### UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO INSTITUTO DE FÍSICA E QUÍMICA DE SÃO CARLOS DEPARTAMENTO DE FÍSICA E CIÊNCIA DOS MATERIAIS



1997 - 1999 - 1999 - 1999 - 1999 - 1999 - 1999 - 1999 - 1999 - 1999 - 1999 - 1999 - 1999 - 1999 - 1999 - 1999 -

"Estudo das Propriedades de Densidades Superficiais de Cargas Via Cálculos Auto-Consistentes"

Marcia da Costa Pereira

Tese apresentada ao Instituto de Física e Química de São Carlos,USP, para obte<u>n</u> ção do Título de Doutor em Ciências "Física Básica"

Orientador: Prof.Dr.Gilmar Eugênio Marques

SERVIÇO DE BIBLIOTECA E INFORMAÇÃO - IFOSC FÍSICA

São Carlos - São Paulo 1989 MEMBROS DA COMISSÃO JULGADORA DA TESE DE DOUTORADO DE \_\_\_\_ Marcia da Costa Pereira APRESENTADA AO INSTITUTO DE FÍSICA E QUÍMICA DE SÃO CARLOS, DA UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO, EM \_\_\_\_\_23 DE \_\_\_\_\_agosto \_\_\_\_\_DE \_\_\_1989

Comissão Julgadora:

Prof. Dr. Gilmar/Eugenio Marques (orientador)

Prof. Dr. Liderio C.Ioriatti Junior

f. Dr. Luiz Nunes de Oliveira

Prof. Dr. Antonio Ferreira da Silva

<u>Melin Studait filho</u> Prof. Dr. Nelson Studart Filho

### AGRADECIMENTOS

Agradeço ao Gilmar por sua orientação segura e paciente e também por sua amizade.

Ao Marcião pelo incentivo e entusiamo que, sob calorosas discussões, muito contribuiram para a minha formação.

Ao Abraham e Nelson por proveitosas discussões e pela amizade.

À Marta pela amizade e por ter me ajudado mais do que todos no trabalho de datilografia.

Aos meus professores da pós-graduação Roland, Sylvio, Luiz, Lidério e Drugo.

À minha amiga Cecilia, ouvido de muitas reclamações.

Ao Almir, Valter, Rocha, Sato, Yvonninha, Zé Edu, Rogerio, Fernandinho, Marisa, Nagib e todos os meus colegas da Pós com os quais tive uma agradável convivência.

Ao pessoal do eletrêtos, Alfredo e Mariângela, pela gentileza de terem me deixado usar seus micros.

À Vlá, Rose, Vera, Carol, Irene, Samuca, Italo, Tilde, Sonia, Bia, Valdir e todos aqueles que de alguma forma contribuiram para que este trabalho fosse realizado.

À Fapesp e à Capes pelo suporte financeiro.

## ÍNDICE

Lista de	Ilustrações I
Resumo	· · · · · · · · · · · · · · · · · · ·
Abstract.	
Capítulo	I. INTRODUÇÃO 1
Capítulo	II
	2.1. Introdução 5
	2.2. Potencial de Hartree-Fock
	2.3. Aproximação do tipo Hidrogenóide
	2.4. Procedimento Numérico18
	2.5. Corte no Potencial Imagem
	2.6. Potencial Imagem Suave
	2.7. Filme de Hélio 35
Capítulo	III
	3.1. Introdução 44
	3.2. Cálculo da Mobilidade - Equação de Boltzmann 46
	3.3. Cálculo do Tempo de Relaxação $ au$
	3.4. Tempo de Relaxação para os Ripplons53
	3.5. Tempo de Relaxação para o Gás de Átomos de He.58
	3.6. Discussão dos Resultados62
CONCLUSÃO	)
Apêndice	A
Apêndice	B
Apêndice	C
Referênci	as Bibliográficas

## LISTA DE ILUSTRAÇÕES

•

Figura 2. 1.Elétrons sobre Hélio líquido
Figura 2. 2.Dispositivo experimental
Figura 2. 3.Esquema dos estados do elétron na superfície
do Hélio 8
Figura 2. 4.Ocupação das subbandas
Figura 2. 5.Potencial Imagem e Potencial de Hatree auto-
consistente13
Figura 2. 6.Funções de ondas hidrogenóide autó-consistente
para o estado fundamental
Figura 2. 7 Descrição do método numérico para solução auto-
consistente da equação de Schrödinger
Figura 2. 8.Resultados auto-consistentes para transições inter-
bandas como função do campo elétrico
Figura 2. 9.Resultados auto-consistentes para distâncias médias
de um elétron à superfície versus densidade
eletrônica
Figura 2.10.Resultados auto-consistentes para transições inter-
bandas versus densidade, a campo externo nulo26
Figura 2.11 Constante dielétrica suave
Figura 2.12.Esquema para resolução do potencial imagem com
constante dielétrica linear
Figura 2.13.Potencial imagem para constante dielétrica
linear
Figura 2.14.Potencial imagem para constante dielétrica
completamente suave junto ao potencial para a
constante dielétrica linear
Figura 2.15.Potencial imagem suave para Ga <sub>0.7</sub> Al <sub>0.3</sub> As/GaAs35

I

Figura 2.16.Elétron sobre filme de Hélio depositado sobre um

.

	substrato
Figura	2.17.Constante dielétrica para filme de Hélio sobre um
	substrato
Figura	2.18.Resultados auto-consistentes para distâncias médias
	de um elétron à superfície do filme versus densi-
	dade eletrônica 40
Figura	2.19 Resultados auto-consistentes para transições inter-
	bandas versus densidade, para elétrons sobre
	filme de Hélio 41
Figura	2.20 Resultados auto-consistentes para transições inter-
	bandas como função da largura do filme
Figura	3. 1.Resultados experimentais para mobilidade eletrônica
	em altas densidades 45
Figura	3. 2.Influência da segunda subbanda no cálculo da
	mobilidade
Figura	3. 3.Resultados auto-consistentes para a mobilidade
	eletrônica, regime de baixa densidade64
Figura	3. 4.Resultados auto-consistentes para a mobilidade
	eletrônica, regime de alta densidade

ΙI

### RESUMO

A formação de camadas de cargas elétricas na superfície de Hélio líquido e em filmes de Hélio sobre um substrato está bem estabelecida tanto teórica quanto experimentalmente. Não existia porém, até o presente, um cálculo auto-consistente para essas camadas de cargas, pois no regime de baixas densidades eletrônicas, estes sistemas podem ser tratados como o problema de 1-elétron. Em nosso trabalho incluimos os efeitos de muitos corpos usando a aproximação de Hartree-Fock e, via cálculos autoconsistentes, mostramos que estes efeitos tornam-se relevantes para densidades a partir de  $10^8$  e/cm<sup>2</sup> para elétrons sobre Hélio e  $10^9$  e/cm<sup>2</sup> para elétrons sobre filme de Hélio. Calculamos também a mobilidade desses elétrons, em superficie de Hélio, incluindo dois mecanismos diferentes de as interações elétron-ripplons e elétron-átomos de vapor. espalhamento; Usando nossos cálculos auto-consistentes obtivemos resultados que melhores concordam com dados experimentais para a mobilidade, em regimes de altas densidades eletrônicas.

