_q v(q) \{S(q)-1\} - N \sum_q \frac{M_q M_q^* S(q)}{\hbar\omega_{LO} + \frac{\hbar^2 q^2}{2m_b S(q)}}, \quad (5.27)$$

onde os dois primeiros termos correspondem a energia do estado fundamental para o gás de elétrons 3D, incluindo a contribuição de troca e correlação, e

$$E_p = - \sum_q \frac{M_q M_q^* S(q)}{\hbar\omega_{LO} + \frac{\hbar^2 q^2}{2m_b S(q)}}, \quad (5.28)$$

ou

$$E_p = - \frac{2\alpha\hbar\omega_{LO}}{\pi q_{LO}} \int_0^\infty dq \frac{S^2(q)}{S(q) + \frac{q^2}{q_{LO}^2}}. \quad (5.29)$$

é a contribuição da interação elétron-fônons-LO para a energia do estado fundamental, $S(q)$ é o usual fator de estrutura estático para o sistema de eletrons na ausência da interação elétron-fônon-LO. Na Eq. (5.29) introduzimos a quantidade

$$q_{LO} = \sqrt{\frac{2m_b \omega_{LO}}{\hbar}}. \quad (5.30)$$

O fator de estrutura estático $S(q)$ é calculado usando as diversas aproximações discutidas no Capítulo 2. Entre os vários métodos da teoria de blindagem linear, a função dielétrica pode ser escrita em termos do campo de polarização efetivo, no qual considera-se os efeitos de correlação. Como visto no Capítulo 2, a função resposta dielétrica pode ser escrita como:

$$\epsilon(q, \omega) = 1 - \frac{v(q) \chi_{3D}^0(q, \omega)}{1 + G(q) v(q) \chi_{3D}^0(q, \omega)}, \quad (5.31)$$

onde $\chi_{3D}^0(q, \omega)$ é a função resposta densidade-densidade devido ao gás de elétrons 3D livre (a função de Lindhard) e $G(q)$ é a correção de campo local, que reduz a interação elétron-elétron a pequenas distâncias. Na aproximação de Hartree-Fock, as partículas respondem às perturbações externas como partículas livres e como discutido, $G(q)$ deve ser tomado igual a unidade para todo valor de q . Na aproximação de Hartree-Fock, $S(q)$ pode ser calculado analiticamente, conforme a Eq. (2.13). Na aproximação de fases aleatórias, todas as correlações de curto alcance são desprezadas, correspondendo a correção de campo local $G(q)$ igual a zero na Eq. (5.31). No limite $\omega=0$ e $q \rightarrow 0$, a Eq. (2.14) reduz-se à aproximação de Thomas-Fermi

$$\lim_{q \rightarrow 0} \epsilon(q, 0) = 1 + \frac{q_{FT}^2}{q^2}. \quad (5.32)$$

onde q_{FT} é o vetor de onda de Thomas-Fermi.

Como vimos, na aproximação de Hubbard,

$$G_{HA}(q) = \frac{1}{2} \frac{q^2}{q^2 + q_F^2} \quad (5.33)$$

é o termo de correção de campo local proposto por Hubbard. A correção de campo local na STLS é dada por

$$G_{STLS}(q) = - \frac{1}{n_e} \int \frac{dq'}{(2\pi)^3} \frac{q \cdot q'}{q'^2} (S(q-q') - 1), \quad (5.34)$$

já exhaustivamente discutido no Capítulo 2.

5.2-Cálculo perturbativo

Vamos tratar as interações elétron-fônon-LO incluindo os efeitos de blindagem estática, que serão considerados ao substituir o coeficiente de interação elétron-fônon-LO $|M_q|^2$ por $|M_q|^2/\epsilon^2(q,0)$, onde $\epsilon(q,0)$ é a função dielétrica estática.

Nesta seção usaremos o método da função de Green, para calcular a auto-energia $\Sigma(p,E)$, devido à interação elétron-fônon-LO. A Fig. 5.1 mostra os diagramas de mais baixa ordem para a auto-energia do elétron devido à interação elétron-fônon-LO. A Fig. 5.1a mostra a contribuição de mais baixa ordem. Este termo contém somente uma linha de fônon, por meio do qual o elétron descreve o processo de emitir e absorver um único fônon virtualmente. A Fig. 5.1b mostra os dois diagramas no qual dois fônons são simultaneamente excitados. A Fig. 5.1c mostra os dez diagramas para o processo envolvendo três fônons.

A intensidade do acoplamento elétron-fônon-LO é determinada pelo valor de α . Os diagramas da Fig. 5.1 representam realmente uma série de potências em α . O termo de um fônon é proporcional a α , os termos de dois fônons a α^2 , etc. Neste trabalho calculamos o termo de auto-energia de mais baixa ordem em α (Fig. 5.1a), o qual envolve o processo de interação elétron-fônon-LO, onde o sistema de elétrons 3D está acoplado aos fônons-LO, via constante de acoplamento de Fröhlich. A principal contribuição do diagrama de Feynman para a auto-energia devido à interação elétron-fônon-LO é dada como^[11]

$$\Sigma(p, i p_n) = - \frac{1}{\beta} \sum_{i \omega_n} \int \frac{d q}{(2\pi)^3} \frac{|M_q|^2}{\epsilon^2(q, i \omega_n)} G(p+q, i p_n + i \omega_n) D(q, i \omega_n), \quad (5.35)$$

onde $\beta = (k_B T)^{-1}$ é o inverso da temperatura, $G(p+q, i p_n + i \omega_n)$ é a função de Green eletrônica, $D(q, i \omega_n)$ é o propagador renormalizado de fônon-LO e p e q são os vetores de onda do sistema de elétrons 3D. É importante notar que a função dielétrica $\epsilon(q, i \omega_n)$ depende tanto do vetor de onda como da frequência e o propagador de fônons-LO $D(q, i \omega_n)$ inclui a renormalização devido à correção da auto-energia de fônon-LO que surge da interação elétron-fônon-LO. Os pólos de $D(q, i \omega_n)$ correspondem aos modos de plasmons e fônons-LO acoplados, os quais ignoraremos neste trabalho devido a grande

complexidade do problema envolvendo três diferentes campos, a saber o elétron, fônon e plasmon, que estão acoplados simultaneamente. Estes processos não são relevantes na descrição do estado fundamental do sistema, que estamos estudando, mas são fundamentais para descrever as excitações do sistema^[58]. O efeito do propagador de fônon renormalizado é significativo, contanto que os modos de plasmon-fônon-LO acoplados sejam relevantes e este acoplamento seja fraco, quando a frequência de plasma ω_p é maior que a frequência de fônon ω_{LO} . Assim, podemos desprezar o acoplamento plasmon-fônon. O primeiro passo é calcular a soma de Matsubara em $i\omega_n$. A mesma é difícil de ser resolvida devido à $\epsilon(q, i\omega_n)$ e $D(q, i\omega_n)$ possuírem dependência complicada em $i\omega_n$.

