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

PLASMONS EM CAMADAS DE INVERSÃO
COM MODULAÇÃO ESPACIAL DE CARGA

JAYME VICENTE DE LUCA FILHO

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

Orientador: Prof.Dr. Lidério Citrângulo Ioriatti Jr.

Departamento de Física e Ciência dos Materiais

São Carlos - 1986

MEMBROS DA COMISSÃO JULGADORA DA DISSERTAÇÃO DE MESTRADO DE _____

Jayme Vicente de Luca Filho

APRESENTADA AO INSTITUTO DE FÍSICA E QUÍMICA DE SÃO CARLOS, DA
UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO, EM 09 DE julho DE 1986.

COMISSÃO JULGADORA:

Lidério Ioriatti Jr.

Dr. Lidério Citrângulo Ioriatti Jr. - Orientador

Roberto Leal Lobo e Silva Filho

Dr. Roberto Leal Lobo e Silva Filho

Eylon E.T. Gonçalves da Silva

Dr. Eylon E.T. Gonçalves da Silva

AGRADECIMENTOS

Agradeço ao Prof. Lidério pela orientação e estímulo.

Ao Prof. Roberto Lobo, que me orientou num período inicial.

Ao Valdecy, programador do Instituto, pelos programas de computação e à Sandra, pela datilografia.

ÍNDICE

Índice de figuras.....	I
Resumo e abstract.....	II
Introdução.....	1
 CAPÍTULO I.....	 10
1.a - Breve descrição da camada de inversão	10
1.b - A aproximação de fases aleatórias (R.P.A.).....	13
1.c - A equação dos plasmons.....	15
1.d - O método variacional para as auto-frequências	18
1.e - De que só na composição do estado $\omega^2 = 0$ entra o campo externo.....	21
1.f - Propriedade de ortogonalidade dos campos.....	23
1.g - Resposta do gás de elétrons a um campo externo.....	24
 CAPÍTULO II.....	 26
2.a - A experiência com gás modulado.....	26
2.b - Efeito de aproximação das bandas.....	31
2.c - Acoplamento dos plasmons com o campo infra-vermelho transmitido.....	39
 CAPÍTULO III -	 44
3.a - A experiência com paridade quebrada.....	44

3.b - Oscilação coletiva num sistema com densidade localizada.....	46
3.c - Efeito do portão metálico.....	50
3.d - Comparação com os resultados experimentais.....	52
 CAPÍTULO IV - Conclusões.....	 54
 Apêndice I - "Damping" de Landau da oscilação localizada.....	 57
Apêndice II - Aparecimento de estados localizados num gás de elétrons bidimensional com densidade modulada....	61
Referências bibliográficas.....	67

INDICE DE FIGURAS

	Página
Fig.1.....	3
Fig.2.....	4
Fig.3.....	5
Fig.4.....	7
Fig.5.....	7
Fig.6.....	8
Fig.7.....	8
Fig.8.....	11
Fig.9.....	11
Fig.10.....	12
Fig.11.....	26
Fig.12.....	26
Fig.13.....	27
Fig.14.....	31
Fig.15.....	32
Fig.16.....	34
Fig.17.....	37
Fig.18.....	41
Fig.19.....	44
Fig.20.....	46
Fig.21.....	47
Fig.22.....	49
Fig.23.....	52
Fig.24.....	63

RESUMO

Nesse trabalho, nós reinterpretemos resultados experimentais sobre plasmons em camada de inversão com densidade eletrônica modulada.

Expandindo a função resposta em R.P.A. obtivemos uma equação clássica para os plasmons e um método variacional que gera essa equação.

Estudamos o aparecimento de plasmons localizados em um gás de elétrons com densidade modulada e mostramos que existe uma modulação crítica para o aparecimento de plasmons localizados.

Nós também calculamos o "damping" de Landau de um plasmon localizado.

Os resultados obtidos concordam com os resultados experimentais.

ABSTRACT

A new interpretation to recent experimental results on two dimensional plasmons in laterally microstructured space charge layers is proposed. A classical equation for the plasma oscillation in R.P.A. and a variational method for this equation is proposed. Localized plasmons in these systems were studied. In particular it is shown that there is a critical value of the modulation for the appearance of localized plasmons.

The Landau "damping" for these modes was also calculated. The theoretical results agree with the existing experimental data.

INTRODUÇÃO

Em 1951 Bohm e Pines [1] sugeriram a introdução de oscilações coletivas ("plasmons") no tratamento de um gás de elétrons interagentes.

Como o potencial de Coulomb é de longo alcance, a aproximação de Hartre-Fock ou a introdução do potencial de Coulomb como perturbação no modelo de Sommerfeld conduz a resultados problemáticos. No primeiro caso a densidade de estados é infinita na superfície de Fermi e no outro caso a segunda ordem de perturbação diverge. O método de Bohm e Pines [1] elimina as dificuldades com a parte de longo alcance do potencial de Coulomb, tratando-a como um conjunto de oscilações coletivas bosônicas. De acordo com Bohm e Pines, a energia de um plasmom num gás tridimensional de elétrons livres com densidade de elétrons por unidade de volume N_0 é aproximadamente: $\hbar\omega_p = \hbar(4\pi N_0 e^2/m^*)^{1/2}$ onde e é a carga do elétron e m^* sua massa efetiva.

Para os elétrons de condução de metais como Al, Mg, Be, etc essa energia é da ordem de 10 eV e a relação de dispersão de Pines-Bohm: $\omega_k^2 = \omega_p^2 + \frac{3}{5} v_F^2 K^2$ (onde v_F é a velocidade de Fermi) foi verificada experimentalmente por Watanabe [2] em 1956.

Plasmons em sistemas eletrônicos bidimensionais foram estudados teoricamente pela primeira vez por Ritchie [3] em 1957, que investigou as perdas de energia por elétrons rápidos ($E \gg \hbar\omega$) através de filmes metálicos finos.

Ritchie [3] propôs um modo de oscilação longitudinal coletiva cuja relação de dispersão para pequenos valores de K é

dada por :

$$\omega_k^2 = \frac{2\pi N_0 e^2}{m^*} |K| \quad (\text{Eq.0.1})$$

onde K é o vetor de onda longitudinal da oscilação e N_0 é o número de elétrons por unidade de área da folha metálica.

Diversamente do caso tridimensional, a frequência para $k=0$ é nula e o espectro fortemente dependente do vetor de onda. Isso é porque em duas dimensões o campo elétrico escapa para fora do plano das cargas, de modo a reduzir as forças eletrostáticas de retorno.

Para pequenos valores de K ($K < 2\pi N_0 e^2 / mC^2 \approx 50\text{cm}^{-1}$ para $N_0 \approx 6 \times 10^{12} \text{ el/cm}^2$) essa relação de dispersão é um pouco modificada por efeito de retardo do campo eletromagnético (Stern [4], 1967), mas a relação de dispersão fica sempre abaixo da dispersão da luz. Desta forma, a conservação de energia e momento não permite o acoplamento desses modos com luz. Esses modos são por isso chamados modos não-radiativos.

O efeito quântico na relação de dispersão de plasmons em um gás de elétrons bidimensional de densidade eletrônica uniforme N_0 , colocado na interface entre dois meios dielétricos semi-infinitos foi calculado por Stern [4] que obteve:

$$\omega^2 = \frac{\omega_k^2}{\bar{\epsilon}} \left(1 + \frac{3\pi}{2} a_B^* K \right), \quad a_B^* = \hbar^2 \bar{\epsilon} / m^* e^2$$

onde $\bar{\epsilon}$ é a média entre as constantes dielétricas dos meios e ω_k é dado pela Eq.0.1 .

Nas condições experimentais que vamos considerar, (Figura 3) a correção quântica na frequência é da ordem de 5% e

nós não consideraremos o efeito.

A observação experimental de plasmons bidimensionais só apareceu em 1976. Grimes e Adams [6] e Platzman e Beni [7] verificaram a existência de plasmons bidimensionais em elétrons ligados em superfícies de hélio.

Em 1977, D.C.Tsui [8] verificou a relação de dispersão do plasmom bidimensional em camada de inversão de silício tipo p-(100), através de experiência de transmissão no infra-vermelho distante.

A solução experimental para acoplar os plasmons com a radiação infra-vermelha foi evaporar sobre o eletrodo metálico do dispositivo uma grade de ouro com período $a = 3,5$ nm (vide Fig. 1).

Fig.1 - Ilustração esquemática da estrutura de grade.

A luz ao passar pela grade produz um campo eletrostático (near field) periódico no comprimento a , e a componente de Fourier em $G = \frac{2\pi}{a} \times n$ do campo ao longo da camada de inversão excita os plasmons.

Fig.2 - Mudança fracional da transmissão causada pela camada de inversão a 1,2 K. As curvas sólidas são os resultados teóricos e o tempo de relaxação indicado foi obtido do ajuste da ressonância lorentziana. A curva de baixo é a absorção de Drude e a curva de cima contém a absorção do plasmom (D.C.Tsui et al [8], 1977).

A altas densidades eletrônicas, onde o gás de elétrons exibe comportamento metálico ($N_0 > 10^{12} \text{ el/cm}^2$), D.C.Tsui [8] verificou a relação de dispersão bidimensional até $k = 10^4 \text{ cm}^{-1}$.

A EXPERIÊNCIA DE U.MACKENS

Em 1984, U.Mackens [9] et al produziram experimentalmente o efeito que será o objeto do presente trabalho, construindo um gás de elétrons bidimensionais com modulação de densidade ao longo de faixas.

Com técnicas de fotolitografia, a camada de óxido do dispositivo foi modulada periodicamente e recoberta com uma fina película de NiCr de modo a estabelecer o eletrodo superior (vide

Fig. 3).

Fig.3 - Ilustração esquemática do mosfet com a camada de óxido modulada: $a \approx 650\text{nm}$, $t/a \approx 0.3$, $d \approx 35\text{nm}$, $d \approx 60\text{nm}$ (U.Mackens et al[9], 1984)

Como veremos mais adiante, na aproximação de capacitor plano a densidade eletrônica em cada região é inversamente proporcional à espessura da camada de óxido, e portanto o gás formado tem faixas de densidades alternantes $N_i \propto 1/d_i$, $i = 0, 1$.

U.Mackens refere-se a Chaplik [10] que mostrou que uma modulação periódica num gás de elétrons bidimensionais mistura os estados degenerados em $G = \frac{\pi}{a} \times n$ produzindo dois novos modos de paridades opostas.

U.Mackens interpretou as ressonâncias ω_- e ω_+ da Fig. 4 como sendo a absorção desses dois novos modos, que acoplam-se com a luz infra-vermelha através do campo eletrostático produzido pela modulação da camada de óxido.

O que nós observamos é que esses estados no centro da zona de Brillouin tem paridades opostas e como o campo que chega na camada de inversão é par, só o modo par deveria ser excitado.

Segundo a nossa interpretação, as ressonâncias ω_- e ω_+ da Fig. 4 correspondem aos modos pares deformados adiabaticamente a partir dos estados não perturbados do gás não modulado em $G = \frac{2\pi}{a}$ e $G = \frac{4\pi}{a}$ respectivamente.

Um outro fato que não pode ser explicado com a interpretação de U.Mackens é o acoplamento com o campo infra-vermelho, nesse caso muito mais intenso do que no experimento similar de D.C.Tsui (Fig. 2).

Tal comportamento resulta da existência de um momento de dipolo não nulo associado a todos os modos pares do sistema modulado. O que ocorre é que esses dipolos acoplam com a componente espacialmente constante do campo infra-vermelho, que é a componente dominante do campo transmitido. Por essa razão a absorção é muito mais intensa. (Compare a Fig.2 com a Fig.4).

Outro fato que a nossa interpretação pode explicar é que a curva de absorção da Fig.4 passa por baixo do "fundo de drude" obtido com polarização paralela à grade, fato que não é observado na experiência de D.C.Tsui (Fig. 2). Como veremos na seção 2. ,este fato é uma particularidade do sistema modulado.

Quanto à concordância com a experiência, a separação em frequência calculada pela nossa interpretação concorda com os resultados de U.Mackens dentro de 15% de erro, enquanto o "splitting" entre os estados de paridade opostas, segundo a interpretação de U. Mackens, é quatro vezes menor que o resultado experimental.

Fig.4 - Mudança relativa da transmissão causada pela absorção do gás modulado. A linha pontilhada é a transmissão para polarização paralela a grade.
(U. Mackens [9], 1985)

Fig.5 - Relação de dispersão 2D em gás modulado segundo teoria de perturbação.

Num trabalho mais recente, D.Heitmann [11] construiu uma grade de fotoresistor sobre a camada de óxido e metalizou com NiCr, para em seguida recobrir com alumínio evaporado a baixo ângulo, de modo a quebrar explicitamente a paridade da grade (vide Fig. 6).

Fig. 6 - Estrutura de grade usada por Heitmann, $d_{ox} \approx 20\text{nm}$, $d_{PR} \approx 120\text{nm}$, $a = 642\text{nm}$, $t/a = 0.5$ (D. Heitmann [11], 1985).

Fig. 7 - Excitação de plasmom no sistema MOS modulado (D.Heitmann [11], 1985).