### ABSTRACT

The formation of electric charged layers outside liquid Helium and outside Helium films are well understood experimentally as well as theoretically. But, until today, there was not a self-consistent calculation for these electronic layers because, at low densities, these system can be treated as a one-clectron problem. In this work we have included the many-body effects using the Hartree-Fock approximations and, via self-consistent calculations, we pointed out that these effects are relevants for densities above  $10^8$  e/cm<sup>2</sup> for liquid Helium and  $10^9$  e/cm<sup>2</sup> for Helium films.

We also have calculated the electronic mobility due to different scattering mechanisms: electron-ripplon and electron-vapour interactions. Using our self-consistent calculations we have obtained results that fit very well the experimental data, at high densities.

e de presente de 1919. Altre de la competencia

## CAPÍTULO I INTRODUÇÃO

Já em 1964, Sommer, em sua tese de doutorado[1], previu a existência de estados eletrônicos na superfície do Hélio. A este trabalho seguiram-se os de Cole e Cohen em 1969[2] e o de Shikin em 1970[3] onde ambos, independentemente, também sugeriram a existência destes estados eletrônicos. As primeiras experiências neste sistema foram medidas de escape desses elétrons feitas por Willians, Crandall e Willis em 1971[3], seguidas por medidas da mobilidade eletrônica por Sommer e Tanner também em 1971[4].

Estes estados ligados são formados na direção perpendicular à superfície do Hélio e, em princípio, os elétrons que os ocupam, são livres para moverem-se na direção paralela à superfície. Estes elétrons quase livres, formam um gás eletrônico bidimensional no plano da interface.

Sistemas bidimensionais tem sido exaustivamente estudados nos útimos anos. O interesse por estes sistemas é, não só por serem teoricamente mais simples, mas sobretudo por serem úteis no entendimento de propriedades de superfícies e interfaces e por exibirem muitas das propriedades dos sistemas tridimensionais como, por exemplo, transições de fase.

Fabricar em laboratórios sistemas genuinamente bidimensionais não é uma tarefa das mais simples. Camadas de átomos adsorvidos em grafite são um bom exemplo de sistema bidimensional que tem sido usado com sucesso como teste das teorias de transição de fase em duas dimensões. Entretanto, devido ao substrato interagir fortemente com essas camadas, deixa de ser interessante quando se deseja estudar movimentos relativos somente aos átomos. Uma das vantagens do sistema

formado por elétrons na superfície de Hélio é que o Hélio constitui uma superfície limpa de impurezas e sem anisotropias. Além disto, as distâncias médias dos elétrons à superfície são bastante grandes ,  $\sim 100$  Å, fazendo com que os elétrons interajam fracamente com o substrato e tornando, portanto, este sistema excelente para estudo de fenômenos de transporte. Ainda diversos outros experimentos podem ser feitos nestes sistemas que são importantes para progressos teóricos em áreas como de teoria de muitos corpos, estados polarônicos, cristalização de Wigner, etc. Bons artigos de revisão sobre estes assuntos são encontrados nas seguintes referências[6-13].

Α localização destes elétrons na direção perpendicular à superfície é devida à polarização do meio que produz um potencial imagem atrativo, e, devido ao princípio de exclusão de Pauli, há a formação de uma barreira de potencial que impede a penetração dos elétrons no Hélio. Os primeiros modelos teóricos[1-3], trataram esta barreira como sendo infinita e o resultado é a equação radial para o átomo de hidrogênio. Para obter uma melhor concordância com medidas de transições inter-bandas, passou-se a incluir, em cálculos posteriores[14], uma barreira finita na interface. Existem também modelos que eliminam a divergência no potencial imagem em z=0, usando um parâmetro de corte para ajustar a teoria aos dados experimentais[2,15,16]. Em um desse modelos, o potencial imagem é calculado para a constante dielétrica variando suavemente de um meio a outro[16]. Infelizmente, o único modelo[17] que não usa parâmetros ajustáveis possui uma concordância muito ruim com os dados experimentais.

Embora este sistema seja estudado há quase vinte anos, tanto teórico como experimentalmente, não havia, até o presente, um cálculo dos níveis quânticos no qual os efeitos da

2

3

interação elétron-elétron estivessem incluídos. Em nosso trabalho esta interação foi levada em conta, pela primeira vez literatura, usando Hartree-Fock e correlações, na na aproximação de densidade local. Para baixas densidades eletrônicas encontramos excelentes resultados comparados com de espectroscopia óptica para transições interdados bandas[18]. Verificamos através desses cálculos autoconsistentes, que, para densidades a partir de  $10^8$  e/cm<sup>2</sup>, estes efeitos tornam-se muito importantes e a aproximação de 1elétron não é mais adequada para descrever'o sistema. Há na literatura dados, obtidos por Mehrotra e outros em 1985[19], para a mobilidade eletrônica na interface líquido-vapor. Essas medidas foram feitas em regime de alta densidade,"entre 10<sup>8</sup> e 10<sup>9</sup> e/cm<sup>2</sup>, justamente para as quais mostramos a importância da interação elétron-elétron. Com esta motivação calculamos a mobilidade eletrônica, usando nossos resultados autoconsistentes, para dois mecanismos diferentes de espalhamento: interação dos elétrons com ondas superficiais chamadas de ripplons e com os átomos de vapor de He na região próxima da superficie. Nossos resultados são os que mais se aproximam dos dados experimentais, constituindo, portanto, uma prova da necessidade da inclusão da interação Coulombiana entre 0 S elétrons no intuito de se descrever corretamente as propriedades físicas destes sistemas.

Para densidades eletrônicas maiores do que 10<sup>9</sup> e/cm<sup>2</sup> a superfície do Hélio torna-se instável[9]. Um outro sistema, similar ao descrito acima, que é formado por um filme de Hélio sobre um substrato sólido (Safira, Vidro, Neônio, etc...), permite o estudo desses elétrons para maiores densidades. O substrato interage com o Hélio tornando-o estável para densidades de até 10<sup>11</sup> e/cm<sup>2</sup>. Mostramos que, para este sistema, a interação elétron-elétron não poderá ser desprezada quando a densidade eletrônica ultrapassar 10<sup>9</sup> e/cm<sup>2</sup>.

