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

**PROPRIEDADES ELETRÔNICAS DE UM SISTEMA
CLÁSSICO BIDIMENSIONAL**

NELSON STUDART FILHO
DEPARTAMENTO DE FÍSICA
UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS

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

Orientador:
Prof. Dr. Oscar Hipólito

SÃO CARLOS
1979

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

PROPRIEDADES ELETRÔNICAS DE UM SISTEMA CLÁSSICO BIDIMENSIONAL

NELSON STUDART FILHO
DEPARTAMENTO DE FÍSICA
UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS

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

Orientador:
Prof. Dr. Oscar Hipólito

SÃO CARLOS
1979

Para Lucila, minha mãe,
Carmem, minha mulher,
André e Juliana, meus filhos.

AGRADEÇO,

ao prof. Dr. Oscar Hipólito pela orientação segura, cons
tante apoio e entusiasmo na realização deste trabalho;

a Gil Farias, Vera Beatriz de Campos e Castilho Alcaraz,
pelas proveitosas discussões;

aos professores Dr. Milton F. de Souza e Dr. Roberto Lo-
bo pela acolhida no Instituto de Física e Química de São
Carlos;

Aos colegas e funcionários do Departamento de Física da
Universidade Federal de São Carlos e do Departamento de
Física e Ciência dos Materiais do IFQSC-USP, em especial
do seu centro de computação, que direta ou indiretamente con
tribuíram para o desenvolvimento deste trabalho;

à Maria Laura pelo excelente trabalho de datilografia;

ao CNPq pelo suporte financeiro.

RESUMO

As propriedades estáticas e dinâmicas de um sistema de elétrons clássico bidimensional foram estudadas com base no método do campo autoconsistente (SCFA), desenvolvido por Singwi et.al. Nesta teoria, as correlações de curto alcance estão presentes através de uma correção de campo local que depende da função correlação dos pares. O fator de estrutura estático e a função resposta densidade-densidade são determinadas em um esquema autoconsistente. A função correlação dos pares e a energia de correlação obtidas concordam muito bem com os dados experimentais de simulação numérica determinados pelo método de Monte Carlo. A blindagem estática de uma impureza carregada, a relação de dispersão do plasma e o fator de estrutura dinâmico são determinados e os resultados comparados com os obtidos na aproximação das fases aleatórias (RPA). Diferenças significativas foram encontradas indicando a importância dos efeitos de correlações entre partículas. Pela primeira vez, as correlações de curto alcance foram incorporadas na dispersão do plasma deste sistema. O método foi estendido para o sistema quase-bidimensional, isto é, elétrons na superfície de hélio, incluindo o efeito da espessura finita da camada eletrônica. Nossos resultados da função correlação dos pares e energia de correlação para os sistemas quase e estritamente bidimensional diferem muito pouco entre si, devido à relação entre a distância média dos elétrons e a espessura da camada. Apesar disso, nosso resultado para a dispersão do plasmon apresenta um avanço considerável relativo aos cálculos de Beck e Kumar. Calculamos a condutividade como função da frequência e da densidade devido ao espalhamento elétron-riplon, para elétrons na superfície de hélio. Este cálculo foi efetuado com base no formalismo de

função memória, desenvolvido por Götze e Wölflé, e no método autoconsistente. Nossos resultados reafirmam a importância dos efeitos de correlações na mobilidade dos elétrons.

ABSTRACT

The static and dynamic properties of a two-dimensional classical electron system have been studied on the basis of the self-consistent-field approximation (SCFA), derived by Singwi et.al. In this theory, the short-range correlations are present through a local-field correction depending upon the pair-correlation function. The static structure factor and the density-density response function are determined in a self-consistent scheme. The pair-correlation function and the correlation energy thus obtained are in good agreement with the Monte Carlo numerical simulation carried out by Totsuji. The static screening of a charged impurity, the plasma dispersion relation and the dynamical structure factor are also determined, and the results are compared with those obtained in the random-phase-approximation (RPA). Sizeable differences were found, indicating the importance of the correlations effects between particles. For the first time, the short-range correlations were incorporated in the plasma dispersion of such system. The method was extended for the quasi two-dimensional system, i.e., electrons on surface of liquid helium including the effect of the finite width of the electronic layer. Our results for the pair correlation and correlation energy for quasi-two-dimensional and two-dimensional systems differs very little among them, due to the relation between the electronic mean distance and the layer thickness. In spite of this fact, our result for the plasmon dispersion shows a considerable advance in relation to the calculations of Beck and Kumar. We have calculated the density and frequency dependence of the conductivity due to the electron-ripplon scattering, for electrons on helium. This calculation was made with basis of the memory-function formalism, as developed

by Götze and Wölfle, and also on the self-consistent method. Our results reinforce the importance of the correlations effects on the electronic mobility.

INDICE

Capítulo 1 - Introdução	1
Capítulo 2 - Propriedades gerais dos eletrons na superfície de hélío.....	6
2.1 - Espectro dos estados superficiais	7
2.2 - Movimento eletrônico paralelo à superfície ...	14
2.3 - Cristal de eletrons	20
Capítulo 3 - Correlações em um sistema clássico de eletrons bi dimensional	23
3.1 - O método do campo autoconsistente	25
3.2 - Correlações	33
3.3 - Propriedades termodinâmicas	37
3.4 - Regra de soma da compressibilidade	40
Capítulo 4 - Eletrodinâmica clássica de um sistema de eletrons bidimensional	45
4.1 - Blindagem de uma impureza carregada estática .	45
4.2 - Dispersão do plasma	51
4.3 - Fator de estrutura dinâmico	55
Capítulo 5 - Correlações de eletrons na superfície de hélío	59
5.1 - Sistema de eletrons quase bidimensional	59
5.2 - Aplicação do método autoconsistente	65
5.3 - Resultados	68
Capítulo 6 - Condutividade de eletrons na superfície de hélío ...	73
6.1 - Modelo para a condutividade	74
6.2 - Aproximação para a função Memória	82
6.3 - Tempo de colisão independente da densidade (caso livre)	86
6.4 - Tempo de colisão dependente da densidade e da frequência	90

Capítulo 7 - Conclusões	95
Apêndices	99
Referências	104
Legenda das figuras	108
Figuras	110

CAPÍTULO 1

INTRODUÇÃO

Nos últimos anos as propriedades eletrônicas de sistemas bi dimensionais, tem sido intensivamente estudadas tanto teori ca quanto experimentalmente, como bem demonstram os anais das três conferências internacionais realizadas em Providen ce, EUA (1975), Berchtesgaden, Alemanha (1977) e Lake Yama naka, Japão (1979).

Eletrons na superfície de hélio líquido e portadores de car ga (eletrons ou buracos) na camada de inversão de semicon dutores em estruturas MOS (metal-óxido-semicondutor) são e- xemplos típicos de um sistema bidimensional. Em ambos os sistemas, os portadores estão ligados perpendicularmente à superfície em estados quânticos discretos e movem-se mais ou menos livremente na direção paralela. No sistema MOS, o poço de potencial que confina os portadores na direção normal é gerado pela aplicação de um campo elétrico e, para determi nação da forma do potencial, devemos incluir os efeitos de correlação e troca das partículas na interface. Portanto, o espectro de estados ligados deve ser calculado, resolvendo autoconsistentemente as equações de Schroedinger e Poisson na direção perpendicular. No caso de eletrons na superfície de hélio, os estados superficiais são induzidos pelo poten cial imagem e seu espectro, como veremos, pode ser determi nado como um problema de um eletron, cuja energia de ligação é da ordem de 0,7 meV.

Existem, no entanto, outras diferenças fundamentais entrees tes dois sistemas. A mais significativa refere-se ao inter valo de densidades eletrônicas acessíveis experimentalmente.

Para eletrons na superfície de hélio líquido, as experiências tem sido realizadas com densidades entre 10^4 a 10^9 cm^{-2} , enquanto que na camada de inversão a densidade varia de 10^{11} a 10^{13} cm^{-2} . Sendo a energia de Fermi em duas dimensões da por

$$\epsilon_F = \frac{\pi \hbar^2 n}{m} \quad (1.1)$$

temos, então, que os portadores de carga na camada de inversão comportam-se como um sistema de Fermi, enquanto que os eletrons na superfície de hélio líquido formam um gás clássico bidimensional, mesmo para temperaturas acima de poucos milikelvins. Além do mais, como a densidade pode ser variada de várias ordens de grandeza, a condensação dos eletrons em um sólido de Wigner pode ser detetada experimentalmente.

> Neste trabalho, estudamos os efeitos das correlações dos eletrons em um sistema clássico bidimensional. Para isto utilizamos a aproximação do campo autoconsistente (SCFA) proposta por Singwi et al⁽¹⁻³⁾ para um gás de eletrons degenerado. Este método foi aplicado com sucesso a diversos sistemas⁽⁴⁻⁹⁾ e os resultados obtidos são significativamente melhores, comparados àqueles obtidos por outras aproximações, em especial à aproximação das fases aleatórias (RPA), comumente utilizada na teoria de muitas partículas. Este método possui a vantagem de ser uma aproximação dinâmica, contrastando com outros elaborados métodos existentes. As correlações de curto alcance, responsáveis pelas correções de campo local, são calculadas de uma maneira autoconsistente, tomando a função resposta densidade-densidade como um funcional da função correlação dos pares. Para um sistema clássico a aproximação SCFA consiste em substituir a função distribuição de duas partículas na equação de Liouville pelo produto de duas funções distribuição de uma partícula e de uma função correlação dos pares.

No Capítulo 2 descrevemos algumas das propriedades dos eletrons nos estados superficiais sobre hélio líquido. Apresentamos o espectro destes estados ligados, dentre os vários modelos propostos para o potencial que confina os eletrons na superfície, bem como a mudança deste espectro devido à aplicação de campos externos. Mostramos ainda o mecanismo de espalhamento dos eletrons por ríplons termicamente ativos e por átomos de vapor de hélio e discutimos a mais recente descoberta neste sistema - a formação do cristal de eletrons para altas densidades e baixas temperaturas, como prevista teoricamente.

No Capítulo 3 estudamos as propriedades estáticas de um gás clássico de eletrons bidimensional, neutralizado por um fundo positivo uniforme (plasma de uma componente - OCP), através da aproximação do campo autoconsistente. Os eletrons interagem via potencial de Coulomb,

$$\phi(\vec{r}) = \frac{e^2}{r} \quad (1.2)$$

onde $\vec{r}$ é o vetor posição bidimensional paralelo à superfície e e a carga do eletron renormalizada para incluir o efeito do substrato. Os eletrons obedecem à distribuição de Maxwell dos momenta. A partir do fator de estrutura estático, determinado no esquema autoconsistente, calculamos a função correlação dos pares e a energia de correlação que concordam muito bem com as experiências de simulação numéricas. As funções termodinâmicas, tais como a energia livre de Helmholtz, o calor específico, compressibilidade isotérmica, bem como a equação de estado do gás, podem ser determinadas a partir da energia de correlação. É mostrado que o aparecimento da ordem de curto alcance ocorre para valor do parâ

metro do plasma $14 < \alpha < 15$. Tornamos evidente, ainda, a inadequacidade da aproximação RPA em tratar as correlações de curto alcance neste sistema.

Continuamos, no Capítulo 4, o estudo do gás clássico bidimensional, analisando as suas propriedades eletrodinâmicas. Calculamos, então, a blindagem de uma impureza carregada fixa no sistema, o fator de estrutura dinâmico e a relação de dispersão do plasma para quaisquer vetores de onda e, em particular, no limite de grandes comprimentos de onda. É interessante notar que nosso cálculo da dispersão do plasma bidimensional inclui, pela primeira vez, os efeitos de correlações entre as partículas deste sistema clássico. Temos comparado todos os resultados na aproximação SCFA com os de RPA.

De modo a tornar nossos resultados mais realistas, quando usados para descrever os elétrons na superfície de hélio, introduzimos, no Capítulo 5, o sistema quase-bidimensional de elétrons, incorporando o efeito de uma camada eletrônica de espessura finita sobre o hélio líquido. Estendemos, então, o método do campo autoconsistente a este sistema, cuja única diferença com o estritamente bidimensional consiste em tornar a interação entre elétrons na superfície menos singular para distâncias menores que a largura da camada. As diferenças entre os resultados para os dois casos são, porém, muito pequenas. Isto é devido ao fato de que o espaçamento médio entre os elétrons na superfície é muito maior do que a espessura da camada eletrônica.

No Capítulo 6 determinamos a condutividade dos elétrons na superfície de hélio no regime de espalhamento dominado por ríplons. Aqui empregamos o formalismo de função memória desenvolvido por Götze e Wölfle^(10,11) para calcular o tempo de

colisão dependente da densidade e da frequência, que aparece numa curva de condutividade do tipo Drude. Importantes efeitos na condutividade aparecem devido à blindagem dos riplons pelos eletrons, que é tratada em ambas as aproximações SCFA e RPA. Como caso particular, obtemos neste formalismo, o tempo de colisão independente da densidade que coincide muito bem com os resultados experimentais.

Finalmente, no Capítulo 7, resumizamos nossas conclusões e sugerimos alguns problemas nesta área, que deverão ser abordados futuramente.

CAPÍTULO 2

PROPRIEDADES GERAIS DOS ELETRONS NA SUPERFÍCIE DE HÉLIO

Neste capítulo resumiremos os conceitos básicos envolvidos no sistema de eletrons em estados superficiais sobre hélio líquido, bem como os principais resultados experimentais obtidos até o momento.

Os estados superficiais dos eletrons aparecem devido, basicamente, a dois tipos de interação: o potencial imagem atrativo de longo alcance, devido à polarização eletrostática da superfície, e uma barreira repulsiva de curto alcance, devido ao princípio de exclusão de Pauli, que obriga a função de onda do eletron extra a ser ortogonal à função dos dois eletrons presentes em cada átomo de hélio. Vários modelos foram propostos para encontrar-se a forma do potencial que prende os eletrons na direção perpendicular à superfície e, portanto, determinar o espectro de autoestados de energia.

A descrição do movimento paralelo à superfície não é tão completa como na direção perpendicular. Ali os eletrons são espalhados por átomos de vapor de hélio e, para temperaturas abaixo de 0,7K, por ondas de capilaridade no hélio que, na sua forma quantizada, são chamadas de riplons. Devemos considerar ainda a interação eletron-eletron que se torna cada vez mais importante, à medida em que a densidade aumenta. Nesta região as correlações entre eletrons não podem mais ser desprezadas.

A primeira evidência da existência destes estados superficiais foi dada por Sommer⁽¹²⁾, quando mediu uma barreira de

potencial da ordem de 1,0 eV para a penetração do elétron no hélio líquido. A observação experimental foi feita por Sommer e Tanner⁽¹³⁾ e Williams et al.⁽¹⁴⁾, através de medidas de mobilidades dos elétrons sobre hélio, tendo sido, porém, refutados por Ostermeier e Schwarz⁽¹⁵⁾. Contudo, num estudo de ressonância ciclotrônica de Brown e Grimes⁽¹⁶⁾, comprovou-se a existência destes estados superficiais, mas não se inferiu nenhuma informação acerca do potencial. A prova experimental definitiva foi apresentada por Grimes e Brown⁽¹⁷⁾, através de medidas espectroscópicas que discutiremos na seção seguinte.

Referimo-nos aqui ao recente trabalho de revisão de Grimes⁽¹⁸⁾ bem como aos de Cole⁽¹⁹⁾, Crandall⁽²⁰⁾, Shikin e Monarkha⁽²¹⁾ e Shikin⁽²²⁾, para uma discussão mais detalhada das propriedades do sistema de elétrons na superfície de hélio. Tendo em vista estes excelentes trabalhos que contêm uma completa bibliografia sobre o assunto, limitar-nos-emos a uma descrição sucinta das propriedades deste sistema.

Apresentaremos, então, o espectro de estados ligados, considerando os diversos modelos de potencial e campos externos, comparando-os com os resultados experimentais. Discutiremos também o espalhamento de elétrons por átomos de vapor e por ríplons, bem como a formação do Cristal de Wigner, cuja prova experimental definitiva foi conseguida muito recentemente.

2.1 - Espectro dos Estados Superficiais

Vamos ignorar, por enquanto, o movimento dos elétrons na direção paralela à superfície e vamos nos preocupar com a direção perpendicular onde os elétrons estão confinados em um poço de potencial $V(z)$. Supondo, ainda, que a superfície

de hélio é plana, podemos escrever a função de onda eletrônica como

$$\psi_n(\vec{r}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \varphi_n(z) \quad (2.1)$$

onde $\vec{r}$ e $\vec{k}$ são vetores bidimensionais, z é a coordenada na direção normal, n determina o índice do autoestado e consideramos o sistema com área unitária. Deste modo, a Eq (2.1) implica, então, que os movimentos nas duas direções são desacoplados, ou seja, que temos eletrons livres na direção paralela, descritos por ondas planas e a função de onda na direção perpendicular satisfaz a equação de Schroedinger,

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

O modelo mais simples para o potencial $V(z)$ consiste em supor uma barreira infinita na superfície e o potencial imagem clássico dado por

$$V(z) = \begin{cases} -\frac{Qe^2}{z} & z > 0 \\ \infty & z \leq 0 \end{cases} \quad (2.3)$$

onde $Q = (\epsilon - 1)/4(\epsilon + 1)$, com $\epsilon = 1.057$, a constante dielétrica do hélio líquido. Nesta aproximação, a equação de Schroedinger torna-se idêntica à equação radial do átomo de hidrogênio para ondas s . Então,

$$\varphi_n(z) = z R_{n,0}(z) \quad (2.4)$$

onde $R_{n,0}(z)$ é a n -ésima solução da equação radial com número quântico orbital zero. O espectro "hidrogênico" de energias é dado por

$$E_n = - \frac{Q^2}{n^2} R_{yd} \approx - \frac{0,65}{n^2} \text{ meV} \quad (2.5)$$

O comprimento característico ou raio de Bohr efetivo,

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{m Q e^2} \approx 76 \text{ \AA} \quad (2.6)$$

é, portanto, relativamente grande, desde que o valor de Q é pequeno, devido à baixa polarizabilidade do átomo de hélio. Os valores da distância média $\langle z \rangle$ dos eletrons nos três mais baixos autoestados, são, respectivamente, 114,456 e 1026 $\text{\AA}$.

Na discussão de um modelo mais realístico, devemos introduzir a barreira de potencial V_0 para $z < 0$. No entanto, na resolução da equação de Schroedinger, vamos encontrar sérias dificuldades matemáticas, devido à singularidade do potencial⁽²³⁾. Cole⁽²⁴⁾ propôs um potencial de modo a evitar esta singularidade

$$V(z) = \begin{cases} - \frac{Qe^2}{z} & z > z_0 \\ - \frac{Qe^2}{z_0} & 0 < z < z_0 \\ + V_0 & z < 0 \end{cases} \quad (2.7)$$

onde z_0 deve ser tomado como a distância interatômica do hélio. As soluções da equação de Schroedinger nas três regiões devem satisfazer as relações de continuidade usuais e a condição de contorno no infinito. A solução geral para $z > z_0$ é uma função hipergeométrica confluyente, com a função de Whittaker a mais apropriada, porque anula-se no infinito. A solução dentro do líquido é, como esperado, uma exponencial decrescente e na região intermediária temos uma função oscilatória de comprimento de onda bastante grande.

Outro potencial aproximado para o eletron é dado por

$$V(z) = \begin{cases} - \frac{Qe^2}{z + z^*} & z > 0 \\ + V_0 & z < 0 \end{cases} \quad (2.8)$$

que consiste em considerar o potencial fora da superfície, como se a força imagem tivesse sua origem a uma pequena distância z^* dentro do líquido. Hipólito et al⁽²⁵⁾ resolveram exatamente este modelo, calculando os níveis de energia dos eletrons, inclusive com campo elétrico externo, através do ajuste do parâmetro z^* com o resultado experimental para a separação dos níveis na transição entre o estado fundamental e o primeiro estado excitado.

Stern⁽²⁶⁾ desenvolveu um modelo de potencial que leva em conta o fato de que a interface entre os dois meios não muda abruptamente, ou seja, considerando que a constante dielétrica varia continuamente em uma fina camada de transição.

O potencial imagem obtido é, então, contínuo e limitado, ao contrário do potencial divergente $1/z$ na interface. Em seu cálculo, a largura da camada na interface é um parâmetro ajustável.