D. Heitmann [11] argumenta que os picos ω_- e ω_+ da Fig.7 são os estados de paridades opostas da teoria de perturbação.

O que nós observamos é que dessa vez, com o propósito de acentuar o efeito da modulação, essa tornou-se exagerada,

produzindo plasmons completamente localizados.

Nós então consideramos o modelo de um gás completamente localizado, calculando as frequências dos modos no centro da zona. Os estados obtidos, de paridades alternantes, tem frequências que concordam com os resultados da Fig. 7.

No experimento anterior, U.Mackens et al observaram que o pico ω_+ é mais intenso que o ω_- , coisa que foi atribuída ao fato de o modo tornar-se radiativo nesse sistema.

Nesse caso ocorre justamente o contrário, e a interpretação proposta por U.Mackens não se mantém.

Como veremos no capítulo 3, o modo localizado de menor frequência nesse sistema (Fig. 7) é o modo par, e mesmo com a paridade quebrada só o acoplamento dipolar com o campo constante transmitido já garante que ele seja o mais excitado.

O material da tese está dividido da seguinte maneira:

CAPÍTULO I : Descrevemos a camada de inversão e desenvolvemos o tratamento matemático do gás de elétrons bidimensional.

CAPÍTULO II : Reinterpretamos os resultados experimentais de U. Mackens [9].

CAPÍTULO III : Reinterpretamos os resultados experimentais de D. Heitmann [11].

APENDICE I : Calculamos o "damping" de Landau da oscilação coletiva de uma densidade eletrônica localizada.

APENDICE II : Estudamos o aparecimento de plasmons localizados num gás de elétrons bidimensional com densidade modulada.

1.a BREVE DESCRIÇÃO DA CAMADA DE INVERSÃO DO MOSFET

O grande investimento tecnológico que foi feito no estudo da interface Si-SiO₂ durante a construção do transistor de efeito de campo na década de 60-70 produziu um sistema particularmente útil para o estudo das propriedades de um gás de elétrons bidimensionais.

Um mosfet (metal-oxide-semiconductor field effect transistor) é essencialmente, um sistema no qual a aplicação de uma voltagem entre as placas de um capacitor muda a condutividade de uma delas (camada de inversão). Esse comportamento pode ser entendido, notando-se em primeiro lugar que se uma diferença de potencial é aplicada através da interface Si-SiO₂, os portadores não penetram no SiO₂ uma vez que este isolante apresenta uma alta barreira para injeção de elétrons ou de buracos. Do lado do silício e na aproximação de massa efetiva, a banda de condução se inclina seguindo a energia potencial elétrica, formando assim um poço de potencial para os elétrons (vide Fig. 9).

Os elétrons ligados a esse poço passam a ter uma função de onda localizada na direção z e onda plana nas direções paralelas à interface, formando uma estrutura de sub-bandas para os elétrons de condução, com energias dadas por:

$$E = E_n + \frac{\hbar^2}{2m^*} (k_x^2 + k_y^2)$$

onde E é a n-ésima energia discreta do poço, (k_x, k_y) o vetor de

onda ao longo do plano e m^* a massa efetiva dos elétrons na direção paralela à interface.

Fig. 8 - Esquema da estrutura MOS

Fig. 9 - Representação esquemática da inclinação das bandas do silício.

A partir da voltagem onde a banda de condução cruza o nível de Fermi (voltagem de inversão, V_t), a primeira sub-banda passa a ser populada.

A queda da voltagem de portão, isto é, aquela que é aplicada entre o eletrodo superior (portão) e o inferior colocado sob o silício, ocorre entre a camada de óxido, a camada de inversão e o eletrodo inferior que produzem dois capacitores em série.

A partir da voltagem de inversão, a capacitância associada à camada de inversão e ao eletrodo inferior fica muito grande e a capacitância equivalente é a capacitância do óxido por unidade de área, $C = C_{ox} = \frac{\epsilon_{ox}}{4\pi d_{ox}}$, onde ϵ_{ox} é a constante dielétrica do óxido e d_{ox} a espessura da camada de óxido.

Portanto, a densidade eletrônica na camada de inversão para voltagens de portão V_g maiores que a voltagem de inversão V_t é dada por:

$$N = \frac{\epsilon_{ox}(V_g - V_t)}{4\pi d_{ox} e} \quad (\text{elétrons/cm}^2) \quad (\text{Eq. 1.a.1})$$

onde e é a carga CGS do elétron. A seguir fornecemos alguns dados relevantes sobre a estrutura MOS:

Para densidades eletrônicas da ordem de 10^{12}el/cm^2 , só a primeira sub-banda está populada [12]. A extensão da função de onda dos elétrons na direção perpendicular à interface é da ordem de $100\text{\AA}$ [12] e a frequência de transição para a próxima sub-banda [12] é da ordem de 40meV ou 350cm^{-1} ($1/\lambda$).

A constante dielétrica estática [8] do SiO_2 é $\epsilon_{\text{ox}} = 4$ e a constante dielétrica do silício [8] é $\epsilon_s = 12$.

A massa efetiva do elétron [8] na direção paralela à interface é $m^* = 0.2m_0$.

Fig.10 - Esquema dos elipsóides de equienergia para a banda de condução do silício. Todos os elipsóides são iguais, o eixo maior corresponde à massa longitudinal $m_l = 0.92m_0$ e os outros correspondem à massa transversa $m^* = 0.2m_0$. No nosso caso só as sub-bandas geradas por c e f são populadas, as outras dão origem a sub-bandas de energias mais altas por causa da menor massa na direção z [12] (para uma resenha sobre propriedades eletrônicas de sistemas bidimensionais, vide referência 12).

O gás de elétrons bidimensionais confinado na camada de inversão é um sistema de muitos corpos interagentes. No próximo parágrafo apresentamos uma técnica (RPA) da teoria de muitos corpos e nos seguintes as aproximações e equações relevantes para o nosso trabalho.

1.b A APROXIMAÇÃO DE FASES ALEATÓRIAS (R.P.A.)

A aproximação de fases aleatórias é particularmente útil para o estudo das oscilações coletivas de um gás de elétrons interagentes.

Essa aproximação pode ser considerada como uma aproximação de Hartre dinâmica, e consiste em desprezar a correlação entre os elétrons supondo que cada elétron se move num campo auto-consistente dependente do tempo.

A equação de movimento do operador densidade de N corpos, $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$ é:

$$i\hbar \frac{\partial \rho}{\partial t} = [H, \rho]$$

Para achar a equação de movimento da função de um corpo, temos que integrar nas $n - 1$ coordenadas $x'_2 = x_2, x'_3 = x_3, \dots, x'_N = x_N$.

Como a interação é entre duas partículas, disso resulta:

$$i\hbar \frac{\partial \rho}{\partial t}(x_1, x'_1) = \int [H_{ef}(x_1, x_2), \rho(x_1, x_2, x'_1, x_2)] dx_2$$

A aproximação R.P.A. consiste em colocar:

$$\rho(x_1, x_2, x'_1, x_2) = \rho(x_1, x'_1) \rho(x_2, x_2)$$

ou seja, desprezar a correlação entre dois corpos. Com isso, a equação de movimento para $\rho(x_1, x'_1)$ fica:

$$i\hbar \frac{\partial \rho}{\partial t}(x_1, x'_1) = [\hat{H}_H, \rho(x_1, x'_1)], \quad \hat{H}_H = p_1^2/2m^* + V(x_1, t) \quad (\text{Eq. 1.b.1})$$

com $V(x_1, t)$ dado por $V(x_1, t) = V_H(x_1) + \phi(x_1, t)$ onde $V_H(x_1)$ é o potencial de Hartre associado à situação de equilíbrio e $\phi(x_1, t)$ é o poten-

cial eletrostático associado à flutuação de carga a partir da densidade de equilíbrio .

Se além disso supomos que na situação estática os elétrons ocupam os estados de uma partícula no potencial de Hartree temos:

$$\begin{aligned} (p_1^2/2m^* + eV_H) |\alpha\rangle &= \epsilon_\alpha |\alpha\rangle, \\ \rho^0 |\alpha\rangle &= f_\alpha |\alpha\rangle \end{aligned} \quad (\text{Eq. 1.b.2})$$

onde $|\alpha\rangle$ é um auto-estado de Hartree e f a função de Fermi-Dirac.

Em seguida supomos que à uma variação auto-consistente do operador densidade $\rho = \rho^0 + \delta\rho e^{-i\omega t} \cdot e^{\delta t}$ esteja associado um potencial elétrico $V(x,t) = V_H(x) + \phi(x) e^{-i\omega t} \cdot e^{\delta t}$ (como H deve ser hermitiano, no fim devemos tomar a parte real).

A equação de movimento para $\delta\rho$, Eq. 1.b.1. fica:

$$\hbar\omega\delta\rho = [p_1^2/2m^* + eV_H, \delta\rho] + [\phi, \rho^0]$$

ou

$$\hbar\omega\langle\alpha|\delta\rho|\beta\rangle = (\epsilon_\alpha - \epsilon_\beta)\langle\alpha|\delta\rho|\beta\rangle + (f_\beta - f_\alpha)\langle\alpha|e\phi|\beta\rangle$$

e $\delta\rho$ fica:

$$\delta\rho = \sum_{\alpha,\beta} \frac{|\alpha\rangle(f_\beta - f_\alpha)\langle\alpha|e\phi|\beta\rangle\langle\beta|}{\hbar\omega + \epsilon_\beta - \epsilon_\alpha + i\delta} \quad (\text{Eq. 1.b.3})$$

Essa é a fórmula da resposta do gás em R.P.A.

1.c A EQUAÇÃO DOS PLASMONS

Para obter-se uma fórmula tratável para $\delta\rho$, expandimos o termo geral de 1.b.3 em potências de $(\epsilon_\alpha - \epsilon_\beta)/\hbar\omega$. A expansão deve convergir rapidamente se o elemento de matriz é pequeno para grandes diferenças de energia e nesse trabalho consideraremos apenas o primeiro termo que é o termo clássico. A correção quântica introduzida pela segunda ordem em $1/\omega^2$ foi calculada por Stern[4] para um gás não modulado e produz um aumento na frequência de oscilação da ordem de 5% nas condições experimentais que iremos considerar (vide introdução, pag 2).

O primeiro termo da expansão pode ser escrito como:

$$\delta\rho = \frac{2}{(\hbar\omega)^2} \sum_{\beta} f_{\beta} [\hat{H}_0, e\phi] |\beta\rangle\langle\beta|$$

onde

$$\hat{H}_0 = p_1^2/2m^* + eV_H$$

é o hamiltoniano de Hartre estático produzido pela distribuição eletrônica no estado fundamental do gás de elétrons.

A densidade eletrônica no ponto x fica:

$$\begin{aligned} \langle x | \delta\rho | x \rangle &= \frac{-e}{m^*\omega^2} \sum_{\beta} f_{\beta} \left\{ 2\psi_{\beta}^*(x) \frac{d\psi_{\beta}(x)}{dx} \cdot \frac{d\phi}{dx} + \psi_{\beta}(x) \psi_{\beta}^*(x) \frac{d^2\phi}{dx^2} \right\} = \\ &= \frac{e}{m^*\omega^2} \frac{d}{dx} \{ N(x)E(x) \} \end{aligned} \quad (\text{Eq.1.c.1})$$

onde $E(x) = -\frac{d\phi}{dx}$ é o campo elétrico e $N(x) = \sum_{\alpha} f_{\alpha} |\psi_{\alpha}(x)|^2$ é a densidade eletrônica de equilíbrio.

Esse é o resultado clássico obtido da equação de continuidade $-i\omega\epsilon\delta\rho + dj/dx = 0$ onde $j(x)$ é a corrente por unidade de

comprimento, $j(x) = \frac{ie^2 N(x) E(x)}{m^* \omega}$, que é a fórmula de Drude com condutividade modulada por $N(x)$.

A parte imaginária da resposta faz com que a oscilação decaia no tempo ("damping" de Landau). Para um gás não modulado o "damping" de Landau em RPA [4] é nulo se $a_B^* k \ll 1$ e $k/2k_F < 1$, onde k é o vetor de onda da oscilação, $a_B^* = \hbar^2 \epsilon / m^* e^2$ o raio de Bohr efetivo e k_F o vetor de onda de Fermi.

No apêndice I usamos a parte imaginária da função resposta para calcular o "damping" de Landau da oscilação coletiva de uma densidade eletrônica localizada.

A densidade de carga na camada de inversão gera um potencial eletrostático no espaço que é dado pela solução da equação de Poisson:

$$\nabla \cdot (\epsilon(z) \vec{\nabla} \phi(x, z)) = -4\pi e \delta(z) \delta \rho(x) \quad (\text{Eq.1.c.2})$$

Como a extensão espacial da camada de inversão ($\approx 100 \text{\AA}$) é muito menor que qualquer comprimento característico da oscilação nas condições experimentais que vamos estudar ($\approx 6000 \text{\AA}$) supomos que a densidade está completamente confinada em $z = 0$, daí a forma funcional $\delta(z)$ que aparece na Eq.1.c.2.