Esta tese foi dividida em tres capítulos, este primeiro para uma introdução, o segundo para os cálculos autoconsistentes e o terceiro para cálculos da mobilidade eletrônica. No CAPÍTULO II discutimos detalhadamente a teoria de formação destes estados superficiais, a inclusão da interação elétron-elétron e também o procedimento utilizado para efetuar o cálculo auto-consistente. Mostramos nossos resultados para transições inter-bandas e distâncias médias de um elétron à superfície do líquido. Também, neste capítulo, se encontram nossos resultados auto-consistentes para elétrons sobre filme de Hélio. Para este sistema apresentamos uma maneira distinta da encontrada na literatura para se calcular o potencial imagem. No CAPÍTULO III apresentamos a teoria para se calcular a mobilidade eletrônica usando o formalismo da equação de Boltzmann e comparamos nossos resultados com os dados experimentais obtidos por Mherotra e outros[19].

# CAPÍTULO I I CÁLCULO AUTO-CONSISTENTE

### 2.1 Introdução

Em condições experimentais próprias pode-se produzir um gás de elétrons bidimensional na superfície de Hélio líquido ou mesmo ainda na superfície de um filme de Hélio sobre algum substrato. Para entender o mecanismo de formação deste gás vamos primeiro considerar um único elétron e a estrutura onde o Hélio ocupa todo semi-espaço z < 0 (figura 2,1)(o caso do filme de Hélio sobre um substrato será tratado mais adiante):



FIGURA 2.1. - O Hélio líquido ocupa o semi-espaço z< 0 e os elétrons formam um gás quasi-bidimensional na interface Hélio-ar.

Por simetria, o elétron é livre para mover na direção paralela superficie à (x-y) e portanto devemos considerar apenas as forças agindo na direção z (normal à superfície). Na ausência de elétrico externo, um campo a

energia potencial confinante será dada por:

$$V(z) = \begin{cases} V_{0}, & z < 0 \\ \\ V_{im}, & z > 0, \end{cases}$$
(2.1)

onde

a) Vo é uma barreira que limita a penetração da função de onda eletrônica na região do Hélio líquido. Esta barreira é uma consequência do princípio de exclusão de Pauli, que requer que a função de onda de um elétron extra no Hélio líquido seja ortogonal às funções de onda dos elétrons no átomo de Hélio. Esta barreira é da ordem de 1 eV [20].

b)V<sub>im</sub> é o potencial imagem clássico devido à polarização do Hélio na presença de uma carga eletrônica. Este potencial é dado por [21]:

$$V_{im} = - \frac{e^2 (KI - KS)}{4 KS (KS + KI) z}, \qquad (2.2)$$

onde KI é a constante dielétrica do material que preenche o espaço z < 0 ( no caso do Hélio KI = 1.05723 ), KS é a constante dielétrica do meio onde estão as cargas ( neste caso é o vácuo, KS = 1), finalmente <u>e</u> é a carga eletrônica.

Um método simples de se criar estes elétrons superficiais consiste em colocar um capacitor carregado positivamente junto à superfície da fase líquida (figura 2.2) criando um campo elétrico,  $E_t$ , e, usando um filamento de tungstênio, injetar sobre a superfície os elétrons na fase gasosa. O campo elétrico aplicado, não somente serve para impedir que os elétrons sejam ionizados, devido às flutuações térmicas, mas também, é uma maneira de controlar a densidade

eletrônica, N<sub>E</sub>, experimentalmente, através da relação  $E_t = 2 \pi e N_E$ .



FIGURA 2.2- Dispositivo experimental-:elétrons são injetados sobre a superfície do Hélio usando-se um filamento de tungstênio. Coloca-se um capacitor carregado positivamente junto à fase líquida criando um campo elétrico,  $E_t$ , que pressionará os elétrons contra a superfície.

Em nosso trabalho também incluimos este campo através da seguinte contribuição à V(z) :

$$V_{ext} = e E_t z \tag{2.3}$$

Antes de escrevermos e analizarmos a inclusão da interação elétron-elétron no potencial V(z) faremos algumas considerações gerais à respeito da equação de Schrödinger para um elétron com uma energia potencial que depende apenas de uma das coordenadas espaciais (no caso z). Neste caso podemos escrever

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(z)\right]\psi_{n,k}(x,y,z) = \delta_{n,k}\psi_{n,k}(x,y,z), \qquad (2.4)$$

onde m é a massa do elétron, ħ é a constante de Planck e

 $(n, \vec{k})$  são os números quânticos representando os niveis n e o momento linear no plano,  $\vec{k}$ .

Como o potencial depende apenas da variável z podemos separar a função de onda total na seguinte forma

$$\psi_{n,k}(\mathbf{x},\mathbf{y},\mathbf{z}) = \exp(i\vec{k}\cdot\vec{r}) \Phi_n(\mathbf{z}), \qquad (2.5)$$

onde o momento linear é dado por  $\vec{k} = k_x \hat{i} + k_y \hat{j}$  e a posição do elétron é  $\vec{r} = r_x \hat{i} + r_y \hat{j}$ . Desta maneira a equação de Schrödinger fica reduzida à seguinte equação unidimensional:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dz^2}+V(z)\right]\Phi_n(z)=\delta_n\Phi_n(z) \qquad (2.6)$$

sendo que, agora, a energia dos estados de nosso sistema é dada por:

$$\mathbf{S}_{n,k} = \mathbf{S}_n + \frac{\hbar^2 k^2}{2 m}.$$
 (2.7)

Essas energias estão esquematizadas na figura abaixo.



FIGURA 2.3- Niveis de energia para elétron na superficie de Hélio. O indice n é relativo aos niveis discretos na direção z e, k é movimento do elétron no plano xy.

Se denominarmos a energia do maior estado ocupado do sistema como energia de Fermi,  $E_F$ , cada subbanda ocupada, n, dará uma contribuição  $N_E^n$  para a densidade eletrônica total. Esta densidade é calculada a partir da integração da densidade de estados e encontramos[22]:

$$N_{E}^{n} = \frac{m}{\pi \hbar^{2}} (E_{F} - S_{n}), \qquad T = 0$$
 (2.8a)

$$N_{\rm E}^n = \frac{m}{\pi \hbar^2} K_{\rm B} T \quad \ln(1 + \frac{(E_{\rm F} - S_n)}{K_{\rm B} T}) \neq 0.$$
 (2.8b)

Logo, é fácil escrever a densidade total,  $N_E$ , que é dada por:

$$N_E = \sum_n N_E^n, \qquad (2.9)$$

onde a soma sobre n dependerá de onde se encontra o nível de Fermi  $E_F$ . Como exemplo, suponhamos a situação da figura 2.4 :



FIGURA 2.4- Um exemplo de preenchimento dos níveis de energia para a situação em que temos somente as duas primeiras subbandas ocupadas, i.é., caso  $E_F < S_2$ .

Como apenas os dois primeiros níveis estão ocupados, teremos  $N_E = N_E^0 + N_E^1$ .