Huang et al⁽²⁷⁾ calcularam microscopicamente a densidade de átomos de hélio na vizinhança da interface líquido-vapor e, a partir daí, obtiveram autoconsistentemente o potencial e a energia de ligação dos eletrons na superfície. A vantagem deste cálculo é que não existe um parâmetro ajustável. Seus resultados, contudo, concordam apenas 10% com a experiência, presumivelmente porque sua teoria omite uma contribuição importante para o potencial da superfície (seu valor para V_0 é somente a metade do valor experimental).

A confirmação experimental do espectro de estados ligados foi dada por Grimes e Brown⁽¹⁷⁾, que mediram a separação de energia entre o estado fundamental e os dois primeiros estados excitados, observando a absorção da radiação de microondas pelos eletrons sobre hélio líquido, sujeitos a um campo elétrico perpendicular. O efeito do campo $F_{\perp}$, na aproximação hidrogênica (barreira infinita), pode ser facilmente tratado em teoria de perturbação de 1ª. ordem. Desde que a perturbação do campo externo é simplesmente $eF_{\perp}z$, então a variação nos autovalores de energia é dada por

$$\Delta E_n = e F_{\perp} \langle z \rangle_n \quad (2.9)$$

onde $\langle z \rangle_n$ é o valor médio de z no estado n . É interessante notar que, por causa da assimetria do potencial, os autoestados não são estados de paridade definida e, portanto, o campo elétrico pode produzir um efeito Stark linear. Variando o campo elétrico, aparecem picos de ressonância na

curva de absorção, quando a frequência da radiação aplicada é igual a $\Delta E/\hbar$. Extrapolando para campo nulo, obtem-se a separação de níveis entre estados induzidos pelo potencial imagem. Na tabela comparamos os valores experimentais (I), com aqueles obtidos no modelo hidrogênico, com barreira infinita (II) e por Cole (III), com $V_0 = 1.3$ eV e $z_0 = 3.6$ Å, e por Huang et al. (IV) para as transições entre o estado fundamental e os dois primeiros estados excitados.

GHz	I	II	III	IV
ν_{12}	125.9 ± 0.2	119.3	133.1	140.0
ν_{13}	148.6 ± 0.3	141.3	156.5	-

Vemos, então, que os resultados na aproximação hidrogênica concordam razoavelmente bem com os dados experimentais. Para o modelo de Cole, com $V_0 = 1.0$ eV (resultado experimental mais preciso), devemos tomar $z_0 = 10$ Å para obter os resultados experimentais, que é um valor muito grande para o modelo ser real.

Para campos elétricos fortes, um cálculo perturbativo não pode ser feito e então devemos usar outras aproximações. Neste caso, os resultados obtidos com o potencial dado por (2.8) coincidem muito bem com os experimentais para o valor do parâmetro $z^* = 1.01$ Å.

Na presença de campo elétrico muito forte, ($F_1 > 3000$ V/cm) o potencial imagem pode ser desprezado. Neste caso, a equação de Schroedinger reduz-se à equação de Airy e as soluções são bem conhecidas (28).

$$\psi_n(z) = \text{const.} \times A \left[\left(z - \frac{E_n}{eF_L} \right) \left(\frac{2meF_L}{\hbar^2} \right)^{1/3} \right] \quad (2.12)$$

com

$$E_n = \chi_n e F_L \left(\frac{\hbar^2}{2meF_L} \right)^{1/3} \quad n = 1, 2, 3 \dots \quad (2.13)$$

onde $A(x)$ é a função Airy e χ_n denota o n -ésimo zero. Aqui o eletrón no estado fundamental está localizado a uma distância da superfície dada por

$$\langle z \rangle_1 \cong 1,3 \left(\frac{\hbar^2}{2meF_L} \right)^{1/3} \quad (2.14)$$

A aplicação de um campo magnético paralelo à superfície, do líquido acopla o movimento paralelo dos elétrons às transições espectroscópicas. Fisicamente isto ocorre devido à componente de força de Lorentz $e/c (\vec{v} \times \vec{B})$ que deve ser adicionada à força sobre o eletrón, em virtude do campo elétrico perpendicular. O único efeito da aplicação de $B_{||}$ será alargar as linhas espectrais e pode ser tratado em teoria de perturbação.

A aplicação de um campo magnético perpendicular à superfície, simplesmente modifica o movimento do eletrón no plano e as autofunções e autovalores de energia da equação de Schroedinger são bem conhecidas ⁽²⁹⁾

$$\psi_{\alpha} = H_N(x-X) \exp\left[-\frac{iyX}{L^2}\right] \psi_n(z) \quad (2.15a)$$

$$E_{\alpha} = \hbar\Omega(N+1/2) + E_n + \sigma\mu_B H, \quad \sigma = \pm 1 \quad (2.15b)$$

onde $\alpha = X, N, n$ denota o conjunto de três números quânticos, H_N é a função de Hermite e usamos a "gauge"

$$\vec{A} = (0, Hx, 0)$$

onde H é a intensidade do campo magnético e definimos

$$L = \left(\frac{\hbar c}{eH}\right)^{1/2} \quad X = -\frac{cp_y}{eH} \quad \Omega = \frac{eH}{mc} \quad (2.16)$$

Verificamos, então, que estes estados superficiais de elétrons, induzidos pelo potencial imagem, constituem um excepcionalmente simples e pedagógico sistema de mecânica quântica.

2.2 - Movimento eletrônico paralelo à superfície

Para baixas densidades, o sistema de elétrons na superfície de hélio, é, geralmente, considerado como um gás ideal de elétrons livres e, nessas condições, o movimento na direção paralela à superfície é governado pelo espalhamento por átomos de vapor e por riplons.

O espalhamento por átomos de vapor tem sido estudado supondo-se que a interação elétron-átomo é descrita por um pseu-

do-potencial do tipo contato, cuja intensidade está diretamente relacionada com a seção de choque de um átomo de hélio. Cole⁽²⁴⁾, Crandall⁽³⁰⁾ e Saitoh⁽³¹⁾ mostraram, através da solução da equação de Boltzmann, que o inverso do tempo de colisão depende linearmente da densidade de átomos de vapor e é independente da energia do eletrón. Como a densidade de vapor aumenta quase exponencialmente com a temperatura, temos que este espalhamento torna-se predominante para altas temperaturas e pode ser desprezado a baixas temperaturas.

O espalhamento por ríplons, no entanto, apresenta aspectos mais interessantes, pois depende detalhadamente da interação entre eletróns e as vibrações da interface líquido-vapor. Tais oscilações que, classicamente, são as bem conhecidas ondas de capilaridade-gravidade dos líquidos em geral, quando quantizadas são chamadas ríplons. Estas quase-partículas são bósons com relação de dispersão dada por

$$\omega_k^2 = gk + \frac{\sigma}{\rho} k^3 \quad (2.17)$$

onde g é a aceleração da gravidade, σ e ρ são a tensão superficial e densidade do líquido. O primeiro termo de (2.17) é bem pequeno e pode ser desprezado na prática.

Usando o conceito de ríplons, podemos então expandir um pequeno deslocamento arbitrário $\xi(\vec{r})$ da superfície de hélio em termos dos operadores de criação e aniquilação b_k^+ e b_k

$$\xi(\vec{r}) = \sum_{\vec{k}} (b_k^+ + b_{-\vec{k}}) Q_k e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \quad (2.18)$$

com $Q_k = \left(\frac{\hbar k}{2\rho\omega_k} \right)^{1/2}$.

Esta perturbação superficial altera as condições de contorno para a função de onda dos eletrons e a forma da interação de polarização do eletron com o líquido. A equação de Schroedinger dos eletrons sobre a superfície deformada pode ser escrita como

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + [e F_L z + V_\epsilon(\vec{r}, z) - E] \psi = 0 \quad (2.19)$$

onde

$$V_\epsilon(\vec{r}, z) = -\frac{Qe^2}{\pi} \int d\vec{r}' \int_{-\infty}^{\xi(\vec{r}')} \frac{dz'}{[(\vec{r}-\vec{r}')^2 + (z-z')^2]^2} \quad (2.20)$$

com as condições de contorno

$$\psi \Big|_{z=\xi(r)} = 0 \quad \text{e} \quad \psi \Big|_{z \rightarrow \infty} \rightarrow 0 \quad (2.21)$$

Aqui, F_L é o campo elétrico externo que pressiona os eletrons contra a superfície de hélio e o posição do plano $z=0$ é especificada pela condição $\int \xi(\vec{r}) d\vec{r} = 0$. O potencial de polarização, Eq (2.20), expressando a interação de um eletron com a superfície é obtido somando-se todas as interações de um eletron com o átomo de hélio no líquido⁽²⁴⁾. Evidentemente, para $\xi \rightarrow 0$, temos o potencial imagem clássico

$$V_\epsilon(z) = -\frac{Qe^2}{z} \quad .$$

Para encontrar a forma explícita da interação eletrôn-riplon, desenvolveremos a aproximação de Shikin e Monarkha⁽²⁹⁾ que tem sido muito utilizada. Admitamos que a função de onda eletrônica deva ser adiabaticamente acoplada às oscilações da superfície, na direção $\tilde{z}$, no sentido de que deva depender da coordenada do riplon

$$\Psi(\vec{r}, z) = \varphi_n(\tilde{z} - \xi) e^{i \vec{k} \cdot \vec{r}} \quad (2.22)$$

Fazendo a transformação de coordenadas

$$\tilde{z} - \xi \rightarrow \tilde{z} \quad \text{e} \quad \vec{r} \rightarrow \vec{r} \quad , \quad (2.23)$$

podemos obter a Hamiltoniana dos eletrons nas novas variáveis como

$$H = H_0 + V \quad (2.24)$$

onde

$$H_0 = \frac{1}{2m} \left[P_{\tilde{z}}^2 + P_r^2 \right] - \frac{Qe^2}{\tilde{z}} + e F_{\perp} \tilde{z} \quad \tilde{z} \geq 0$$

$$V = - \frac{1}{2m} \left[\left(\frac{\partial \xi}{\partial \vec{r}} P_r \right) P_{\tilde{z}} + \left(P_r \frac{\partial \xi}{\partial \vec{r}} \right) P_{\tilde{z}} \right] + \delta V_e + e F_{\perp} \xi \quad (2.25)$$

com $P = -i\hbar \nabla$.

$$\delta V_e = - \frac{Qe^2}{\pi} \int d\vec{r}' \int_0^{\xi' - \xi} \frac{d\tilde{z}'}{[(r' - r)^2 + (\tilde{z}' - \tilde{z})^2]^2} \quad (2.26)$$

O operador H_0 é a Hamiltoniana dos eletrons acima da superfície do líquido. O primeiro termo de V , Eq (2.25), que aparece devido à transformação do Laplaciano, possui a propriedade de que os elementos de matriz para espalhamento entre estados de mesmo número quântico, são todos zeros. Expandindo, então, a parte residual δV_e em termos de $\xi/a_0 \ll 1$ retendo somente os termos lineares e transformando o resultado para a representação de segunda quantização pelo uso da Eq (2.18), obtemos a expressão final da interação eletrôn-riplon

$$V = \sum_{\vec{k}} (b_{\vec{k}}^{\dagger} + b_{-\vec{k}}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} V_{\vec{k}}(z) \quad (2.27)$$

com

$$V_{\vec{k}}(z) = Q_k \left[\frac{Qe^2}{z^2} - \frac{Qe^2 k}{z} K_1(kz) + e F_{\perp} \right] \quad (2.28)$$

onde $K_1(x)$ é a função de Bessel modificada de segunda espécie.

No limite de grandes comprimentos de onda, $ka_0 \ll 1$, podemos tomar $K_1(kz) \cong 1/kz$, tal que o termo de polarização desaparece e obtemos

$$V_k(z) = Q_k e F_z$$

tal que nenhuma interação eletron-riplon pode existir neste limite, a menos que surjam fatores externos, como o campo elétrico perpendicular.

Usaremos no Capítulo 6, uma aproximação para a interação e-letron-riplon, dada pela Eq (2.28), para obter a condutivi-dade dos eletrons no processo de espalhamento por riplons.

Diversas medidas da mobilidade dos eletrons na superfíciede hélio tem sido obtidas, a partir das larguras da ressonância ciclotrônica e ressonância de plasmon, de métodos de tempo de voo, etc. No regime dominado pelo espalhamento por áto-mos de vapor, a concordância é muito boa entre as várias experiências e os resultados teóricos para a mobilidade. No entanto, na região de espalhamento por riplons, os valores experimentais são contraditórios. Talvez isso ocorra por-que parâmetros experimentais importantes, como a densidade eletrônica e as intensidades de campo elétrico não tem coïn-cidido nas várias experiências. Os cálculos teóricos devi-dos a Saitoh⁽³¹⁾, Monarkha⁽³²⁾, Cole⁽²⁴⁾, também não concor-dam entre si e diferem dos valores experimentais. É conve-niente frisar que em todos os cálculos a interação eletron-eletron foi desprezada.

Em geral, o resultado das várias experiências é que o espa-lhamento eletron-riplon governa a mobilidade para baixas tem-peraturas, que é caracterizada por três comportamentos: tor-na-se aproximadamente independente da temperatura, decresce quando o campo elétrico perpendicular aumenta e torna-se u-ma função crescente do campo elétrico paralelo à superfície para campos acima de um valor mínimo (efeitos não ohmicos).

2.3 - Cristal de eletrons

Um dos mais fascinantes aspectos deste sistema de eletrons sobre hélio é a possibilidade da formação de um cristal de Wigner para grandes densidades eletrônicas e temperaturas suficientemente baixas⁽³³⁾. Isto pode ocorrer porque a razão da energia potencial de Coulomb e energia cinética dos eletrons, dada pelo parâmetro r^* , pode tornar-se muito grande, de modo que um estado cristalino pode ser energeticamente mais estável do que um estado desordenado.

A primeira estimativa teórica para a temperatura de fusão do cristal de eletrons clássico bidimensional, foi feita por Platzman e Fukuyama⁽³⁴⁾, os quais usaram uma aproximação harmônica autoconsistente para o espectro de fonons do cristal. Eles encontraram uma transição de fase para $T_m = 3$. Bonsall e Maradudin⁽³⁵⁾ calcularam a energia estática para todas as possíveis redes bidimensionais e mostraram que o cristal com simetria triangular possui a mais baixa energia. Hockney e Brown⁽³⁶⁾ realizaram uma experiência numérica através da simulação de dinâmica molecular, encontrando uma anomalia do tipo lambda, no calor específico eletrônico em $T^* = 95$. Mais recentemente, outras experiências com computadores não tem confirmado esta anomalia e prevêm a transição para maiores valores de T^* . Gann et al⁽³⁷⁾ realizaram um extensivo estudo para o plasma bidimensional e determinaram a fusão do cristal em $T^* = 125 \pm 15$. Thouless⁽³⁸⁾ aplicou o modelo de fusão mediada por deslocamentos devido a Kostelitz e a Thouless⁽³⁹⁾, mostrando que o valor crítico T_m depende das constantes elásticas de Lamé para o cristal. Ele usou os valores destas constantes para temperatura zero e obteve $T_m = 78$.

Nelson e Halperin⁽⁴⁰⁾ estenderam a teoria da fusão mediada

por deslocações e determinaram três fases no sistema. Primeiramente uma transição da fase sólida para uma fase sólida-líquida chamada fase líquida hexática. Nesta fase existe uma ordem direcional de longo alcance, mas a ordem posicional decresce exponencialmente com a distância, como no líquido normal. Para uma temperatura maior haveria, então, a transição para uma fase líquida isotrópica.

Morf⁽⁴¹⁾ utilizou uma simulação do tipo de dinâmica molecular para calcular a variação com a temperatura do módulo de cisalhamento do cristal. Encontrou uma instabilidade nesta função, mas o ponto crítico não pode ser determinado precisamente devido a efeitos de não equilíbrio na simulação. Ele introduziu, então, o efeito das deslocações no módulo de cisalhamento, resolvendo as equações de grupo de renormalização de Nelson e Halperin, encontrando uma transição em $T = 128$, que é consistente com seu resultado de dinâmica molecular.

Zipfel et al⁽⁴²⁾ usaram experiências espectroscópicas para determinar a função de autocorrelação de velocidades para elétrons na superfície de hélio, dependendo da densidade eletrônica. Eles mostraram, então, que os efeitos de interação elétron-eletron são bastante importantes neste sistema e observaram que, para altas densidades, os tempos de autocorrelação eram próximos dos períodos de oscilação de um elétron em torno de sua posição numa rede cristalina triangular.

Muito recentemente Grimes e Adams⁽⁴³⁾ apresentaram uma prova definitiva da existência do cristal de elétrons, através de uma experiência proposta inicialmente por Shikin⁽⁴⁴⁾. Ele havia sugerido que, na fase cristalina, a aplicação, perpendicularmente, de um campo elétrico alternado produziria

uma série de ressonâncias devido à excitação dos ríplons sobre a superfície. As ressonâncias, evidentemente, deveriam ocorrer quando um número inteiro de comprimentos de onda do ríplon fosse igual à distância entre as linhas dos elétrons no cristal e a frequência do campo aplicado satisfizesse a relação de dispersão do ríplon. Os modos que foram detetados na experiência não foram os modos de Shikin, mas outros modos mais sofisticados de acoplamento plasmon-ríplon, que foram imediatamente analisados por Fisher et al⁽⁴⁵⁾. Examinando as amplitudes das ressonâncias, Grimes e Adams determinaram uma transição de fase em $T = 131 \pm 7$. A fase líquida hexática não tem sido observada experimentalmente, mas existem indícios de sua presença em simulações de computador.

Vemos, então, que o valor observado para a transição de fase é consistente com a teoria da fusão mediada por deslocamentos.

CAPÍTULO 3

CORRELAÇÕES EM UM SISTEMA CLÁSSICO DE ELETRONS BIDIMENSIONAL

Vamos iniciar neste capítulo o estudo das propriedades estáticas e dinâmicas de um sistema clássico de eletrons bidimensional, interagindo através do potencial de Coulomb, com uma distribuição de equilíbrio de Maxwell e neutralizados por um fundo positivo uniforme.⁽⁴⁶⁾

Este sistema é caracterizado pelo parâmetro de plasma adimensional

$$\alpha = \frac{2\pi n e^4}{T^2}$$

onde n é a densidade, T a temperatura em unidades de energia e e a carga eletrônica. α está relacionado ao parâmetro Γ , comumente utilizado na teoria de plasma através de

$$\Gamma = \left(\frac{\alpha}{2} \right)^{1/2} .$$

A primeira tentativa de estudar as correlações no gás de eletrons bidimensional foi feita por Fetter⁽⁴⁷⁾, que tratou o sistema na aproximação de Debye-Hückel ou aproximação das fases aleatórias (RPA) clássica. Como no caso tridimensional, esta aproximação é válida, com restrições, somente na região de baixa densidade e para $n > e^4/T$, ou seja, grandes distâncias entre as partículas. A falha de RPA na região de curto alcance, onde os eletrons são fortemente correlacionados, manifesta-se pela divergência logarítmica na equação de estado do gás, resultante da singularidade na

origem da função correlação dos pares, mesmo no limite de baixas densidades. A inadequacidade desta aproximação é mais significativa em sistemas de duas do que em sistemas de três dimensões.

Com o intuito de incorporar as correlações de curto alcance, Totsuji⁽⁴⁸⁾ e Chalupa⁽⁴⁹⁾ estudaram este sistema clássico de eletrons bidimensional baseados numa expansão diagramática do parâmetro de plasma, válida no domínio de baixas densidades. Seus resultados mostraram que as correlações de curto alcance são bastante importantes, indicando a necessidade de melhorar RPA para tratar problemas de mais altas densidades.

- As propriedades termodinâmicas do gás clássico de eletrons bidimensional tem sido, recentemente, estudadas por Totsuji⁽⁵⁰⁾, com técnicas de Monte Carlo, e por Lado⁽⁵¹⁾, através da solução numérica da equação integral "hypernetted chain" (HNC).

A investigação das propriedades deste sistema de eletrons será baseada aqui na aproximação do campo autoconsistente (SCFA), proposta por Singwi et al. para o gás de eletrons degenerado. Este método tem sido largamente aplicado, com grande sucesso, para vários sistemas de muitas partículas, constituindo-se em um grande avanço, quando comparado com RPA, no tratamento teórico dos sistemas de muitas partículas, principalmente para o caso bidimensional, onde as deficiências de RPA são mais acentuadas. A aproximação SCFA difere de outros métodos ainda pelo fato de que é um método dinâmico.