O termo de retardo da equação de Maxwell é desprezível no infra-vermelho distante, o que pode ser visto calculando o fator $(\omega/qc)^2$ onde ω é uma frequência no infra-vermelho distante, c a velocidade da luz e $q = 2\pi/a$ com a sendo o período do sistema. Para as condições que vamos considerar esse termo é da ordem de 10^{-4} . Por essa razão, em todas as partes subsequentes do presente trabalho consideraremos apenas o potencial eletrostá-

tico.

A equação de continuidade (Eq.1.c.1) combinada com a equação de Poisson (Eq.1.a.2) produz uma equação de auto-valores para o potencial:

$$\nabla \cdot (\epsilon(z) \vec{\nabla} \phi(x,z)) = \frac{4\pi e^2}{m^* \omega^2} \delta(z) \frac{d}{dx} (N(x) \frac{\partial \phi}{\partial x}(x,0)) \quad (\text{Eq.1.c.3})$$

Essa equação mais as condições de contorno sobre o potencial especificam completamente o problema.

Por exemplo, caso o gás de elétrons de densidade constante N_0 exista na interface de dois meios semi-infinitos de constantes dielétricas ϵ_{ox} e ϵ_s a solução da Eq.1.c.3 cujo campo é periódico e vai a zero longe da interface é $\phi(x,z) = e^{iqx} e^{-|qz|}$ e a frequência é:

$$\frac{\omega^2}{q} = \frac{4\pi N_0 e^2}{m^* (\epsilon_{ox} + \epsilon_s)} |q| \quad (\text{Eq.1.c.4})$$

Essa solução foi obtida pela primeira vez por Ritchie [3].

Outro caso de interesse é aquele onde a camada de óxido tem espessura finita e termina num eletrodo metálico plano colocado a uma distância d da camada de inversão.

Nesse caso a condição de contorno é que o potencial seja nulo sobre o eletrodo metálico e vá a zero a grandes distâncias da camada de inversão do lado do semiconductor. Nesse caso a solução cujo campo sobre a camada de inversão é da forma $\partial \phi(x,0)/\partial x = e^{iqx}$, tem frequência dada por:

$$\frac{\omega^2}{q} = \frac{4\pi N_0 e^2}{m^*} \frac{|q|}{(\epsilon_s + \epsilon_{ox} \cotgh|qd|)} \quad (\text{Eq.1.c.5})$$

Essa correção na relação de dispersão dos plasmons longitudinais foi calculada por M.Nakayama[13] e por A.Eguiluz[14] e foi verificada experimentalmente por D.C.Tsui[8] em 1977.

No caso do metal estar a grandes distâncias da camada de inversão, $|qd| \rightarrow \infty$, esse resultado se reduz ao caso anterior (Eq.1.a.4).

1.d O MÉTODO VARIACIONAL PARA AS AUTO-FREQUÊNCIAS

Seja $\phi(x,z)\cos(\omega t)$ o potencial eletrostático associado ao plasmon na camada de inversão (produzido pelas cargas na camada de inversão e imagens no metal e dielétricos). A auto-energia potencial dessa oscilação é dada por:

$$V = \frac{1}{8\pi} \int \epsilon(z) |\vec{\nabla}\phi|^2 dx dz \cos^2 \omega t \quad (\text{Eq.1.d.1})$$

Escrevendo a força que atua sobre cada elétron na camada de inversão como $-\partial\phi(x,0)/\partial x$ e integrando a Lei de Newton em relação ao tempo obtemos a velocidade do elétron em (x,t) na camada de inversão:

$$v(x,t) = \frac{-e}{m^*\omega} \frac{\partial\phi}{\partial x}(x,0)\sin\omega t$$

onde m^* é a massa efetiva dos elétrons.

Se $N(x)$ é o número de elétrons por unidade de área, a

energia cinética da oscilação $T = \frac{1}{2} m^* \int N(x) v^2(x,t) dx$ fica:

$$T = \frac{e^2}{2m^* \omega^2} \int dx N(x) \left| \frac{\partial \phi}{\partial x}(x,0) \right|^2 \sin^2 \omega t \quad (\text{Eq.1.d.2})$$

Como o valor máximo da energia cinética é igual ao valor máximo da energia potencial, igualando esses dois máximos obtém-se um funcional para a frequência de oscilação:

$$\left[\frac{m^* \omega^2}{4\pi e^2} \right] = \frac{\int N(x) \left| \frac{\partial \phi}{\partial x}(x,0) \right|^2 dx}{\int \epsilon(z) |\vec{\nabla} \phi|^2 dx dz} \quad (\text{Eq.1.d.3})$$

O extremo desse funcional com relação ao potencial $\phi(x,z)$ gera a equação de auto-valores (Eq.1.c.3).

A frequência de oscilação do sistema é um mínimo desse funcional, ou seja, qualquer potencial que satisfaça a equação de Laplace fora da camada de inversão e satisfaça as condições de contorno do problema produz uma frequência maior ou igual à frequência fundamental de oscilação do sistema. Se o potencial é ortogonal ao estado fundamental (assunto do próximo parágrafo) através da relação da Eq.1.f.1, então a frequência obtida é maior ou igual à frequência do primeiro estado excitado, e assim por diante.

Só por ilustração obteremos o resultado perturbativo de Chaplik [10] para a oscilação de um gás levemente modulado, cuja densidade bidimensional é dada por $N(x) = N_0 + \Delta N(x)$, onde a perturbação $\Delta N(x)$ é periódica no comprimento a , constante para $|x| < t/2$ e nula no resto do período. Essa perturbação levanta a degenerescência no centro da zona de Brillouin.

Se o contorno metálico é invariante por translação, a forma do campo sobre a camada de inversão nos estados de paridades opostas do gás não modulado em $G=n \times \frac{\pi}{a}$ é:

$$-\frac{\partial \phi}{\partial x}(x,0) = \cos Gx \quad (\text{estado par})$$

$$-\frac{\partial \phi}{\partial x}(x,0) = \sin Gx \quad (\text{estado ímpar})$$

Colocando essas formas não perturbadas no método variacional, Eq.1.d.3 com obtemos:

$$\frac{\omega_{\pm}^2}{\omega_G^2} = 1 + \frac{\Delta N t}{N_0 a} \left(1 \pm \frac{\sin Gt}{Gt}\right) \quad (\text{Eq.1.d.4})$$

onde ω_G^2 é a frequência não perturbada, e os sinais mais e menos são para os modos par e ímpar respectivamente.

O "splitting" entre os estados par e ímpar calculado pela teoria de perturbação vale:

$$\frac{\omega_+^2 - \omega_-^2}{\frac{1}{2}(\omega_+^2 + \omega_-^2)} = \frac{2\Delta N t}{N_0 a} \frac{\sin Gt}{Gt} \quad (\text{Eq.1.d.5})$$

Esta é a formula que foi usada por U. Mackens e D. Heitmann [9,11,15] para interpretar os experimentos realizados com um gás modulado.

Outra coisa que podemos afirmar é que a corrente $j(x) = N(x)E(x)$ deve ser uma função contínua, pois caso contrário a Eq.1.c.1 prevê uma singularidade tipo $\delta(x)$ na densidade de carga, que representa um fio de carga. Nesse caso o campo elétrico tem a forma do campo de um fio: $\|\vec{E}(x,z)\|^2 \propto (x^2+z^2)^{-1}$ e o método variacional (Eq.1.d.3) prevê uma frequência de oscilação infinita.

1.e DE QUE SÓ NA COMPOSIÇÃO DO ESTADO $\omega^2=0$ ENTRA O CAMPO EXTERNO

Observemos que sempre existe uma solução da Eq.1.c.3 cuja frequência é nula e para a qual a corrente $J = N(x)E(x)$ é a mesma em todos os pontos, com $N(x)$ sendo a densidade eletrônica e $E(x)$ o campo elétrico sobre a camada de inversão.

Essa ressonância em $\omega^2=0$ é o "fundo de Drude" do sistema.

O modo $\omega^2=0$ tem a particularidade de que o campo elétrico da solução não vai a zero no infinito mas sim a um valor constante. Esse campo constante é um campo externo no sentido de que ele não pode ser produzido pelas cargas da camada de inversão, mas sim por cargas no infinito (componente não modulada do campo de radiação transmitido).

Como a corrente $J_0 = N(x)E_0(x)$ do modo é constante, o campo $E(x)$ é dado por $E(x) = J_0 / N(x)$ e se $N(x)$ é periódica no comprimento a , $E_0(x)$ também o é.

Seja por exemplo uma camada de inversão colocada na interface entre dois meios semi-infinitos. A solução que satisfaz a equação de Laplace fora da camada de inversão, produz um campo periódico no comprimento a e cujo campo vale $E_0(x) = J_0 / N(x)$ para $z = 0$ nesse caso é:

$$\phi_0(x,z) = -A_0 x + \sum_{n=1}^{\infty} A_n \sin\left(\frac{2\pi n x}{a}\right) e^{-2\pi n |z|/a}$$

onde os coeficientes A_n são determinados impondo-se que o campo sobre a camada de inversão $\frac{\partial \phi_0(x,0)}{\partial x}$ é dado por $E_0(x) = J_0 / N(x)$.

Em particular:

$$A_0 = \frac{1}{a} \int_{-a/2}^{a/2} E_0(x) dx = \frac{j_0}{a} \int_{-a/2}^{a/2} \frac{dx}{N(x)} \neq 0 \quad (\text{Eq.1.e.1})$$

Para ver que para os modos de frequência finita o campo vai a zero no infinito, suponhamos que ele não vá e calculemos a frequência do modo usando o método variacional (Eq.1.d.3).

A energia cinética (Eq.1.d.2) é proporcional ao comprimento do sistema e a energia potencial (Eq.1.d.1) é proporcional a esse comprimento vezes uma integral infinita na direção z caso o campo não vá a zero em $z = \infty$. Portanto, o quociente cinética/potencial é nulo (Eq.1.d.3) e a frequência do modo é nula.

Isso mostra que para todos os modos de frequência finita o potencial vai a zero no infinito, ou seja, o coeficiente do termo linear em x na expansão do potencial é nulo.

De acordo com a Eq.1.e.1 esse coeficiente é dado por $A = 1/a \int E_n(x) dx$, onde $E_n(x) = - \frac{\partial \phi_n}{\partial x}(x,0)$ é o campo sobre a camada de inversão associado ao modo de frequência ω_n . Portanto para todos os modos de frequência não nula vale a seguinte relação:

$$\int E_n(x) dx = 0 \quad (\text{Eq.1.e.2})$$

1.f PROPRIEDADE DE ORTOGONALIDADE DOS CAMPOS

Consideremos a n -ésima solução da equação de autovalores (Eq.1.c.3) cuja frequência não nula é ω_n .

Multiplicando a equação para a n -ésima solução pela m -ésima solução, subtraindo esse produto com n e m trocados entre si e integrando no espaço obtemos:

$$\int |\phi_m \nabla \cdot (\epsilon \vec{\nabla} \phi_n) - \phi_n \nabla \cdot (\epsilon \vec{\nabla} \phi_m)| dx dz = \frac{4\pi e^2}{m^*} \left(\frac{1}{\omega_m^2} - \frac{1}{\omega_n^2} \right) \int N(x) \frac{\partial \phi_n}{\partial x}(x,0) \frac{\partial \phi_m}{\partial x}(x,0)$$

onde $-\frac{\partial \phi_n}{\partial x}(x,0) = E_n(x)$ é o campo sobre a camada de inversão no n -ésimo modo do sistema.

Como o potencial é zero no infinito ou sobre o contorno metálico, a integral da esquerda é nula e obtemos a ortogonalidade dos modos:

$$\int N(x) E_n(x) E_m(x) dx = \text{zero se } m \neq n \quad (\text{Eq.1.f.1})$$

Observemos que já que os modos de frequência finita tem valor médio do campo igual a zero (Eq.1.e.2), eles também são ortogonais ao modo $\omega^2 = 0$ ($N(x) E_0(x) = 1$):

$$\int N(x) E_0(x) E_n(x) dx = \int E_n(x) dx = \text{zero} \quad (\text{Eq.1.f.2})$$

Como $N(x) E_n(x) = j_n(x)$ é a corrente do n -ésimo modo, a ortogonalidade pode ser escrita na forma:

$$\int j_n(x) E_m(x) dx = \text{zero se } m \neq n \quad (\text{Eq.1.f.3})$$

1.9 RESPOSTA DO GÁS DE ELÉTRONS A UM CAMPO EXTERNO

Sejam $\phi_n(x,z)$ as soluções da equação de auto-valores para os plasmons de um gás de elétrons bidimensional com densidade eletrônica $N(x)$ (vide Eq.1.c.3).

Sejam $\phi_{ext}(x,z)$ um potencial externo gerado por cargas no infinito ($\nabla^2 \phi_{ext} = 0$) que produz um campo externo sobre a camada de inversão e $\phi(x,z)$ o potencial induzido.