Fig. 5.1 - As correções para a energia do elétron devido à interação elétron-fônon. A figura mostra todos os diagramas que tem: (a) um, (b) dois e (c) três fônons.

O propagador de fônon-LO $D(\mathbf{p}, i\omega_n)$ é escrito em termos da polarizabilidade do gás de elétrons na RPA,

$$D(\mathbf{p}, i\omega_n)^{-1} = D_0(\mathbf{p}, i\omega_n)^{-1} - |M_q|^2 \frac{\chi_{3D}^0(\mathbf{q}, i\omega_n)}{\epsilon^2(\mathbf{q}, i\omega_n)}, \quad (5.36)$$

e a polarizabilidade $\chi_{3D}^0(\mathbf{q}, i\omega_n)$ do sistema de elétrons 3D é dada por

$$\chi_{3D}^0(\mathbf{q}, i\omega_n) = \frac{2}{\beta} \sum_{i\omega_n} \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} G_0(\mathbf{p}+\mathbf{q}, i\mathbf{p}_n+i\omega_n) G_0(\mathbf{q}, i\mathbf{p}_n). \quad (5.37)$$

A função dielétrica $\epsilon(\mathbf{q}, i\omega_n)$ contém todas as informações acerca da blindagem e é dada por $\epsilon(\mathbf{q}, i\omega_n) = 1 - v(\mathbf{q}) \chi_{3D}^0(\mathbf{q}, i\omega_n)$ na RPA. Na Eq. (5.37), $G_0(\mathbf{q}, i\mathbf{p}_n)$ é a função de Green do elétron livre. Das Sarma, Kobayashi e Lai^[59] calcularam a taxa de espalhamento das quase-partículas devido à interação elétron-fônons-LO, a qual é obtida ao calcular a parte imaginária da auto-energia $\Sigma(\mathbf{p}, E)$, consideraram a relação de dispersão tipo concha de massa $E = p^2/2m_b$ e levaram em conta apenas processos de emissão à temperatura $T=0$. Neste caso não há emissão de fônons real. Na aproximação de blindagem estática, despreza-se a dependência da frequência na função dielétrica. Esta aproximação tem sido aplicada extensivamente tanto em sistemas de elétrons 3D^[60-63] como em 2D^[51]. Embora a soma em $i\omega_n$ seja complicada, devemos introduzir algumas simplificações para obter um resultado utilizável. Supomos então que a função de Green de fônon é dada por seu propagador livre,

$$D_0(\mathbf{q}, i\omega_n) = - \frac{2\omega(\mathbf{q})}{\omega_n^2 + \omega^2(\mathbf{q})}. \quad (5.38)$$

e assumimos a frequência de fônons-LO independente do vetor de onda. Os efeitos de blindagem dinâmicos são completamente intratáveis por este método perturbativo, assim sendo, somos forçados a fazer algumas aproximações em $\epsilon(\mathbf{q}, i\omega_n)$. A próxima aproximação é mais razoável. Vamos desprezar a dependência da frequência na função dielétrica. Esta aproximação é considerada na literatura como aproximação de frequência efetiva^[59] que consiste em fazer $\epsilon(\mathbf{q}, i\omega_n) = \epsilon(\mathbf{q}, \omega_{LO})$. Portanto, $\omega_p \gg \omega_{LO}$, $\epsilon(\mathbf{q}, \omega_{LO})$ é aproximada por seu limite estático. Deste modo $\epsilon(\mathbf{q}, i\omega_n)$ será tratada como

uma função unicamente do vetor de onda. Esta aproximação é razoável, enquanto estamos interessados em frequência de plasma dos portadores de cargas muito maior que as energias de fônon-LO. Dessa forma $\epsilon(\mathbf{q}, \omega) \approx \epsilon(\mathbf{q}, 0)$ é admissível todas as vezes que $\omega_{LO} \ll \omega_P$,

$$\Sigma(\mathbf{p}, i\mathbf{p}_n) = \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \frac{|M_{\mathbf{q}}|^2}{\epsilon^2(\mathbf{q}, 0)} \left(\frac{1 + N_{\mathbf{q}} - n_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}}{i\mathbf{p} - \hbar\omega_{LO} - \xi_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}} + \frac{N_{\mathbf{q}} + n_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}}{i\mathbf{p} + \hbar\omega_{LO} - \xi_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}} \right), \quad (5.39)$$

onde $N_{\mathbf{q}}$ ($n_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}$) é o número de ocupação de Bose (Fermi) e $\xi_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}$ é a energia do elétron medida com relação a energia de Fermi. Discutiremos somente o limite de temperatura zero, onde podemos desprezar o fator de ocupação de Bose e $n_{\mathbf{p}+\mathbf{q}} = \theta(-\xi_{\mathbf{p}+\mathbf{q}})$. Ao fazer a soma de Matsubara em $i\omega_n$ consideramos a frequência dos fônons-LO independente do vetor de onda, ou seja, $\omega(\mathbf{q}) = \hbar\omega_{LO}$, e a energia cinética medida com relação a energia de Fermi,

$$\xi_{\mathbf{p}+\mathbf{q}} = \epsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{q}} - E_F. \quad (5.40)$$

Há também contribuições para a auto-energia $\Sigma(\mathbf{p}, E)$ devido as interações elétron-elétron. Contudo, em nosso cálculo da relação de dispersão da energia do elétron, não incluiremos a contribuição direta elétron-elétron. A partir da parte real da auto-energia devido à interação elétron-fônon, Mahan e Duke^[64] calcularam a densidade de estados para um sistema de elétrons 3D na presença da blindagem estática (Thomas-Fermi) e não levaram em consideração a parte da auto-energia devido à interação elétron-elétron. Vamos considerar os efeitos de blindagem estática. Além da aproximação de Thomas-Fermi, trataremos os efeitos de muitos corpos pelas seguintes aproximações, STLS, HA e RPA.