### 2.2 Potencial de Hartree-Fock e correlações

Tendo feito as considerações acima voltemos à energia potencial V(z). Falta-nos ainda incluir a interação elétronelétron que é um dos pontos principais em nosso trabalho. Para tal utilizamos o potencial de Hartree-Fock mais correlações,  $V_{H-F}$ , de maneira que o potencial V(z) total considerado será dado por(z > 0):

$$V(z) = V_{im} + V_{ext} + V_{H-F}.$$
 (2.10)

O potencial  $V_{H-F}$  por sua vez é constituido por dois termos [22]:

$$V_{H-F} = V_{H} + Vxc \qquad (2.11)$$

onde  $V_{\rm H}$  é o potencial de Hartree e Vxc o potencial de correlação e troca. O primeiro deles,  $V_{\rm H}$ , advém de uma aproximação que é feita para se conseguir escrever um problema de muitos corpos sob o formalismo de uma partícula. Este termo não leva em conta o princípio de exclusão de Pauli. O segundo termo são correções ao primeiro que leva em conta este princípio. A principal hipótese para se escrever  $V_{\rm H}$  é supor que cada um dos elétrons está submetido a um potencial elétrico,  $\Phi_{\rm H}$ , produzido por uma densidade de carga,  $\rho(z)$ , devida a <u>todos os</u> <u>outros elétrons</u> do problema. Então a energia potencial,  $V_{\rm H} =$  $e\Phi_{\rm H}$ , é determinado pela equação de Poisson:

$$\frac{d^2}{dz^2} V_{\rm H} = \frac{4\pi e}{\rm KS} \rho(z). \qquad (2.12)$$

Para um sistema bidimensional onde apenas a primeira subbanda é ocupada, temos:

$$\rho(z) = -e \sum_{n,k} N_{E}^{n} |\psi_{n,k}(x,y,z)|^{2} = -e N_{E}^{0} |\Phi_{0}(z)|^{2}, \quad (2.13)$$

onde  $\Phi_0(z)$  é a função de onda do estado fundamental e  $N_E^0$  é a densidade deste estado. Assim a energia de Fermi,  $E_F$ , está abaixo do primeiro estado excitado,  $E_1$ , o oue ocorre somente a baixas densidades.

Para resolvermos a equação de Poisson usamos as seguintes condições de contorno:

$$\frac{d}{dz} V_{\rm H}(0) = \frac{4 \pi e^2 N_{\rm E}^0}{\rm KS}, \qquad (2.14a)$$

e

$$V_{\mu}(0) = 0,$$
 (2.14b)

onde a equação (2.14a) é relativa ao uso da lei de Gauss na interface e (2.14b) é devida à escolha do zero de energia potencial.

A solução da equação de Poisson com as condições (2.14a) e (2.14b) é:

$$W_{\rm H}(z) = \frac{4 \pi e^2 N_{\rm E}^0}{\rm KS} \left\{ z - \int_0^z (z - z') \Phi_0^2(z') dz' \right\} .(2.15)$$

O potencial  $V_{xc}$ , que é o potencial de correlação e troca, na aproximação de densidade local, é dado por[23]:

$$V_{xc} = -2 \frac{0.658428}{\pi \alpha r_s(z)} \left\{ 1 + \frac{0.7734 r_s(z)}{21} \ln \left[ 1 + \frac{21}{r_s(z)} \right] \right\} . (2.16)$$

Na expressão acima  $V_{\rm XC}$  é medido em meV,  $\alpha = \left[\frac{4}{9\pi}\right]^{1/3}$ , o raio do volume ocupado por partícula é dado por:

$$\Gamma_{s}(z) = \left[ \frac{4}{3} \pi \quad (a^{*})^{3} \ \rho(z) \right]^{-1/3}, \qquad (2.17)$$

e, o raio de Bohr efetivo, a\*, é:

$$\mathbf{a^*} = \frac{\hbar^2 \mathrm{KS}}{\mathrm{m} \,\mathrm{e}^2}.$$
 (2.18)

Devido à presença da função de onda,  $\Phi_0(z)$ , no potencial de Hartree e no potencial Vxc, teremos que resolver a equação de Schrödinger (2.6) de forma auto-consistente. Em primeiro lugar devemos escolher uma função  $\Phi_0$  convenientemente e, para isso, usamos o método variacional. Desta forma obtemos um V(z) de entrada, V<sub>ent</sub>, para o primeiro cálculo da função de onda,  $\Phi_0$ , usando a equação de Schrödinger. Então, com esta nova função de onda, recalculamos o potencial V<sub>H-Z</sub> que, acrescido de V<sub>im</sub> e de V<sub>ext</sub>, chamamos de V<sub>saida</sub>. Colocamos em nossos cálculos numéricos uma mistura do V<sub>saida</sub> com o V<sub>ent</sub> na equação de Schrödinger e, assim por diante, até que o V<sub>saida</sub> seja igual ao V<sub>ent</sub>.

Abaixo, na figura 2.5, mostramos nossos resultados para o potencial de Hartree, calculado com uma densidade eletrônica  $N_E = 10^9 \text{ e/cm}^2$ . Nesta figura os potenciais  $V_H$  e  $V_{im}$ são plotados na mesma escala.

Os efeitos do potencial V<sub>H</sub> sobre os estados do potencial imagem, serão bas<u>icamente dois:</u>

a) tornar os níveis de energia,  $S_n$ , mais profundos, por ser um acréscimo negativo.

b) comprimir os elétrons contra a superfície, diminuindo, assim, as distâncias médias.



FIGURA 2.5- O potencial de Hartree,  $V_{H}$ , para  $N_{E}=10^{8}e/cm^{2}$ , junto do potencial imagem,  $V_{im}$ , sentido por elétrons sobre Hélio líquido.

O efeito do potencial  $V_{\rm XC}$  sobre os estados do potencial imagem, na verdade, contribui muito fracamente para o resultado final, para as densidades consideradas  $(10^6-10^9$  $e/cm^2)$ . Sendo  $V_{\rm XC}$  bem menor que o potencial de Hartree, podemos quase sempre desprezá-lo. Por exemplo, para a mais alta densidade eletrônica considerada,  $10^9 e/cm^2$ , as transições eletrônicas entre as subbandas são :

a) Para V(z) = 
$$V_{im} + V_H$$
, temos

$$\Delta_{0\to 1} = \mathbf{S}_1 - \mathbf{S}_0 = 0.89 \text{ meV} , \qquad (2.19)$$

$$\Delta_{0 \to 2} = \mathbf{S}_2 - \mathbf{S}_0 = 1.01 \text{ meV} . \qquad (2.20)$$

b) Para V(z) = 
$$V_{im} + V_H + V_{xc}$$
, temos

$$\Delta_{0 \to 1} = \delta_1 - \delta_0 = 0.94 \text{ meV}, \qquad (2.21)$$

$$\Delta_{0\to 2} = \delta_2 - \delta_0 = 1.02 \text{ meV} . \qquad (2.22)$$

Repare que, mesmo para esta densidade, o termo  $V_{XC}$ praticamente não altera os resultados obtidos se considerarmos apenas o termos de Hartree.