A equação de Poisson nesse caso fica (vide Eq.1.c.3):

$$\nabla \cdot (\epsilon \vec{\nabla} \phi(x,z)) = \frac{4\pi e^2}{m^* \omega^2} \delta(z) \frac{\partial}{\partial x} \left[N(x) \left(\frac{\partial \phi}{\partial x}(x,0) - E_{ext}(x) \right) \right]$$

O campo externo E_{ext} pode ser expandido no conjunto (completo) ortogonal de campos E_n associados aos plasmons (soluções da Eq.1.c.3):

$$E_{ext}(x) = - \sum_n a_n \frac{\partial \phi_n}{\partial x}(x,0) = \sum_n a_n E_n(x) \quad (\text{Eq.1.g.1})$$

onde os a_n são determinados pela relação de ortogonalidade dos campos (Eq.1.f.2):

$$a_n = \frac{\int N(x) E_n(x) E_{ext}(x) dx}{\int N(x) E_n^2(x) dx} \quad (\text{Eq.1.g.2})$$

Nesse ponto introduziremos também um tempo de espalhamento fenomenológico para os elétrons na camada de inversão usando a fórmula de Drude com espalhamento para a condutividade:

$$j = \frac{ie^2 \tau / m^*}{(i + \omega \tau)} N(x) E(x) \quad (\text{Eq.1.g.3})$$

Usando essa equação e a equação de continuidade, a equação de Poisson (Eq.1.c.3) fica:

$$\nabla \cdot (\epsilon \vec{\nabla} \phi) = \frac{4\pi e^2}{m^*} \frac{\tau}{\omega(i+\omega\tau)} \delta(z) \frac{\partial}{\partial x} \left[N(x) \left(\frac{\partial \phi}{\partial x}(x,0) - E_{\text{ext}}(x,0) \right) \right] \quad (\text{Eq. 1.9.4})$$

O potencial induzido pelo campo externo pode ser escrito como uma soma sobre as soluções da Eq.1.c.3:

$$\phi(x,z) = \sum_n A_n \phi_n(x,z)$$

Colocando essa expansão e a expansão do campo externo (Eq.1.g.1) na Eq.1.g.4 e usando a Eq.1.c.3 para calcular $\nabla^2 \phi_n(x,z)$ temos:

$$\sum_n \frac{A_n}{\omega_n^2} \frac{d}{dx} (N(x) E_n(x)) = \frac{\tau}{\omega(i+\omega\tau)} \sum_n (A_n - a_n) \frac{d}{dx} (N(x) E_n(x))$$

Usando a relação de ortogonalidade dos modos podemos calcular os coeficientes A_n :

$$A_n = \frac{\tau \omega_n^2}{\tau(\omega_n^2 - \omega^2) + i\omega} a_n \quad (\text{Eq. 1.9.5})$$

Essa é a amplitude da resposta do gás de elétrons ao campo externo.

Agora, usando a fórmula de Drude (Eq.1.g.3) podemos calcular a corrente total a partir do campo total e depois calcular a potência absorvida do campo externo, $p = 1/2 \text{Re}\{\int j(x) E^*(x) dx\}$. O resultado é uma soma de lorentzianas:

$$p = \frac{e^2 \tau}{2m^*} \sum_{\lambda} \frac{\omega_{\lambda}^2}{\omega^2 + (\omega_{\lambda}^2 - \omega^2)^2 C^2} |C_{\lambda}|^2 \quad (\text{Eq. 1.9.6})$$

onde

$$|C_{\lambda}|^2 = \frac{|\int N(x) E_{\lambda}(x) E_{\text{ext}}(x) dx|^2}{\int N(x) E_{\lambda}^2(x) dx} \quad (\text{Eq. 1.9.7})$$

2.a A EXPERIÊNCIA COM GÁS MODULADO

Nesse capítulo reinterpreteremos os resultados experimentais apresentados por U. Mackens et al, em 1984 [9] e num artigo posterior por D. Heitmann et al em 1985 [22].

Fig.12 Variação da transmissão no infravermelho distante para a camada de inversão modulada da Fig.11. A linha quebrada representa o espectro para polarização paralela à grade e à voltagem $V_g - V_t = 4V$ (U. Mackens et al, [9]).

Fig.11- Amostra usada por U.Mackens $a = 650 \text{ nm}$, $d = 35 \text{ nm}$, $d = 60 \text{ nm}$ $t/a \approx 0.3$. Espessura de NiCr: $e = 3 \text{ nm}$ (U. Mackens et al [9])

A camada de óxido modulada da Fig.11 faz com que a densidade de carga na camada de inversão tenha valores diferentes para as duas regiões diferentes. Na aproximação de capacitor

plano a densidade é dada por 1.a.1 ($N_i = \frac{\epsilon_{ox}(V_g - V_t)}{4\pi e d_i}$, $i=0,1$)
(vide Fig.13).

U. Mackens et al mediram a oscilação da condutividade (Shubnikov de Haas) para essa amostra e encontraram duas ressonâncias bem resolvidas que correspondem a densidades eletrônicas N_0 e N_1 que concordam com o previsto pela aproximação de capacitor plano.

Fig.13 - Densidade eletrônica na camada de inversão na aproximação de capacitor plano.

Nessas condições de densidade eletrônica e comprimento de modulação o efeito quântico não é importante para determinar a densidade eletrônica, já que $k_F t = 100$, onde k_F é o vetor de onda de Fermi do gás de elétrons e $t = 200\text{nm}$ é o comprimento da região de modulação (vide Fig.13).

O efeito de borda eletrostático faz com que a densidade eletrônica não tenha a descontinuidade calculada pela aproximação de capacitor plano, mas sim que varie continuamente do valor maior N_1 até o valor menor N_0 numa região da ordem da separação d entre as placas do capacitor. Isso faz com que a extensão da região de alta densidade seja da ordem de $t + 2d$ ou seja 260 nm , um pouco maior que o valor $t = 200\text{nm}$ previsto pela aproximação de capacitor plano.

U. Mackens et al argumenta que os picos w_- e w_+ da

Fig.12 são os estados de paridades opostas obtidos pela teoria de perturbação de Chaplik (vide Eq. 1.c.6).

Nós argumentamos que o contorno feito pelo portão metálico é par e portanto o campo elétrico que chega na camada de inversão é par e não excita o modo ímpar.

Pode-se perguntar se irregularidades na forma do portão metálico não poderiam produzir o necessário campo ímpar. Observe-mos que se isso for o caso, esse sinal ímpar deveria ser comparável ao sinal par pois os picos w_+ e w_- da Fig.12 tem alturas comparáveis. No entanto tais irregularidades certamente quebrariam a periodicidade do portão metálico, e como a forma do portão também determina a densidade eletrônica de equilíbrio do gás de elétrons, essa quebra de periodicidade produziria estados no "gap" entre par e ímpar que seriam agora excitados. Deste modo, ao invés de duas ressonâncias bem resolvidas a Fig.12 deveria apresentar um único pico muito mais largo.

U. Mackens et al também observaram que o "splitting" calculado pela teoria de perturbação (Eq.1.d.5) é duas vezes menor que o resultado experimental, de onde concluiu-se que a teoria de perturbação talvez não valha para essa modulação e que a segunda ordem de perturbação aumentaria o "splitting".

Na verdade o que ocorre é justamente o oposto, pois os outros termos da série fazem diminuir o "splitting" (definido em 1.d.5).

Na hipótese do portão metálico ser de alta resistividade ($\sigma=0$), como foi suposto na ref.9, o "splitting" (Eq.1.d.5) entre os estados par e ímpar com os dados da Fig.12 foi calculado

numericamente com o procedimento da página 36 e vale $\Delta\omega^2/\omega^2 = 0.13$. O resultado perturbativo é 0.24 e o "splitting" experimental é 0.48 .

O que nós propomos como interpretação desse experimento é que em primeiro lugar todos os estados excitados são pares, ou seja, as ressonâncias ω_- e ω_+ da Fig.12 são os estados deformados adiabaticamente a partir dos estados pares em $G = 2\pi/a$ e $G = 4\pi/a$ (centros da zona de Brillouin).

Se o portão metálico fosse liso e de alta resistividade ($\sigma = 0$) e o gás de densidade constante N_0 , esses centros seriam dados por $\omega^2 = \frac{2\pi N_0 e^2}{m^* \epsilon} |G|$; $|G| = \frac{2\pi}{a}, \frac{4\pi}{a}$ (vide Eq.1.c.4) e o "splitting" seria $\Delta\omega^2/\omega^2 = (2-1)/1.5 = 0.67$ desde já muito mais próximo do resultado experimental 0.48.

O que nós faremos a seguir é mostrar que o efeito da modulação e da condutividade finita do portão metálico aproxima as primeiras bandas. Para isso iremos supor que apenas o metal colocado sobre a região de alta densidade blinda a oscilação. Como o NiCr tem resistividade finita, certamente a par mais próxima da camada de inversão tem efeito mais importante na blindagem.

Para ver que o NiCr pode ter efeito metálico, suponhamos que esse filme tenha a mesma condutividade volumétrica do NiCr cristalino, que no CGS vale $\sigma = 10^{15} \text{ sec}^{-1}$ [19]. Para um filme de espessura $e = 3\text{nm}$ a condutividade bidimensional é $\sigma e = 3 \times 10^6 \text{ m/s}$.

Para que a fita metálica de comprimento t colocada sobre a região de alta densidade (Fig.14) consiga blindar a

oscilação de frequência ω , o elétron deve correr de uma ponta a outra da fita metálica no tempo $T = \pi/\omega$. O tempo gasto pelo elétron para atravessar uma fita de comprimento $t=200\text{nm}$ é:

$$\tau = \frac{t}{v_e} = \frac{2.0 \times 10^{-7}}{3.0 \times 10^6} = 6.6 \times 10^{-14} \text{ sec}$$

para ser comparado com o tempo de oscilação π/ω que no infravermelho distante é:

$$T = \frac{\pi}{1.8 \times 10^{13}} = 1.7 \times 10^{-13} \text{ sec}$$

Portanto se o filme for cristalino, os elétrons conseguem blindar as oscilações ($\tau/T < 1$) numa escala de distâncias de 200 nm.

Todavia, numa escala de distâncias de 6000 nm tais tempos são comparáveis e conseqüentemente oscilações de plasma nesse comprimento de onda são blindadas apenas parcialmente.

Fig.14 - O dipolo induzido na fita metálica pelo campo da oscilação tende a anular esse campo na região debaixo da fita.

Suponhamos que o campo da oscilação em $G = 2\pi/a$ seja dado aproximadamente por $E_x(x,z) = \cos(\frac{2\pi x}{a})e^{-2\pi|z|/a}$. Para $z=d_1$ e $|x| < t/2$, esse campo é aproximadamente constante sobre a fita se $t/a < 0.3$. O campo constante induz um dipolo na fita que tende a anular esse campo na região debaixo da fita, ou seja, a fita metálica expulsa o campo elétrico da região de alta densidade eletrônica ($|x| < t/2$, $z=0$).

Outro efeito que contribui para expulsar o campo da região de alta densidade é a modulação de densidade eletrônica. Como já vimos (Cap.I, pg.19) a corrente deve ser uma função contínua e suave, que para o primeiro modo é dada aproximadamente por $N(x)E(x) = \cos GX$. Assim, a modulação também contribui no sentido de diminuir o campo do primeiro modo na região de alta densidade.

É interessante considerar a situação limite onde a fita

metálica está muito próxima da camada de inversão ($d_1 \approx 0$ na Fig.14). Nessa situação considerando que as paredes metálicas em $|x| = t/2$ se estendem até o infinito a solução para o potencial está ilustrada na Fig.15.

Fig.15 - Situação limite onde a fita metálica está muito próxima da camada de inversão.

A solução da Equação de Laplace que vai a zero para grandes valores de z e se anula em $|x| = L/2$ é dada por:

$$\phi_L(x,z) = \sum_n \alpha_n \sin\left(\frac{2\pi nx}{L}\right) e^{-2\pi nz/L} \quad (\text{Eq.2.b.1})$$

e a solução para valores negativos de z é dada por

$$\phi_a(x,z) = \sum_n A_n \sin\left(\frac{2\pi nx}{a}\right) e^{2\pi nz/a}, \quad z < 0$$

onde os coeficientes A_m são funções lineares dos α_m determinados impondo que o campo tangencial é contínuo, com o campo tangencial da solução $\phi_L(x,z)$ (Eq.2.b.1) para $|x| < L/2$ e zero sob a fita

metálica.

Para calcular o primeiro modo usaremos a Eq.2.b.1 com $\alpha_1=1, \alpha_2 \neq 0$ e $\alpha_3=\alpha_4=\dots=\alpha_n = 0$.

Colocando essa combinação no método variacional (Eq.1.d.3) e minimizando em relação ao parâmetro α_2 no caso ($t/a = 0.25$, densidade eletrônica N_0 para $|x| < L/2$, constante dielétrica do óxido $\epsilon_{ox} = 4$ e constante do silício $\epsilon_s = 12$) temos que para o primeiro modo $\alpha_2 = 0.035$ e a frequência é:

$$\omega^2 = \frac{4\pi^2 N_0 e^2}{m^* \bar{\epsilon} a} \times 1.42$$

onde $\bar{\epsilon}$ é a média entre as constantes dielétricas e os outros parâmetros são definidos como em (Eq.0.1). A forma do campo está esboçada na Fig.16, e o fato de α_2 ser pequeno justifica a proposta variacional.