Na aproximação SCFA as correlações de curto alcance, responsáveis pelas correções de campo local, são calculadas de um modo autoconsistente, fazendo a função resposta densidade-densidade dependente da função correlação dos pares. Para

sistemas clássicos a aproximação consiste em recolocar a função distribuição de duas partículas na equação de Liouville pelo produto de duas funções distribuição de uma partícula e uma função correlação dos pares.

Apresentamos nossos resultados para as funções correlação dos pares, as energias de correlação e demais propriedades termodinâmicas que estão em muito boa concordância com as experiências numéricas de Totsuji.

3.1 - O método do campo autoconsistente

A Hamiltoniana clássica de N partículas interagindo entre si através do potencial $\phi(\vec{r}-\vec{r}_i)$ e na presença de um potencial externo $V_{\text{ext}}(\vec{r},t)$ é

$$H = \sum_{i=1}^N H_i \quad (3.1)$$

onde

$$H_i = \frac{p_i^2}{2m} + V_{\text{ext}}(\vec{r}_i, t) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j}^N \phi(\vec{r}_i - \vec{r}_j) \quad (3.2)$$

A equação de Liouville para a função distribuição de N partículas $f_N(\vec{r}_1, \vec{p}_1, \vec{r}_2, \vec{p}_2, \dots, \vec{r}_N, \vec{p}_N | t)$ pode ser escrita como

$$\frac{\partial f_N}{\partial t} + \left[\sum_{i=1}^N Q(\vec{r}_i, \vec{p}_i) \right] f_N = 0 \quad (3.3)$$

onde o operador $Q(\vec{r}_i, \vec{p}_i)$ é dado por

$$Q(\vec{r}_i, \vec{p}_i) = \vec{v}_i \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{r}_i} - \frac{\partial}{\partial \vec{r}_i} V_{ext}(\vec{r}_i, t) \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{p}_i} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{\partial}{\partial \vec{r}_i} \phi(\vec{r}_i - \vec{r}_j) \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{p}_i} .$$

Integrando a equação de Liouville nas coordenadas e momentos de N-1 partículas, obtém-se a equação de movimento para a função distribuição de uma partícula $f_1(\vec{r}, \vec{p}, t)$

$$\frac{\partial f_1}{\partial t} + \vec{v} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{r}} f_1 - \frac{\partial}{\partial \vec{r}} V_{ext}(\vec{r}, t) \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{p}} f_1 - \int d\vec{r}' d\vec{p}' \frac{\partial}{\partial \vec{r}} \phi(\vec{r} - \vec{r}') \cdot \frac{\partial f_2}{\partial \vec{p}} = 0$$

(3.4)

que depende da função distribuição de duas partículas

$f_2(\vec{r}, \vec{p}, \vec{r}', \vec{p}' | t)$. A equação de movimento para f_2 , por sua vez, depende da função distribuição de três partículas e assim sucessivamente.

Na aproximação do campo autoconsistente (SCFA), devido a Singwi et al.⁽¹⁾, esta sequência infinita de equações é truncada desacoplando a função distribuição de duas partículas através da hipótese

$$f_2(\vec{r}, \vec{p}, \vec{r}', \vec{p}' | t) = f_1(\vec{r}, \vec{p}, t) f_1(\vec{r}', \vec{p}', t) g(\vec{r} - \vec{r}') , \quad (3.5)$$

onde $g(\vec{r} - \vec{r}')$ é a função correlação estática de equilíbrio dos pares. Com esta hipótese, as correlações de curto alcance do sistema são consideradas, de um modo aproximado, através de uma função $g(\vec{r})$ que é uma medida da probabilidade de se encontrar uma partícula a uma distância r de outra partícula. Fazendo $g(\vec{r}) = 1$ para todo

na Eq(3.5) obtemos o desacoplamento usado na aproximação de Debye-Hückel ou aproximação RPA clássica.

Considerando um potencial externo fraco podemos escrever a função distribuição de uma partícula como

$$f_1(\vec{r}, \vec{p}, t) = f_0(\vec{p}) + \delta f(\vec{r}, \vec{p}, t) \quad (3.6)$$

onde $f_0(\vec{p})$ é a função distribuição de equilíbrio e $\delta f(\vec{r}, \vec{p}, t)$ representa a variação de f_0 induzida pelo potencial externo. Usando as Eqs (3.5) e (3.6), podemos linearizar a equação do movimento (3.4) para obter

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} + \vec{v} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{r}} \right] \delta f(\vec{r}, \vec{p}, t) - \frac{\partial}{\partial \vec{r}} \phi_{ef}(\vec{r}, t) \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{p}} f_0(\vec{p}) = 0 \quad (3.7)$$

com

$$\phi_{ef}(\vec{r}, t) = V_{ext}(\vec{r}, t) + \int d\vec{r}_1 \delta n(\vec{r}_1, t) \psi(\vec{r} - \vec{r}_1) \quad (3.8)$$

onde

$$\frac{\partial}{\partial \vec{r}} \psi(\vec{r} - \vec{r}_1) = g(\vec{r} - \vec{r}_1) \frac{\partial}{\partial \vec{r}} \phi(\vec{r} - \vec{r}_1) \quad (3.9)$$

e $\delta n(\vec{r}, t) = \int d\vec{p} \delta f(\vec{r}, \vec{p}, t)$ é a densidade de partículas induzida em $(\vec{r}, t)$.

Deste modo, o campo elétrico efetivo, atuando sobre uma partícula, é dado por

$$\begin{aligned}
\vec{E}_{ef}(\vec{r}, t) &= - \frac{\partial}{\partial \vec{r}} \phi_{ef}(\vec{r}, t) \\
&= - \frac{\partial}{\partial \vec{r}} V_{ext}(\vec{r}, t) - \int d\vec{r}_1 \frac{\partial}{\partial \vec{r}} \phi(\vec{r} - \vec{r}_1) \delta n(\vec{r}_1, t) \\
&\quad - \int d\vec{r}_1 [g(\vec{r} - \vec{r}_1) - 1] \frac{\partial}{\partial \vec{r}} \phi(\vec{r} - \vec{r}_1) \delta n(\vec{r}_1, t) \quad .
\end{aligned}
\tag{3.10}$$

Os dois primeiros termos do lado direito da Eq(3.10), correspondem ao campo efetivo na aproximação RPA, ou seja, o campo elétrico macroscópico usual, composto pelo campo externo e o termo de campo médio de interação entre as partículas. O terceiro termo corresponde à correção de campo local na aproximação SCFA, de modo que, neste termo, estão incorporadas as correlações de curto alcance do sistema. Assim, a Eq (3.10) ressalta a contribuição das correlações para o campo efetivo na aproximação SCFA.

Por causa da linearidade da Eq (3.7) podemos tomar uma única componente de Fourier do potencial externo para encontrar sua solução e obtemos

$$\delta n(\vec{k}, \omega) = \chi(\vec{k}, \omega) V_{ext}(\vec{k}, \omega) \tag{3.11}$$

onde $\chi(\vec{k}, \omega)$ é a função resposta densidade-densidade dada por

$$\chi(\vec{k}, \omega) = \frac{\chi_0(\vec{k}, \omega)}{1 - \psi(\vec{k}) \chi_0(\vec{k}, \omega)} \tag{3.12}$$

com $\chi_0(\vec{k}, \omega)$ sendo a função resposta densidade-densidade do sistema sem interação.

Para o sistema clássico de elétrons bidimensional obedecendo a distribuição de equilíbrio de Maxwell,

$$f_0(p) = \frac{n}{2\pi m T} e^{-\frac{p^2}{2mT}}$$

temos que, como calculado no apêndice, a função resposta densidade-densidade para o caso sem interação, é dada por

$$\chi_0(\vec{k}, \omega) = -\frac{n}{T} W\left[\frac{\omega}{k} \left(\frac{m}{T}\right)^{1/2}\right] \quad (3.13)$$

onde

$$\operatorname{Re} W(z) = 1 - z R(z) \quad (3.14a)$$

$$\operatorname{Im} W(z) = z I(z) \quad (3.14b)$$

com

$$R(z) = e^{-z^2/2} \int_0^z e^{y^2/2} dy \quad (3.15a)$$

$$I(z) = \left(\frac{\pi}{2}\right)^{1/2} e^{-z^2/2} \quad (3.15b)$$

O potencial autoconsistente efetivo $\psi(\vec{k})$ é simplesmente dado por

$$\Psi(k) = \phi(k) [1 - G(k)] \quad (3.16)$$

onde $\phi(k) = 2\pi e^2/k$, é a interação coulombiana entre as partículas e

$$G(k) = - \frac{1}{n} \int \frac{d\vec{q}}{(2\pi)^2} \frac{\vec{k} \cdot \vec{q}}{k q} [S(\vec{k} - \vec{q}) - 1] \quad (3.17)$$

O fator de estrutura estático $S(\vec{k})$ está relacionado com a função correlação dos pares $g(\vec{r})$, através da transformada de Fourier, ou seja,

$$S(\vec{k}) = 1 + n \int d\vec{r} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} [g(\vec{r}) - 1] \quad (3.18)$$

Como vemos, a função resposta densidade-densidade $\chi(\vec{k}, \omega)$ é um funcional do fator de estrutura estático $S(\vec{k})$ através das Eqs (3.12), (3.16) e (3.17). Por sua vez, $S(\vec{k})$ está relacionado com $\chi(\vec{k}, \omega)$ através do teorema da flutuação-dissipação^[52],

$$S(\vec{k}) = - \frac{\hbar}{n} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \text{Im} \chi(\vec{k}, \omega) \coth \hbar \left(\frac{\hbar \omega}{2T} \right) \quad (3.19a)$$

fechando, assim, o esquema autoconsistente.

As Eqs (3.12) e (3.17), juntamente com a Eq (3.19a), devem então ser resolvidas autoconsistentemente.

No limite clássico, $\hbar\omega \ll T$, a Eq (3.19a) pode ser escrita como

$$S(\vec{k}) = - \frac{T}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{\omega} \operatorname{Im} \chi(\vec{k}, \omega) d\omega \quad . \quad (3.19b)$$

Esta expressão e a relação de Kramers-Krönig

$$\chi(\vec{k}, \omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega'}{\pi} \frac{\operatorname{Im} \chi(\vec{k}, \omega')}{\omega' - \omega - i\eta} \quad , \quad (3.20)$$

permitem-nos relacionar o fator de estrutura estático com a função resposta densidade-densidade em $\omega = 0$, através de

$$\chi(\vec{k}, 0) = - \frac{n}{T} S(\vec{k}) \quad .$$

Esta relação elimina, então, uma das equações do conjunto auto-consistente, resultando para $S(\vec{k})$ o valor

$$S(\vec{k}) = \frac{1}{1 + \frac{n}{T} \psi(\vec{k})} = \frac{k}{k + k_D [1 - G(k)]} \quad (3.21)$$

onde $k_D = 2\pi n e^2 / T$ é o vetor de onda de Debye no sistema bidimensional.

Como vimos, a aproximação RPA é obtida da aproximação SCFA se desprezamos as correções de campo local, ou seja, tomando o potencial efetivo $\psi(k)$, definido pela Eq (3.16), como o potencial coulombiano simples $\phi(\vec{k})$, de acordo com a Eq (3.9), ou equivalentemente $G(\vec{k}) \equiv 0$.

Assim, na aproximação RPA a função resposta densidade-densidade é escrita como

$$\chi_{RPA}(\vec{k}, \omega) = \frac{\chi_0(\vec{k}, \omega)}{1 - \phi(\vec{k}) \chi_0(\vec{k}, \omega)} \quad (3.22)$$

e, tendo em vista a Eq (3.21), com $\phi(\vec{k}) = 0$, o fator de estrutura estático e a função correlação dos pares são dados por

$$S_{RPA}(\vec{k}) = \frac{k}{k + k_D} \quad (3.23)$$

e

$$g_{RPA}(\vec{r}) = 1 - \frac{u(r)}{T} \quad (3.24)$$

com

$$\begin{aligned} u(r) &= e^2 \int_0^\infty k dk \frac{J_0(kr)}{k + k_D} \\ &= \frac{e^2 k_D}{r} \int_0^\infty dt e^{-rt} \int_0^\infty s ds e^{-st} J_0(k_D s) \\ &= \frac{e^2 k_D}{r} \int_0^\infty \frac{t}{(k_D^2 + t^2)^{3/2}} e^{-rt} dt \\ &= \frac{e^2}{r} \left\{ 1 - \frac{\pi k_D r}{2} \left[\bar{H}_0(k_D r) - Y_0(k_D r) \right] \right\} \end{aligned} \quad (3.25)$$

onde $J_0(x)$, $\bar{H}_0(x)$ e $Y_0(x)$ são as funções de ordem

zero, respectivamente de Bessel, Struve e Bessel de segunda espécie.⁽⁵³⁾

Como podemos notar, a função correlação dos pares na aproximação RPA diverge na origem, mostrando a falha desta aproximação na região de curto alcance.

3.2 - Correlações

As correlações de curto alcance do sistema de eletrons são descritas diretamente pela função correlação dos pares

$g(r)$, que é uma quantidade física básica encontrada no sistema de muitas partículas. Ela representa a probabilidade de encontrar uma partícula a uma distância r da outra e é obtida pela transformada de Fourier inversa do fator de estrutura

$$g(r) = 1 + \frac{1}{2\pi n} \int_0^\infty k dk J_0(kr) [S(k) - 1] \quad (3.26)$$

ou, em unidades adimensionais, conveniente para cálculos numéricos,

$$g(r) = 1 + \alpha \int_0^\infty k dk J_0(\sqrt{2\alpha} kr) [S(k) - 1]$$

onde

$$S(k) = \frac{k}{1 + k - G(k)} \quad (3.27)$$

e $G(k)$, obtido pela Eq (3.17), após a integração angular, é dado por

$$G(k) = -\frac{2\alpha}{\pi} \left\{ \int_0^k q \, dq \, \mathcal{E}\left(\frac{q}{k}\right) [S(q)-1] + k \int_k^\infty dq \left[\left(1 - \frac{q^2}{k^2}\right) K\left(\frac{k}{q}\right) + \frac{q^2}{k^2} \mathcal{E}\left(\frac{k}{q}\right) \right] [S(q)-1] \right\} \quad , \quad (3.28)$$

onde k e q estão em unidades de k_D , r em unidades de $a = (\pi n)^{-1/2}$, correspondendo ao raio de um círculo contendo exatamente uma partícula, e $K(x)$ e $\mathcal{E}(x)$ são as integrais elípticas de primeira e segunda espécie respectivamente. ⁽⁵³⁾

A solução autoconsistente das Eqs (3.27) e (3.28) é obtida através de um processo iterativo. Inicia-se o processo com $S(k)$ escolhido como o fator de forma em RPA para k menor do que um certo $k_{\max}$, e $S(k) = 1$ para $k \geq k_{\max}$. O processo continua até que um $S(k)$ autoconsistente é encontrado e, para isso, definimos o critério de que a consistência ocorre quando a diferença entre as matrizes de $G(k)$ de duas iterações consecutivas é menor do que algum valor preestabelecido ϵ . Como no caso tridimensional a convergência em $G(k)$ revela uma precisão muito boa em $S(k)$. Evidentemente, o processo independe do fator $S(k)$ inicial. No limite do parâmetro α pequeno, o processo iterativo converge sem qualquer dificuldade, com poucas iterações. Contudo, quando α aumenta, grandes oscilações começam a ocorrer, dificultando a convergência. Para evitar isso, utilizamos o mecanismo de aceleração da convergência, definindo como entrada para $G(k)$ da (N+1)-

ésima iteração

$$\zeta^{(N+1)}(k) = \zeta^{(N-1)}(k) + p \left[\zeta^{(N)}(k) - \zeta^{(N-1)}(k) \right] \quad (3.29)$$

onde o fator de convergência p depende do valor de α . Para α grande, p da ordem de 0,1 é conveniente para obtermos convergência com aproximadamente 12 iterações.

Os resultados para o fator de estrutura como função do vetor de onda para vários valores do parâmetro de plasma estão mostrados na Fig. 1. Na região de α pequeno, o fator de estrutura aproxima-se do valor correspondente na aproximação RPA para $k \rightarrow 0$.

Vemos na Fig. 1 que $S(k)$ ultrapassa o valor da unidade quando o parâmetro de plasma α aumenta. Picos pronunciados em $S(k)$ começam a aparecer para $\alpha > 10$.

Como mostrado na seção 3.1, a aproximação RPA apresenta uma função correlação dos pares $g(r)$ que diverge na origem, evidenciando o insucesso desta aproximação em tratar a região de curto alcance $r < e^2/T$, onde os elétrons são fortemente correlacionados. Deste modo, a inadequacidade da RPA é muito mais significativa em sistemas em duas do que em três dimensões.

Totsuji propôs uma função correlação dos pares, equivalente a uma aproximação RPA não linear, como

$$g(r) = e^{-u(r)/T} \quad (3.30)$$

onde $u(r)$ é dada pela Eq (3.25).

Esta função correlação foi proposta como uma interpolação entre a forma de longo alcance (RPA) e a correlação de curto alcance assumida como dada pela distribuição canônica para interação entre um único par de eletrons $\exp(-\phi(r)/T)$. Esta aproximação deve ser válida para baixas densidades (limite de α pequeno) e elimina a singularidade de $g(r)$ em RPA.

Nossos resultados para as funções correlação dos pares como obtidas da Eq (3.26) são mostradas na Fig. 2 para vários valores de α .

Para comparação, os resultados experimentais devidos a Tot-suji, obtidos pelo método de Monte Carlo, são também apresentados. Como podemos ver, a concordância entre nossos resultados e o experimento numérico é bastante satisfatória.

Para valores muito pequenos de α , nossos valores de $g(r)$ ajustam-se bem aos da expressão aproximada, dada pela Eq (3.30).

No intervalo $14 < \alpha < 15$, $g(r)$ começa a exibir um comportamento oscilatório que é interpretado como o início da ordem de curto-alcance, indicando que para mais altas densidades o sistema bidimensional de eletrons é altamente estruturado.

Temos calculado a função correlação dos pares para $\alpha > 25$ (não mostrada na Fig. 2), apesar de dificuldades de convergência no método. Infelizmente $g(r)$ torna-se progressivamente mais negativa para pequenos valores de r , com o aumento do parâmetro α . Isto decorre do fato de que a região de pequeno r é muito sensível a erros de arredondamento em $S(k)$ para grandes valores de k e de acordo com a Eq (3.26), esses erros são amplificados por um fator k para $r = 0$. Tendo em vista que com o aumento de α , este comportamento não deve ser desprezível, apresentamos

nossos resultados até $\alpha = 25$.

3.3 - Propriedades Termodinâmicas

A densidade de energia do sistema é determinada pela média estatística da densidade de Hamiltoniana, dada pela Eq(3.1) sem o potencial externo

$$E = \frac{\langle H \rangle}{A} = \frac{1}{A} \left\langle \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m} \right\rangle + \frac{1}{2A} \left\langle \sum_{i \neq j}^N \phi(\vec{r}_i - \vec{r}_j) \right\rangle .$$

O primeiro termo do lado direito desta equação nos dá a densidade de energia cinética nT e o segundo termo é a densidade de energia de correlação E_c que pode ser expressa em termos da função correlação dos pares como

$$E_c = n^2 \pi \int_0^\infty \phi(r) [g(r) - 1] r dr \quad (3.31)$$

ou, em termos do fator de estrutura estático,

$$E_c = \frac{n}{4\pi} \int_0^\infty \phi(k) [S(k) - 1] k dk \quad (3.32)$$

de modo que para a interação coulombiana, pode ser escrita como

$$\frac{E_c}{nT} = -\alpha \gamma(\alpha) , \quad (3.33)$$

onde

$$\gamma = -\frac{1}{2} \int_0^{\infty} dk [S(k) - 1] \quad (3.34)$$

é determinado de $S(k)$ calculado autoconsistentemente.

Desde que γ , na presente formulação, torna-se uma quantidade importante e aparecerá frequentemente em nossos cálculos, apresentamos na Fig. 3 os valores de γ como função do parâmetro de plasma α .

Substituindo o fator de estrutura estático na aproximação RPA, dado pela Eq (3.23), na expressão (3.32), obtemos uma energia de correlação que diverge logarithmicamente.