A auto-energia devido à interação elétron-fônon-LO tem tanto a parte real como a parte imaginária. Usando a identidade

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{f(x)dx}{x + i\delta} = P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{f(x)}{x} dx - i\pi \delta(x) f(x), \quad (5.41)$$

onde P é a parte principal da integral, podemos obter a parte real, como :

$$\text{Re}(\Sigma(\mathbf{p}, E)) = \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \frac{|M_{\mathbf{q}}|^2}{\epsilon^2(\mathbf{q}, 0)} \left(\frac{n_{\mathbf{p}+\mathbf{q}} + N_{\mathbf{q}}}{E + \hbar\omega_{\text{LO}} - \epsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}} + \frac{N_{\mathbf{q}} + 1 - n_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}}{E - \hbar\omega_{\text{LO}} - \epsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}} \right) \quad (5.42)$$

e a parte imaginária por

$$\begin{aligned} \text{Im}\{\Sigma(\mathbf{p}, E)\} = & -\pi \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \frac{|M_{\mathbf{q}}|^2}{\epsilon^2(\mathbf{q}, 0)} \left\{ (n_{\mathbf{p}+\mathbf{q}} + N_{\mathbf{q}}) \delta(E + \hbar\omega_{\text{LO}} - \epsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}) + \right. \\ & \left. + (N_{\mathbf{q}} + 1 - n_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}) \delta(E - \hbar\omega_{\text{LO}} - \epsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}) \right\}. \end{aligned} \quad (5.43)$$

Há dois termos na Eq. (5.43), o primeiro termo corresponde à absorção de um fônon pelo elétron. Este termo é proporcional a função distribuição de fônons $N_{\mathbf{q}}$, o qual desaparece a temperatura igual a zero. O segundo termo surge da emissão de um fônon pelo elétron, e é proporcional ao fator $N_{\mathbf{q}} + 1 - n_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}$, que finito a $T=0$. Portanto, este termo é finito somente se $E > \hbar\omega_{\text{LO}}$, quando a partícula têm mais energia que o fônon, e é zero quando $E < \hbar\omega_{\text{LO}}$.

Além da massa efetiva do polaron que pode ser extraída da parte real da auto-energia da interação elétron-fônon-LO, a taxa de espalhamento da quase-partícula devido à interação polar, como foi calculada por Das Sarma et al.^[59], também pode ser obtida da parte imaginária da auto-energia devido à interação elétron-fônon-LO,

$$\Gamma(\mathbf{p}) = -\text{Im}\{\Sigma(\mathbf{p}, E)\}. \quad (5.44)$$

Como estamos considerando apenas um elétron na banda de condução, a função distribuição de elétrons $n_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}$ é igual a zero e além disso, para baixas temperaturas, a função distribuição de fônons $N_{\mathbf{q}}$ também pode ser considerada nula. Obtemos

$$\text{Re}(\Sigma(\mathbf{p}, E)) = \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \frac{|M_{\mathbf{q}}|^2}{\epsilon^2(\mathbf{q}, 0)} \frac{1}{E - \hbar\omega_{\text{LO}} - \epsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}}. \quad (5.45)$$

Queremos calcular a relação de dispersão do polaron dada por

$$E = \frac{\hbar^2 \mathbf{p}^2}{2m} + \text{Re}\{\Sigma(\mathbf{p}, E(\mathbf{p}))\}. \quad (5.46)$$

A parte real da auto-energia devido à interação elétron-fônon, Eq. (5.45), pode ser escrita como:

$$\text{Re}[\Sigma(p, E)] = \frac{\alpha}{\pi} \frac{\hbar\omega_{LO}}{q_{LO}} \int_0^\infty \frac{dq}{\epsilon^2(q, 0)} \int_0^\pi \frac{\sin\theta d\theta}{\frac{E}{\hbar\omega_{LO}} - \frac{p^2}{q_{LO}^2} - \frac{2pq\cos\theta}{q_{LO}^2} - \frac{q^2}{q_{LO}^2}} \quad (5.47)$$

O cálculo do espectro de excitação é feito resolvendo as Eqs. (5.46) e (5.47) autoconsistentemente. Este método é equivalente a teoria de perturbação de Wigner-Brillouin.

A massa efetiva do polaron pode ser extraída da parte real da auto-energia da interação elétron-fônon-LO como,

$$\frac{m_F^*}{m_b} = \left\{ 1 + \frac{m_b}{\hbar^2 q_F} \left(\frac{\partial \text{Re}[\Sigma(p)]}{\partial p} \right)_{p=q_F} \right\}^{-1}, \quad (5.48)$$

usando as Eqs. (5.46) e (5.47) determinamos de uma forma autoconsistente a parte real da auto-energia e tomando a derivada da mesma, podemos calcular a massa efetiva do polaron.

A teoria de perturbação de Rayleigh-Schrödinger fornece valores melhores da energia do que a teoria de perturbação de Wigner-Brillouin no limite de um polaron. Podemos assim, escolher a teoria de perturbação de Rayleigh-Schrödinger para calcular a contribuição da interação elétron-fônon para a energia do elétron, fazendo $E = \hbar p^2 / 2m_b$ em $\text{Re}[\Sigma(p, E)]$. Dessa forma a Eq. (5.47) torna-se

$$E = \frac{\hbar^2 p^2}{2m} - \frac{\alpha}{\pi} \frac{\hbar\omega_{LO}}{q_{LO}} \int_0^\infty \frac{dq}{\epsilon^2(q, 0)} \int_0^\pi \frac{\sin\theta d\theta}{\frac{p^2}{q_{LO}^2} + \frac{2pq\cos\theta}{q_{LO}^2} + \frac{q^2}{q_{LO}^2}} \quad (5.49)$$

Neste parágrafo, vamos apresentar apenas as expressões, calculadas pela teoria de perturbação de Rayleigh-Schrödinger, para o resultado da energia de ligação polarônica, assim como, para a massa efetiva do polaron. Portanto, se usarmos a relação de dispersão devido à interação elétron-fônon-LO tipo concha de massa, como foi discutido nos parágrafos anteriores, pelo método da teoria da função de Green,

teremos o mesmo resultado como foi originalmente apresentado por Lee, Low e Pines^[65]. A energia de ligação polarônica devido à interação elétron-fônon-LO, é dada por

$$E_p = - \frac{2\alpha\hbar\omega_{LO}}{\pi q_{LO}} \int_0^\infty \frac{dq}{\epsilon^2(q,0)} \frac{1}{1 + \frac{q^2}{q_{LO}^2}} \quad (5.50)$$

e a massa efetiva do polaron por:

$$\frac{m_R^*}{m_b} = \left\{ 1 - \frac{8\alpha}{3\pi} \int_0^\infty \frac{dq}{q_{LO}} \frac{1}{\epsilon^2(q,0)} \frac{q^2/q_{LO}^2}{(1 + q^2/q_{LO}^2)^3} \right\}^{-1}. \quad (5.51)$$

Ao fazer a função dielétrica, $\epsilon(q,0)=1$, nas Eqs. (5.50) e (5.51) recuperaremos os resultados na ausência dos efeitos de muitos corpos, $E_p = -\alpha\hbar\omega_{LO}$ e $m^*/m_b = 6/(1-\alpha)$.