A frequência do primeiro estado aumentou de 42% em relação ao valor quando não existe metal, isto é, aquele para um gás de densidade uniforme N oscilando com vetor de onda $G = 2\pi/a$ numa interface entre dois meios infinitos dados por ϵ_{ox} e ϵ_s . Esse aumento da frequência é consequência da expulsão do campo da região sob a fita, pois agora os vetores de onda para escrever o campo na camada de inversão são maiores.

Como mostramos no parágrafo 1, a corrente do segundo estado tem que ser ortogonal ao campo do primeiro, e como o campo associado ao primeiro estado torna-se pequeno na região de alta densidade, aparece a oportunidade do segundo estado ter a corrente localizada nessa região. Além de facilitar a ortogonalização, essa localização é favorável porque a oscilação sob a fita metálica é blindada por essa e tem sua frequência abaixada

(o segundo estado tem que ter a frequência mais baixa possível sendo ortogonal ao primeiro e ao estado de frequência zero).

Supondo que o primeiro estado já tem a forma limite (Fig.16), propomos que a corrente do segundo seja dada por:

$$j_2(x) = \begin{cases} -A & \text{se } |x| < L/2 \\ -A + \sqrt{1 - (2x/t)^2} & \text{se } L/2 < x < a/2 \end{cases}$$

Fig.16 - Campo do primeiro estado e corrente do segundo estado.

Essa forma é ortogonal ao campo $E_1(x)$ da Fig.16, e a constante A que entra em $j_2(x)$ é escolhida para que a corrente também seja ortogonal ao estado fundamental $E_0(x) = 1/N(x)$.

Para levar em conta o efeito da fita metálica sobre esse estado, notemos que a densidade de carga dessa oscilação $n_2(x) = dj_2(x)/dx$ se localiza toda debaixo da fita, e portanto as cargas imagens produzidas pelo metal ficam todas sobre a região da fita ($L/2 < x < a/2$ na Fig.14). Em vista disso, os efeitos da blindagem da fita são aproximadamente os mesmos caso ela se estendesse por todo o período a , pois de qualquer forma as cargas imagens criadas pelo metal estão todas sobre a região da fita.

No que segue consideraremos um portão metálico liso

colocado a uma distância d_1 da camada de inversão. A partir da corrente $j_2(x)$ calculamos o campo $E_2(x) = j_2(x)/N(x)$ e para calcular a frequência associada a esse modo usamos o método variacional (Eq.1.d.3) com o potencial dado por:

$$\phi_2(x,z) = \begin{cases} \sum_{G=2\pi n/a} \frac{1}{G} A_G \frac{\sinh G(z-d_1)}{\sinh Gd_1} \sin Gx & , \quad 0 < z < d_1 \\ - \sum_{G=2\pi n/a} \frac{1}{G} A_G e^{Gz} \sin Gx & , \quad z < 0 \end{cases}$$

Esse potencial é zero em $z=d_1$ na aproximação de portão metálico liso, produz campo tangencial contínuo sobre a camada de inversão ($z = 0$) e vai a zero na região do semiconductor a grandes distâncias da camada de inversão ($z = -\infty$). Os coeficientes A_G são escolhidos de forma a produzir o campo longitudinal $E_2(x) = j_2(x)/N(x)$ sobre a camada de inversão.

Com os dados da Fig.11, ou seja, $d_1 = 35$ nm, e $t/a = 0.25$ o valor da frequência é:

$$\omega^2 = \frac{4\pi^2 N_0 e^2}{m^* \epsilon a} \times 1.77$$

Nesse caso, o "splitting" entre os centros das duas bandas é:

$$\frac{\Delta\omega^2}{\omega^2} = \frac{1.77-1.42}{(1.77+1.42)/2} = 0.22$$

menor que o valor 0.67 para um gás sem modulação e sem contorno metálico.

Essa situação limite ilustra o fenômeno de aproximação de bandas que estamos propondo.

Os cálculos acima são apenas uma estimativa exagerada

para ilustrar o efeito, pois nas presentes condições experimentais (Fig.11) o campo do primeiro modo ainda não foi completamente expulso da região de alta densidade e por isso sua frequência não é tão alta. No entanto essa situação guarda todas as características que queremos enfatizar, ou seja, aproximação dos centros das bandas e localização da densidade de carga do segundo modo na região de alta densidade produzindo um momento de dipolo que se acopla fortemente com a componente espacialmente constante do campo transmitido. Esse ponto será discutido com mais detalhes no parágrafo 2.c .

Para finalizar essa seção faremos uma breve exposição do procedimento de cálculo numérico utilizado no cálculo dos modos na situação real (Fig.11).

O procedimento foi tomar uma proposta variacional que satisfaz as condições de contorno do problema, calcular a frequência usando a Eq.1.d.3 e minimizar a frequência em relação aos parâmetros variacionais. Para achar a proposta que satisfaz as condições de contorno dividimos o espaço em tres regiões como mostra a Fig.17 .

Fig.17

Na região 1 a solução, ímpar da equação de Laplace que se anula em $z=d_0$ e $|x|=L/2$ é da forma:

$$\phi_1(x,z) = \sum_n A_n \sinh \frac{2\pi n}{L}(d_0 - z) \cdot \sin \left(\frac{2\pi n x}{L} \right)$$

onde os A_n são coeficientes indeterminados. Na região 2 a solução geral é da forma:

$$\phi_2(x,z) = \sum_n \left[B_n \cosh \left(\frac{2\pi n z}{a} \right) + C_n \sinh \left(\frac{2\pi n z}{a} \right) \right] \sin \left(\frac{2\pi n x}{a} \right)$$

A condição de contorno de campo tangencial contínuo impõe que o campo $-\partial\phi_2/\partial x$ produzido pela solução 2 se anule sobre a fita metálica ($L/2 < x < a/2$, $z=d_1$) e seja igual ao campo da solução 1 na interface entre as regiões 1 e 2 ($|x| < L/2$, $z=d_1$).

Além disso o campo normal produzido pela solução 1 deve ser igual ao campo normal produzido pela solução 2 na interface entre as duas regiões. Essas duas condições de contorno são duas relações matriciais que determinam os coeficientes A_n e C_n em função dos coeficientes B_n .

A solução na região 3 que vai a zero para $z=-\infty$ é:

$$\phi_3(x,z) = \sum_n D_n e^{2\pi n z/a} \sin(2\pi n x/a)$$

e a condição que o campo tangente seja contínuo sobre a camada de inversão ($z=0$) determina os coeficientes D_n em função dos coeficientes B_n .

O que faremos a seguir é colocar essa solução dependente dos parâmetros arbitrários B_n no método variacional (Eq.1.d.3) e minimizar em relação a esses coeficientes. Usamos uma solução com os vinte primeiros coeficientes B_n diferentes de zero e diagonalizamos a matriz 20×20 numericamente.

Para considerar apenas o efeito do metal colocado sobre a região de alta densidade colocamos $d_0 = \infty$ (vide Fig.17). Para a situação mostrada na Fig.11, ou seja, $d_1 = 35\text{nm}$, $a = 650\text{nm}$ e $\Delta N/N_0 = 0.7$ as três primeiras frequências obtidas são: $\omega_1^2 = 1.27$, $\omega_2^2 = 2.27$ e $\omega_3^2 = 3.62$, medidas em unidades $\omega_G^2 = 4\pi^2 N_0 e^2 / m^* \epsilon a = 1$, onde N_0 é a densidade deslocalizada (Fig.13) e a a periodicidade.

Nessa situação o "splitting" entre os primeiros dois estados pares é $\Delta\omega^2/\omega^2 = 0.56$, para ser comparado com o valor experimental 0.48 [9]. Essas frequências calculadas com os valores da Fig. 11 para voltagem de portão $V_g - V_t = 4\text{V}$ são: 63.6cm^{-1} , 85.0cm^{-1} e 108.0cm^{-1} , enquanto os valores experimentais são (vide Fig.12): 66.6cm^{-1} , 88.0cm^{-1} e 113.2cm^{-1} , respectivamente.

2.c ACOPLAMENTO DOS PLASMONS COM O CAMPO INFRAVERMELHO TRANSMITIDO

U. Mackens et al [15] observaram que o acoplamento dos plasmons do sistema modulado com a luz infra-vermelha é muito maior que no sistema modulado usado por D. C. Tsui [8]. Esse fato não pode ser atribuído simplesmente a uma maior eficiência da grade usada por U. Mackens (Fig.11) para modular o campo eletrostático transmitido, pois justamente o contrário deveria ocorrer já que na amostra de D. C. Tsui (Fig.1) d_{ox}/a é menor que na amostra usada por U. Mackens (Fig. 11).

O motivo desse maior acoplamento é que no sistema modulado os plasmons se acoplam com a componente constante do campo transmitido. Esse fato pode ser visto usando a Eq.1.g.7 com $E_{ext}(x)=E_0$ e $\Delta N(x)=N_0+\Delta N(x)$ respectivamente o campo constante transmitido e a densidade eletrônica modulada. A intensidade da ressonância (Eq.1.g.7) fica:

$$|C_\lambda|^2 = \frac{E_0^2 \left\{ \int |N_0 + \Delta N(x)| \epsilon_\lambda(x) dx \right\}^2}{\int N(x) \epsilon_\lambda^2(x) dx} \quad (Eq.2.c.1)$$

onde $\epsilon_\lambda(x)$ é o auto-campo do plasmon.

Para os modos de frequência não nula, usando a Eq.1.e.2 podemos reescrever a Eq.2.c.1 como:

$$|C_\lambda|^2 = \frac{E_0^2 \left| \int \Delta N(x) \epsilon_\lambda(x) dx \right|^2}{\int N(x) \epsilon_\lambda^2(x) dx}$$

de onde fica claro que a modulação $\Delta N(x)$ acopla os modos de fre-

quência não nula com o campo constante transmitido, por isso a maior absorção do sistema modulado.

Além disso U. Mackens observou que a ressonância ω_+ é sempre maior que a ressonância ω_- , e a explicação dada ao fato é que plasmons pares induzem na grade um momento de dipolo não nulo e que esse momento de dipolo irradia (daí o maior acoplamento com o campo de radiação). Essa questão foi investigada por Chaplik [16] e a conclusão é que nas condições da experiência de U. Mackens o efeito radiativo é desprezível.

Segundo a nossa interpretação, como o modo ω_+ é localizado na região de alta densidade, o seu acoplamento com o campo constante é grande. Só por ilustração, na situação limite apresentada em 2.b só o modo ω_+ acopla com o campo constante (vide Fig.16).

Para os dois primeiros modos calculados numericamente na situação real (página 36) o acoplamento com o campo constante é aproximadamente o mesmo. O que faz o segundo modo absorver mais potência é que a componente de Fourier em $2\pi/a$ do campo transmitido interfere destrutivamente com o campo constante, reduzindo sua amplitude de excitação. Isto pode ser visto notando-se que o campo infra-vermelho incidente induz um dipolo na fita metálica colocada sobre a região de alta densidade que tende a despolarizar o campo da luz (vide Fig.18). Por causa disso o primeiro coeficiente de Fourier do campo que chega sobre a camada de inversão deve ser negativo, de forma a diminuir o campo na região de alta densidade ($|x| < t/2$, vide Fig.18).

Fig.18 - O dipolo induzido pelo campo da luz na fita metálica produz o campo es-
boçado acima.

Supondo que o campo transmitido tenha a forma $E(x) = 1 + E_1 \cos(\frac{2\pi x}{a})$, as amplitudes de acoplamento (Eq.1.9.7) desse campo com os dois primeiros modos foram calculadas através dos auto-campos obtidos na pag.36. Desta forma encontrou-se:

$$C_1^2 = N_0 \times a \times 0.036 (1 + 4.37 E_1)^2$$

$$C_2^2 = N_0 \times a \times 0.019 (1 + 0.9 E_1)^2$$

A intensidade do pico ω_+ na Fig.12 é duas vezes maior que a do pico ω_- e o valor de E_1 necessário para produzir esse efeito é $E_1 = -0.12$. Para o contorno da Fig.11 a forma do campo transmitido é muito difícil de ser calculada.

Na experiência de D. C. Tsui (vide Fig.1) o contorno é menos complicado e a forma do campo transmitido pode ser calculada [8]. O valor da primeira componente de Fourier para $t'/a = 0.7$ (Fig.1) é $E_1 = -0.2$. Apesar da forma do contorno na amostra de Tsui ser diferente, isso mostra que pelo menos essa ordem de grandeza para a componente de Fourier é plausível. Aqui ficamos devendo uma estimativa melhor que deveria ser feita como na referência [21].

Uma grandeza que U. Mackens [9] também mediu foi a absorção da camada de inversão quando o campo incidente está polarizado na direção paralela às linhas de modulação. O resultado obtido é um espectro de Drude como pode ser visto nas Fig.12. Como nessa direção o sistema é invariante por translação contínua, esse espectro é atribuído à translação uniforme de todos os elétrons do sistema que seguem o campo (espacialmente constante) incidente sobre a camada de inversão.