Na Fig. 4 mostramos os valores da densidade de energia de correlação como função do parâmetro do plasma. Para comparação, plotamos também os resultados experimentais e os resultados baseados em uma expansão do virial no parâmetro do plasma, determinada por Chalupa, que evidentemente só é satisfeita para pequenos valores de α e cuja densidade de energia de correlação é dada por

$$\begin{aligned} \frac{E_c}{nT} = & \frac{1}{2} \alpha \ln 2\alpha + \alpha \left(\delta - \frac{1}{2} \right) - \frac{1}{2} \alpha^2 \ln^2 \left(\frac{\alpha}{2} \right) + \\ & + (1 - 2\delta) \alpha^3 \ln 2\alpha, \end{aligned} \quad (3.35)$$

onde $\delta = 0,5772$ é a constante de Euler.

Da Fig. 4 torna-se claro que nossos resultados reproduzem os valores experimentais muito bem e também são consistentes com o método de expansão do parâmetro do plasma para α pequeno. Infelizmente temos somente dois valores da energia de correlação, correspondentes a $\alpha = 0,02$ e $\alpha = 2,0$, para comparar com um cálculo feito por Lado baseado na solu -

→ ção numérica da equação integral "hypernetted-chain".⁽⁵¹⁾ Para estes valores, os resultados são exatamente os mesmos.

Desde que tenhamos obtido a energia de correlação, podemos calcular outras propriedades termodinâmicas do sistema.

A densidade de energia total do sistema é, por exemplo, dada por

$$\frac{E}{nT} = 1 + \frac{E_c}{nT} \quad (3.36)$$

A energia livre de Helmholtz é dada por

$$F = E - TS$$

onde $S = \oint dQ/T$ é a entropia do sistema. Ao longo de uma trajetória à área constante, podemos escrever

$$S(T, A) = \int_0^T \left(\frac{\partial E}{\partial T'} \right) \frac{dT'}{T'}$$

de modo que, se E é conhecido em várias temperaturas para uma dada área A , podemos determinar $S(T, A)$ e, portanto, a energia livre

$$F = F_0 + \frac{NT}{2} \int_0^\alpha \frac{d\alpha'}{\alpha'} \left(\frac{E_c}{nT} \right), \quad (3.37)$$

onde F_0 é a energia livre, do gás clássico sem interação. O calor específico à área constante, por unidade de partícula,

$$C_A = \frac{1}{N} \left(\frac{\partial E}{\partial T} \right)_A = 1 + \frac{E_c}{nT} - 2\alpha \frac{\partial}{\partial \alpha} \left(\frac{E_c}{nT} \right) \quad (3.38)$$

A pressão total exercida pelo sistema assume a forma

$$P = nT + \frac{1}{2} E_c \quad (3.39)$$

e a compressibilidade isotérmica definida como

$$\chi_T = - \frac{1}{A} \left(\frac{\partial P}{\partial A} \right)_T^{-1}$$

é determinada pela equação

$$\frac{\chi_T^0}{\chi_T} = 1 + \frac{1}{2} \left[\frac{E_c}{nT} + \alpha \frac{\partial}{\partial \alpha} \left(\frac{E_c}{nT} \right) \right] \quad (3.40)$$

onde χ_T^0 é a compressibilidade isotérmica do gás livre.

3.4 - Regra de soma da compressibilidade

Evidentemente, podemos, nesta formulação, relacionar a função resposta densidade-densidade $\chi(\vec{k}, \omega)$, definida pela Eq (3.11), com a função resposta dielétrica $\epsilon(\vec{k}, \omega)$, através de

$$\frac{1}{\epsilon(\vec{k}, \omega)} - 1 = \phi(\vec{k}) \chi(\vec{k}, \omega) \quad (3.41)$$

de modo que, na aproximação do campo autoconsistente, a função dielétrica assume a forma

$$\epsilon(\vec{k}, \omega) = 1 - \frac{\phi(\vec{k}) \chi_0(\vec{k}, \omega)}{1 + G(\vec{k}) \phi(\vec{k}) \chi_0(\vec{k}, \omega)} \quad (3.42)$$

e na aproximação RPA

$$\epsilon_{RPA}(\vec{k}, \omega) = 1 - \phi(k) \chi_0(\vec{k}, \omega) = 1 + \frac{k_D}{k} W \left[\frac{\omega}{k} \left(\frac{m}{T} \right)^{1/2} \right] \quad (3.43)$$

Esta formulação dielétrica permite-nos determinar a regra de soma para a compressibilidade isotérmica de um sistema carregado. ⁽⁵²⁾

→ No limite de grandes comprimentos de onda, $\vec{k} \rightarrow 0$, a função dielétrica estática $\epsilon(\vec{k}, 0)$ representa a resposta do sistema carregado a um potencial blindado estático que varia lentamente no espaço e portando podemos relacionar com a compressibilidade isotérmica macroscópica do sistema através de

$$\begin{aligned} \lim_{\vec{k} \rightarrow 0} \epsilon(\vec{k}, 0) &= 1 + n \phi(k) \chi_T \\ &= 1 + \frac{\chi_T}{\chi_T^0} \frac{k_D}{k} \quad (3.44) \end{aligned}$$

Na aproximação do campo autoconsistente a função dielétrica estática assume a forma

$$\epsilon(\vec{k}) = 1 + \frac{k}{k - k_D G(k)} \quad (3.45)$$

No limite de grande comprimento de onda, a correção de campo local $G(\vec{k})$ pode ser escrita como

$$G(\vec{k}) = G'(0) k \quad , \quad (3.46a)$$

onde

$$G'(0) = \frac{1}{4\pi n} \int_0^\infty [S(q) - 1] dq \quad (3.47)$$

e em unidades adimensionais

$$G(k) = \alpha \gamma k \quad (3.46b)$$

de modo que

$$\lim_{\vec{k} \rightarrow 0} \epsilon(\vec{k}, 0) = 1 + \frac{1}{1 - \alpha \gamma} \frac{1}{k} \quad . \quad (3.48)$$

Comparando com a Eq (3.44), podemos agora escrever a razão das compressibilidades isotérmicas como

$$\frac{\chi_T^0}{\chi_T} = 1 - \alpha \gamma \quad . \quad (3.49)$$

Na Fig. 5 comparamos os valores da compressibilidade, obtidos da regra de soma (Eq (3.49 - curva I), com aqueles obtidos a partir da energia de correlação (Eq 3.40 - curva II). A inconsistência entre as duas maneiras de obter a compres-

sibilidade isotérmica, deve-se ao fato de que a Eq (3.49) apresenta uma aproximação em mais baixa ordem para a compressibilidade. Esta inconsistência é uma característica de todos os cálculos perturbativos.

Existe uma completa concordância entre os nossos resultados para a compressibilidade e os obtidos através do método de Monte Carlo.

De acordo com a curva II da Fig 5, a compressibilidade diverge nas proximidades de $\alpha_c = 4,5$. Portanto, além deste valor crítico, o sistema torna-se termodinamicamente instável. A natureza dessa instabilidade termodinâmica tem sido analisada em detalhes por Totsuji e Ichimaru⁽⁵⁴⁾, para o caso do plasma tridimensional e decorre do fato de que a energia livre do sistema para $\alpha > \alpha_c$ tende a decrescer quando uma excitação de longo comprimento de onda é criada no fundo uniforme; daí, o sistema, com um fundo positivo uniforme, torna-se instável.

Temos mostrado na Seção 3.2 que, quando o parâmetro de plasma aumenta, picos pronunciados começam a aparecer no fator de estrutura estático. Evidentemente, deveremos ter um valor de α em que a condição

$$k + k_D [1 - G(k)] = 0 \quad (3.50)$$

seja satisfeita em uma posição do pico $k = k_s$. Desde que $S(k)$, Eq (3.21), diverge quando a Eq (3.50) é satisfeita, temos então outro parâmetro crítico α_s tal que, para este valor o sistema deve sofrer uma transição de fase, tornando-se altamente estruturado - um cristal - com constante de rede especificada por k_s ; uma tendência que, como vimos, torna-se evidente quando $g(r)$ ultrapassa o

valor da unidade para $\alpha \simeq 15$ na Fig 2. .

Entretanto, os resultados do nosso método deverão estar longe de corresponder aos valores reais de α_s e k_s , desde que o nosso modelo consiste de um sistema uniforme e isotrópico e para a determinação dos valores precisos da estrutura da rede, tal hipótese deveria ser abandonada. Porém, o valor crítico α_s pode ser identificado com o valor onde a solidificação foi observada na experiência de Grimes e Adams⁽⁴³⁾ no sistema de eletrons na superfície de hélio ($\alpha = 3,7 \times 10^4$)

CAPÍTULO 4

ELETRODINÂMICA CLÁSSICA DE UM SISTEMA DE ELETRONS BIDIMENSIONAL

Neste capítulo prosseguimos o estudo do sistema de eletrons bidimensional, discutindo agora suas propriedades eletrodinâmicas na aproximação do campo autoconsistente, desenvolvida no capítulo anterior, e, como caso particular, na aproximação das fases aleatórias. Os efeitos eletrodinâmicos estudados incluem a blindagem de uma impureza estática, as oscilações do plasma e o fator de estrutura dinâmico, que mede as flutuações na densidade no sistema de muitas partículas e está diretamente relacionado com a seção de choque de espalhamento inelástico.

4.1 - Blindagem de uma impureza carregada estática

Como primeiro exemplo, vamos estudar a resposta eletrodinâmica do sistema de eletrons bidimensional a uma impureza de carga Ze , localizada na origem, atuando como um potencial externo dado por:

$$\phi_{ext}(\vec{r}, t) = \frac{Ze}{r} \quad (4.1)$$

cuja transformada de Fourier é

$$\phi_{ext}(\vec{k}, \omega) = (2\pi)^2 \frac{Ze}{k} \delta(\omega) \quad (4.2)$$

A resposta a esta perturbação externa é caracterizada pela densidade de partículas induzida, que, como vimos (Eq(3.11)), na teoria da resposta linear é dada por (a interação é $-e\phi_{ext}$)

$$\delta n(\vec{k}, \omega) = -\chi(\vec{k}, \omega) e \phi_{ext}(\vec{k}, \omega) , \quad (4.3)$$

onde $\chi(\vec{k}, \omega)$ é a função resposta densidade-densidade. Na aproximação do campo autoconsistente $\chi(\vec{k}, \omega)$ é expressa por

$$\chi(\vec{k}, \omega) = \frac{\chi_0(\vec{k}, \omega)}{1 - \psi(k) \chi_0(\vec{k}, \omega)} \quad (4.4)$$

onde $\psi(k) = \phi(k) [1 - G(k)]$ é o potencial efetivo e $\chi_0(\vec{k}, \omega)$ é a função resposta no caso livre.

A transformada inversa da Eq (4.3) nos dá uma densidade de partículas induzida

$$\delta n(\vec{r}) = -Ze^2 \int_0^\infty dk J_0(kr) \chi(k, 0) , \quad (4.5)$$

onde $J_0(x)$ é a função de Bessel de ordem zero.

Usando a expressão para $\chi(\vec{k}, \omega)$ dada pela Eq (4.4) no limite estático, $\omega = 0$, e o valor da função resposta densidade-densidade do sistema sem interação neste limite dada por

$$\chi_0(\vec{k}, 0) = -\frac{n}{T} W(0) = -\frac{n}{T} , \quad (4.6)$$

temos que

$$\delta n(\vec{r}) = \frac{ze k_D}{2\pi} \int_0^\infty dk \frac{k J_0(kr)}{k + k_D [1 - G(k)]} \quad (4.7)$$

Para obter o resultado da densidade de partículas na aproximação RPA⁽⁴⁷⁾, devemos tomar na Eq (4.7) a correção de campo local.

$$G(k) = 0 ,$$

$$\delta n(\vec{r}) = \frac{ze k_D}{2\pi} \int_0^\infty dk \frac{k}{k + k_D} J_0(kr) \quad (4.8a)$$

ou

$$\delta n(\vec{r}) = \frac{ze k_D}{2\pi} \left\{ \frac{1}{r} - \frac{\pi}{2} k_D \left[\bar{H}_0(k_D r) - Y_0(k_D r) \right] \right\} . \quad (4.8b)$$

Este resultado foi obtido também por Chalupa⁽⁴⁹⁾, através da linearização da equação de Poisson para o potencial blindado em um cálculo do tipo Debye-Hückel, e corresponde também ao resultado do modelo semiclássico de Stern e Howard⁽⁵⁵⁾, aplicado ao problema dos elétrons na camada de inversão em semicondutores, porém com uma constante de blindagem modificada.

A carga total induzida é dada por

$$\begin{aligned} Q &= -e \int d\vec{r} \delta n(\vec{r}) \\ &= -ze k_D \int_0^\infty dk \frac{\delta(k)}{k + k_D [1 - G(k)]} = -ze , \end{aligned} \quad (4.9)$$

indicando que, para grandes distâncias, a impureza carregada é completamente blindada.

Infelizmente, a densidade de partículas diverge para $r=0$, de modo que teremos uma densidade de carga induzida infinita nesta região. Esta divergência aparece devido à linearização da equação de movimento (Eq (3.4)), que se constitui de uma aproximação não válida na região perto da impureza. Esta divergência pode ser evitada se usarmos a função resposta densidade-densidade do sistema sem interação tomada no limite clássico, ou seja, considerando o sistema quântico, porém no limite clássico, e, ao invés da Eq (4.6), podemos escrever

$$\chi(\vec{k}, 0) = -\frac{n}{T} \xi\left(\frac{k}{k_T}\right), \quad (4.10)$$

onde $k_T = (2mT)^{1/2}/\hbar$ é o inverso do comprimento de onda térmico e

$$\xi(x) = \frac{1}{\sqrt{2} x} R(\sqrt{2} x) \quad (4.11)$$

Com esta modificação, a densidade induzida fica sendo

$$\delta n(\vec{r}) = \frac{\tilde{z} k_D}{2\pi} \int_0^\infty dk \, k J_0(kr) \frac{\xi(k/k_T)}{k + k_D [1 - G(k)] \xi(k/k_T)} \quad (4.12)$$

e obtemos, uma densidade de partículas que é finita mesmo em $r=0$, tendo em vista o comportamento assintótico das funções

$$\xi(x) \approx \frac{1}{x^2} \quad x \gg 1$$

e

$$G(k) \rightarrow 1 \quad k \gg k_D \quad .$$

Convém ressaltar que, através dos cálculos numéricos, notamos que este procedimento torna-se desnecessário, porque, para $r=0$, a expressão (4.12) assume valores finitos, porém, extremamente grandes. Além do mais, devemos levar em conta, como salientado anteriormente, que nenhuma das aproximações comumente usadas pode apresentar resultados satisfatórios nas proximidades de $r=0$, pois a teoria de resposta linear não é válida nesta região.

Para grandes distâncias, o comportamento do integrando para k pequeno domina a integral da expressão (4.12), de modo que, neste limite, podemos aproximar $\xi(x)$ por seu termo principal $\xi(0) \approx 1$ e usar a Eq (3.40)

$$G(k) = G'(0)k = \alpha \gamma \frac{k}{k_D}$$

para obter a seguinte expressão da densidade de partícula induzida,

$$\delta n(r) = \frac{Z k_D^*}{2\pi} \int_0^\infty dk \frac{k J_0(kr)}{k + k_D^*} \quad (4.13)$$

onde

$$k_D^* = \frac{k_D}{1 - \alpha \gamma} \quad (4.14)$$

é o vetor de onda renormalizado de Debye.

Esta expressão é a mesma que a Eq (4.8a) para $\delta n(r)$ na aproximação RPA e, portanto, tomando o limite assintótico da Eq (4.8b) obtemos a expansão analítica da densidade induzida para grandes distâncias:

$$\delta n(r) = \frac{Z k_D^*}{2\pi} \left[\frac{1}{(k_D^* r)^3} - \frac{9}{(k_D^* r)^5} + \frac{225}{(k_D^* r)^7} - \dots \right] \quad (4.15)$$

Evidentemente, em RPA temos a mesma expressão com $k_D^* = k_D$ pois $\gamma = 0$ nesta aproximação.

Como vimos na seção 3.4, a compressibilidade isotérmica, dada pela Eq (3.43), diverge para o parâmetro de plasma $\alpha = \alpha_c$ e para este valor crítico surge uma singularidade em k_D^* dado por (4.14), de modo que o sistema torna-se também eletrodinamicamente instável.

É interessante notar que, para grandes distâncias, uma impureza estática induz uma densidade de carga dada por uma expressão algébrica de longo alcance, ao contrário do fator exponencial de Debye-Hückel em três dimensões.

A integral da Eq (4.7) foi calculada numericamente para vários valores de α . Na Fig. 6 os resultados para $\alpha = 1,0$ e $\alpha = 20,0$ são comparados com o obtido na aproximação RPA dada pela Eq (4.8b). Notamos diferenças significativas na

densidade de carga induzida à medida em que o parâmetro de plasma aumenta, refletindo a contribuição das correlações de curto alcance do sistema, tratadas na aproximação do campo autoconsistente.

4.2 - Dispersão do Plasma

A relação de dispersão do plasma $\omega(\vec{k})$ e o amortecimento $\Gamma(\vec{k})$ das oscilações do plasma, são determinadas através dos polos da função resposta densidade-densidade. Portanto, devemos encontrar a solução

$$\omega = \omega(k) + i\Gamma(k) \quad (4.16)$$

da equação

$$F(\vec{k}, \omega) \equiv 1 - \phi(k) [1 - G(k)] \chi_0(\vec{k}, \omega) = 0 \quad (4.17a)$$

ou

$$F(\vec{k}, \omega) \equiv 1 + \frac{1}{k} [1 - G(k)] \left\{ 1 - z R(z) + iz I(z) \right\} \quad (4.17b)$$

onde $z = \omega/k$, com k em unidades de k_D e ω em unidades de $\omega_0 = (2\pi n e^2 k_D / m)^{1/2} = k_D (T/m)^{1/2}$.

No limite de pequeno amortecimento, $\Gamma(k) \ll \omega(k)$, podemos desacoplar as partes real e imaginária da Eq (4.17) e, expandindo em primeira ordem em Γ , obtemos

$$\operatorname{Re} F(\vec{k}, \omega) = 1 - \phi(k) [1 - G(k)] \operatorname{Re} \chi_0(\vec{k}, \omega(\vec{k})) = 0 \quad (4.18a)$$

ou, em unidades adimensionais,

$$1 + \frac{1}{k} \left[1 - G(k) \right] \left[1 - x_k R(x_k) \right] = 0 \quad (4.18b)$$

e

$$\pi(\vec{k}) = - \frac{\operatorname{Im} F(\vec{k}, \omega(\vec{k}))}{\left(\frac{\partial \operatorname{Re} F(\vec{k}, \omega)}{\partial \omega} \right)_{\omega = \omega(\vec{k})}} \quad (4.19)$$

No limite de grandes comprimentos de onda, a correção de campo local $G(k)$ varia linearmente com $(eq(3.40))$ e, expandindo $R(x)$ até segunda ordem, na Eq (4.18b), obtemos a relação de dispersão do plasma

$$\omega(\vec{k}) = \left(\frac{2\pi n e^2 k}{m} \right)^{1/2} \left[1 + \left(\frac{3}{2 k_D} - \frac{1}{2} G'(0) \right) k \right] \quad (4.20a)$$

ou, em unidades adimensionais,

$$\omega(\vec{k}) = k^{1/2} \left[1 + \left(\frac{3}{2} - \frac{1}{2} \alpha \gamma \right) k \right] , \quad (4.20b)$$

que é válida para $k \ll k_D$.

Portanto, estas ondas de plasma que são constituídas de perturbações na densidade de carga e que se comportam como linhas de carga oscilantes no sistema de duas dimensões, apresentam uma relação de dispersão, cujo termo principal é proporcional a $k^{1/2}$, ao contrário do caso tridimensional, cujo termo é independente de k .

Um estudo experimental sobre a dispersão do plasma bidimensional foi feito por Grimes e Adams⁽⁵⁶⁾ para o sistema de eletrons na superfície de Hélio. Eles usaram radiação de um espectrômetro de radiofrequência para excitar e detetar as ondas de plasma estacionárias na camada de eletrons contidas em uma célula retangular. Deste modo, verificaram a relação de dispersão apenas com seu termo principal

$$\omega(\vec{k}) = \left(\frac{2\pi n e^2}{m} k \right)^{1/2} .$$

Para observar o termo proporcional a $k^{3/2}$ seria necessário utilizar comprimentos de onda bastante pequenos, bem como pequenas densidades eletrônicas.