5.3-Resultados

Na Fig. 5.2 apresentamos a contribuição da interação elétron-fônon-LO E_p , Eq. (5.29), em unidades de $\hbar\omega_{LO}$, para a energia do estado fundamental de um gás de polarons 3D, como função da densidade de elétrons para diferentes aproximações, previamente discutidas no Capítulo 2. Os parâmetros físicos considerados correspondem ao ZnO^[66], isto é, a energia de fônon-LO ($\hbar\omega_{LO}=73.27\text{meV}$), a massa do elétron na banda de condução m_b está expressa em unidades da massa do elétron livre ($m_b=0.24m_e$), a constante dielétrica de frequência zero ($\epsilon_0=8.15$) e a constante dielétrica de alta frequência ($\epsilon_\infty=4.0$). Se usarmos estes mesmos parâmetros, encontraremos o raio efetivo de Bohr da ordem de $15.45\text{\AA}$ e finalmente podemos obter o tamanho efetivo do elétron, que é uma medida natural de comprimento na teoria do polaron ($r_p = \sqrt{\hbar/2m_b\omega_{LO}} = 7.21\text{\AA}$).

Os nossos resultados foram obtidos para o ZnO, mesmo sendo um semicondutor polar, o ZnO apresenta propriedades piezoelétricas. Estes resultados quando obtidos de outros semicondutores menos polar permanecem qualitativamente válidos. As interações elétron-elétron são especificadas pelo parâmetro adimensional de

densidade r_s , dado pela Eq. (2.1). Deste modo, para o semicondutor ZnO, com uma densidade de elétrons da ordem de $n_e \approx 10^{19} \text{cm}^{-3}$, obtemos $r_s \simeq 1.86$. Note que os efeitos de blindagem sobre a interação elétron-fônon-LO aumentam com o aumento da densidade de elétrons e a energia de ligação polarônica E_p , em módulo, diminui com o aumento da densidade de elétrons. Em todas as aproximações a energia de ligação polarônica, em módulo, decresce quando a densidade de elétrons aumenta. No entanto, fica claro que a RPA superestima os efeitos de blindagem enquanto que a HFA os subestima. Na região de baixas densidades, os resultados são quantitativamente diferentes. Ao estudar as propriedades dinâmicas do gás de polarons pelo método variacional, Lemmens et al.^[16] usaram apenas aproximação de Hartree-Fock (HFA). Note que os resultados na HFA, mesmo no limite de alta densidade quando comparados com os outros estão deslocados. Neste mesmo limite de densidade, as curvas STLS e HA aproximam-se da curva RPA. Quando as correlações eletrônicas são introduzidas, via aproximação de Hubbard, que leva em conta apenas o efeito de troca devido ao princípio de Pauli, nota-se uma gradual redução do efeito de blindagem. Esta tendência é mantida ao usarmos a aproximação STLS, que conhecidamente trata melhor as correlações de curto alcance do sistema. Em toda parte usamos a mesma descrição física como foi usada em sistemas de baixa dimensionalidade e não encontramos diferenças qualitativas. Embora, as presentes grandezas da energia de ligação polarônica, não sejam quantidades experimentalmente relevantes para as heteroestruturas de GaAs, as mesmas produzirão relevantes mudanças nas bordas das bandas em semicondutores mais polares, tipo ZnO.

Na Fig. 5.3 apresentamos a contribuição devido a interação elétron-fônon-LO, Eq. (5.50), para a energia do estado fundamental de um sistema de muitos polarons interagentes, em unidades de $\hbar\omega_{LO}$, como função da densidade de elétrons. As quatro curvas correspondem a função dielétrica estática do gás de elétrons homogêneo, nas aproximações de Thomas-Fermi, RPA, Hubbard e STLS. A aproximação de Thomas-Fermi apresenta a energia de ligação polarônica, em módulo, menor do que as outras. No entanto, a mesma decresce, em módulo, com o aumento da densidade de elétrons. Como esperávamos a TFA apresenta piores resultados, já que nesta aproximação os efeitos de correlações são completamente desprezados. É conveniente

notar que o resultado da aproximação RPA para a função dielétrica é igual ao resultados de Thomas-Fermi para $q \leq 2q_F$. Portanto, encontramos maiores diferenças nos resultados entre as aproximações RPA e TFA. Não há diferenças significativas, menores do que $0.01\hbar\omega_{LO}$, na energia polarônica para todas as aproximações na aproximação de blindagem estática na região de alta densidade. A energia de ligação polarônica calculada pela aproximação STLS é bem melhor em comparação com as outras aproximações, isto é devido ao fato que esta aproximação leva em conta as correlações de curto alcance devido ao potencial de Coulomb e troca do gás de elétrons. Como no caso dinâmico, em todas as aproximações a energia de ligação polarônica, em módulo, decresce com o aumento da densidade de elétrons, isto é devido aos efeitos de blindagem estática sobre as interações elétron-fônon-LO, os quais aumentam com o aumento da densidade de elétrons.

Na Fig. 5.4 comparamos os dois métodos de blindagem: o dinâmico para a energia de ligação polarônica de um gás de polaron e o estatístico (teoria de perturbação Rayleigh-Schrödinger) também para a energia polarônica. As quatro curvas correspondem a energia de ligação polarônica como função da densidade de elétrons. As curvas pontilhada e traço-ponto correspondem aos resultados com blindagem dinâmica e as curvas cheia e tracejada aos resultados de blindagem estática. Note que, na região de alta densidade de elétrons a energia de ligação polarônica devido a interação elétron-fônon-LO apresenta resultados aproximadamente iguais para ambas as aproximações, fica claro que nesta região de densidades de elétrons, todas as aproximações, tanto com efeitos de blindagem dinâmica ou com efeitos de blindagem estática, coincidem. No entanto, na região de baixa densidade de elétrons, a aproximação de blindagem dinâmica apresenta uma energia de ligação polarônica E_p , em módulo, maior do que aproximação de blindagem estática.

Fig. 5.2 - A Energia de ligação polarônica como uma função da densidade de elétrons na aproximação de blindagem dinâmica, Eq. (5.29), usando o fator de estrutura estático em várias aproximações.

Fig. 5.3 - Contribuição da interação elétron-fônon para a energia do estado fundamental versus a densidade de elétrons, Eq. (5.50). A função dielétrica estática foi calculada na TFA, RPA, HA e STLS.

Fig. 5.4 - Comparação das energias de ligação polarônica como uma função da densidade de elétrons nas aproximações de blindagem estática e dinâmica para as aproximações RPA e STLS.