Uma observação interessante é que a curva de absorção da Fig.12 passa abaixo desse fundo de Drude. O que ocorre é que o fundo de Drude excitado com polarização perpendicular é menos intenso que o fundo excitado com polarização paralela. Tal fato pode ser visto, calculando-se a amplitude de acoplamento do modo $\omega^2=0$ de um gás com densidade $N_0 + \Delta N(x)$ com um campo constante paralelo às linhas de modulação, onde $\Delta N(x)$ é constante se $|x| < t/2$ e zero no resto do período a . Como nessa direção o sistema possui invariância de translação contínua, o auto-campo do modo é espacialmente constante nessa direção. Supondo que a amplitude do campo externo é E , o acoplamento pode ser calculado com a Eq.1.g.7 e vale:

$$C_{\parallel}^2 = E^2 \int N(x) dx = E^2 N_0 L (1 + t \Delta N / a N_0) \quad (\text{Eq.2.c.2})$$

onde L é o comprimento do sistema.

Como vimos na seção 1.e o modo $\omega^2 = 0$ de oscilação perpendicular às linhas de modulação do sistema tem auto-campo da forma $E_0(x) = \frac{1}{N(x)}$. Nessa situação o acoplamento com o campo constante perpendicular às linhas de modulação fica:

$$C_{\perp}^2 = \frac{E^2 L^2}{\int dx / N(x)} \approx E^2 N_0 L \left| 1 + \frac{(t \Delta N / a N_0)}{(1 + \Delta N / N_0)} \right|$$

e podemos ver que C_1^2 é sempre menor que C_2^2 .

3.a A EXPERIÊNCIA COM PARIDADE QUEBRADA

Em 1985, D. Heitmann [11] propôs um experimento onde a paridade foi propositadamente quebrada (vide Fig.19). Na amostra usada a espessura da camada de óxido é constante e superposta a esta existe uma grade de fotoresistor. Sobre o eletrodo metálico de NiCr foi evaporada a baixo ângulo uma fina camada de alumínio de modo a quebrar explicitamente a paridade (vide Fig.19).

Fig.19 - Estrutura MOS e grade usadas por D.Heitmann. $d_{ox} \approx 20 \text{ nm}$, $d_{PR} \approx 120 \text{ nm}$, $a = 642 \text{ nm}$, $t/a = 0.5$ (D.Heitmann [11], 1985)

Na aproximação de capacitor plano a densidade eletrônica na camada de inversão vale $n_s(x) \approx \frac{q\phi(x)}{t}$ para $|x| < t/2$ e $n_s(x) = 0$ no resto do período.

A modulação $n_s(x)$ confinada na região de alta densidade chamaremos gás de caixa (Parte localizada da densidade eletrônica, vide Fig.22).

Nessa experiência, D.Heitmann argumenta que a paridade foi quebrada, fato que nós não discutimos. O que nós observamos é que a modulação não pode ser tratada como perturbação sobre um gás não-modulado, pois a densidade eletrônica n_s da modulação é seis

vezes maior que a densidade N_0 da parte deslocalizada.

Como a densidade deslocalizada é muito menor que a densidade localizada, essa situação é muito mais próxima do caso onde a parte deslocalizada é nula e o gás está completamente localizado dentro das caixas periódicas.

Observemos que a teoria de perturbação (Eq.1.d.4) usada na interpretação de D. Heitmann [11], prevê que o estado de frequência mais alta w_+ seja o estado par, e por isso a absorção desse estado deveria ser maior que a absorção do estado w_- . Nessa situação ocorre justamente o contrário, a ressonância w_- é maior que a ressonância w_+ .

Como veremos a seguir, a paridade do modo de oscilação localizada de menor frequência (w_-) é par, e mesmo estando a grade com a paridade quebrada só o acoplamento dipolar com a componente constante do campo transmitido já garante que esse modo seja o mais excitado.

No parágrafo seguinte consideraremos a oscilação coletiva de uma densidade eletrônica completamente confinada dentro de uma "caixa".

3.b OSCILAÇÃO COLETIVA NUM SISTEMA COM DENSIDADE LOCALIZADA

Mostraremos agora um caso de densidade de carga localizada onde a equação 1.c.3 pode ser resolvida exatamente. Tal caso serve para ilustrar as características de plasmons em sistemas com densidade de carga localizada.

Consideraremos a densidade de carga localizada numa região onde $|x| < t/2$ e cuja forma é $N(x) = N_c \sqrt{1 - (2x/t)^2}$. Para o modo de campo par por exemplo temos que resolver a equação de Laplace no espaço com a condição de contorno que o potencial vá a zero no infinito, seja zero no eixo $x = 0$ e a densidade de carga $n(x) = \frac{1}{2\pi} \frac{\partial \phi(x,0)}{\partial z}$ seja dada pela equação de continuidade (Eq.1.c.1):

$$n(x) = \frac{1}{2\pi} \frac{\partial \phi}{\partial z}(x,0) = \frac{e^2}{m^* \epsilon \omega^2} \frac{d}{dx} (N(x) \frac{\partial \phi}{\partial x}(x,0))$$

Usaremos a transformação conforme que resolve o problema eletrostático de uma fita metálica carregada:

$$\begin{aligned} x &= t/2 \cosh \xi \operatorname{sen} \eta & 0 < \xi < \infty \\ y &= t/2 \operatorname{senh} \xi \cos \eta & -\pi/2 < \eta < \pi/2 \end{aligned}$$

Fig. 20 - Como o contorno em (x, z) é mapeado no contorno em (η, ξ) .

A solução separada que satisfaz $\phi=0$ em $\eta=0$ e $\partial\phi/\partial\eta=0$ em $\eta=\pi/2$ é $\phi=\text{sen}\alpha\eta e^{-\alpha\xi}$ onde α é um inteiro ímpar.

Essa solução também satisfaz o contorno em $\xi=0$ (vide Fig.20) e determina as frequências de oscilação:

$$\omega_{\alpha}^2 = \frac{4\pi N_c e^2}{m^* \epsilon t} \times \alpha \quad (\text{Eq.3.b.1})$$

Para as oscilações com campo ímpar o potencial é $\phi=\cos\alpha\eta e^{-\alpha\xi}$ e as frequências são dadas pela mesma fórmula, com α sendo um inteiro par.

Se reescrevemos o campo na variável x , as soluções são os polinômios de Chebyshev na variável x . Para o primeiro modo de campo par o campo elétrico é dado por:

$$E(x) = \begin{cases} 1 & \text{se } |x| < t/2 \\ 1 - \frac{2|x|/t}{\sqrt{(2x/t)^2 - 1}} & \text{se } |x| > t/2 \end{cases} \quad (\text{Eq.3.b.2})$$

Fig. 21 - Primeiro modo de campo par (estado fundamental). A linha cheia representa o campo elétrico, a linha pontilhada é a densidade localizada $N(x)$ e a linha tracejada é a oscilação de carga $n(x)=d/dx(N(x)E(x))$.

Desde que $J(x) = 0$ para $|x| > t/2$, a corrente $J(x) = N(x)E(x)$ vai a zero na extremidade de modo a não criar um fio de carga na borda, embora a densidade de carga seja divergente na extremidade da caixa (nesse caso tem uma singularidade integrável).

Até aqui estudamos uma única caixa isolada. Quando colocamos as caixas uma do lado da outra para tornar o sistema periódico existe uma interação entre elas. Para calcular os efeitos dessa interação no primeiro modo par, supomos que todas as caixas estão oscilando no primeiro estado par (vide Fig.21), observando que se as caixas estão suficientemente separadas ($t/2a \ll 1$) o campo que uma caixa faz sobre a outra é dipolar (vide Eq. 3.b.2).

Suponhamos que cada caixa oscile com amplitude A no estado 3.b.2. O campo de dipolo sobre uma caixa causado por todas as outras é aproximadamente constante dentro da caixa e vale:

$$E = - \frac{\pi^2}{6} \left(\frac{t}{2a}\right)^2 A$$

Se esse é o campo externo, a amplitude de oscilação do sistema é dada pela Eq.1.g.5 com $\tau = \infty$ e vale:

$$A = - \frac{\pi^2}{6} \left(\frac{t}{2a}\right)^2 A \cdot \frac{\omega_1^2}{\omega^2 - \omega_1^2} \quad (\text{Eq.3.b.3})$$

onde $\omega_1^2 = 4\pi N_c e^2 / m^* \epsilon t$ é a frequência da oscilação isolada. Portanto, a frequência de oscilação do sistema periódico é:

$$\omega^2 = \omega_1^2 \left| 1 - \frac{\pi^2}{6} \left(\frac{t}{2a}\right)^2 \right| \quad (\text{Eq.3.b.4})$$

e para $t/a = 0.5$ temos: $\omega^2 = 0.9\omega_1^2$

Como os outros modos possuem nós dentro da caixa, o dipolo é muito menor e a correção é desprezível.

Além do efeito já ser pequeno, o dipolo imagem feito pelo portão metálico praticamente cancela a interação dipolar. Consequentemente, o efeito é ainda menor que o previsto pela Eq.3.b.4. No que segue nós não consideraremos a interação inter-caixas.

Outra coisa que pode ser questionada é o efeito da parte deslocalizada. Nessa situação a grandeza relevante é o vetor de onda da oscilação da parte deslocalizada na frequência de oscilação da parte localizada.

Para o gás deslocalizado temos $\omega^2 = 2\pi N_0 e^2 |G| / m^* \epsilon$ onde $|G|$ é o vetor de onda da oscilação. Igualando essa frequência com a frequência da parte localizada $\omega_c^2 = 4\pi e^2 \Delta N / m^* \epsilon t$, temos:

$$Gt = 2\Delta N / N_0$$

e para os dados da Fig.19, temos $Gt = 12 \approx 4\pi$, portanto o campo deslocalizado dá duas oscilações completas dentro da caixa e não se acopla com o campo constante (3.b.2) gerado pela densidade localizada.

Fig.22 - Representação esquemática da densidade eletrônica para os dados da Fig.19.

Observemos que esses estados localizados não são a continuação analítica dos estados de oscilação de um gás com densidade constante, ou seja, eles não podem ser obtidos adiabaticamente (perturbativamente) a partir dos estados de um gás não modulado. Como mostramos no Apêndice II, esses estados só aparecem depois de uma modulação crítica. Por esse fato o uso de teoria de perturbação é completamente insustentável nesse problema. Por exemplo, o modo de oscilação localizada com frequência mais baixa é o modo par, enquanto a teoria de perturbação preve o contrário.

Observemos também que para uma oscilação de densidade localizada o "damping" de Landau passa a ser importante. No Apêndice I, calculamos o "damping" de Landau associado a esses modos.

3.c EFEITO DO PORIÃO METÁLICO

Na presente situação experimental o eletrodo superior de NiCr está colocado mais próximo da camada de inversão (20 nm) do que nas experiências anteriores (60 nm na experiência da Fig.11). Mesmo que a condutividade do NiCr seja pequena (vide página 29), já deve haver algum efeito de blindagem e a constante dielétrica deve ser maior que o valor $\bar{\epsilon} = 1/2(\epsilon_{ox} + \epsilon_s) = 8$. Além disso existe a camada de alumínio colocada sobre a região de alta densidade que certamente tem efeito metálico.

Para estimar esse efeito, calcularemos o efeito de um

portão metálico plano colocado a uma distância d (20 nm) da camada de inversão, de forma similar ao que fizemos na página 34, ou seja, iremos supor que o efeito da blindagem não muda muito a forma funcional do campo elétrico ao longo da camada de inversão.

O potencial elétrico da oscilação na região do óxido fica:

$$\phi(x,z) = - \sum_{G=2\pi n/2} \frac{1}{G} A_G \frac{\sinh G(d-z)}{\sinh Gd} \sin Gx \quad (\text{Eq.3.c.1})$$

onde os A_G são determinados impondo que o campo na camada de inversão seja o campo da solução obtida em 3.b. Por exemplo para o primeiro modo par (vide 3.b.2) temos $A_G = \frac{1}{a} j_1(Gt/2)$, onde j_1 é a função de Bessel.

Colocando esse potencial no método variacional (Eq.1.d.3) a constante dielétrica na presença do metal fica:

$$\epsilon = \frac{1}{2} \times \frac{\sum \frac{1}{G} A_G^2 (\epsilon_s + \epsilon_{ox} \coth Gd)}{\sum \frac{1}{G} A_G^2} \quad (\text{Eq.3.c.2})$$

Para o primeiro modo par (3.b.1), com os dados da Fig.19, temos $\epsilon_1 = 14.8$ e para o primeiro ímpar $\epsilon_2 = 12.6$.

3.d COMPARAÇÃO COM OS RESULTADOS EXPERIMENTAIS

Fig. 23 - Variação da transmissão no infra-vermelho distante para a estrutura MOS da Fig.19. (D. Heitmann [11], 1985)

Agora usaremos a fórmula $\omega^2 = \frac{4\pi e^2 \Delta N}{m^* \epsilon t} \alpha$ para calcular as ressonâncias da Fig.23 , onde ΔN é a densidade eletrônica localizada (vide Fig.22). Para os modos de campo par, α é inteiro ímpar e para os modos de campo ímpar é inteiro par.

Iremos supor que a constante dielétrica é a mesma para todos os modos e calcularemos o valor de ϵ a partir dos dados da Fig.23 para comparar com o valor calculado na seção 3.c .