Na Fig 7 apresentamos as relações de dispersão para dois valores do parâmetro do plasma α , calculadas da Eq (4.20b) com γ determinado autoconsistentemente. Para comparação, temos plotado também a curva na aproximação RPA ($\gamma = 0$) e que coincide com os resultados obtidos por Fetter⁽⁴⁷⁾ e Tot

suji⁽⁴⁸⁾.

É interessante notar que as correlações de curto alcance consideradas na aproximação do campo autoconsistente, corrigem o resultado de RPA, através do decréscimo do coeficiente do termo $k^{3/2}$ na dispersão do plasma. Este é um dos resultados mais importantes obtidos pelo método autoconsistente, porque ressaltava o efeito das correlações neste sistema. Anteriormente Beck e Kumar⁽⁵⁷⁾ investigaram a contribuição das correlações dos eletrons, obtendo em sua relação de dispersão um decréscimo no coeficiente daquele termo, da ordem de λ_T , comprimento de onda térmico, que, evidentemente, anula-se no limite estritamente clássico ($k \rightarrow 0$). Assim, nosso trabalho é o primeiro a incorporar os efeitos de correlação na relação de dispersão do plasma bidimensional.

O amortecimento do plasma $\Gamma(\vec{k})$ determinado pela Eq (4.19) apresenta como contribuição principal o mesmo resultado de RPA, ou seja, o bem conhecido amortecimento de Landau. Porém, através de uma expansão para k pequeno na Eq (4.17b), podemos obter

$$\Gamma(\vec{k}) = -\left(\frac{\pi}{8}\right)^{1/2} \left(\frac{1}{k} - \alpha\gamma\right)^{3/2} \exp\left[\frac{1}{2k} + \frac{3}{2} - \frac{\alpha\gamma}{2}\right], \quad (4.21)$$

que se reduz ao resultado de Landau para $\gamma=0$. Evidentemente, no limite $k \rightarrow 0$, esta correção é desprezível. Por outro lado, sabe-se que neste limite o amortecimento das oscilações pelas colisões é muito maior do que o amortecimento de Landau. Convém notar ainda que o resultado para o amortecimento de Landau não é fundamentalmente alterado pela dimensionalidade do sistema.

Para determinar a relação de dispersão do plasma para vetores de onda arbitrários, resolvemos numericamente a Eq(4.18b) para encontrar as suas raízes.

Desde que a função $1 - \epsilon R(x)$ possui um valor mínimo, aproximadamente igual a -0,284, podemos afirmar que não existem raízes reais para

$$\frac{k}{[1 - \epsilon(k)]} > 0,284 \quad . \quad (4.22)$$

Mostramos na Fig 8 os resultados para a parte real dos modos de oscilação do plasma para os parâmetros $\alpha = 20,0$ e $\alpha = 1,0$, em comparação com aqueles obtidos por Platzman e Tzoar⁽⁵⁸⁾ na aproximação RPA.

Como vemos na Fig. 8 a relação de dispersão apresenta dois ramos diferentes. O ramo superior corresponde a um modo coletivo do tipo plasmon, semelhante ao resultado de baixas temperaturas, onde sabemos que a maior contribuição para o sistema surge do termo de interação coulombiana (plasma frio) O ramo inferior com uma frequência mais baixa, corresponde a um modo do tipo som

$$\omega(k) = c k$$

com a velocidade c da ordem da velocidade térmica do elétron kT/m , relacionada com o fluxo livre das partículas em altas temperaturas, onde a energia térmica domina a contribuição da energia eletrostática (plasma quente).

4.3 - Fator de estrutura dinâmico

Consideremos agora, como outra aplicação da SCFA, o cálculo

do fator de estrutura dinâmico $S(\vec{k}, \omega)$, que é a função espectral das flutuações de densidade em um sistema de muitas partículas, relacionado diretamente com uma quantidade observável do sistema, que é a seção de choque de espalhamento inelástico.

Do teorema da flutuação-dissipação, Eq (3.14), obtemos, no limite clássico,

$$S(\vec{k}, \omega) = - \frac{T}{n\pi\omega} \operatorname{Im} \chi(\vec{k}, \omega) \quad (4.23)$$

Na aproximação SCFA esta expressão tem a seguinte forma

$$S(\vec{k}, \omega) = - \frac{T}{n\pi\omega} \frac{\operatorname{Im} \chi_0(\vec{k}, \omega)}{[1 - \psi(k) \operatorname{Re} \chi_0(\vec{k}, \omega)]^2 + [\psi(k) \operatorname{Im} \chi_0(\vec{k}, \omega)]^2} \quad (4.24)$$

Para um sistema sem interação, isto é, $\psi(k) = \phi(k) = 0$ o fator de estrutura dinâmico $S_0(\vec{k}, \omega)$ tem, para k fixo, uma forma gaussiana em torno de $\omega = 0$ dada por

$$S_0(\vec{k}, \omega) = - \frac{T}{n\pi\omega} \operatorname{Im} \chi_0(\vec{k}, \omega) = \left(\frac{m}{2\pi T} \right)^{1/2} \frac{1}{k} \exp \left[- \frac{m\omega^2}{2Tk^2} \right] \quad (4.25)$$

Este comportamento de $S(\vec{k}, \omega)$ é significativamente alterado para um sistema interagente, pois o fator de estrutura pode admitir grandes valores não somente quando $\operatorname{Im} \chi_0(\vec{k}, \omega)$ for grande, mas também quando

$$\phi(k) [1 - \psi(k)] \operatorname{Re} \chi_0(\vec{k}, \omega) = 1$$

correspondendo aos zeros da função $F(\vec{k}, \omega)$ dada por (4.18a). Neste caso, para $k \ll k_D$, a contribuição relevante para $S(\vec{k}, \omega)$ aparece devido aos modos coletivos do plasma e vemos, comparando com a Eq (4.18a), que $S(\vec{k}, \omega)$ adquire um pico na frequência do plasma $\omega(\vec{k})$ com largura da ordem de $\Gamma(\vec{k})$. Expandindo a Eq (4.24) em torno de $\omega = \omega(\vec{k})$, obtemos para $S(\vec{k}, \omega)$ uma forma Lorentziana dada por

$$S(\vec{k}, \omega) = - \frac{k}{2\pi k_D} \frac{\Gamma(\vec{k})}{[\omega - \omega(\vec{k})]^2 + \Gamma^2(k)}, \quad (4.26)$$

onde $\omega(\vec{k})$ e $\Gamma(\vec{k})$ são dados pelas Eqs (4.20) e (4.21). No limite $k \gg k_D$, a contribuição para $S(\vec{k}, \omega)$ aparece devido ao movimento térmico dos elétrons individuais, ou seja, o sistema comporta-se como um sistema sem interação.

$$S(\vec{k}, \omega) \simeq S_0(k, \omega).$$

Nossos resultados demonstram inequivocamente este comportamento do espectro de flutuações de densidade do sistema de elétrons bidimensional.

Na Fig 9. plotamos $S(\vec{k}, \omega)$ como função de ω , para valores fixos de k , e para parâmetros de plasma $\alpha = 1,0$ e $\alpha = 20,0$. Para comparação, mostramos os resultados na aproximação RPA. No limite de baixas densidades, α pequeno, nossos resultados coincidem com os da aproximação RPA. No entanto, à medida que α aumenta, ocorrem modificações significativas no fator de estrutura dinâmico e seu deslocamento para valores menores de k e ω .

Finalmente, a relação de $S(\vec{k}, \omega)$ com a seção de choque de espalhamento inelástico de eletrons por uma camada superficial carregada, pode ser facilmente estabelecida⁽⁴⁷⁾.

Considerando $\vec{k}$ e $\vec{k}'$ como os vetores de onda tridimensionais do eletron incidente e $\vec{k}$ como a projeção de $\vec{k} - \vec{k}'$ no plano da camada de eletrons, então a seção de choque diferencial para espalhamento é dada por^(47, 59)

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\omega} = N \frac{k'}{k} \left(\frac{\hbar m e^2}{\hbar^2 |\vec{k} - \vec{k}'|^2} \right)^2 S(\vec{k}, \omega) .$$

Então, a observação experimental de um pico no fator de estrutura comprovaria de outro modo a forma da relação de dispersão do plasma. Contudo, não existem ainda dados experimentais para confirmação destes resultados que foram deduzidos de considerações puramente teóricas.

CAPÍTULO 5

CORRELAÇÕES DE ELETRONS NA SUPERFÍCIE DE HÉLIO

Como discutido anteriormente, eletrons colocados na superfície de hélio líquido permanecem ligados à superfície na direção perpendicular, em estados quânticos discretos e se movem mais ou menos livremente na direção paralela à superfície, comportando-se como um gás clássico.

Evidentemente, este sistema de eletrons não é bidimensional no sentido matemático, como discutido nos dois capítulos precedentes. Portanto, uma descrição física mais realística deste sistema deve incluir o efeito da largura finita da camada eletrônica.

Neste capítulo estenderemos o método autoconsistente, aplicado com sucesso ao sistema de eletrons estritamente bidimensional, a fim de incorporar a espessura da camada, analisando seu efeito sobre as correlações entre os eletrons do sistema. Em particular, vamos comparar nossos resultados para a relação de dispersão do plasma com aqueles obtidos por Beck e Kumar⁽⁵⁷⁾, até o momento os únicos autores que estudaram a contribuição da largura finita e os efeitos de correlações nas oscilações do plasma neste sistema.

5.1 - Sistema de eletrons quase-bidimensional

No sistema de eletrons quase-bidimensional, o efeito da largura finita da camada eletrônica pode ser considerado através de funções de onda da forma

$$\psi_i(\vec{r}, z) = \varphi_i(z) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}, \quad (5.1)$$

onde $\vec{k}$ e $\vec{r}$ são os vetores bidimensionais paralelos à superfície e z a coordenada perpendicular à superfície. As autofunções $\varphi_i(z)$ devem ser calculadas através da solução autoconsistente da equação de Schroedinger unidimensional

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \varphi_i}{dz^2} - [eV(z) + E_i] \varphi_i = 0 \quad (5.2)$$

e da equação de Poisson

$$\frac{d^2 V}{dz^2} = -4\pi \rho_i \quad (5.3)$$

onde $\rho_i = -en |\varphi_i(z)|^2$ é a densidade de carga da camada. A solução destas equações deve ser obtida impondo-se, ainda, as seguintes condições de contorno

$$V(z) \rightarrow 0 \quad \text{quando} \quad z \rightarrow \infty \quad (5.4a)$$

e

$$\epsilon \left. \frac{dV}{dz} \right|_{z=0^-} = \left. \frac{dV}{dz} \right|_{z=0^+} \quad (5.4b)$$

sendo $\epsilon = 1,057$ a constante dielétrica do hélio líquido. Contudo, como discutido no capítulo 2, para o sistema de eletrons na superfície de hélio, uma boa aproximação consiste em determinar o espectro de energias destes estados, tratando o sistema como o problema de um eletron.

Nesta aproximação, diversos modelos de potencial para confinamento dos eletrons na direção z são propostos para a determinação das autofunções e autovalores da equação de Schrodinger unidimensional.

- Em nosso caso, com o intuito de incluir ambos os efeitos de largura finita e correlações de muitas partículas nas propriedades deste sistema não degenerado de eletrons, vamos utilizar o método variacional proposto por Stern e Howard⁽⁵⁵⁾ para o sistema de eletrons na camada de inversão de um semicondutor MOSFET.

Consideremos, então, que a função de onda do estado mais baixo de energia pode ser escrita como

$$\varphi(z) = \left(\frac{b^3}{2}\right)^{1/2} z e^{-bz/2} \quad (5.5)$$

onde b é o parâmetro variacional que deve ser determinado minimizando a energia total de uma única partícula. Substituindo a Eq (5.5) na Eq (5.3), podemos resolver a equação de Poisson para o potencial V(z), tal que a energia do estado fundamental será dada por

$$E(b) = \langle \varphi | T + V | \varphi \rangle = \frac{\hbar^2 b^2}{8m} + \frac{33}{8} \frac{\pi n e^2}{b} \quad (5.6)$$

O primeiro termo do lado direito da Eq (5.6) é a contribuição da energia cinética e o segundo é a contribuição da energia eletrostática.

Minimizando a energia, Eq (5.6), encontramos o seguinte valor para o parâmetro b ,

$$b = \left(\frac{33}{8} \frac{k_D}{\lambda_T^2} \right)^{1/3}, \quad (5.7)$$

onde $k_D = 2\pi n e^2 / T$ e $\lambda_T = \hbar / (2mT)^{1/2}$ são o vetor de onda de Debye e o comprimento de onda térmico, correspondentemente.

O valor médio de z é dado por

$$\langle z \rangle = \int_0^\infty |\psi(z)|^2 dz = \frac{3}{b} \quad (5.8)$$

e este valor deve ser considerado como uma medida da espessura da camada eletrônica. Para eletrons na superfície de hélio com uma densidade de 10^7 cm^{-2} , teremos uma largura da ordem de 1400 Å.

Desde que não existe movimento de eletrons na direção perpendicular à superfície, a introdução da largura finita deve modificar somente a interação eletrôn-eletrôn entre dois pontos $\vec{r}$ e $\vec{r}'$ no plano. Esta interação pode ser escrita como ^(5,60)

$$\begin{aligned}
 v(\vec{r}-\vec{r}') = & e^2 \int_0^\infty dz \int_0^\infty dz' \frac{|\psi(z)|^2 |\psi(z')|^2}{\left[|\vec{r}-\vec{r}'|^2 + (z-z')^2 \right]^{3/2}} \\
 & - 4Qe^2 \int_0^\infty dz \int_0^\infty dz' \frac{|\psi(z)|^2 |\psi(z')|^2}{\left[|\vec{r}-\vec{r}'|^2 + (z+z')^2 \right]^{3/2}}, \quad (5.9)
 \end{aligned}$$

onde $Q = (\epsilon-1)/4(\epsilon+1)$ e o segundo termo representa a interação da distribuição de eletrons na superfície com sua carga imagem no hélio líquido.

Tomando a transformada de Fourier da Eq (5.9), temos que a interação entre dois eletrons, com diferença de vetor de onda $\vec{k}$ paralelo à superfície, é dada por

$$v(\vec{k}) = \phi(k)F(k) \quad (5.10)$$

onde

$$\phi(k) = \frac{2\pi e^2}{k} \quad (5.11)$$

é o potencial de Coulomb do sistema de eletrons estritamente bidimensional com carga renormalizada, incluindo o efeito do substrato de hélio líquido, dada por

$$e^{\chi} = \left(\frac{2}{1+\epsilon} \right)^{1/2} e \quad (5.12)$$

e

$$F(k) = (\epsilon+1) \frac{8+9\chi+3\chi^2}{16(1+\chi)^3} - (\epsilon-1) \frac{1}{8(1+\chi)^6} \quad (5.13)$$

com $\chi = k/b$.

No limite de $b \rightarrow \infty$, $F(k)$ tende a um, e obtemos o resultado bidimensional para o potencial. Analisemos, agora, com mais detalhes a interação entre eletrons nos limites de pequenos e grandes valores de r . Para isso, considere mos a transformada inversa da Eq (5.10)

$$v(r) = \frac{1}{2\pi} \int k dk J_0(kr) \phi(k) F(k) \quad (5.14)$$

Para grandes distâncias, $r \gg b^{-1}$, somente valores de k pequeno, $k \ll b$ contribuem para a integral da Eq (5.14), de modo que podemos tomar aproximadamente $F(k)$ igual a 1, obtendo-se, então, $v(r) = e^{\chi^2}/r$. Por outro lado, no limite de $r \ll b^{-1}$, a contribuição fundamental para a integral, virá de k grande, $k \gg b$, de modo que podemos aproximar $F(k)$ por seu termo principal

$$F(k) \cong \frac{1}{1+k/b} \quad (5.15)$$

obtendo para o potencial

$$v(r) \approx b \ln \left(\frac{2}{\delta b r} \right) \quad (5.16)$$

onde δ é a constante de Euler.

Desta forma, a interação entre eletrons no sistema quase-bidimensional, reproduz o resultado do sistema estritamente bidimensional para grandes distâncias e torna-se menos singular para distâncias muito menores que a espessura da camada eletrônica. Esta é a única diferença entre os dois modelos.

5.2 - Aplicação do método autoconsistente

Estamos aptos, agora, para utilizar a aproximação do campo autoconsistente no estudo dos efeitos de correlação do sistema de eletrons na superfície de hélio. Como discutido no capítulo 3, o método fundamenta-se em determinar auto-consistentemente o fator de estrutura $S(\vec{k})$, a função resposta densidade-densidade $\chi(\vec{k}, \omega)$ e o potencial de interação efetivo $\psi(\vec{k})$, através das equações

$$\chi(\vec{k}, \omega) = \frac{\chi_0(\vec{k}, \omega)}{1 - \psi(\vec{k}) \chi_0(\vec{k}, \omega)} \quad (5.17)$$

$$\psi(\vec{k}) = v(\vec{k}) + \frac{1}{n} \int \frac{\vec{k} \cdot \vec{k}'}{k^2} v(\vec{k}') [S(\vec{k} - \vec{k}') - 1] \frac{d\vec{k}'}{(2\pi)^2} \quad (5.18)$$

$$S(\vec{k}) = - \frac{I}{n\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{\omega} \text{Im} \chi(\vec{k}, \omega) \quad , \quad (5.19)$$

onde $v(\vec{k})$ é o potencial de interação eletron-eletron que, no sistema quase-bidimensional, é dado pela Eq (5.10) e $\chi_0(\vec{k}, \omega)$ é a função resposta densidade-densidade do sistema sem interação, dada pela Eq (3.13) .

Usando a relação de Kramers-Krönig, podemos eliminar uma das equações do esquema autoconsistente, resultando

$$S(\vec{k}) = \frac{k}{k + k_D [F(\vec{k}) - H(\vec{k})]} \quad (5.20)$$

e

$$H(\vec{k}) = - \frac{1}{n} \int \frac{\vec{k} \cdot \vec{q}}{k q} F(\vec{q}) [S(\vec{k} - \vec{q}) - 1] \frac{d\vec{q}}{(2\pi)^2} \quad , \quad (5.21)$$

que devem ser resolvidas autoconsistentemente com $F(\vec{x})$ dado pela Eq (5.13).

As correlações deste sistema são descritas pela função correlação dos pares, obtida a partir do fator de estrutura

$$g(r) = 1 + \frac{1}{2\pi n} \int_0^\infty k dk J_0(kr) [S(k) - 1] \quad . \quad (5.22)$$

A densidade de energia de correlação do sistema tem a for-

ma (Eq (3.32)),

$$\bar{E}_c = \frac{n}{4\pi} \int_0^\infty k dk v(k) [S(k) - 1]$$

tal que

$$\frac{\bar{E}_c}{nT} = \frac{e^2}{2T} \int_0^\infty F(k) [S(k) - 1] dk \quad . \quad (5.23)$$

No limite de grandes comprimentos de onda podemos escrever a função $F(k)$ dada pela Eq (5.13) como

$$F(k) = 1 - \Lambda \frac{k}{b} \quad (5.24)$$

com $\Lambda = (63 - 33\epsilon)/16$, e a correção de campo local $H(\vec{k})$ neste limite, pode ser escrita como

$$H(k) = H'(0) k \quad (5.25)$$

onde

$$H'(0) = - \frac{1}{4\pi n} \int_0^\infty \left[F(q) + \frac{dF}{dq} q \right] [S(q) - 1] dq \quad . \quad (5.26)$$

A relação de dispersão do plasma é obtida dos polos da função resposta densidade-densidade, através da equação

$$1 + \frac{k_D}{k} \left[F(k) - H(k) \right] W \left[\frac{\omega}{k} \left(\frac{m}{T} \right)^{1/2} \right] = 0 \quad . \quad (2.27)$$

De modo que no limite de grandes comprimentos de onda, usando as Eqs (5.24) e (5.26), obtemos

$$\omega(k) = \left(\frac{2\pi n e^2 b}{m} \right)^{1/2} \left\{ 1 + \left[\frac{3}{2k_D} - \frac{1}{2} \left(\frac{\Lambda}{b} + H'(0) \right) \right] k \right\} \quad (5.28)$$

De maneira análoga à Eq (3.49), podemos escrever também a compressibilidade isotérmica da regra de soma como

$$\frac{\alpha_T^0}{\alpha_T} = 1 - k_D \left(\frac{\Lambda}{b} + H'(0) \right) \quad (5.29)$$

Convém salientar que os resultados na aproximação RPA são obtidos desprezando-se as correções de campo local, isto é, tomando $\psi(\vec{k}) \equiv v(\vec{k})$

5.3 - Resultados

As Eqs (5.20) e (5.21) foram resolvidas autoconsistentemente, usando o método iterativo descrito na seção 3.2, para vários valores da densidade de elétrons e temperatura, pois agora o parâmetro de plasma α não caracteriza, por si só, o gás quase-bidimensional.