Como já discutimos na introdução, cálculos prévios, existentes na literatura, eram feitos sem a contribuição do termo  $V_{H-F}$  ao potencial V(z). Em um desses cálculos, fazendo  $Vo \rightarrow \infty$  e o campo externo nulo, obtém-se um potencial do tipo hidrogenóide[1-3]. Com a finalidade de compararmos com os nossos resultados, mostramos a seguir, a solução da equação de Schrödinger para este potencial.

### 2.3 Aproximação do tipo Hidrogenóide

Para átomos hidrogenóides, a equação de Schrödinger pode ser separada em uma parte radial e outra angular. A parte radial assume a seguinte forma :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dr^2}+\frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2}+V(r)\right]u_n(r) = \delta u_n(r), \qquad (2.23)$$

com

$$\mathbf{V}(\mathbf{r}) = -Z\frac{\mathbf{e}^2}{\mathbf{r}}, \qquad (2.24)$$

onde  $\mu$  é a massa reduzida e Ze é a carga do núcleo .

15

Sendo que a solução total (radial+angular) é dada por:

$$\psi_{nim}(\mathbf{\dot{r}}) = \frac{1}{\mathbf{r}} \quad \mathbf{u}_{n}(\mathbf{r}) \quad \mathbf{Y}_{im}(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\phi}), \qquad (2.25)$$

onde  $Y_{tm}(\theta, \phi)$  são os harmônicos esféricos.

É fácil comparar (2.23) com a equação de Schrödinger que descreve o nosso sistema, i. é:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\,\mathrm{m}}\,\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}z^2}\,+\,\mathrm{V}(z)\,\right]\,\Phi(z)\,=\,\mathbf{S}\,\Phi(\dot{z})\,\,.\tag{2.6}$$

Para isto consideramos apenas o potencial imagem clássico:

$$V(z) = V_{im} = -Q \frac{e^2}{z}$$
, sendo  $Q = \frac{1}{4} \frac{(KI - KS)}{KS (KS + KI)}$  z>0. (2.26)

Note então que, se fizermos l=0 em (2.23), a equivalência de ambas equações é imediata. Existe porém uma restrição sobre  $\psi$  em (2.25), pois a probabilidade tem de ser finita e isto implica que u(r)  $\rightarrow 0$  quando r  $\rightarrow 0$ . Portanto, na comparação das duas equações, devemos obrigar que a nossa função de onda  $\Phi$  se anule para  $z \rightarrow 0$ . Isto é equivalente a considerarmos a barreira Vo  $\rightarrow \infty^1$ .

Uma vez observada a condição acima, a equivalência entre (2.23) e (2.6) é estabelecida ao fazermos:

$$\mathbf{r} \equiv \mathbf{z}$$
.  $\mu \equiv \mathbf{m}$ ,  $\mathbf{Z} \equiv \mathbf{Q}$  e  $\mathbf{u} \equiv \mathbf{\Phi}$ . (2.27)

As soluções de (2.23) são encontradas em qualquer livro de mecânica quântica (por exemplo no Merzbacher [24]). Para o caso l = 0, as funções de onda são escritas como:

```
^{1}repare que para a equação radial r \geq 0
```

$$u_n(r) = r \sqrt{\frac{(2k)^3 (n-1)!}{2n (n!)}} \exp(-kr) L_{n-1}^1(2kr),$$
 (2.28)

$$E_n = -\frac{Z^2 e^2}{2 a n^2}, \quad (n = 1, 2, 3 ....),$$
 (2.29)

onde  $k = \frac{Z}{\hbar a}$  e o raio de Bohr é dado por  $a = \frac{\hbar^2}{\mu e^2}$ . Também,  $L_{n-1}^1$  são os polinômios associados de Laguerre definidos por:

e

$$L_{q-p}^{p}(z) = (-)^{p} \frac{d^{p}}{dz^{p}} L_{q}(z), \qquad (2.30)$$

onde L<sub>q</sub> são os conhecidos polinômios de Laguerre obtidos pela relação:

$$L_{q}(z) = e^{Z} \frac{d^{q}}{dz^{q}}(e^{-Z}z^{q}).$$
 (2.31)

Por exemplo, o estado fundamental e sua respectiva função de onda são dados por:

$$\mathbf{S}_0 = -\frac{\mathbf{Q}^2 \, \mathbf{e}^2}{2 \, \mathbf{a}}, \qquad (2.32)$$

$$\Phi_0 = 2z \left(\frac{Q}{a}\right)^{3/2} e^{-(Qz)/a}. \qquad (2.33)$$

Para a constante dielétrica do Hélio, KI = 1.05723 encontramos  $\mathcal{S}_0 \sim 0.7$  meV. Se comparamos este valor com a energia térmica para temperatura ambiente, K<sub>B</sub>T= 25.8 meV, vemos que estes elétrons são facilmente ionizáveis, mesmo a muito baixas temperaturas. Calculando também as energias dos estados excitados, encontramos as seguintes frequências para as transições:

$$\Delta_{0 \to 1} = (\mathbf{S}_1 - \mathbf{S}_0)/\hbar = 118.412 \text{ GHz} = 0.489 \text{ meV},$$
 (2.34)

$$\Delta_{0 \to 2} = (\mathbf{S}_2 - \mathbf{S}_0)/\hbar = 140.340 \text{ GHz} = 0.580 \text{ meV}. \quad (2.35)$$

A experiência de absorção óptica para baixas densidades do sistema fornece os seguintes valores [18]:

$$\Delta_{0 \to 1} = (\mathbf{S}_1 - \mathbf{S}_0)/\hbar = 125.9 \stackrel{+}{=} 0.2 \text{ GHz} = 0.521 \text{ meV}, (2.36)$$
  
$$\Delta_{0 \to 2} = (\mathbf{S}_2 - \mathbf{S}_0)/\hbar = 148.6 \stackrel{+}{=} 0.3 \text{ GHz} = 0.614 \text{ meV}. (2.37)$$

Veremos que a inclusão do termo de muitos corpos em altas densidades eletrônicas, altera significavamente esses resultados. Para se ter uma idéia de qu<sup>'</sup>ao importante é acontribuição de V<sub>H-F</sub>, mostramos abaixo, na figura 2.6, uma dasnossas funções de onda, para o estado fundamental, justaposta àsolução hidrogenóide.</sup>



FIGURA 2.6- Função de onda hidrogenóide para  $N_{E}=10^{9}$  /cm<sup>2</sup>,  $\Phi_{H}$ , e a função de onda auto-consistente,  $\Phi_{0}$ , para o estado fundamental. Note que as distâncias médias de um elétron à superfície ,z=0, serão menores para o elétron com função de onda auto-consistente.

Note que, além da nossa função de onda penetrar na região z<0, a distância média dos elétrons à superfície, diminui em relação à hidrogenóide. Isto resulta, não somente por considermos o líquido como uma barreira de potencial finita mas, sobretudo, devido ao potencial de Hartree, (figura 2.5), comprimir os elétrons de encontro à superfície.