A densidade eletrônica ΔN de acordo com 1.a.1 e Fig.19 vale:

$$\Delta N = \frac{\epsilon_{ox}(V_g - V_t)}{4\pi e} \left[\frac{1}{d_{ox}} - \frac{1}{d_{ox} + d_{PR}} \right] = 0.92 \times 10^{12} \times (V_g - V_t) \frac{e\ell/cm^2}{volt}$$

e a frequência de oscilação vale:

$$\omega^2 = \frac{4\pi\Delta Ne^2}{m^*\epsilon t} \cdot \alpha = 4.14 \times 10^{23} \times \frac{(V_g - V_t)}{\epsilon} \cdot \alpha$$

onde α é o número inteiro.

Ou seja:

$$\frac{1}{\lambda\sqrt{\alpha}} = 107.9 \sqrt{\frac{V_g - V_t}{\epsilon}} \frac{\text{cm}^{-1}}{\text{volt}^{1/2}} \quad (\text{Eq. 3.c.1})$$

Como observou D.Heitmann [11], as frequências dos modos são lineares com a voltagem de portão $((V_g - V_t)^{1/2})$.

Para as quatro curvas da Fig.23 tabelamos o resultado experimental $1/\lambda\sqrt{\alpha}$ que deve ser um número constante de acordo com a nossa interpretação. A partir desse número calculamos o valor da constante dielétrica para acertar a nossa fórmula (eq. 3.c.1) com a experiência (vide tabelas abaixo).

$$V_g - V_t = 3.4 \text{ V}$$

$\frac{1}{\lambda_n} (\text{cm}^{-1})$	$\frac{1}{\lambda_n \sqrt{n}}$
52,7	52,7
74,3	52,5

$$\left(\frac{1}{\lambda \sqrt{n}} \right) = 52,6$$

$$\epsilon = 14,3$$

$$V_g - V_t = 7,4 \text{ V}$$

$\frac{1}{\lambda_n} (\text{cm}^{-1})$	$\frac{1}{\lambda_n \sqrt{n}}$
79,7	79,7
107,5	76,0
133,7	77,1
160,0	80,0

$$\left(\frac{1}{\lambda \sqrt{n}} \right) = 78,2$$

$$\epsilon = 14,0$$

$$V_g - V_t = 5.4 \text{ V}$$

$\frac{1}{\lambda_n} (\text{cm}^{-1})$	$\frac{1}{\lambda_n \sqrt{n}}$
67,6	67,6
92,0	65,0
116,0	67,0
130,0	65,0

$$\left(\frac{1}{\lambda \sqrt{n}} \right) = 66,15$$

$$\epsilon = 14,35$$

$$V_g - V_t = 9.4 \text{ V}$$

$\frac{1}{\lambda_n} (\text{cm}^{-1})$	$\frac{1}{\lambda_n \sqrt{n}}$
90,5	90,5
122	86,3
150	86,6

$$\left(\frac{1}{\lambda \sqrt{n}} \right) = 87,8$$

$$\epsilon = 14,2$$

CONCLUSÕES

A interpretação dada por U. Mackens e D. Heitmann aos resultados experimentais, ou seja, que a modulação periódica levanta a degenerescência dos plasmons no centro da zona de Brillouin não pode ser mantida entre outras razões porque o contorno par não produz componente de Fourier ímpar no campo transmitido para excitar os modos ímpares.

Além disso o "splitting" entre par e ímpar foi calculado numericamente nas condições experimentais e o resultado ($\Delta\omega^2/\omega^2 = 0.13$) é quatro vezes menor que o resultado experimental $\Delta\omega^2/\omega^2 = 0.48$. Na nossa interpretação de aproximação de bandas a separação em frequências dos modos pares em $2\pi/a$ e $4\pi/a$ ($\Delta\omega^2/\omega^2 = 0.56$) concorda com o resultado experimental dentro de 15%. Além disso, a posição absoluta das ressonâncias também concorda com os dados experimentais.

Na experiência de D. Heitmann com a paridade quebrada nós concordamos com os autores quanto ao fato que os estados par e ímpar são excitados. Só que nessa situação experimental como a modulação é muito grande ($\Delta N/N_0 = 6$) a teoria de perturbação usada pelos autores é insustentável. Nesse ponto, a falha da teoria de perturbação não é apenas numérica. O fato é que os estados localizados que propomos não podem ser obtidos adiabaticamente a partir dos estados de um gás modulado, simplesmente aumentando a modulação. O sistema apresenta uma quebra de simetria

tria, e estados localizados aparecem a partir de uma modulação crítica. Esse resultado é original e pode ser investigado experimentalmente construindo um sistema modulado com periodicidade grande. Nessa situação só os estados localizados acoplam com um campo externo constante, e a partir da modulação crítica a absorção do sistema fica intensa.

As frequências obtidas para as oscilações localizadas concordam com os resultados experimentais.

Outra coisa que explicamos qualitativamente é a intensidade relativa das linhas nas experiências com gás modulado e as estimativas concordam com a experiência.

Entendemos também a maior absorção do sistema modulado quando comparada com um sistema não modulado, pois no sistema modulado os modos têm momento de dipolo que acoplam-se com a componente constante do campo transmitido.

O fato de o fundo de Drude obtido com polarização paralela às linhas de modulação ser mais intenso que o fundo com polarização perpendicular também é explicado.

Nesse trabalho os seguintes resultados teóricos são originais:

1. Obtivemos um método variacional que gera a equação clássica de oscilação coletiva do gás de elétrons e que é essencial para estimar a frequência de oscilação e incluir efeitos de blindagem;

2. Introduzimos um tempo de espalhamento de Drude para os elétrons na camada de inversão e mostramos que as linhas de absorção são lorentzianas.

3. Reinterpretamos os resultados experimentais sobre

gás de elétrons bidimensional com densidade eletrônica modulada [9,11];

4. Mostramos que num gás de elétrons bidimensional com densidade modulada existe modulação crítica para o aparecimento de oscilações localizadas (Apêndice II).

"DAMPING" DE LANDAU DA OSCILAÇÃO LOCALIZADA

A função resposta em RPA obtida no capítulo 1 (Eq.1.b.3) tem uma parte imaginária que é necessária para que a resposta seja causal.

Para considerar a parte imaginária na equação de auto-consistência da oscilação coletiva, primeiro supomos que o efeito da parte imaginária é pequeno encontrando a auto-frequência real usando só a parte real da função resposta:

$$\nabla^2 \phi(\vec{x}) = -4\pi e^2 \int d^2 x' \text{Re} \chi(\omega_0, \vec{x}, \vec{x}') \phi(\vec{x}') \quad (\text{Eq.5.1})$$

onde ϕ é o potencial eletrostático e $\chi(\omega_0, \vec{x}, \vec{x}')$ é a função resposta em RPA (vide Eq. 1.b.3).

$$\chi(\omega, \vec{x}, \vec{x}') = \sum_{\alpha, \beta} \frac{(f_\beta - f_\alpha)}{\hbar \omega + \epsilon_\beta - \epsilon_\alpha + i\delta} \psi_\alpha(\vec{x}) \psi_\beta^*(\vec{x}) \psi_\alpha^*(\vec{x}') \psi_\beta(\vec{x}')$$

Foi isso que fizemos na seção 1.c, e a Eq.1.c.3 é equivalente à Eq.5.1 até a primeira ordem em $1/\omega_0^2$.

Agora, se escrevemos a equação completa da oscilação coletiva, a parte imaginária de $\chi(\omega, \vec{x}, \vec{x}')$ faz com que os autovalores tenham uma pequena parte imaginária $\omega = \omega_0 + i\omega_\ell$, onde ω_ℓ é o "damping" de Landau.

A equação completa da oscilação é:

$$\nabla^2 \phi(\vec{x}) = -4\pi e^2 \int d^2 \vec{x}' \chi(\omega_0 + i\omega_\ell, \vec{x}, \vec{x}') \phi(\vec{x}')$$

multiplicando ambos os membros por $\phi(\vec{x})$ e integrando em relação a $d^2 \vec{x}$

temos:

$$\int \phi \nabla^2 \phi d^2 \vec{x} = -4\pi e^2 \int d^2 \vec{x} d^2 \vec{x}' \chi(\omega_0 + i\omega_\ell, \vec{x}, \vec{x}') \phi(\vec{x}) \phi(\vec{x}') \quad \text{Eq. 5.2}$$

Agora supondo ω_ℓ pequeno, escrevemos a parte real de χ como:

$$\text{Re} \chi(\omega_1 \vec{x}, \vec{x}') = \text{Re} \chi(\omega_0, \vec{x}, \vec{x}') + i\omega_\ell \frac{\partial \text{Re} \chi}{\partial \omega}(\omega_0, \vec{x}, \vec{x}')$$

Usando isso e a Eq. 5.1 na Eq. 5.2 obtemos o valor de ω_ℓ :

$$\omega_\ell = \frac{\int d^2 \vec{x} d^2 \vec{x}' \text{Im} \chi(\omega_0, \vec{x}, \vec{x}') \phi(\vec{x}) \phi(\vec{x}')}{\int d^2 \vec{x} d^2 \vec{x}' \frac{\partial \text{Re} \chi}{\partial \omega}(\omega_0, \vec{x}, \vec{x}') \phi(\vec{x}) \phi(\vec{x}')} \equiv \frac{\langle \phi | \text{Im} \chi | \phi \rangle}{\langle \phi | \frac{\partial \text{Re} \chi}{\partial \omega} | \phi \rangle} \quad \text{Eq. 5.3}$$

onde:

$$\text{Re} \chi(\omega, \vec{x}, \vec{x}') = \sum_{\nu, \mu} \frac{(f_\nu - f_\mu)}{\epsilon_\mu - \epsilon_\nu + \hbar\omega} \psi_\nu(\vec{x}) \psi_\mu^*(\vec{x}) \psi_\nu^*(\vec{x}') \psi_\mu(\vec{x}') \quad \text{Eq. 5.4}$$

$$\text{Im} \chi(\omega, \vec{x}, \vec{x}') = -\pi \sum_{\nu, \mu} (f_\nu - f_\mu) \delta(\epsilon_\mu - \epsilon_\nu + \hbar\omega) \psi_\nu(\vec{x}) \psi_\mu^*(\vec{x}) \psi_\nu^*(\vec{x}') \psi_\mu(\vec{x}') \quad \text{Eq. 5.5}$$

Essa aproximação foi usada por V. N. Nishanov [18] para calcular o "damping" de oscilações localizadas em panquecas circulares em sistemas bidimensionais.

O que faremos agora é usar essa fórmula para calcular o "damping" de Landau da oscilação fundamental de um gás bidimensional de densidade N_0 confinado numa caixa de comprimento t . Iremos supor que o potencial da oscilação é da forma $\phi(x,0)=x$ para $|x| < t/2$, que é o potencial da oscilação fundamental obtida em 3.b .

Na aproximação de capacitor plano o potencial de Hartre produzido pela densidade eletrônica de equilíbrio e fundo positivo é um poço quadrado cuja profundidade é $e\Delta V = 4\pi N_0 e^2 d / \bar{\epsilon}$ onde $\bar{\epsilon} = \frac{1}{2} (\epsilon_{ox} + \epsilon_s)$, d a distância entre as placas do capacitor e a densidade eletrônica na placa do capacitor. O quociente entre essa profundidade e a energia de Fermi do gás de elétrons é:

$$\frac{e\Delta V}{\epsilon_F} = \frac{4d}{a_B^*}, \quad a_B^* = \hbar^2 \bar{\epsilon} / m^* e^2$$

Como nas condições que vamos considerar esse quociente é da ordem de 60, podemos considerar o potencial de Hartre como um poço infinito.

Nesse caso, as funções de onda são da forma:

$$\psi(x,y) = \sqrt{\frac{2}{TL}} e^{ik_y y} \sin(k_x x)$$

onde L é o comprimento do sistema na direção y e t o comprimento da caixa.

O cálculo do numerador da Eq.5.3 usando a Eq.5.5 é trivial apesar de trabalhoso. O que fizemos foi transformar a soma na Eq.5.5 numa integral e colocar o potencial $\phi(x,0)=x$. O resultado no caso $\hbar\omega \ll \epsilon_F$ é:

$$\langle \phi | m\dot{x} | \phi \rangle = - \frac{2m^* t^2}{(2\pi\hbar)^2} \cdot \frac{1}{4q_\omega} \cdot L$$

onde $q_\omega = (2m^*\omega/\hbar)^{1/2}$

O denominador da Eq.5.3 pode ser calculado usando a Eq.1.c.1 e vale:

$$\langle \phi | \frac{\partial \text{Re}x}{\partial \omega} | \phi \rangle = \frac{t q_F^2}{2m^*\omega^3} \cdot L$$

onde q_F é o vetor de onda de Fermi do gás de elétrons.

Usando esses dois resultados o "damping" de Landau fica:

$$\frac{\omega_l}{\omega} = \left(\frac{q_\omega}{4\pi q_F} \right)^2 q_\omega t$$

para as condições da Fig.23 , ou seja, $N_0 = 4 \times 10^{12} \text{ el/cm}^2$
 $\omega = 1.3 \times 10^{13} \text{ Hz}$ e $t = 320 \text{ nm}$,temos:

$$\frac{\omega_l}{\omega} = 0.08$$

Portanto o plasmon localizado é uma oscilação coletiva bem definida do gás de elétrons.