Os fatores de estrutura obtidos autoconsistentemente foram usados para calcular numericamente a função correlação dos pares, a energia de correlação e a relação de dispersão do plasma, dadas pelas Eqs (5.22), (5.23) e (5.28).

Comparando com os resultados do modelo bidimensional, os valores obtidos para $g(r)$ e $\bar{\epsilon}_c$ não apresentam diferenças significativas no intervalo de densidades eletrônicas

de 10^4 a $2 \times 10^6 \text{ cm}^{-2}$. A explicação destes resultados consiste no fato de que a única diferença entre os casos estritamente bidimensional e quase-bidimensional, é devida ao potencial de interação entre os eletrons que, no segundo caso, torna-se menos singular para pequenas distâncias, enquanto reproduz o resultado bidimensional para grandes distâncias, comparadas com a largura da camada. Assim, o único efeito da espessura finita seria aumentar os valores de $g(r)$ para pequenas distâncias, $r \ll b^{-1}$, fazendo com que as correlações de curto alcance tornem-se menos importantes e, no intervalo de densidades considerado, o valor do parâmetro b^{-1} é muito pequeno comparado com a distância média entre os eletrons, de tal modo que a maior contribuição para o acréscimo previsto de $g(r)$ está numa região perto de $r=0$, onde sabemos que a função correlação dos pares se anula.

→ Devemos esperar também que os valores da energia de correlação no modelo quase-bidimensional devam ser menores do que no modelo bidimensional, desde que o sistema é menos correlacionado. Os resultados obtidos confirmam esta hipótese, porém com uma diferença muito pequena, da ordem de uns poucos por cento, na energia de correlação entre os dois modelos.

Vemos, então, que, para o sistema de eletrons na superfície de hélio, o efeito das correlações dos eletrons é muito mais importante do que o efeito da largura finita da camada eletrônica.

Analisemos agora a relação de dispersão do plasma, no limite de grandes comprimentos de onda, Eq (5.28). É importante notar que as correções devido aos efeitos de correlação e largura finita da camada, só aparecem em termos de ordem su

perior a $k^{1/2}$ e que, no limite de $b \rightarrow \infty$, obtemos a relação de dispersão do plasma do modelo bidimensional. Em particular, examinemos o coeficiente do termo $k^{3/2}$ dado por

$$c = \frac{3}{2k_D} - \frac{1}{2} \left(\frac{\Lambda}{b} + H'(0) \right) \quad (5.30)$$

O primeiro termo do lado direito corresponde ao resultado de RPA para o sistema bidimensional e o segundo é a correção da largura finita na aproximação RPA. Os efeitos de correção e largura finita, na aproximação SCFA, estão incorporados no último termo. Os valores numéricos para a correção de campo local $H'(0)$ são menores do que os obtidos no caso bidimensional, desde que, com a introdução da largura da camada, o sistema torna-se menos correlacionado.

Comparemos, então, nosso resultado com o obtido por Beck e Kumar para a dispersão do plasma, que, até o momento, foram os únicos a tratar as correlações e largura finita da camada de eletrons na superfície de hélio. O coeficiente c do termo $k^{3/2}$ obtido por eles é escrito como

$$c_{B-K} = \frac{3}{2k_D} - 0,45 a_0 - \frac{\lambda_T}{4} \quad (5.31)$$

onde $a_0 = \hbar^2/mde^2$ é o raio de Bohr. O primeiro termo é o resultado óbvio do sistema bidimensional na aproximação RPA, o segundo é a correção para espessura finita e o terceiro resulta das correlações eletron-eletron. É evidente que a correção para largura finita não é satisfatória, desde que apresenta um valor constante, independente da densidade dos eletrons. Este resultado é equivalente a introduzir o efei

to da largura, tomando a função de onda $\varphi(x)$ do modelo hidrogênico para o estado de energia mais baixo e usando a aproximação RPA. No nosso cálculo, a correção de RPA aparece diretamente da largura da camada b^{-1} , que depende da densidade dos eletrons. Relativamente aos efeitos de correlação entre eletrons, a diferença entre nossos resultados e os de Beck e Kumar é mais significativa, desde que a aproximação SCFA faz decrescer o coeficiente $k^{3/2}$, através de uma correção de campo local, mesmo a baixas densidades, enquanto que a contribuição destes efeitos à dispersão do plasma, obtida por Beck e Kumar, manifesta-se também através de um termo constante, o comprimento de onda térmico, que somente se torna competitivo com a correção de RPA (λ_D), para densidades bastante altas, onde sabemos que estas aproximações do tipo campo médio não apresentam bons resultados.

Podemos concluir, então, que os efeitos mais importantes para o sistema de eletrons na superfície de hélio, são devidos às correlações de muitos eletrons. A contribuição de uma largura finita para a camada eletrônica não é significativa, desde que as densidades de eletrons, utilizadas nas experiências, são tais que a distância média entre os eletrons tornar-se-à grande, comparada com a espessura da camada de tal modo que a distribuição de carga, na direção perpendicular ao plano da camada não apresenta importância fundamental. Caso contrário ocorre no sistema de eletrons na camada de inversão de semicondutores, onde, devido a altas densidades, a contribuição da largura finita torna-se importante.

Portanto, para descrever as propriedades dos eletrons na superfície de hélio, é suficiente considerar o sistema bidimensional, incluindo o efeito do substrato de hélio na carga renormalizada do eletrôn, dada pela Eq (5.12). Com esta

modificação, todos os resultados obtidos para o plasma clássico bidimensional são totalmente aplicáveis ao sistema de elétrons na superfície de hélio.

CAPÍTULO 6

CONDUTIVIDADE DE ELETRONS NA SUPERFÍCIE DE HÉLIO

Para temperaturas abaixo de 0,7K, o mecanismo de espalhamento de eletrons na superfície de hélio é determinado por colisões com ríplons. Este espalhamento depende fundamentalmente da interação eletrôn-ríplon, apresentada no Capítulo 2.

Neste Capítulo vamos discutir a condutividade dinâmica dos eletrons na região em que o espalhamento por ríplons é dominante. Para isto empregamos o formalismo de função memória, desenvolvida por Götze e Wölfle no estudo da susceptibilidade de spin e condutividade em metais, para determinar a condutividade do tipo Drude no sistema de eletrons sobre hélio.

O tempo de colisão dependente da frequência e da densidade, incorpora os efeitos da blindagem dinâmica dos ríplons pelos eletrons que dependem criticamente das correlações do sistema interagente. Esses efeitos de muitas partículas são tratados em ambas as aproximações, SCFA e RPA. Nosso resultado corrige o tratamento inadequado de Platzman, Simons e Tzoar,⁽⁶¹⁾ que desenvolveram um cálculo análogo do tempo de colisão na aproximação RPA.

Como caso particular obtemos ainda, de um modo bastante simples, o tempo de colisão independente da densidade e frequência, que concorda muito bem com os resultados experimentais de Grimes e Adams.⁽⁵⁶⁾ Este resultado foi também encontrado por Platzman e Beni⁽⁶²⁾ através da solução da equação de Boltzman para um eletrôn.

6.1 - Modelo para a condutividade

Nosso modelo para o sistema eletrôn-riplon é descrito pela Hamiltoniana

$$H = H_0 + H_{int} \quad (6.1)$$

onde H_0 é a Hamiltoniana devido aos elétrons interagindo via potencial de Coulomb,

$$H_0 = \sum_i \frac{p_i^2}{2m} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} v(\vec{r}_i - \vec{r}_j) \quad (6.2)$$

e H_{int} denota a interação eletrôn-riplon, dada pela Eq (2.27)

$$H_{int} = \sum_i \sum_k V_k(z) (b_k^+ + b_{-k}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_i}, \quad (6.3)$$

onde b_k^+ (b_k) é o operador de criação (destruição) de um riplon de momentum $\hbar \vec{k}$, $\vec{p}_i$ e $\vec{r}_i$ são momentum e coordenada do elétron no plano, z é a coordenada perpendicular à superfície e

$$V_k(z) = Q_k \left[\frac{Qe^2}{z^2} - \frac{Qe^2 k}{z} K_1(kz) + e F_1 \right], \quad (6.4)$$

onde

$$Q_k = \left(\frac{\hbar k}{2\rho \omega_k} \right)^{1/2} \quad (6.5)$$

e

$$\omega_k^2 = \left(\frac{\sigma}{\rho} \right) k^3 \quad (6.6)$$

são, respectivamente, a coordenada normal do riplon e a frequência dos riplons; $K_1(kz)$ é a função de Bessel modificada de segunda espécie, $F_{\perp}$ o campo aplicado normal à superfície, ρ e σ a densidade e tensão superficial do hélio líquido, conforme definimos no Capítulo 2. Para simplicidade, consideramos o sistema com área unitária.

As experiências com eletrons na superfície de hélio são realizadas de tal modo que a condição $ka_0 \ll 1$ é sempre satisfeita, onde a_0 é a espessura da camada eletrônica no modelo hidrogênico. Portanto, é suficiente tomar a forma assintótica no limite de grande comprimento de onda para a interação eletrôn-riplon. Podemos então expandir a Eq- (6.4) para obter uma expressão aproximada para o potencial de interação⁽⁶²⁾

$$V_k(z) = Q_k \left[\frac{1}{2} Q e^3 k^2 \left(\frac{1}{2} + \ln 2 - \delta - \ln kz \right) + e F_{\perp} \right] \quad (6.7)$$

onde δ é a constante de Euler.

Quando H_{int} é projetado no estado fundamental do eletrôn, considerado como

$$\psi(z) = \frac{2}{a_0^{3/2}} z e^{-z/a_0} \quad ; \quad a_0 = \frac{\hbar^2}{m Q e^2} \quad (6.8)$$

devemos recolocar $V_k(z)$ por seu valor médio no estado fundamental

$$\bar{V}_k = Q_k \left\{ -\frac{1}{2} Q e^2 k^2 \left[1 + \ln \left(\frac{k a_0}{4} \right) \right] + e F_1 \right\} .$$

(6.9)

No limite de grandes comprimentos de onda as frequências dos riplons, Eq (6.6), são pequenas, comparadas com as frequências do plasma de eletrons, Eq (4.20). Deste modo, podemos considerar o espalhamento de eletrons por riplons como o espalhamento por um potencial randômico estático com intensidade dada por $\bar{V}$, Eq (6.9). Neste caso é conveniente escrever a Hamiltoniana do sistema em segunda quantização na forma da Eq (6.1), onde agora

$$H_0 = \sum_k \epsilon(k) a_k^+ a_k + \frac{1}{2} \sum_{p, p', k} \phi(k) a_{p+k}^+ a_{p-k}^+ a_{p'} a_p \quad (6.10)$$

e

$$H_{int} = \sum_{k, k'} \langle \vec{k} | \bar{V} | \vec{k}' \rangle a_k^+ a_{k'} \quad , \quad (6.11)$$

com a_k^+ (a_k) são os operadores de criação (destruição) do eletrôn de vetor de onda $\vec{k}$ e

$$\phi(\vec{k}) = \frac{2\pi e^2}{k} \left(1 - \delta_{\vec{k}, 0} \right) \quad (6.12)$$

é o potencial de Coulomb entre eletrons, e a interação com o fundo positivo uniforme. Vamos supor, finalmente, que a interação eletrôn-riplon é uma perturbação fraca, comparada com a interação eletrôn-eletrôn.

Tendo construído um modelo de Hamiltoniana para o sistema, podemos, então, encontrar uma expressão para a condutividade dinâmica $\sigma(\omega)$. Em geral, a condutividade dinâmica homogênea pode ser escrita, na teoria da resposta linear, como ⁽⁵²⁾

$$\sigma(\omega) = - \frac{ie^2}{\omega} \left\{ \chi_J(\omega) - \frac{n}{m} \right\} \quad (6.13)$$

onde $\chi_J(\omega)$ é a função resposta corrente-corrente, definida por

$$\chi_J(\omega) \delta_{\alpha\beta} = - \langle\langle J_\alpha; J_\beta \rangle\rangle_\omega \quad \beta, \alpha = 1, 2 \quad (6.14)$$

onde o operador corrente J_α dado por

$$J_\alpha = \sum_{\vec{k}} u_\alpha(\vec{k}) a_{\vec{k}}^+ a_{\vec{k}} \quad (6.15)$$

sendo $u_\alpha(\vec{k}) = \frac{\partial \epsilon(\vec{k})}{\partial \vec{k}}$ a α -ésima componente da velocidade do elétron,

$$\langle\langle J_\alpha; J_\beta \rangle\rangle_\omega = -i \int_0^\infty e^{i\omega t} \langle [J_\alpha(t), J_\beta(0)] \rangle dt \quad (6.16)$$

determina, portanto, o espectro de flutuações de corrente induzidas pela perturbação externa. Aqui, $J_\alpha(t)$ é a representação de Heisenberg do operador corrente J_α e

$\langle [J_\alpha, J_\beta] \rangle$ significa a média termodinâmica do comutador dos dois operadores.

É importante notar que uma teoria de resposta linear desenvolvida desta maneira aplica-se a qualquer uma das funções

resposta de um operador A devido a uma perturbação acoplada a outro operador, B. Em particular, podemos tratar de igual modo a função resposta densidade-densidade discutida nos capítulos anteriores.

A função resposta $\chi_J(\omega)$ é holomorfa em todo o plano complexo, com exceção do eixo real e decresce com $1/\omega$ para ω grande, podendo então ser representada por uma integral espectral do tipo Kramers-Krönig (Eq (3.20)),

$$\chi_J(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega'}{\pi} \frac{\text{Im } \chi_J(\omega')}{\omega' - \omega} \quad . \quad (6.17)$$

Ela obedece às equações de movimento do tipo

$$\omega \ll J_\alpha; J_\beta \gg = \langle [J_\alpha, J_\beta] \rangle + \ll [J_\alpha, H]; J_\beta \gg_\omega \quad (6.18a)$$

$$= \langle [J_\alpha, J_\beta] \rangle - \ll J_\alpha; [J_\beta, H] \gg_\omega \quad . \quad (6.18b)$$

Evidentemente, a função resposta do lado direito de (6.18) é de ordem mais alta do que a inicial, de modo que podemos construir também para ela outra equação do tipo acima, a fim de obter uma cadeia de equações acopladas para estas funções respostas. Esta hierarquia de equações é análoga àquela encontrada no Capítulo 3 para as funções distribuição clássicas.

A função resposta $\chi_J(\omega)$ tem, ainda, as seguintes propriedades

CAPÍTULO 6

CONDUTIVIDADE DE ELETRONS NA SUPERFÍCIE DE HÉLIO

Para temperaturas abaixo de 0,7K, o mecanismo de espalhamento de eletrons na superfície de hélio é determinado por colisões com ríplons. Este espalhamento depende fundamentalmente da interação eletrôn-riplon, apresentada no Capítulo 2.

Neste Capítulo vamos discutir a condutividade dinâmica dos eletrons na região em que o espalhamento por ríplons é dominante. Para isto empregamos o formalismo de função memória, desenvolvida por Götze e Wölfle no estudo da susceptibilidade de spin e condutividade em metais, para determinar a condutividade do tipo Drude no sistema de eletrons sobre hélio.

O tempo de colisão dependente da frequência e da densidade, incorpora os efeitos da blindagem dinâmica dos ríplons pelos eletrons que dependem criticamente das correlações do sistema interagente. Esses efeitos de muitas partículas são tratados em ambas as aproximações, SCFA e RPA. Nosso resultado corrige o tratamento inadequado de Platzman, Simons e Tzoar,⁽⁶¹⁾ que desenvolveram um cálculo análogo do tempo de colisão na aproximação RPA.

Como caso particular obtemos ainda, de um modo bastante simples, o tempo de colisão independente da densidade e frequência, que concorda muito bem com os resultados experimentais de Grimes e Adams.⁽⁵⁶⁾ Este resultado foi também encontrado por Platzman e Beni⁽⁶²⁾ através da solução da equação de Boltzman para um eletrôn.

$$\chi_J(\omega) = \frac{\chi_J(0) M(\omega)}{\omega + M(\omega)} \quad (6.21)$$

ou

$$M(\omega) = \frac{\omega \chi_J(\omega)}{\chi_J(0) - \chi_J(\omega)} \quad (6.22)$$

A função $M(\omega)$ assim definida, também é holomorfa para to do ω não real, desde que a desigualdade

$$\chi_J(\omega) \neq \chi_J(0) \quad \text{para} \quad \text{Im } \omega \neq 0 \quad (6.23)$$

pode ser facilmente demonstrada a partir das propriedades de $\chi_J(\omega)$. Em virtude de (6.19), temos que $M(\omega)$ de - cresce assintoticamente com $1/\omega$ e satisfaz às relações de simetria

$$M^*(\omega) = M(\omega^*) \quad (6.24a)$$

$$M(\omega) = -M(-\omega) \quad (6.24b)$$

Do mesmo modo que $\chi_J(\omega)$ pode ser representada por uma integral espectral do tipo da relação (6.17), as partes real e imaginária de $M(\omega)$ satisfazem

$$\text{Re } M(\omega) = -\text{Re } M(-\omega) \quad (6.25a)$$

$$\text{Im } M(\omega) = \text{Im } M(-\omega) \quad (6.25b)$$

A partir das Eq (6.13), (6.20) e (6.21) podemos, finalmente, escrever a expressão para a condutividade dinâmica em termos da função memória $M(\omega)$

$$\sigma(\omega) = \frac{in e^2}{m} \left[\frac{1}{\omega + M(\omega)} \right] \quad (6.26)$$

Temos, assim, um resultado para a condutividade que, em princípio, é válido para todo intervalo de frequências, sem restrição tanto para baixas frequências (regime hidrodinâmico), quanto para altas frequências. As vantagens deste formalismo tem sido apontadas por Götze e Wölfle no estudo da suscetibilidade de spin e condutividade em metais, em comparação com outros métodos para determinação de funções resposta corrente-corrente, tais como, a quebra da hierarquia das equações de movimento, somas infinitas de diagramas ou resolução da equação de transporte do tipo Boltzmann. Além disso, para o nosso sistema, o uso da função memória no cálculo da condutividade, consitui-se em um método simples e elegante. No entanto, veremos que o regime de frequência onde $\sigma(\omega)$ é válido, dependerá fundamentalmente da aproximação usada para $M(\omega)$.

Para apresentar nosso resultado de uma maneira mais convencional, identificamos o efeito do espalhamento eletron-riplon, com a forma do tipo Drude para a condutividade, ou seja,

$$\sigma = \frac{ine^2}{m^*} \frac{1}{\omega + i/\gamma} \quad (6.27)$$

Deste modo, a parte real da função memória $M(\omega)$ pode simplesmente ser relacionada com uma massa efetiva dependente da frequência, enquanto que a parte imaginária está relacionada com o tempo de colisão. Tendo em vista que experiências de ressonância ciclotrônica^(16,66) tem demonstrado que a variação na massa do eletrôn é insignificante para eletrons na superfície de hélio, de modo que $m^* = m$, a massa do eletrôn livre, vamos nos limitar ao estudo do efeito colisional. Podemos escrever, então, o tempo de colisão dependente da frequência como

$$\frac{1}{\gamma(\omega)} = \text{Im } M(\omega) \quad (6.28)$$

É evidente que, tomando o limite estático da função memória, obtemos o tempo de colisão independente da frequência. É importante frisar que podemos determinar a condutividade do tipo Drude usando a equação de Boltzmann de um eletrôn e aproximando a integral de colisão por um tempo de colisão fenomenológico. Porém esta aproximação torna-se impossível se desejamos um tempo de colisão dependente da frequência.

6.2 - Aproximação para função memória

A determinação da função memória é, evidentemente, um problema de muitas partículas e, portanto, só pode ser feita de um modo aproximado. Então, a questão essencial consiste em

encontrar uma expressão para a função memória $M(\omega)$ dada pela Eq (6.22).