A seguir daremos uma descrição mais detalhada de como nossos cálculos foram feitos e dos métodos utilizados.

2.4 Procedimento numérico

Na figura 2.7 mostramos três regiões do espaço onde, em cada uma delas, é empregado um procedimento de cálculo distinto. Descreveremos abaixo estes procedimentos.



FIGURA 2.7- Três diferentes regiões de energia potencial, onde em cada uma delas, usa-se um procedimento de cálculo distinto: Analítico na região I, numérico na II e WKB na III. A barreira e o potencial imagem não estão na mesma escala de energia. Mostramos também um esboço da função de onda do estado fundamental,  $\Phi_0$ , e sua respectiva energia,  $S_0$ . i) A função de onda  $\Phi_0$ , na região I, é encontrada analiticamente, pois para z < 0, V(z) = Vo, uma constante, de maneira que :

$$\Phi_0(z) = C e^{\alpha z}, \quad z \le 0,$$
 (2.38)

com

$$\alpha = \sqrt{\frac{2 \mathrm{m}}{\hbar^2}} \left( \mathrm{s}_0 - \mathrm{Vo} \right). \qquad (2.39)$$

O valor da constante C será determinada pela normalização da função de onda total.

ii) Na região II, a equação de Schrödinger, para V(z) dado por:

$$V(z) = V_{im} + V_{ext} + V_{H-F},$$
 (2.40)

calculado para uma densidade eletrônica<sup>2</sup> fixa, é resolvida numericamente pelo método de Runge-Kuttta[25]. Para usarmos este método, é necessário conhecer a função de onda e sua derivada em z = 0. Neste ponto podemos usar a solução (2.38) com z=0 e a constante igual á um<sup>3</sup>, pois devemos impor continuidade da função e sua derivada. Portanto:

$$\Phi_0(0) = 1, \qquad (2.41a)$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z}\Phi_0(0) = \alpha \,. \tag{2.41b}$$

Como  $\alpha = \alpha(\mathbf{S}_0)$  precisamos escolher um valor tentativa -  ${}^2N_{\text{E}}$  inicial é escolhida como sendo a menor delas,  $10^6 e/cm^2$ 

<sup>3</sup>como já dissemos esta constante somente será importante para a normalização da função de onda total. para  $\mathbf{S}_0$ . Uma vez que, V(z), em (2.40), depende de  $\Phi_0$  através de  $V_{\mu,F}$ , precisamos também de uma função tentativa para  $\Phi_0$ , para que nesta região possamos usar o Runge-Kutta<sup>4</sup>. Usamos o método variacional para obter esses primeiros valores para  $\mathbf{S}_0 = \Phi_0$ . A escolha da função de onda variacional para este sistema é direta. A função hidrogenóide, por ser uma solução analítica muito boa para baixas densidades, é a melhor candidata. Substituindo-se o fator Q/a por um parâmetro variacional B, temos:

$$\Phi_0(Z) = \frac{1}{\sqrt{2}} B^{3/2} z \exp(-\frac{Bz}{2}). \qquad (2.42)$$

A baixas densidades podemos escrever a energia potencial eletrônica como V(z) = V $_{im}$  + V<sub>H</sub> ou seja:

$$V(z) = -\frac{\Lambda_0}{Z} + A \left[ z - \int_0^Z (z-z') \Phi_0^2(z') dz' \right], \qquad (2.43)$$

onde

$$\Lambda_0 = \frac{1}{4} \frac{(KI - KS) e^2}{KS (KI + KS)}, \qquad (2.44)$$

e

$$A = \frac{4\pi}{\frac{e^2 N_E}{KS}}.$$
 (2.45)

Ao substituirmos  $\Phi_0$ , dada por (2.42), em (2.43), temse:

$$V(z) = -\frac{\Lambda_0}{z} + A \left[ z - \int_0^z (z-z') \frac{1}{2} B^3 z'^2 \exp(-Bz') dz' \right]. (2.46)$$

<sup>4</sup>precisamos do potencial definido ponto a ponto para que a equação diferencial seja definida ponto a ponto.

A integração de (2.46) fornece:

$$V(z) = -\frac{\Lambda_0}{z} + A \left[ \frac{3}{B} - \frac{1}{2}B \exp(-Bz) \left( z^2 + \frac{4z}{B} + \frac{6}{B^2} \right)^2 \right]. (2.47)$$

Podemos calcular a energia média,  $\langle H \rangle = \langle T \rangle + \langle V \rangle$ , onde:

$$\langle V \rangle = \frac{1}{2} \int_{0}^{\infty} \Phi_{0}(Z) V(Z) dZ =$$
  
=  $-\frac{1}{4} \Lambda_{0} B + \frac{33}{32} \frac{A}{B},$  (2.48)

е

$$\langle T \rangle = \int_{0}^{\infty} \Phi_{0}(Z) \left( -\frac{\hbar^{2}}{2m} \frac{d^{2}}{dZ^{2}} \right) \Phi_{0}(Z) dZ =$$
  
 $= \frac{\hbar^{2}B}{8m} .$  (2.49)

Para encontrar B devemos minimizar a energia total média. Fazendo  $\frac{d}{dB}$ <H> = 0, obtemos a seguinte equação:

$$B^{3} - \frac{2m}{\hbar^{2}}\Lambda_{0}B^{2} - \frac{33mA}{8m\hbar^{2}} = 0 . \qquad (2.50)$$

Substituindo em (2.47) o valor de B obtido desta equação calculamos V(z) variacional e podemos dar a primeira entrada para o potencial no cálculo autoconsistente.

Uma vez tendo as condições iniciais (2.41) e também os primeiros  $\mathbf{S}_0$  e  $\mathbf{\Phi}_0$  podemos, usando o Runge-Kutta, resolver a equação de Schrödinger, (2.6), passo a passo, até alcançar o ponto Zm, na fronteira da região III. Este ponto é escolhido, suficientemente distante do ponto de retorno  $z_r$ , para que, a partir dele o potencial V(z) já seja bem suave.

iii) Como, por escolha, o potencial é suave na região III, podemos usar o método WKB para encontrar  $\Phi_0$  nesta região. Saberemos se o  $S_0$  usado, tentativamente, para a região II é o correto se:

$$\frac{d}{dz} \Phi_0^{\text{Runge-Kutta}}(Zm) = \frac{\frac{d}{dz} \Phi_0^{\text{WKB}}(Zm)}{\Phi_0^{\text{WKB}}(Zm)}, \qquad (2.51)$$

Note que a função WKB, na região III, tem condição de contorno correta para z→∞. Com o uso desta aproximação estamos evitando a propagação de erros numéricos nesta região, onde os valores da função de onda são muito pequenos.