Na Fig. 5.5 mostramos a massa efetiva do polaron m_R^* , Eq. (5.51), devido à interação elétron-fônon-LO em diferentes aproximações para a blindagem estática. A curva pontilhada corresponde à função dielétrica estática $\epsilon(q,0)$ na aproximação de fases aleatórias, a curva tracejada à $\epsilon(q,0)$ na aproximação de Thomas-Fermi, a curva traço-ponto corresponde a função dielétrica estática do gás de elétrons na aproximação de Hubbard e a curva cheia corresponde a função dielétrica estática na aproximação STLS. Como, não há um método equivalente de transformação canônica que tenha sido desenvolvido para calcular as massas efetivas do polaron, nossos resultados são baseados no tratamento de blindagem estática do sistema de muitos polarons como discutido na seção 5.2. Em todas as aproximações, m_R^* diminui uniformemente com o aumento da densidade de elétrons. No limite de alta densidade de elétrons, os valores para a massa efetiva do polaron nas diversas aproximações são aproximadamente iguais. Isto pode ser facilmente compreendido da seguinte maneira: com o aumento da densidade de elétrons, a interação efetiva elétron-fônon-LO diminui devido ao aumento do efeito de blindagem, resultando numa massa efetiva do polaron muito menor. Podemos também observar que TFA fornece piores comportamentos para m_R^* e nossos resultados sugerem que a TFA não trata adequadamente a blindagem na interação elétron-fônon-LO.

Na Fig. 5.6 mostramos a massa de renormalização m_F^* devido a interação elétron-fônon-LO, extraída da parte real da auto-energia devido interação elétron-fônon-LO na TD-TPWB. Usamos a aproximação de Thomas-Fermi, RPA, Hubbard e STLS para tratar os efeitos de blindagem estática do gás de elétrons. Em todas as aproximações, podemos observar que a massa efetiva do polaron diminui e logo em seguida, aumenta com o aumento da densidade de elétrons. Este comportamento pode ser compreendido da seguinte maneira: quando a densidade de elétrons aumenta, a interação efetiva elétron-fônon-LO diminui devido ao aumento do efeito da blindagem estática, resultando numa pequena massa de renormalização. Por outro lado, com o aumento da densidade de elétrons a relação de dispersão do elétron em $p=q_F$ deixa de ser parabólica e isto pode ser observado pelo aumento da massa de renormalização. Este aumento em m_F^* trona-se mais acentuado quando q_F aproxima-se de q_{LO} . Isto ocorre para valores de densidades de elétrons em torno de $n_e \approx 10^{19} \text{ cm}^{-3}$. O mesmo

comportamento foi observado em duas dimensões e exhaustivamente discutido no trabalho de Wu Xiaoguang et al.. A conclusão é que o resultado para m_F^* não é válido para grandes valores de densidades de elétrons. A inclusão da interação direta elétron-elétron na auto-energia pode corrigir esta falha no limite de altas densidades. Em nossos resultados não incluímos a auto-energia devido a interação direta elétron-elétron. Usamos o conjunto de Eqs. (5.47), (5.49) de maneira autoconsistente. Este procedimento é conhecido como a teoria de perturbação de Wigner-Brillouin.

Fig. 5.5 - A massa efetiva do polaron m_R^* , Eq. (5.51), calculada pela teoria de perturbação Rayleigh-Schrödinger como uma função da densidade de elétrons e com efeitos de blindagem estática tratados em diferentes aproximações.

Fig. 5.6 - A massa efetiva do polaron m_p^* , Eq. (5.48), calculada pela teoria de perturbação Wigner-Brillouin como uma função da densidade de elétrons e com efeitos blindagem estática tratados em diferentes aproximações. Como discutido no texto, este resultado não é válido para densidades grandes de elétrons.

A Fig. 5.7 apresenta a massa efetiva do polaron devido à interação elétron-fônon-LO em diferentes aproximações para a blindagem estática. As curvas cheia e tracejada correspondem ao resultado obtido por teoria de perturbação Rayleigh-Schrödinger, os efeitos de blindagem sendo tratados pelas aproximações RPA e STLS. As curvas traço-ponto e pontilhada correspondem à massa de renormalização devido à interação elétron-fônon-LO, calculada pela aproximação de Wigner-Brillouin. Os efeitos de blindagem do gás de elétrons sendo também tratados pela aproximações RPA e STLS respectivamente. A idéia central da teoria de perturbação de Wigner-Brillouin é que a energia E e o momento $\mathbf{p}=(p_x, p_y, p_z)$, são quatro variáveis independentes. Supondo que o momento $\mathbf{p}$ seja conhecido, a energia E não será dada por $\epsilon_p = p^2/2m_b$. Este resultado ($E = \epsilon_p$) só seria verdadeiro se não existisse no Hamiltoniano o termo de interação elétron-fônon-LO. Assim, podemos assegurar que a teoria de perturbação de Wigner-Brillouin, dá resultados muito melhores do que a usual teoria de perturbação de Rayleigh-Schrödinger. Mostramos as diferenças entre as duas massas efetivas m_F^* e m_R^* calculadas como uma função da densidade de elétrons. Para baixas densidades, os efeitos da massa de renormalização são pronunciados em m_R^* quando comparado com m_F^* . A conclusão é que para o sistema de muitos polarons interagentes, TPRS fornece melhores resultados que a TD-TPWB.

Na Fig. 5.8 mostramos a parte real da auto-energia devido à interação elétron-fônon-LO para diferentes valores da densidade de elétrons. Os efeitos de muitos corpos sendo tratados pela aproximação de Thomas-Fermi. Em $p=0$, $\Sigma(p=0)$ aumenta ($|\Sigma(p=0)|$ diminui) com o aumento da densidade de elétrons. Isto está consistente com os nossos cálculos anteriores da energia de ligação polarônica, ou seja, os efeitos de blindagem aumentam com o aumento da densidade de elétrons, fazendo com que a parte real da auto-energia em módulo diminua com o aumento da densidade de elétrons. Portanto, como foi evidenciado por Wu Xiaoguang et al.^[17], $\Sigma(p=0) \neq E_p$ porque, como uma consequência da estatística de Fermi-Dirac, no estado fundamental os diferentes elétrons têm diferentes vetores de onda $\mathbf{p}$. Note também, que no limite de baixa densidade de elétrons a parte real da auto-energia devido à interação elétron-fônon-LO não depende tanto de $\mathbf{p}$. Embora, no limite de alta densidade de elétrons $\Sigma(\mathbf{p})$ muda mais dramaticamente com $\mathbf{p}$, devido ao forte efeito não parabólico