Desprezando a interação eletron-riplon, a corrente total é uma quantidade conservada, ou seja,

$$[J, H_0] = 0$$

e, neste caso, ambas as funções $\chi_J(\omega)$ e $M(\omega)$ anulam-se. Usando o fato de que a interação eletron-riplon constitui-se numa perturbação fraca no sistema, podemos expandir a Eq (6.21) em primeira ordem de $|\bar{V}|^2$, tal que

$$\omega \chi_J(\omega) = \chi_J(0) M(\omega) + O(|\bar{V}|^3) \quad (6.29)$$

Esta é a aproximação básica para a função memória que é válida quando

$$\frac{M(\omega)}{\omega} \ll 1 \quad (6.30)$$

isto é, no regime de alta frequência ($\omega \gg 1$). Para eletrons sobre hélio líquido, em temperaturas da ordem de 0,5 K, as frequências devem estar acima de 100 MHz.

Da equação de movimento, Eq (6.18a), temos

$$\omega \langle\langle J_1; J_1 \rangle\rangle_\omega = \langle\langle Y; J_1 \rangle\rangle_\omega \quad (6.31)$$

onde

$$Y = [J_1, H_{int}] = \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} \langle \vec{k} | \bar{V} | \vec{k}' \rangle [u_1(\vec{k}) - u_1(\vec{k}')] a_{\vec{k}}^+ a_{\vec{k}'}, \quad (6.32)$$

e da Eq (6.18b)

$$\omega \langle\langle Y; J_1 \rangle\rangle_\omega = \langle [Y, J_1] \rangle - \langle\langle Y; Y \rangle\rangle_\omega \quad (6.33)$$

Fazendo $\omega=0$ na Eq (6.33) teremos

$$\langle\langle Y; Y \rangle\rangle_{\omega=0} = \langle [Y, J_1] \rangle$$

de modo que

$$\langle\langle Y; J_1 \rangle\rangle = \frac{1}{\omega} \left[\langle\langle Y; Y \rangle\rangle_{\omega=0} - \langle\langle Y; Y \rangle\rangle_\omega \right] \quad (6.34)$$

Através das Eqs (6.29), (6.34) e (6.14) obtemos a seguinte expressão para $M(\omega)$ em primeira ordem no acoplamento elétron-riplon

$$M(\omega) = \frac{m}{n\omega} \left[\langle\langle Y; Y \rangle\rangle_\omega - \langle\langle Y; Y \rangle\rangle_{\omega=0} \right] \quad (6.35)$$

Devemos, então, determinar a função correlação $\langle\langle Y; Y \rangle\rangle$ do sistema de elétrons na presença de riplons que, por hipótese, não são correlacionados.

A Eq (6.32) nos dá

$$\langle\langle Y; Y \rangle\rangle_{\omega} = - \sum_{\vec{k}} \frac{k^3}{m^2} N_k |\bar{V}_k|^2 \chi(\vec{k}, \omega) \quad (6.36)$$

onde $\chi(\vec{k}, \omega)$ é a função resposta densidade-densidade do sistema com interação,

$$\chi(\vec{k}, \omega) = \langle\langle \rho_{\vec{k}}; \rho_{\vec{k}}^* \rangle\rangle \quad (6.37)$$

onde $\rho_{\vec{k}}$ é o operador densidade

$$\rho_{\vec{k}} = \sum_{\vec{p}} a_{\vec{p}+\vec{k}}^+ a_{\vec{p}} \quad (6.38)$$

e N_k é o número de ríplons no estado k

$$N_k = \frac{1}{e^{\hbar\omega_k/T} - 1} \approx \frac{T}{\hbar\omega_k} \gg 1 \quad (6.39)$$

Então, a função memória $M(\omega)$, Eq (6.35), pode ser escrita como

$$M(\omega) = - \frac{1}{2\pi n m} \int_0^{\infty} \left(\frac{T}{\hbar\omega_k} \right) |\bar{V}_k|^2 k^3 \frac{\chi(\vec{k}, 0) - \chi(\vec{k}, \omega)}{\omega} dk \quad (6.40)$$

→ É conveniente lembrar que podemos relacionar a função memória também com a função resposta dielétrica $\epsilon(\vec{k}, \omega)$ através da expressão

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

É importante notar, ainda, que a função resposta densidade-densidade $\chi(\vec{k}, \omega)$ ou a função resposta dielétrica $\epsilon(\vec{k}, \omega)$ não contém riplons, que são considerados, neste formalismo, somente como um fator multiplicativo da função dielétrica $\epsilon(\vec{k}, \omega)$. Portanto nossa aproximação consistirá de uma correção de acoplamento fraco (tipo aproximação Born) da condutividade do sistema de eletrons. Ou seja, a blindagem dinâmica do potencial dos riplons, devido a todos os eletrons, está incluída através do termo $|\bar{V}_k|^2 / \epsilon(\vec{k}, \omega)$ na equação (6.40).

6.3 - Tempo de colisão independente da densidade (caso livre)

Como primeira aplicação do formalismo desenvolvido nas seções anteriores, vamos calcular o tempo de colisão independente da densidade de eletrons e no limite de baixas frequências. Para isto vamos considerar o sistema de eletrons sem interação, sendo espalhado por riplons. Esta hipótese corresponde a tomar, na expressão da função memória, a função resposta densidade-densidade do sistema livre, sem incluir, portanto, os efeitos de uma blindagem efetiva dos riplons pelos eletrons. Assim, usando as Eq (6.28) e (6.40), temos

$$\frac{1}{\gamma(\omega)} = - \frac{1}{2\pi n m} \int_0^\infty \left(\frac{\tau}{\tau + \omega_k} \right) |\bar{V}_k|^2 k^3 \frac{\text{Im} \chi_0(\vec{k}, \omega)}{\omega} dk \quad . \quad (6.41)$$

Desde que nosso sistema é clássico, gostaríamos de tomar a expressão para a função resposta densidade-densidade clássica

ca, como dada pela Eq (3.13). No entanto, o limite estritamente clássico da parte imaginária de $\chi_0(\vec{k}, \omega)$ conduz a uma integral divergente na Eq (6.41). Esta situação é muito comum na discussão de plasmas clássicos⁽⁶⁷⁾, onde, em determinadas circunstâncias, podemos tomar expressões semi-clássicas, no sentido de que contém alguns termos dependentes de $\hbar$, evitando as divergências em certos resultados. Um exemplo anterior foi o da divergência na densidade de carga induzida na origem, discutida no Capítulo 4. Portanto, a integral da expressão (6.41) só converge devido à introdução de efeitos quânticos no sistema. Tendo em vista estas considerações, tomemos a expressão da parte imaginária da função resposta densidade-densidade do sistema sem interação no limite clássico, como dada no apêndice

$$\text{Im } \chi_0(\vec{k}, \omega) = -\frac{n}{T} \left(\frac{\pi m}{2T} \right)^{1/2} \frac{\omega}{k} \exp \left[-\frac{m\omega^2}{2Tk^2} - \frac{\hbar^2 k^2}{8mT} \right] \quad (6.42)$$

Substituindo as Eq (6.9), (6.42) na Eq (6.41), obtemos o tempo de colisão para baixas frequências (limite estático),

$$\frac{1}{\gamma} = \frac{1}{4\sigma\hbar} \frac{1}{\pi^{1/2}k_T} \int_0^\infty \left[(eF_L) - \frac{Qe^2k^2}{2} \left(1 + \ln \frac{k a_0}{4} \right) \right]^2 \times \\ \times \exp \left(-\frac{k^2}{4k_T^2} \right) \quad (6.43)$$

onde $k_T = (2mT)^{1/2}/\hbar$ é o vetor de onda térmico.

Depois de efetuarmos as integrações, podemos escrever o tempo de colisão dos eletrons independentes da densidade e da

frequência

$$\frac{1}{\gamma} = \frac{1}{4\pi\hbar} \left\{ (eF_1)^2 + 2A_1 \frac{T}{a_0} (eF_1) + A_2^2 \frac{T^2}{a_0^2} \right\}, \quad (6.44)$$

onde

$$A_1 = 3\ln 2 - 4 + \delta + \ln \left(\frac{Qe^2}{a_0 T} \right) \quad (6.45a)$$

$$A_2 = \frac{3\pi^2}{2} + \frac{160}{3} - 84\ln 2 + 27(\ln 2)^2 + \delta(18\ln 2 - 28) + 3\delta^2 - (28 - 18\ln 2 - 6\delta) \ln \left(\frac{Qe^2}{a_0 T} \right) + 3 \left[\ln \left(\frac{Qe^2}{a_0 T} \right) \right]^2 \quad (6.45b)$$

sendo δ a constante de Euler.

A expressão (6.44) para o tempo de colisão coincide com o resultado de Platzman e Beni ^[62], que resolveram a equação de transporte de Boltzmann para a função distribuição perturbada de uma partícula, aproximando a integral de colisão por uma frequência de colisão simples $1/\gamma$, de modo a obter a condutividade de Drude do sistema. Vemos, então, que particularmente, obtemos de um modo bastante simples o tempo de colisão, independente da densidade e da frequência, para a expressão de Drude da condutividade, como uma aproximação da função memória no limite de blindagem nula. Como esperado, a hipótese de considerar no nosso formalismo o sistema de eletrons sem interação, corresponde a obter o resultado da equação de transporte na teoria de um eletrôn.

Seria interessante agora comparar o resultado da Eq(6.44)

com o resultado experimental. Grimes e Adams⁽⁵⁶⁾ verificaram experimentalmente para eletrons na superfície de hélio, a existência de plasmons de grandes comprimentos de onda e que o tempo de vida do plasmon era determinado pela espalhamento por ríplons. Eles mostraram que o tempo de vida que aparece na curva de Drude da condutividade, pode ser determinado empiricamente por uma função da forma

$$\frac{1}{\gamma} = \frac{1}{c} [eF_{\perp} + eF_0]^2 \quad (6.46)$$

onde

$$c \cong 4\sigma\hbar \quad (6.47a)$$

e

$$F_0 \cong (230 \pm 12) \text{ V/cm} \quad (6.47b)$$

para temperatura de 0,5K.

Desde que, para campos elétricos arbitrários, a expressão (6.44) não é um quadrado perfeito, então, a forma quadrática da expressão (6.46) deve ser tida como uma aproximação. Platzman e Beni apontaram ainda que, numericamente, A_1 é aproximadamente igual a A_2 e que o campo F_0 , como dado pela Eq (6.44), cresce linearmente com a temperatura. A 0,5 K, o campo efetivo encontrado foi 233 V/cm, em boa concordância com o valor observado. Este fato demonstra que o potencial $|\bar{V}_h|$, como dado pela Eq (6.4), descreve muito bem a interação eletrón-riplón..

Em particular, para campos elétricos fortes, isto é, $F_{\perp} \gg F_0$ podemos escrever o tempo colisão dos eletrons, independen

te da densidade e da frequência, como

$$\frac{1}{\gamma_0} = \frac{e^2 F_1^2}{4\hbar\sigma} \quad (6.48)$$

ou, alternativamente, a mobilidade é escrita como

$$\mu = \frac{e\tau}{m} = \frac{4\sigma\hbar}{meF_1^2} \quad (6.49)$$

As expressões acima são válidas na região onde a interação com riplons domina o mecanismo de espalhamento de eletrons na superfície de hélio.

6.4 - Tempo de colisão dependente da densidade e da frequência

Embora a consideração do sistema de eletrons livres tenha apresentado bons resultados quantitativos para a condutividade de eletrons na superfície de hélio, esperamos encontrar neste sistema efeitos significativos que dependem da densidade e que surgem devido à blindagem dos riplons pelos eletrons. A natureza destes efeitos deve depender fundamentalmente das correlações de curto alcance do sistema interagente, com as quais temos nos preocupado ao longo deste trabalho. Além do mais, existe alguma evidência experimental da forte dependência da mobilidade μ com a densidade no regime de espalhamento dominado pelos riplons. Bridges e McGill⁽⁶⁸⁾ encontraram para $n \approx 10^4 \text{ cm}^{-2}$ o valor de $\mu \approx 4 \times 10^5 \text{ cm}^2/\text{V-seg}$; Rybalko et al.⁽⁶⁹⁾ para $n \approx 3 \times 10^5$, obtiveram $\mu \approx 2 \times 10^6$ e Grimes e Adams⁽⁵⁶⁾ para $n \approx 3 \times 10^7$ determinaram $\mu \approx 1.3 \times 10^7$. Os dois primeiros resultados foram obtidos com medidas dc, enquanto que o último foi encontrado a partir da largura de

linha do plasmon.

Então, vamos retomar a expressão para o tempo de colisão dependente da densidade e frequência, Eq (6.28), com a função memória determinada pela Eq (6.40). Por simplicidade, consideremos a interação eletrôn-riplon com seu termo dominante para campos elétricos fortes,

$$\bar{V}_k = Q_k (e F_{\perp}) \quad . \quad (6.50)$$

Temos, então,

$$\frac{1}{\gamma(\omega)} = - \frac{\hbar}{\gamma_0} \frac{T}{\pi n m \omega} \int_0^{\infty} k \operatorname{Im} \chi(\vec{k}, \omega) dk \quad (6.51a)$$

$$= - \frac{\hbar}{\gamma_0 m} \int_0^{\infty} k S(\vec{k}, \omega) dk \quad , \quad (6.51b)$$

onde a última expressão é obtida pelo teorema de flutuação-dissipação, que relaciona a parte imaginária da função resposta densidade-densidade $\chi(\vec{k}, \omega)$ com o fator de estrutura dinâmico $S(\vec{k}, \omega)$. Aqui, γ_0 é dado pela Eq (6.48).

Na aproximação do campo autoconsistente, temos

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

No entanto, para sistemas carregados, podemos escrever a parte imaginária da função resposta densidade-densidade ⁽⁵²⁾, como

$$\text{Im } \chi(\vec{k}, \omega) = \frac{\text{Im } \chi_{sc}(\vec{k}, \omega)}{|\epsilon(\vec{k}, \omega)|^2}, \quad (6.52)$$

onde $\chi_{sc}(\vec{k}, \omega)$ é a função resposta densidade-densidade blindada (polarizabilidade). Nas aproximações de campo médio do tipo de RPA e SCFA, a função resposta blindada é aproximada pela função resposta do sistema sem interação. Desta forma,

$$\frac{1}{\gamma(\omega)} = -\frac{\hbar}{\gamma_0} \frac{T}{\pi n m \omega} \int_0^\infty k dk \frac{\text{Im } \chi_0(\vec{k}, \omega)}{|\epsilon(\vec{k}, \omega)|^2}. \quad (6.53)$$

Desde que esta integral diverge no limite estritamente clássico, tendo em vista que quando $k \rightarrow \infty$, $\epsilon(\vec{k}, \omega) \rightarrow 1$, devemos, então, tomar o limite clássico de $\text{Im } \chi_0(\vec{k}, \omega)$, Eq - (6.42).

De outra forma, analisando a Eq (6.51b), temos que o fator de estrutura dinâmico $S'(\vec{k}, \omega)$ tende, no limite de $\vec{k} \rightarrow \infty$ para $S_0(\vec{k}, \omega)$, fator de estrutura do sistema livre dado pela Eq (4.25), tal que a integral diverge.

No limite de baixas frequências, o tempo de colisão depende da densidade dos eletrons é dado por

$$\frac{\gamma_0}{\gamma} = \frac{1}{k_T \pi^{1/2}} \int_0^\infty \frac{\exp(-k^2/4k_T^2)}{\left[1 + \frac{k_D}{k - g(\epsilon)k_D} \right]^2} dk, \quad (6.54)$$

onde $k_D = 2\pi n e^2 / T$ é o vetor de onda de Debye. Novamente, obtemos a aproximação RPA desprezando a correção de campo local, isto é, tomando $Q(k) \approx 0$. É importante notar que, no limite de blindagem nula, obtemos o tempo de colisão independente da densidade γ_0 .

A figura 10 apresenta os resultados do tempo de colisão como função da densidade e, para comparação, apresentamos também os resultados na aproximação RPA. Notemos que o efeito das correlações de curto alcance, consideradas na aproximação SCFA, faz decrescer o tempo de colisão à medida que a densidade aumenta. Anteriormente Platzman et al.⁽⁶¹⁾ desenvolveram um formalismo análogo para tempo de colisão na aproximação RPA, porém o tratamento inadequado dos efeitos quânticos, que devem ser introduzidos no sistema clássico, acarretou diferenças numéricas da ordem de 30% nos resultados para o tempo de colisão, principalmente no limite de blindagem nula.

No limite de baixas densidades, α ou $T \ll 1$, ambas as aproximações SCFA e RPA apresentam os mesmos resultados. Neste limite podemos obter uma expressão analítica aproximada para γ . A partir do tempo de colisão na aproximação RPA, que pode ser escrito como

$$\frac{\gamma_0}{\gamma} = \frac{1}{\pi^{1/2}} \int_0^\infty \frac{x^2 e^{-x^2/4}}{(x + k_s)^2} dx \quad (6.55)$$

onde $k_s = k_D/k_T$, podemos expandir o integrando para k_s pequeno e para evitar divergências aproximamos a expressão tomando como limite inferior k_D e superior k_T . O resultado final é, então,

$$\frac{\gamma_0}{\gamma} = 1 + \frac{2}{\pi^{1/2}} k_s \ln k_s \quad (6.56)$$

Evidentemente, para altas densidades eletrônicas tais que o comprimento de blindagem λ_D seja bem menor que o espaçamento a entre as partículas ($k_s a \gg 1$), estas aproximações de campo médio devem apresentar resultados imprecisos.

O tempo de colisão dependente da frequência, foi também determinado numericamente a partir das Eq (6.51a) e (6.51b). O resultado é que $\gamma(\omega)$ permanece aproximadamente constante para frequências de interesse e vai a zero somente para frequências muito altas. Platzman et al. encontraram na região de altas densidades, um aumento surpreendente em $1/\gamma$ (resistividade) para $\omega \cong 2\omega_p [(\pi n)^{1/2}]$, onde $\omega_p(\vec{k})$ é a dispersão do plasmon dado pela Eq (4.20). Tal aumento seria explicado pela contribuição das excitações coletivas (polos da função resposta) ao inverso do tempo de colisão. No entanto, eles usaram a aproximação RPA que, sabidamente, deve falhar para estas densidades elevadas. Muito recentemente, Totsuji⁽⁷⁰⁾, usando simulações numéricas para este sistema, mostrou que, para altas densidades, ($T = 50$), as flutuações na densidade na região de $k \ll k_D = 2\pi(\pi n)^{1/2}$ contribuem do mesmo modo que as excitações coletivas, de modo que o tempo de colisão deve realmente ser independente da frequência.

CAPÍTULO 7

CONCLUSÕES

Neste trabalho mostramos que a aproximação do campo auto-consistente (SCFA), incorporando os efeitos das correlações de curto alcance, descreve satisfatoriamente as propriedades estáticas e dinâmicas do líquido clássico de elétrons bidimensional, neutralizados por um fundo positivo e uniforme.

Obtivemos resultados numéricos para a função correlação dos pares, o fator de estrutura estático, a compressibilidade isotérmica, a energia de correlação e as demais quantidades termodinâmicas, tais como o calor específico, a energia livre de Helmholtz, que são determinadas a partir da energia de correlação. Nossos resultados para a função correlação dos pares, $g(r)$, ajustam-se bem à expressão aproximada de Totsuji para valores muito pequenos do parâmetro de plasma α e coincidem com os resultados de simulação numérica baseados no método de Monte Carlo. No intervalo $14 < \alpha < 15$, $g(r)$ começa a exibir pequenas oscilações, que são interpretadas como o início da ordem de curto alcance. Os valores da energia de correlação reproduzem os resultados obtidos através de cálculos baseados na expansão do parâmetro de plasma para $\alpha \ll 1$, e concordam muito bem com os valores experimentais da simulação numérica. É importante frisar, portanto, que o tratamento das correlações entre partículas na aproximação SCFA é bastante satisfatório, tendo em vista que a aproximação RPA, comumente utilizada na teoria de muitos corpos, é inadequada na descrição do plasma bidimensional. Este insucesso de RPA manifesta-se principalmente na divergência da equação de estado do plasma.

Os resultados obtidos para a densidade de carga induzida em torno de uma impureza fixa, positivamente carregada, apresentam significativas diferenças com os resultados obtidos em RPA. Para grandes distâncias da impureza, a densidade induzida é dada por uma expressão algébrica de longo alcance, ao contrário do fator exponencial de Debye-Hückel do plasma tridimensional. Nesta região, a expressão para a densidade de carga é formalmente a mesma obtida em RPA, porém com uma constante de blindagem renormalizada pelos efeitos de correlações de curto alcance. Determinamos ainda o parâmetro de plasma crítico onde o sistema de eletrons com o fundo positivo uniforme torna-se instável, tanto elétrica quanto termodinamicamente.