Se (2.51) não for satisfeita devemos esolher un novo  $S_0$  e assim por diante até que a igualdade ocorra. Uma vez obtido  $S_0$ , temos automaticamente o  $\Phi_0$  e, com este  $\Phi_0$ recalculamos  $V_{H-F}$ . Encontramos assim o potencial  $V_{saida}$ , que é comparado com o potencial  $V_{ent}$ . Se não forem iguais fazemos uma mistura de ambos para compor um novo  $V_{ent}$ . Repetimos o procedimento descrito para a região II e III até que a autoconsistência seja satisfeita ( $V_{ent} = V_{saida}$ )<sup>5</sup>.

Uma vez determinados  $S_0$  e  $\Phi_0$  auto-consistentemente, aumentamos a densidade eletrônica e repetimos o procedimento acima. A diferença agora é que, para dar entrada no Runge-Kutta, não usamos mais o cálculo variacional e sim o resultado auto-consistente para a densidade anterior. Isto permite

5não utilizamos novamente a autoconsistência para calcular as funções de onda dos estados excitados. O potencial é o obtido por autoconsistência para o estado fundamental e é mantido fixo.

obtermos uma nova solução em menor tempo de computação.

### 2.5 Corte no potencial imagem

Para resolvermos numericamente a equação de Schrödinger para o potencial dado por (2.40), é necessário que se faça um corte no potencial imagem,  $V_{im}$ , suprimindo-lhe a divergência não física em z=0. Uma maneira de faze-lo é usar um parâmetro  $\beta$ , reecrevendo  $V_{im}$  dado por (2.2) como:

$$V_{im} = -\frac{\Lambda_0}{(z + \beta)}$$
 (2.52)

O  $V_{im}$ , escrito inicialmente, é um resultado clássico e, desta forma, não vale para pequenas distâncias da interface. Assim, o parâmetro de corte,  $\beta$ , pode ser entendido como uma forma de se levar em conta os efeitos microscópicos da superfície.

Em nossos cálculos, encontramos que o valor de  $\beta$  que melhor ajusta os resultados teóricos com os dados experimentais, a campo externo zero [18], é  $\beta$ =1.005 Å. Este valor, difere ligeiramente do resultado obtido por Hipólito e outros [15],  $\beta$ =1.01 Å. Esta diferença dos resultados é devida ao fato de termos considerado o termo de muitos corpos no potencial total.

Existem, ainda, uma outra maneira de se suprimir a divergência do potencial imagem, na superfície[16]. O fator principal que nos levou à escolha da maneira acima, foi a relativa facilidade, em relação à outra, com que pudemos manipular (2.52) e ajustar o parâmetro  $\beta$ . Mais adiante, neste capítulo, voltaremos a falar sobre esta divergência e sobre uma maneira muito mais engenhosa de suprimí-la. Na figura 2.8, abaixo, apresentamos nossos resultados para transições inter-bandas como função do campo elétrico externo,  $E_t$ . Com a finalidade de mostrarmos a importância do efeito de muitos corpos, plotamos essas transições, para dois valores extremos da densidade eletrônica:

 Para uma densidade pequena, 10<sup>6</sup> e/cm<sup>2</sup>, cujo resultado é basicamente o mesmo de 1-elétron,

2) Para a maior densidade permitida para este sistema,  $10^3 \text{ e/cm}^2$ .



FIGURA 2.8- Resultado auto-consistente para as transições inter-bandas como função do campo elétrico  $E_t$ , perpendicular à superfície do líquido, para dois valores diferentes da densidade eletrônica. Os pontos experimentais foram obtidos por Grimes e Brown na referência [18].

Ajustamos nosso parâmetro de corte,  $\beta$ , fazendo com que o resultado, para pequenas densidades, em  $E_t = 0$ , fitasse o resultado experimental, assinalado com cruzes nesta figura. É interessante notar a ótima concordância desses dados com os nossos, mesmo para campos externos não nulos.

Contrapondo-se a esses valores, plotamos o resultado para 10<sup>9</sup> e/cm<sup>2</sup>. Podemos verificar que diferem completamente do resultado de baixa densidade. As diferenças de energias ficaram muito maiores, pois o estado fundamental, como consequência do efeito do potencial de Hartree, tornou-se bem mais profundo.

Outra consequência da inclusão do termo de Hartree, já discutida anteriormente, é o fato das distâncias médias de um elétron à superfície do líquido diminuirem. Podemos verificar este efeito diretamente pela figura 2.9.



FIGURA 2.9- Resultado auto-consistente para a distância média de um elétron à superfície do Hélio líquido em função da densidade eletrônica, para  $E_t=0$  e  $E_t=200$  V/cm.

A contribuição do termo de Hartree, assim como a do campo elétrico  $E_t$  é de fazer com que o elétron se aproxime da superfície líquida. Este resultado pode tornar-se mais claro ao verificarmos que, o potencial de Hartree, plotado na figura 2.5, possui uma derivada maior que a do potencial imagem. As distâncias médias se modificam drasticamente a partir do valor  $10^8$  e/cm<sup>2</sup> para a densidade eletrônica. Esta densidade crítica surge também nos resultados plotados na figura 2.10, onde mostramos dados para as transições como função da densidade eletrônica.

Podemos concluir então que, para densidades menores que  $10^8$  e/cm<sup>2</sup>, a interação elétron-elétron é desprezível, o que justifica, portanto, a aproximação de 1-elétron existente na literatura. Acima de  $10^8$  e/cm<sup>2</sup>, a contribuição desta interação torna-se muito importante e deve ser levada em conta para se descrever o sistema adequadamente.



FIGURA 2.10- Resultado auto-consistente para as transições inter-bandas, como função da densidade eletrônica.

Infelizmente, ainda não foram feitos experimentos de absorção óptica que forneçam essas transições a altas densidades uma vez que o sistema torna-se muito instável[9]. Existem, entretanto, dados experimentais para a mobilidade eletrônica[19], obtidos nas densidades desejadas. No CAPÍTULO III, apresentamos nossos cálculos teóricos, para esta mobilidade, e, veremos que os nossos resultados, são os que mais se aproximam desses dados experimentais, comprovando a validade de nossa teoria.

Antes de apresentarmos a teoria e os cálculos para o outro sistema estudado, filme de Hélio sobre um substrato, queremos mostrar uma maneira diferente de se eliminar a divergência no potencial imagem. Mostraremos assim um modo, não existente na literatura, de calcular o potencial imagem para o filme de Hélio sobre um substrato.

#### 2.6 Potencial imagem suave

Esta outra forma de suprimir a divergência em  $V_{im}$ , é alcançada variando a constante dielétrica suavemente, de um valor KI no material, em z < 0, até o valor KS, no vácuo [16]. Usamos uma função suave, K(z), que é plotada na figura 2.11 abaixo. Neste caso teremos, ao invés de  $\beta$ , um outro parâmetro a ser ajustado, determinando a largura, d<sub>1</sub>, da região onde ocorre a transição de KI a KS.