induzido pela interação elétron-fônon-LO. Consequentemente, a derivada $\partial \Sigma(p)/\partial p$, em $p=q_F$, torna-se mais negativa com o aumento da densidade de elétrons. Em conseqüência, a massa de renormalização devido a interação elétron-fônon-LO aumenta com o aumento da densidade de elétrons, $n_e \geq 10^{18} \text{ cm}^{-3}$. Tanto a Fig. 5.9, como as Fig. 5.10 e 5.11, mostram a parte real da auto-energia da interação elétron-fônon-LO para diferentes valores da densidade de elétrons, os efeitos de muitos corpos foram tratados respectivamente, pela aproximação de fases aleatórias, aproximação de Hubbard e aproximação STLS. Como no caso da energia de ligação polarônica, tanto o dinâmico como o estático, em todas as aproximações $\Sigma(p)$ decresce em módulo com o aumento da densidade de elétrons, isto é devido aos efeitos de blindagem sobre a interação elétron-fônon-LO, os quais aumentam com o aumento da densidade de elétrons.

Na Fig. 5.12 apresentamos a parte real da auto-energia da interação elétron-fônon-LO (em unidades de $\hbar\omega_{LO}$) como função de p . As quatro curvas correspondem a função dielétrica estática do gás de elétrons homogêneo para as aproximações de Thomas-Fermi, RPA, Hubbard e STLS. A aproximação de Thomas-Fermi apresenta uma auto-energia $\Sigma(p,E)$ em módulo menor do que as outras. A auto-energia calculada pela aproximação STLS é bem melhor em comparação com as outras aproximações, isto é devido ao fato que esta aproximação leva em conta as correlações de curto alcance devido ao potencial de Coulomb e troca do gás de elétrons.

Os resultados experimentais realizados por Brown et al.^[67], através da associação de experimentos de mobilidade e medidas de ressonância ciclotrônicas demonstraram os efeitos polarônicos. Uma das ferramentas mais usadas para estudar a interação elétron-fônon são os experimentos de ressonância ciclotrônicas. Em semicondutores *bulk*, no caso onde os dados de ressonância ciclotrônicas são praticáveis^[68], as densidades de elétrons são relativamente pequenas (tipicamente da ordem de 10^{13} cm^{-3} em GaAs). Neste caso as teorias de um polaron descrevem muito bem os efeitos polarônicos. Para ZnO, há informações experimentais relativo ao espectro de reflexão no infra-vermelho incluindo diferentes concentrações de elétrons. Collins e Kleinman^[69] mostraram que o espectro de reflexão é completamente diferente para densidades de elétrons acima ou abaixo de 10^{17} cm^{-3} . No caso real, haverá complicações na compreensão dos efeitos dos portadores nas propriedades polarônicas,

porque teríamos que incluir outros tipos de fônons, principalmente os fônons acústicos que surgem do potencial de deformação piezoelétrico, os quais estão presentes no ZnO. Esperamos que nossos resultados possam motivar trabalhos experimentais em semicondutores polares 3D, como ocorrido em heteroestruturas semicondutoras^[70-72], para confirmar os efeitos de muitos polarons nos semicondutores *bulk*.

Fig. 5.7 - A massa efetiva do polaron em função da densidade de elétrons calculada pelas aproximações RPA e STLS: (a) m_R^* calculada pela TPRS e (b) m_F^* calculada pela TD-TPWB.

Fig. 5.8 - A parte real da auto-energia devido à interação elétron-fônon-LO para diferentes valores de densidades de elétrons, $n_e = 2.8 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ (curva sólida), $n_e = 1.2 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ (ponto-traço) e $n_e = 6.0 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ (curva tracejada) como uma função do vetor de onda e os efeitos de muitos corpos tratados pela aproximação de Thomas-Fermi.

Fig. 5.9 - A parte real da auto-energia devido à interação elétron-fônon-LO para diferentes valores de densidades de elétrons, $n_e = 2.8 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ (curva sólida), $n_e = 1.2 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ (ponto-traço) e $n_e = 6.0 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ (curva tracejada) como uma função do vetor de onda e os efeitos de muitos corpos tratados pela aproximação de fases aleatórias.

Fig. 5.10 - A parte real da auto-energia devido à interação elétron-fônon-LO para diferentes valores de densidades de elétrons, $n_e = 2.8 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ (curva sólida), $n_e = 1.2 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ (ponto-traço) e $n_e = 6.0 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ (curva tracejada) como uma função do vetor de onda e os efeitos de muitos corpos tratados pela aproximação de Hubbard.

Fig. 5.11 - A parte real da auto-energia devido à interação elétron-fônon-LO para diferentes valores de densidades de elétrons, $n_e = 2.8 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ (curva sólida), $n_e = 1.2 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ (ponto-traço) e $n_e = 6.0 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ (curva tracejada) como uma função do vetor de onda e os efeitos de muitos corpos tratados pela aproximação de STLS.

Fig. 5.12 - Comparação da parte real da auto-energia devido à interação elétron-fônon-LO como uma função do vetor de onda para $n_e = 2.8 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ e os efeitos de muitos corpos tratados pelas seguintes aproximações: TFA, RPA, HA e STLS.

CAPÍTULO 6

CONCLUSÕES

Neste trabalho, uma das mais bem sucedidas aproximações da formulação dielétrica da teoria de muitos corpos, a STLS, foi generalizada para estudar as correlações eletrônicas de um arranjo periódico de gases de elétrons bidimensionais, o gás encamado (LEG).

Pela primeira vez, resultados numéricos para a correção de campo local $G(q, q_z)$ foram obtidos através da completa solução das equações integrais do esquema STLS. Tal procedimento foi possível graças ao uso de uma expressão conveniente para a função resposta do gás bidimensional que possibilitou um cálculo eficiente e acurado através do método iterativo. Nossos resultados para a energia de correlação e dispersão de plasmons revelaram comportamento qualitativamente diferente do gás de elétrons em duas e em três dimensões. No entanto, nos limites apropriados, nossos resultados reproduziram aqueles esperados nos casos bi e tridimensionais. Observou-se uma drástica variação da energia de correlação com a distância intercamadas para valores abaixo de $100 \text{ \AA}$ (raio de Bohr efetivo no GaAs). A relação de dispersão de plasmons exibiu o comportamento intermediário entre aquele encontrado no gás bidimensional $\omega(q) \propto q^{1/2}$ e $\omega(q) = \text{constante}$, típico do caso tridimensional no limite de q_d pequeno e $q_z = 0$. Um modo "acústico" de plasmon $\omega(q) \propto q$ foi encontrado no limite de acoplamento forte ($q_d \ll 1$) e $q_z \neq 0$. Este comportamento foi comprovado experimentalmente^[39]. Para pequenos valores de r_s , as aproximações RPA, Hubbard e STLS apresentam resultados equivalentes para o espectro de plasmons. No entanto, quando r_s aumenta, embora para valores de q pequeno a situação não se altere, os resultados entre as várias aproximações apresentam significativas diferenças. Infelizmente, as experiências usando a técnica de espalhamento inelástico ressonante de luz envolvem pequenos números de onda. Batke et al.^[73] usando experiências de espectroscopia de transmissão no infra-vermelho longínquo mostraram a importância de correções quânticas com o aumento de q no gás bidimensional em heterojunções semicondutoras de GaAs. Tal experiência em superredes poderá evidenciar a importância das correlações eletrônicas no espectro de plasmons. Obtevemos ainda