O tempo de relaxação introduzido pelo "damping" de Landau é: $\tau_l = \frac{1}{\omega_l} = 0.9 \times 10^{-12} \text{ sec}$

Como esse tempo é da ordem do espalhamento calculado por Tsui [8] (vide Fig.2) $\tau = 1.3 \times 10^{-12} \text{ sec}$, esse efeito pode ser responsável pelo alargamento das linhas da Fig.23 , quando comparadas com as linhas da Fig.2 .

APARECIMENTO DE ESTADOS LOCALIZADOS NUM GÁS DE ELÉTRONS BIDIMENSIONAIS COM DENSIDADE MODULADA

O que faremos agora é estudar o comportamento aproximado das soluções auto-consistentes da Eq.1.c.3. Como vimos na seção 1.d essas soluções são os extremos do funcional

$$\left[\frac{m^* \epsilon \omega^2}{4\pi e^2} \right] = \frac{\int N(x) \left| \frac{\partial \phi}{\partial x}(x,0) \right|^2 dx}{\int |\vec{\nabla} \phi|^2 dx dz}$$

em relação à função potencial $\phi(x,z)$.

O que faremos é supor que o potencial possa ser escrito como produto de uma função de x , $\phi(x)$ por uma função de z , $\psi(z)$:

$$\phi(x,z) = \phi(x)\psi(z)$$

Colocando essa proposta no método variacional e minimizando com relação às duas funções independentes, obtemos que $\psi(z)$ é da forma $\psi(z) = e^{-\alpha|z|}$ e $\phi(x)$ satisfaz a equação:

$$\frac{d}{dx} \left[\left(1 - \frac{4\pi e^2 \alpha N(x)}{m^* \epsilon \omega^2} \right) \frac{d\phi}{dx} \right] = \alpha^2 \phi \quad (\text{Eq.6.1})$$

Essa equação determina a frequência em função do parâmetro variacional α , e achamos as frequências nos pontos onde a derivada da frequência com relação a α é igual a zero.

No caso de um gás não modulado essa separação é exata.

O caso onde essa aproximação poderia falhar, é aquele onde a densidade de carga é localizada, pois nessa simetria o campo tem um decaimento dipolar que não é separável. No entanto

a Eq.6.1 também apresenta soluções exponenciais decrescentes que conseguem descrever a simetria localizada.

Para testar essa aproximação nessa situação extrema resolveremos a Eq.6.1 no caso de uma densidade eletrônica igual a ΔN se $|x| < t/2$ e igual a zero se $|x| > t/2$.

Como o potencial deve ser contínuo, a condição de contorno deduzida a partir da Eq.6.1 é que:

$$F(x) = \left(1 - \frac{4\pi e^2 \alpha^2}{m^* \epsilon \omega^2} N(x)\right) \frac{d\phi}{dx}$$

seja uma função contínua.

Nesse caso a Eq.6.1 fica :

$$\frac{d^2 \phi}{dx^2} = \frac{-\alpha^2}{\left(\frac{4\pi e^2 \alpha N(x)}{m^* \epsilon \omega^2} - 1\right)} \phi$$

e a solução de potencial ímpar que vai a zero em $x = \infty$ é:

$$\phi(x) = \begin{cases} \frac{\text{sen} \alpha_c x}{\text{sen}(\alpha_c t/2)}, & |x| < t/2 \\ e^{-\alpha(|x| - t/2)}, & |x| > t/2 \end{cases}$$

onde

$$\alpha_c^2 = \alpha^2 / \left(\frac{4\pi e^2 \alpha \Delta N}{m^* \epsilon \omega^2} - 1\right)$$

A condição de contorno nesse caso se escreve:

$$\alpha_c \text{tg} \left(\frac{\alpha_c t}{2}\right) = \alpha$$

Se agora definimos $\alpha_\omega \equiv m^* \epsilon \omega^2 / 4\pi e^2 \Delta N$ e $\xi \equiv (\alpha / \alpha_\omega) - 1$

a condição de contorno fica:

$$\text{tg} \frac{\alpha_\omega t}{2} \left(\xi + \frac{1}{\xi}\right) = \xi$$

Essa condição determina a frequência em função do parâmetro ξ e o valor da frequência é encontrado nos pontos onde a derivada de α_ω em relação a ξ se anula. Usando esse fato pode-

mos eliminar α_ω da Eq. 6.2 e obter uma equação só para ξ :

$$\operatorname{tg} \left(\frac{\xi}{\xi^2 - 1} \right) = \xi \quad (\text{Eq. 6.3})$$

e depois calcular α_ω através de ξ :

$$\frac{\alpha_\omega t}{2} = \frac{\xi^2}{\xi^4 - 1}$$

A solução da Eq. 6.3 de menor frequência é $\xi = 2.585$ e a frequência é :

$$\omega^2 = \frac{11.4 \Delta N e^2}{m^* \epsilon t}$$

A frequência correta nessa situação (resultado obtido numericamente) é $\omega^2 = 14.9 \Delta N e^2 / m^* \epsilon t$ o que mostra que mesmo quantitativamente essa aproximação é boa. Além disso para as altas frequências os valores de ξ ficam todos próximos de 1 ($\xi \rightarrow 1^+$) e as frequências são dadas por:

$$\alpha_\omega t = \pi/4 + n\pi, \quad n \text{ grande}$$

ou seja, as frequências são equiespaçadas, comportamento já encontrado na solução exata da densidade localizada da seção 3.b.

Fig.24 - Forma espacial do campo elétrico do estado de frequência mais baixa do padrão quadrado na aproximação de separação de variáveis. (Compare com a Fig. 21)

Tendo ganho confiança nessa aproximação, vamos agora utilizá-la para deduzir um comportamento curioso do gás de elétrons bidimensionais com densidade modulada.

Consideremos um gás de elétrons cuja densidade seja

dada por $N(x) = N_0 + \Delta N(x)$, onde $\Delta N(x)$ é constante e igual a ΔN se $|x| < t/2$ e igual a zero se $|x| > t/2$.

Caso N_0 seja igual a zero, $N(x)$ é a densidade que consideramos no início do apêndice e os estados são todos localizados, ou seja, o campo elétrico vai a zero no infinito.

Quando a parte estendida N_0 da densidade é diferente de zero, aparecem estados de oscilação estendidos cujo campo não vai a zero em $|x| = \infty$. Estes estados são oscilações da parte deslocada cuja forma assintótica do potencial é $\phi(x) = \text{sen}(qx + \delta)$ onde δ é o deslocamento de fase produzido pela modulação ΔN e a frequência é dada por $\omega_q^2 = 2\pi N_0 e^2 |q| / m^* \epsilon$.

Além desse contínuo de estados existe um conjunto discreto de estados cujo campo vai a zero no infinito e correspondem aos estados localizados obtidos com $N_0 = 0$. O fato que queremos salientar é que quando a razão $\Delta N / N_0$ começa a diminuir, os estados localizados desaparecem e abaixo do valor crítico $\Delta N / N_0 = 1$ não existe mais nenhum estado localizado no sistema.

Isto pode ser visto considerando a solução da Eq. 6.1. nessa situação cujo potencial é ímpar e vai a zero em $|x| = \infty$, isto é:

$$\phi(x) = \begin{cases} \frac{\text{sen} \alpha_c x}{\text{sen}(\alpha_c t/2)}, & |x| < t/2, \quad \alpha_c^2 = \frac{\alpha^2}{\left(\frac{4\pi e^2 \alpha (N_0 + \Delta N)}{m^* \epsilon \omega^2} - 1 \right)} \\ e^{-\alpha_\lambda (|x| - t/2)}, & |x| > t/2, \quad \alpha_\lambda^2 = \frac{\alpha^2}{\left(1 - \frac{4\pi e^2 \alpha N_0}{m^* \epsilon \omega^2} \right)} \end{cases}$$

Definindo $\alpha_\omega \equiv m^* \epsilon \omega^2 / 4\pi e^2 (N_0 + \Delta N)$, $\xi \equiv \sqrt{(\alpha / \alpha_\omega) - 1}$,

$\lambda = \Delta N / N_0$ temos:

$$\alpha_c = \alpha_\omega (1 + \xi^2) / \xi$$

$$\alpha_\ell = \alpha_\omega (1 + \lambda)^{1/2} (1 + \xi^2 / C\lambda - \xi^2)^{1/2}$$

de onde podemos ver que a condição para ter estado localizado (α_ℓ real) é que $\lambda > \xi^2$.

A condição de contorno nesse caso fica:

$$\operatorname{tg} \frac{\alpha_\omega t}{2} \left(\xi + \frac{1}{\xi} \right) = \frac{\xi (1 + \lambda)^{1/2}}{(\lambda - \xi^2)^{1/2}}$$

onde os valores de ξ são achados tomando a derivada dessa equação em relação a ξ :

$$\frac{\alpha_\omega t}{2} \sec^2 \frac{\alpha_\omega t}{2} \left(\xi + \frac{1}{\xi} \right) = \frac{\lambda (1 + \lambda)^{1/2} \xi^2}{(\xi^2 - 1)(\lambda - \xi^2)^{3/2}}$$

Já que essa equação só tem solução real se $\xi^2 > 1$, e como $\xi^2 < \lambda$, a condição sobre a modulação é $\lambda > 1$. Além disso, quando a modulação está próxima da criticalidade as duas equações anteriores mostram que os estados localizados de alta frequência aparecem primeiro:

$$\alpha_\omega t \propto \frac{1}{(\lambda - 1)^{3/2}}, \quad \lambda > 1$$

Esse comportamento é entendido considerando que quanto maior a frequência do modo localizado, menor é o momento de dipolo associado, e mais difícil se torna para a parte deslocalizada blindar a oscilação. A modulação crítica para o aparecimento das frequências mais baixas é maior que um. Por exemplo para o aparecimento do estado que não tem nós dentro da caixa ($|x| < t/2$) a modulação crítica é $\lambda = 5.7$. No experimento da Fig. 23 esse valor é $\lambda = 6$, portanto de acordo com essa aproximação todos os estados localizados já apareceram e a nossa inter-

pretação é confirmada nesse ponto.

Esse fenômeno pode ser verificado experimentalmente construindo-se um sistema modulado periódico com período suficientemente grande ($t/a \ll 1$), pois nessa situação os estados localizados acoplam com um campo de radiação espacialmente constante e a absorção do sistema é nula antes da criticalidade e grande depois da modulação crítica.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] D.Pines and D.Bohm, PHYS. REV. 82, 625 (1951); 85, 338 (1952); 92, 609, 626 (1953)
- [2] H.Watanabe, J. PHYS. SOC. JAPAN 11,112 (1956)
- [3] R.H.Ritchie, PHYS. REV. 106, 874 (1957)
- [4] F.Stern, PHYS. REV. LETT. 18, 546 (1967)
- [5] R.H.Richie, SURFACE SCIENCE 34, 1-19 (1973)
- [6] C.C.Grimes and G.Adams; PHYS. REV. LETT. 36, 145 (1976)
- [7] P.M.Platzman and G.Beni; PHYS. REV. LETT. 36, 626 (1976)
- [8] S.J.Allen Jr, D.C.Tsui and R.A.Logan; PHYS. REV. LETT. 38, 980 (1977)
- [9] U.Mackens, D.Heitmann, L.Prager and J.P.Kotthaus; PHYS. REV. LETT. 53, 1485 (1984)
- [10] M.V.Krasheninnikov and A.V.Chaplik, SOV. PHYS. SEMICOND. 15, 19 (1981)
- [11] D.Heitmann, SURFACE SCIENCE 170 (1986) 332-345
- [12] Ando, Fowler and Stern: ELETRONIC PROPERTIES OF 2D SYSTEMS; REVIEWS OF MODERN PHYSICS, 54, (1982)
- [13] M.Nakayama, J.PHYS. SOC. JPN. 36, 393 (1974)

- [14] A.Eguiluz, T.K.Lee, J.J.Quinn and K.W.Chiu; PHYS. REV. B
11,4989 (1975)
- [15] D.Heitmann, J.P.Kotthaus, U.Mackens; SUPERLATTICES and
MICROSTRUCTURES, vol.1, 35 (1985)
- [16] M.V.Krashennnikov and A.V.Chaplik, SOV. PHYS. JETP 61
(1), 75 (1985)
- [17] D.R.Musin and V.N.Nishanov, SOV. PHYS. SOLID STATE 26
(12), 2238 (1984)
- [18] YU.E.Loikov and V.N.Nishanov, SOV. PHYS. SOLID STATE 20,
2111 (1978)
- [19] HANDBOOK OF MATERIAL SCIENCE, Vol 2, pag. 234
Metals, composites and refractory materials
CRC PRESS, Edited by Charles T. Lynch
- [20] T.N.Theis, PLASMONS IN INVERSION LAYERS
SURFACE SCIENCE 98 (1980) 515-532
- [21] D.C.Tsui, S.J.Allen Jr., R.A.Logan, A. Kamgar and
S.N.Coppersmith, SURFACE SCI.73 (1978) 419
- [22] D.Heitmann, J.P.Kotthaus, U.Mackens and W.Beinvogl,
SUPERLATTICES AND MICROSTRUCTURES, Vol.1, N.1, Pag.35,
(1985)