Nossos resultados para a relação de dispersão do plasma corrigem significativamente as expressões obtidas anteriormente por Fetter e Beck e Kumar no limite de grandes comprimentos de onda. É importante notar que nosso cálculo da dispersão do plasma inclui, pela primeira vez, as correlações de curto alcance deste sistema clássico. Determinamos ainda o fator de estrutura dinâmico, que concorda com o resultado de RPA somente para baixas densidades. Nossos resultados são condizentes com o comportamento previsto do espectro de flutuações de densidade no sistema em ambos os limites de $k \ll k_D$ e $k \gg k_D$.

A aproximação de SCFA foi também aplicada no estudo de eletrons na superfície de hélio, incluindo o efeito de uma espessura finita para a camada eletrônica no sistema bidimensional. Para densidades eletrônicas entre 10^4 a 10^6 cm^{-2} não encontramos diferenças significativas entre os resultados para a função correlação dos pares e energia de correlação nos casos do sistema quase e estritamente bidimensional. Isto ocorre porque, para estas densidades, a distância mē-

dia entre os eletrons é muito maior do que a espessura da camada, de modo que a distribuição de carga na direção perpendicular à superfície não influencia fundamentalmente a interação dos eletrons no plano. Assim, os efeitos de correlação entre os eletrons sobre hélio são muito mais importantes do que os devidos a uma espessura finita da camada. Concluimos, então, que os movimentos eletrônicos no plano e na direção perpendicular podem ser realmente desacoplados. Nosso resultado para a dispersão do plasmon melhora consideravelmente o resultado obtido por Beck e Kumar, onde os efeitos de correlação só aparecem na região de altas densidades e a espessura da camada independe da densidade eletrônica.

A condutividade dinâmica dos eletrons na superfície de hélio no regime limitado pelo espalhamento por ríplons foi determinada usando-se o formalismo de função memória. A expressão para o tempo de colisão do espalhamento eletrôn-riplon inclui a blindagem dos ríplons pelos eletrons. Apresentamos os efeitos de muitos corpos no tempo de colisão em ambas as aproximações RPA e SCFA. O nosso cálculo corrige o tratamento dado por Platzman et al. aos efeitos quânticos que foram introduzidos no sistema clássico de um modo inadequado. Como caso particular, obtivemos em nosso formalismo o tempo de colisão para o sistema sem interação, que coincide com resultados experimentais.

Finalmente, sugerimos alguns problemas nesta área:

- aplicação da teoria do "acoplamento de modos"⁽⁷¹⁾ de líquidos clássicos para investigar as propriedades dinâmicas do plasma bidimensional de uma componente para altas densidades;

- uso de um potencial do tipo randômico para tratar o espalhamento eletrôn-átomo de vapor e estudar, dentre

outros, o seu efeito na largura da linha das transições entre estados ligados de eletrôn na superfície de hélio,⁽⁷²⁾

determinação detalhada do espectro de estados ligados para campos fortes, para comparar com recentes experiências espectroscópicas nesta região⁽⁷³⁾;

introdução do movimento aleatório das partículas na função resposta densidade-densidade do gás livre para uso na função resposta das teorias de campo médio, tipo RPA e SCFA.

APÊNDICE

FUNÇÃO RESPOSTA DENSIDADE-DENSIDADE PARA O
SISTEMA BIDIMENSIONAL DE ELETRONS LIVRES

Tomando a transformada de Fourier da equação de movimento, Eq (3.7), obtemos diretamente

$$\chi_0(\vec{k}, \omega) = \int d\vec{p} \frac{\vec{k} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{p}} f_0(\vec{p})}{\frac{\vec{p} \cdot \vec{k}}{m} - \omega - i\eta} \quad (\text{A.1})$$

onde $f_0(\vec{p})$ é a função distribuição clássica de equilíbrio dada por

$$f_0(\vec{p}) = \frac{n}{2\pi m T} e^{-\frac{p^2}{2mT}} \quad (\text{A.2})$$

Como o sistema é isotrópico, podemos escolher arbitrariamente o eixo x na direção do vetor de onda. Assim

$$\vec{k} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{p}} f_0(p) = k \frac{\partial}{\partial p_x} f_0(p)$$

Integrando na variável p_y , obtemos a seguinte expressão para a função resposta

$$\chi_0(\vec{k}, \omega) = -\frac{n}{T} W \left[\frac{\omega}{k} \left(\frac{m}{T} \right)^{1/2} \right] \quad (\text{A.3})$$

onde

$$W(z) = \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{y e^{-y^2/2}}{y - z - i\eta} dy \quad (A.4)$$

Usando a identidade formal

$$\frac{1}{y - z \pm i\eta} = \mathcal{P} \frac{1}{y - z} \mp i\pi \delta(y - z) \quad (A.5)$$

podemos escrever as partes real e imaginária da função W , como

$$\text{Re } W(z) = 1 - z R(z) \quad (A.6)$$

$$\text{Im } W(z) = \left(\frac{\pi}{2}\right)^{1/2} z e^{-z^2/2} \quad (A.7)$$

onde

$$R(z) = \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} \mathcal{P} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-y^2/2}}{z - y} dy. \quad (A.8)$$

é a parte real da função dispersão do plasma⁽⁷⁴⁾. Multiplicando o integrando por $(z+y)/(z+y)$ obtemos

$$R(z) = \left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/2} z \mathcal{P} \int_0^{\infty} \frac{e^{-y^2/2}}{z^2 - y^2} dy \quad (A.9)$$

que é uma função ímpar. Uma expansão direta do integrando para grande z nos dá o comportamento assintótico

$$R(z) = \frac{1}{z} + \frac{1}{z^3} + \frac{3}{z^5} + \dots \quad z \gg 1 \quad (\text{A.10})$$

Diferenciando a Eq (A.8) com relação a z , e integrando por partes, obtemos a seguinte equação diferencial

$$\frac{dR}{dz} = 1 - z R(z) \quad (\text{A.11})$$

que, com $R(0) = 0$, possui a solução

$$R(z) = e^{-z^2/2} \int_0^z e^{y^2/2} dy \quad (\text{A.12})$$

Uma expansão da função $R(z)$ na Eq (A.12) para z pequeno, dá

$$R(z) = z - \frac{z^3}{3} + \frac{z^5}{15} - \dots \quad z \ll 1 \quad (\text{A.13})$$

É conveniente também obter a expressão da função resposta quântica do gás livre no limite de altas temperaturas, que é usada para evitar certas divergências em plasmas estritamente clássicos.

A função resposta densidade-densidade no caso quântico é de finida como ⁽⁵⁹⁾

$$\chi_0(\vec{k}, \omega) = -2 \int \frac{d\vec{p}}{(2\pi)^3} \frac{f_0(\vec{p} + \vec{k}) - f_0(\vec{p})}{\hbar\omega + i\eta - [\epsilon_0(\vec{p} + \vec{k}) - \epsilon_0(\vec{p})]} \quad (\text{A.14})$$

onde $f_0(\vec{p})$ é a função distribuição quântica dos eletrons dada por

$$f_0(\vec{p}) = \frac{1}{e^{[\epsilon_0(\vec{p}) - \mu]/T} + 1} \quad (\text{A.15})$$

e

$$\epsilon_0(\vec{p}) = \frac{\hbar^2 p^2}{2m} \quad (\text{A.16})$$

Fazendo uma simples mudança de variáveis, podemos escrever a Eq (A.14) como

$$\chi_0(\vec{k}, \omega) = -2 \int \frac{d\vec{p}}{(2\pi)^3} f_0(\vec{p} + \vec{k}/2) \left[\frac{1}{\hbar\omega + i\eta - \frac{\hbar^2 \vec{p} \cdot \vec{k}}{m}} - \frac{1}{\hbar\omega + i\eta + \frac{\hbar^2 \vec{p} \cdot \vec{k}}{m}} \right] \quad (\text{A.17})$$

Esta expressão é válida para todas as temperaturas e reproduz o resultado de temperatura zero (gás degenerado) encontrada por Stern⁽⁷⁵⁾. A integração total de (A.17) seria bastante complicada, mas a expressão torna-se bastante simples no limite de altas temperaturas, onde a função distribuição é gaussiana

$$f_0(p) = e^{\mu/T} e^{-\frac{\hbar^2 p^2}{2mT}} = \frac{\pi n \hbar^2}{mT} e^{-\frac{\hbar^2 p^2}{2mT}} \quad (\text{A.18})$$

Fazendo as integrações em coordenadas polares $\vec{p} = \vec{p}_\perp + \hat{k} p_\parallel$ com $\hat{k}$ sendo o eixo polar, e usando a identidade (A.5) pode

mos separar as partes real e imaginária da função resposta densidade-densidade

$$\text{Re } \chi_0(\vec{k}, \omega) = - \frac{n}{\hbar k} \left(\frac{m}{T} \right)^{1/2} \left\{ \mathcal{R} \left[\left(\frac{m}{T} \right)^{1/2} \left(\frac{\omega}{k} + \frac{\hbar k}{2m} \right) \right] - \mathcal{R} \left[\left(\frac{m}{T} \right)^{1/2} \left(\frac{\omega}{k} - \frac{\hbar k}{2m} \right) \right] \right\} \quad (\text{A.19})$$

$$\text{Im } \chi_0(\vec{k}, \omega) = - \frac{n}{T} \frac{\omega}{k} \left(\frac{\pi m}{2T} \right)^{1/2} \exp \left[- \frac{m\omega^2}{2Tk^2} - \frac{\hbar^2 k^2}{8mT} \right] \frac{\sinh(\hbar\omega/2T)}{(\hbar\omega/2T)} \quad (\text{A.20})$$

Evidentemente, no limite estritamente clássico ($\hbar \rightarrow 0$) obtemos o resultado para a função resposta clássica dada pelas Eq (A.6) e (A.7).

No limite estático, $\omega = 0$, temos

$$\text{Im } \chi_0(\vec{k}, 0) = 0 \quad (\text{A.21a})$$

$$\text{Re } \chi_0(\vec{k}, 0) = - \frac{n}{T} \xi \left(\frac{k}{k_T} \right) \quad (\text{A.21b})$$

onde

$$\xi(x) = \frac{1}{\sqrt{2} x} \mathcal{R}(\sqrt{2} x) \quad (\text{A.22})$$

e $k_T = (2mT)^{1/2}/\hbar$ é o vetor de onda térmico.

REFERÊNCIAS

1. K.S.Singwi, M.P.Tosi, R.H.Land e A.Sjölander, Phys.Rev. 176, 589 (1968).
2. K.S.Singwi, A.Sjölander, M.P.Tosi e R.H.Land, Phys.Rev. B1, 1044 (1970).
3. P.Vashishta, K.S.Singwi, Phys.Rev. B6, 875 (1972).
4. K.F.Berggren, Phys.Rev. A1, 1783 (1970).
5. M.Jonson, J.Phys. C9, 3055 (1976).
6. O.Hipolito e R.Lobo, Phys.Rev. B14, 9, 3892 (1976).
7. V.B.Campos, O.Hipolito e R.Lobo, Phys.Rev. B15, 4234 (1977).
8. R.Bansal e N.Ailawadi, Phys.Rev. A16, 1228 (1977).
9. R.Lobo, Phys.Rev. B12, 2640 (1975).
10. W.Götze e P.Wölfle, Phys.Rev. B6, 1226 (1972).
11. W.Götze e P.Wölfle, J.Low Temp.Phys., 5, 575 (1971).
12. W.T.Sommer, Phys.Rev. Lett., 12, 271 (1964).
13. W.T.Sommer e D.J.Tanner, Phys.Rev.Lett., 27, 1345 (1971).
14. R.Williams, R.S.Crandall e A.H.Willis, Phys.Rev.Lett., 26, 7 (1971).
15. R.M.Ostermeier e K.W.Schwarz, Phys.Rev.Lett., 29, 25 (1972).
16. T.R.Brown e C.C.Grimes, Phys.Rev.Lett., 29, 1233 (1972).
17. C.C.Grimes e T.R.Brown, Phys.Rev.Lett., 32, 280 (1974).
18. C.C.Grimes, Surface Sci., 73, 379 (1978).
19. M.W.Cole, Rev.Mod.Phys., 46, 451 (1974).
20. R.S.Crandall, Surface Sci., 58, 266 (1976).
21. V.B.Shikin e Yu.P.Monarkha, Sov.J.Low Temp.Phys., 1, 459 (1975).
22. V.B.Shikin, Surface Sci., 73, 396 (1978).
23. R.Loudon, Am.J.Phys., 27, 649 (1959).
24. M.W.Cole, Phys.Rev. B2, 4239 (1970).

25. O.Hipólito, J.R.D.Felício, G.A.Farias, Sol.St.Comm.,
26, 365 (1978).
26. F.Stern, Phys.Rev. B17, 5009 (1978).
27. H.M.Huang, Y.M.Shih, C.W.Woo, J.Low Temp.Phys. 14,
413 (1974).
28. D.Colman, R.T.Bate e J.P.Mize, J.Appl.Phys., 39, 1923
(1968).
29. V.B.Shikin, Yu.P.Monarkha J.Low Temp.Phys. 16, 193
(1974).
30. R.S.Crandall, Phys.Rev. A6, 790 (1972).
31. M.Saitoh, J.Phys.Soc.Japan, 42, 201 (1977).
32. Yu.P.Monarkha, Sov.J.Low Temp.Phys., 2, 600 (1976).
33. C.C.Grimes, Proceedings of the Yamada Conference II
on Electronic Properties of Two-Dimensional Systems,
Lake Yamanaka (Japan) (1979).
34. P.M.Platzman e H.Fukuyama, Phys.Rev. B10, 3150 (1974).
35. L.Bonsall e A.A.Maradudin, Phys.Rev. B15, 1959 (1977).
36. R.W.Hockney e T.R.Brown, J.Phys.C8, 1813 (1975).
37. R.C.Gann, S.Chakravarty e G.V.Chester, Phys.Rev. B20,
326 (1979).
38. D.J.Thouless, J.Phys. C11, L 189 (1978).
39. J.M.Kosterlitz e D.J.Thouless, J.Phys. C5, L 124 (1972);
C6, 1181 (1973).
40. D.R.Nelson e B.I.Halperin, Phys.Rev. B19, 2457 (1979).
41. R.H.Morf, Phys.Rev.Lett. 43, 931 (1979).
42. C.L.Zipfel, T.R.Brown e C.C.Grimes, Phys.Rev.Lett, 37
1760 (1976).
43. C.C.Grimes e G.Adams, Phys.Rev.Lett., 42, 795 (1979).
44. V.B.Shikin, JETP Lett., 19, 335 (1974).
45. D.S.Fisher, B.I.Halperin e P.M.Platzman, Phys.Rev.Lett.
42, 798 (1979).
46. N.Studart e O.Hipólito, Phys.Rev. A19, 1790 (1979).
47. A.L.Fetter, Phys.Rev. B10, 3739 (1974).
48. H.Totsuji, J.Phys.Soc. Japan, 40, 857 (1976).
49. J.Chalupa, Phys.Rev. B12, A (1975); 13, 2243 (1976).

50. H.Totsuji, Phys.Rev. A17, 399 (1978).
51. F.Lado, Phys.Rev., B17, 2827 (1978).
52. D.Pines e P.Nozières, The Theory of Quantum Liquids
(Benjamin, New York, 1966), Vol.1.
53. M.Abramowitz e I.A.Stegun, Handbook of Mathematical
Functions (Dover, New York, 1972).
54. H.Totsuji e S.Ichimarú, Prog.Theor.Phys., 52, 42 (1974).
55. F.Stern e W.E.Howard, Phys.Rev., 163, 816 (1967).
56. C.C.Grimes e G.Adams, Phys.Rev.Lett., 36, 145 (1976).
57. D.E.Beck e P.Kumar, Phys.Rev., B13, 2859 (1976),
B14, 5127 (1976).
58. P.M.Platzman e N.Tzoar, Phys.Rev., B13, 3197 (1976).
59. A.L.Fetter e J.D.Walecka, Quantum Theory of Many-
Particle Systems. McGraw Hill, N.Y. (1971).
60. B.Vinter, Phys.Rev. B13, 4447 (1976).
61. P.M.Platzman, A.L.Simons e N.Tzoar, Phys.Rev. B16,
2023 (1977).
62. P.M.Platzman, G.Beni, Phys.Rev.Lett. 36, 626 (1976).
63. D.N.Zubarev, Sov.Phys.Usp., 3, 320 (1960).
64. L.P.Kadanoff e P.C.Martin, Ann.Phys. (N.Y.), 24, 419
(1963).
65. H.Mori, em "Many Body Theory" editado por R.Kubo,
Syokabo - Benjamin, Tóquio, N.Y. (1968).
66. V.S.Edelman, JETP Lett. 24, 468 (1976).
67. A.Ron e N.Tzoar, Phys.Rev. 131, 12 (1967).
68. F.Bridges e J.F.McGill, Phys.Rev. B15, 1324 (1977).
69. A.S.Rybalko, Yu.Z.Kovdrya e B.N.Esel'son, JETP Lett.
22, 280 (1975)
70. H.Totsuji Proceedings of the Yamada Conference II on
Electronic Properties of Two-Dimensional Systems,
Lake Yamanaka (Japan) (1979).
71. J.Bosse e K.Kubo, Phys.Rev. A18, 2337 (1978)

72. C.C.Grimes, T.R.Brown, M.L.Burns, C.L.Zipfel, Phys.
Rev. B13, 140 (1976).
73. D.Lambert, P.L.Richards. Comunicação pessoal.
74. B.D.Fried e S.D.Conte, "The Plasma Dispersion Relation"
Academic Press, N.York (1961).
75. F.Stern, Phys.Rev.Lett., 18, 546 (1967).

LEGENDA DAS FIGURAS

FIGURA 1

Fatores de estrutura autoconsistentes $S(\vec{k})$ como função de k em unidades de k_D para vários valores de α . Note que o fator de estrutura ultrapassa a unidade à medida em que o parâmetro do plasma aumenta, indicando um comportamento oscilatório.

FIGURA 2

Função correlação dos pares $g(r)$ como função de r em unidades de $(\pi n)^{-1/2}$ para vários valores do parâmetro de plasma. Os pontos representam os valores dados pela experiência numérica baseada no método de Monte Carlo (Ref.50).

FIGURA 3

Valores de γ , determinado do fator de estrutura autoconsistente como função do parâmetro de plasma α .

FIGURA 4

Densidade de energia de correlação normalizada pela densidade de energia cinética E_c/nT versus o parâmetro de plasma α . A curva contínua é baseada na expansão do parâmetro de plasma. As cruzes denotam os valores da experiência numérica de Totsuji e os pontos foram encontrados através do método do campo autoconsistente.

FIGURA 5

Razão entre a compressibilidade isotérmica do gás livre e a compressibilidade isotérmica do sistema clássico de ele-

trons bidimensional versus o parâmetro do plasma α . Curva I é obtida da regra de soma da compressibilidade (Eq (3.49)) com os valores autoconsistentes de γ , e Curva II a partir da derivada da energia de correlação do sistema. A linha tracejada é o resultado de RPA correspondendo a $\gamma=0$.

FIGURA 6

Densidade de partícula induzida $\delta n(r)/\bar{n}k_D^2$ como uma função de r em unidades de k_D^{-1} para dois valores do parâmetro de plasma e a curva de RPA.

FIGURA 7

Curvas de dispersão do plasma para grandes comprimentos de onda em unidades de $\omega_0 = (2\pi n e^2 k_D / m)^{1/2}$ para dois valores do parâmetro de plasma e a curva de RPA.

FIGURA 8

Parte real da dispersão do plasma em unidades de ω_0 para dois valores do parâmetro de plasma e a curva de RPA.

FIGURA 9

Fator de estrutura dinâmico $S(\vec{k}, \omega) / \omega_0^{-1}$ versus ω / ω_0 com valores fixos de k/k_D , para dois valores do parâmetro de plasma, e a curva de RPA.

FIGURA 10

Tempo de colisão dependente da densidade no limite de baixa frequência em unidades de $\gamma_0 = 4\sigma\hbar / (e F_\perp)^2$ para a temperatura de 1,0K e $n_0 = 10^{15} \text{ cm}^{-2}$. A curva contínua representa o resultado em RPA e a linha tracejada é o resultado em SCFA.

FIGURA 2a

FIGURA 2b

FIGURA 3

FIGURA 4

FIGURA 5

FIGURA 6

FIGURA 7

FIGURA 8

FIGURA 9a

FIGURA 9b

FIGURA 9c

FIGURA 10