resultados que indicam que a aproximação de Miesenböck e Tosi de desprezar as correlações de curto alcance intercamadas é bastante satisfatória em um grande número de casos. Tal aproximação simplifica tremendamente os cálculos numéricos.

Estudamos ainda os efeitos de blindagem no gás tridimensional de polarons interagente, usando duas diferentes técnicas: um método de blindagem dinâmica baseado na generalização do tratamento de Lee-Low-Pines para o sistema de muitos polarons e o usual método de blindagem estática baseado em teorias de perturbação de primeira ordem. O tratamento dinâmico resulta em efeitos polarônicos mais pronunciados em comparação com o método estático. Os efeitos de correlação são apropriadamente levados em conta no método dinâmico e mostraram-se relevantes a pequenas densidades. Pela primeira vez, cálculos da auto-energia e demais quantidades derivadas foram realizados além de RPA. Uma análise comparativa dos efeitos de renormalização da massa em função da densidade de portadores foi feita em detalhes. Mostramos explicitamente que a aproximação de Thomas-Fermi largamente usada não é válida para tratar os efeitos de blindagem e que a teoria de perturbação de Rayleigh-Schrödinger fornece resultados mais razoáveis para o gás de polarons quando comparados com aqueles obtido via teoria de perturbação de Wigner-Brillouin. Uma das mais importantes ferramentas para demonstrar experimentalmente os efeitos polarônicos é a técnica de ressonância ciclotrônica. Em semicondutores, onde dados confiáveis de ressonância ciclotrônica estão disponíveis, as densidades são relativamente pequenas (tipicamente da ordem de 10^{13}cm^{-3} para GaAs)^[68]. Neste caso, a teoria de um único polaron descreve bem os resultados experimentais. No entanto, para semicondutores fortemente dopados, existem evidências antigas de que o comportamento de espectros de reflexão dependem fortemente da densidade^[69]. Esperamos que nossos resultados possam motivar um trabalho experimental em semicondutores *bulk* polares, como tem acontecido com heteroestruturas semicondutoras de modo a estabelecer os efeitos de muitos polarons.

Uma sugestão de trabalho futuro refere-se ao desenvolvimento do formalismo aqui apresentado para o caso de um sistema de dupla camada onde efeitos de cristalização de Wigner tem sido anunciados^[41] e que possui considerável importância para o efeito Hall quantizado^[74,75]. Este modelo tem representado uma estrutura de

duplo poço quântico dopado ou um único poço quântico com uma grande densidade eletrônica em cada interface devido a efeitos de carga espacial .

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- 1 - T. Ando, A. B. Fowler e F. Stern, *Rev. Mod. Phys.* **54**, 437 (1982) .
- 2 - N. Studart e O. Hipólito, *Rev. Bras. Fís.* **16**, 194 (1986) .
- 3 - Para o status atual da área, ver S. Hiyamizu e H. Nakashima (eds.), *Proceeding of the Fifth International Conference on Modulated Semiconductor Structures*, Nara, Japan, *Surf. Sci.* **267** (1992) .
- 4 - P. B. Visscher e L. M. Falicov, *Phys. Rev.* **B3**, 2541 (1971) .
- 5 - S. Ichimaru, *Rev. Mod. Phys.* **54**, 1017 (1982) .
- 6 - K. S. Singwi e M. P. Tosi, *Solid State Phys.*, **36**, 177, Academic, New York (1981) .
- 7 - K. S. Singwi, M. P. Tosi, R. H. Land e A. Sjölander, *Phys. Rev.* **176**, 589 (1968) .
- 8 - C. Zhang e N. Tzoar, *Phys. Rev.* **A38**, 5786 (1988) .
- 9 - H. M. Miesenböck e M.P. Tosi, *Z.Phys. B - Condensed Matter* **78**, 255 (1990) .
- 10 - A. Gold, *Z. Phys.* **B86**, 193 (1992) .
- 11 - G. D. Mahan, *Many-Particle Physics*, 2^a ed. Plenum, New York (1990) .
- 12 - J. T. Devreese, *Phys. Scripta* **T25**, 305 (1989) .
- 13 - J. T. Devreese (ed.), *Polaron in Ionic Crystals and Polar Semiconductors*, North-Holland Publ. Co., Amsterdam (1972) .
- 14 - G. D. Mahan na Ref. 13 .
- 15 - S. Das Sarma, A. Kobayashi e W. Y. Lai, *Phys. Rev.* **B36**, 8151 (1987) .
- 16 - L. F. Lemmens, J. T. Devreese e F. Brosens, *Phys. Stat. Sol.* **B82**, 439 (1977) .
- 17 - Wu Xiaoguang, F. M. Peeters e J. T. Devreese, *Phys. Stat. Sol.* **B133**, 229 (1986) .
- 18 - W. B. da Costa e N. Studart, *Proc. 5th Braz. Sch. Semiconductor Physics*, J. R. Leite, A. Fazzio e A. S. Chaves (eds.), World Scientific (em impressão) .
- 19 - W. B. da Costa e N. Studart, *Proc. 20th Int. Conf. Semiconductor Physics*, Beijing, 1992, X. Xide e K. Huang (eds.), World Scientific (Singapore) .
- 20 - D. M. Ceperley e B. J. Alder, *Phys. Rev. Lett.* **45**, 566 (1980) .
- 21 - B. Tanatar e D. M. Ceperley, *Phys. Rev.* **B39**, 5005 (1989) .
- 22 - H. Raether, *Excitations of Plasmons and Interband Transitions by Electrons* (Springer, Berlin), (1980) .
- 23 - D. Pines e P. Nozières, *The Theory of Quantum Liquids*, W. A. Benjamin, New

- York, (1966) .
- 24 - A. A. Kugler, J. Stat. Phys. 12, 35, (1975) .
 - 25 - J. Lindhard, K. Dan. Vidensk. Selsk. Mat. Fys. Mod. (8) 28, 1 (1954) .
 - 26 - J. Hubbard, Phys. Lett. A25, 709 (1957); Proc. R. Soc. London, Ser. A243, 336 (1957) .
 - 27 - U. Freitas, L. Ioriatti e N. Studart, J. Phys. C: Sol. Stat. Phys. 20, 5983 (1987) .
 - 28 - P. Nozières e D. Pines, Phys. Rev. 111, 442 (1958) .
 - 29 - P. Nozières, Interacting Fermi Systems (Benjamin, Reading, Mass., 1964) .
 - 30 - E. P. Wigner, Trans. Faraday Soc. 34, 678 (1938) .
 - 31 - G. F. Giuliani e J. J. Quinn, Phys. Rev. Lett. 51, 919 (1983) .
 - 32 - D. Grecu, Phys. Rev. B8, 1958 (1973) .
 - 33 - S. Das Sarma e J. J. Quinn. Phys. Rev. B25, 7603 (1982) .
 - 34 - W. L. Bloss e E. M. Brody, Solid State Commun. 43, 523 (1982) .
 - 35 - A. L. Fetter, Ann. Phys. (N.Y.) 81, 367 (1973) e 88, 1 (1974) .
 - 36 - D. M. Luz e J. d'Albuquerque e Castro, Phys. Rev. B44, 13534 (1991) .
 - 37 - D. Grecu, J. Phys. C8, 2627 (1975) .
 - 38 - S. Das Sarma e A. Madhukar, Phys. Rev. B23, 805 (1981) .
 - 39 - D. Olego, A. Pinczuk, A. C. Gossard e W. Wiegmann, Phys. Rev. B25, 7867 (1982) .
 - 40 - Jainendra K. Jain e Philip B. Allen, Phys. Rev. Lett. 54, 2437, (1985) .
 - 41 - L. Swierkowski e D. Neilson, Phys. Rev. Lett. 67, 240 (1991) .
 - 42 - D. Bohm e D. Pines, Phys. Rev. 92, 609 (1953) .
 - 43 - M. Gell-Mann e K. A. Brueckner, Phys. Rev. 106, 364 (1957) .
 - 44 - F. Stern, Phys. Rev. Lett. 18, 546 (1967) .
 - 45 - L. Ioriatti e A. Isihara, Z. Phys. B 44, 1 (1981) .
 - 46 - A. Isihara e L. Ioriatti Phys. Rev. B 22, 214 (1980) .
 - 47 - A. C. Tselis e J. J. Quinn, Phys. Rev. B29, 3318 (1984) .
 - 48 - U. de Freitas e N. Studart, Phys. Rev. B36, 6677 (1987) .
 - 49 - M. Jonson, J.Phys. C9, 3055 (1976) .
 - 50 - J. T. Devreese e F. M. Peeters (eds.), The Physics of the Two-Dimensional Electron Gas, Plenum, New York (1987) .

- 51 - S. Das Sarma e B. A. Mason, Ann. Phys. (N.Y) **163**, 78 (1985); Physica **134B**, 301 (1985), Phys. Rev. B **31**, 5536 (1985) .
- 52 - R. Jalabert e S. Das Sarma, Phys. Rev. **B39**, 5542 (1989) .
- 53 - V. B. Campos, M. H. Degani e O. Hipólito, Solid State Comm. **79**, 473 (1991) .
- 54 - V. B. Campos e S. Das Sarma Phys. Rev. **B45**, 3898 (1992) .
- 55 - M. H. Degani, U. Freitas, O. Hipólito e N. Studart, Phys. Rev. **B37**, 10137 (1988) .
- 56 - C. B. Duke e G. D. Mahan, Phys. Rev. **139**, A1965 (1965) .
- 57 - D. Pines, Many Body Problem, W. A. Benjamin, Inc., New York, 1962; A. L. Fetter J. D. Wallecka, Quantum Theory of Many Particle Systems, McGraw-Hill Publ. Co., New York 1971 .
- 58 - S. Das Sarma, J. K. Jain e R. Jalabert, Phys. Rev. **B37**, 6290 (1988) .
- 59 - S. Das Sarma, A. Kobayashi e W. Y. Lai, Phys. Rev. **B36**, 8151 (1987) .
- 60 - H. Ehrenreich, J. Phys. Chem. Solids **8**, 130 (1959); **9**, 129 (1959) .
- 61 - E. Conwell, High Field Transport in Solids (Academic, New York, 1963) .
- 62 - M. E. Kim, A. Das e S. D. Senturia, Phys. Rev. B **18**, 6890 (1978) .
- 63 - G. D. Mahan na Ref. 13 e também Many Particle Physics por G. D. Mahan (plenum, New York, 1990), 2^a ed., Cap. 6 .
- 64 - G. D. Mahan e C. D. Duke, Phys. Rev. **149**, 705 (1966) .
- 65 - T. D. Lee, F. E. Low e D. Pines, Phys. Rev. **90**, 297 (1953) .
- 66 - E. Karheuser, Polaron in Ionic Crystals and Polar Semiconductors, Ed. J. T. Devreese, North-Holland Publ. Co., Amsterdam 1972 (p.717) .
- 67 - F. C. Brown, em Polarons and Excitons, C. G. Kuper e G. Whitfield (eds.), Oliver e Boyd, Edinburg (1962) .
- 68 - Veja, p. ex. G. Lindemann, R. Lassnig, W. Seidenbusch e E. Gornik, Phys. Rev. **B28**, 4693 (1983) .
- 69 - R. J. Collins e D. A. Kleinman, J. Phys. Chem. Solids. **11**, 190 (1959) .
- 70 - M. Horst, U. Merkt, W. Zawadzki, J.C. Maan e K. Ploog, Solid State Commun. **53**, 403 (1985) .
- 71 - H. Sigg, P. Wyder e J. A. A. J. Pereboom, Phys. Rev. **31**, 5253 (1985) .
- 72 - M. A. Hopkins, R.J. Nicholas, M.A. Brummell, J. J. Harris e C. T. Foxon, Phys. Rev. **B36**, 4789 (1987) .

- 73 - E. Batke, D. Heitmann e C. W. Tu, Phys. Rev. B **34**, 6951 (1986) .
- 74 - G. S. Boebinger, H. W. Jiang, L. N. Pfeiffer e K. W. West, Phys. Rev. Lett. **64**, 1793 (1990) .
- 75 - J. P. Eisenstein, "New Transport Phenomena in Coupled Quantum Wells", Proc. Sixth International Conference on Superlattices, Microstructures and Microdevices, Xi'an, China, 1992 (aparecerá na Superlatt. and Microstruc.) .