Para calcularmos o novo potencial imagem, devemos calcular o potencial elétrico,  $\Phi$ , produzido por uma carga Q posicionada em  $\vec{r}_0$  (fig.11), resolvendo a equação de Poisson:

$$\nabla \cdot \mathbf{K}(z) \, \vec{\nabla} \, \boldsymbol{\Phi}(\mathbf{\vec{r}}) = -4 \, \pi \, \mathbf{Q} \, \, \delta(\mathbf{\vec{r}} - \mathbf{\vec{r}}_0) \,. \tag{2.53}$$

(a origem dos eixos x-y está colocada sobre a carga Q).



FIGURA 2.11- A constante dielétrica suave.

Pode-se expandir  $\Phi$  usando a transformada de Fourier-Bessel[26]:

$$\Phi(\vec{r}) = \int_{0}^{\infty} q J_{0}(q R) A_{q}(z) dq, \qquad (2.54)$$

onde  $J_0$  é a função de Bessel de ordem zero e  $R = \sqrt{x^2 + y^2}$ . Substituindo (2.54) em (2.53) encontra-se uma equação diferencial que deve ser satifeita por  $A_q(z)$ :

$$\frac{d^2}{dz^2} A_{\mathbf{q}}(z) - \mathbf{q}^2 A_{\mathbf{q}}(z) + \frac{1}{K(z)} \frac{d}{dz}K(z) \frac{d}{dz}A_{\mathbf{q}}(z) = -2 \frac{Q \delta(z - z_0)}{K(z_0)}.$$
 (2.55)

Resolvendo esta equação diferencial encontra-se Φ para todo espaço.

O potencial imagem é o potencial sentido pela carga Q, devido à polarização do meio por ela própria, e é dado por
$\Phi(\vec{r})$  ao fazermos  $\vec{r} \equiv (0, 0, z_0)$ , i.é, a posição da carga Q. Devemos tomar o cuidado de subtrair o termo divergente de  $\Phi$ , que é relativo à auto-energia, i.é., a contribuição da carga sobre ela mesma. Este termo é encontrado ao colocarmos em (2.55),  $K(z) = K(z_0)$  para todo o espaço z, além da condição  $\Phi \rightarrow 0$  quando  $|z| \rightarrow \infty$ . Desta forma encontramos:

$$A_{\mathbf{q}}^{0}(z) = \frac{Q}{K(z_{0}) \mathbf{q}} \exp(-\mathbf{q} |z - z_{0}|). \qquad (2.56)$$

Logo, o potencial imagem é dado por:

$$V_{im}(z_0) = \frac{1}{2} \int_0^\infty q [A_q(z_0) - A_q^0(z_0)] dq.$$
 (2.57)

Um exercício interessante é o cáculo do potencial imagem clássico dado na eq.(2.2), usando este procedimento, ao invés do usual método das imagens. Isto será discutido mais tarde.

A equação diferencial (2.55) permite solução analítica quando a constante dielétrica varia linearmente de um meio ao outro. Podemos escrever, genericamente, K(z) como uma variação gradual :

$$K(z) = KI + (KS - KI) S(z),$$
 (2.58)

onde

$$z < -z_t$$

0

1

$$S(z) = \frac{(z+z_t)}{z_t} -z_t < z \le 0$$
 (2.59)

z > 0.



FIGURA 2.12.- A constante dielétrica varia linearmente na região de transição. A carga Q encontra-se em  $z_0$ , na região de transição, definida por  $0 < s < z_0$ .

Se a carga estiver em  $z_0$ , na região definida por  $0 < z_0 < -z_t$ , como na figura 2.12, a solução da equação diferencial (2.55) será:

Região 1. 
$$A_{q}^{1}(z) = A_{q}^{1} e^{q z}$$
, (2.60a)

Região 2.  $A_q^2(z) = \alpha I_0(\eta) + \beta K_0(\eta)$ , (2.60b)

Região 3.  $A_q^3(z) = \alpha_1 I_0(\eta) + \beta_1 K_0(\eta)$ , (2.60c)

Região 4.  $A_q^4(z) = A_q^4 e^{-qz}$ . (2.60d)

Nas expreessões acima,  $I_0 \in K_0$  são as funções de Bessel modificadas com argumento dado por  $\eta = -q(z + \frac{KS z_t}{KS - KI})$ .

É importante frisar que estamos considerando KI>KS. Se tivessemos KI<KS deveríamos fazer  $\eta \rightarrow -\eta$ , pois as funções  $I_0$ e K<sub>0</sub> são definidas para argumentos positivos.

As constantes em (2.60) são calculadas através das

1	SERVIÇO DE BIBLIOTECA E INFORMAÇÃO	- HOSC
	FISICA	

condições de contorno nas interfaces entre cada região:

$$A_{q}^{i}(-z_{t}) = A_{q}^{2}(-z_{t}),$$
  

$$\frac{d}{dz}A_{q}^{i}(-z_{t}) = \frac{d}{dz}A_{q}^{2}(-z_{t}),$$
(2.61a)

$$A_{\mathbf{q}}^{2}(z_{0}) = A_{\mathbf{q}}^{3}(z_{0}),$$

$$\frac{d}{dz}A_{\mathbf{q}}^{3}(z_{0}) - \frac{d}{dz}A_{\mathbf{q}}^{2}(z_{0}) = -\frac{2Q}{K(z_{0})},$$
(2.61b)

$$A_{q}^{4}(0) = A_{q}^{3}(0),$$
  
$$\frac{d}{dz}A_{q}^{4}(0) = \frac{d}{dz}A_{q}^{3}(0),$$

(2.61c)

Após resolvermos o sistema de equações, encontramos

$$A_{\mathbf{q}}^{1}(z) = \frac{2Q}{K(z_{0})q} \frac{(K_{1}^{-} I_{1}^{-} - I_{1}^{+} K_{1}^{+})(K_{3}^{+} I_{02} - I_{3}^{-} K_{02})}{(I_{1}^{+} K_{3}^{+} - I_{3}^{-} K_{1}^{-})(I_{2}^{-} K_{2}^{-} - K_{2}^{+} I_{2}^{+})}e^{\mathbf{q}(z+z_{t})},$$
(2.62a)

$$A_{\mathbf{q}}^{2}(z) = \frac{2Q}{K(z_{0})q} \frac{(K_{1}^{-} I_{0}(\eta) - I_{1}^{+} K_{0}(\eta))(K_{3}^{+} I_{02} - I_{+3}^{-} K_{02})}{(I_{1}^{+} K_{3}^{+} - I_{3}^{-} K_{1}^{-})(I_{2}^{-} K_{2}^{-} - K_{2}^{+} I_{2}^{+})},$$
(2.62b)

$$A_{\mathbf{q}}^{3}(z) = \frac{2Q}{K(z_{0})\mathbf{q}} \frac{(K_{3}^{+} I_{0}(\eta) - I_{3}^{-} K_{0}(\eta))(K_{1}^{-} I_{02} - I_{1}^{+} K_{02})}{(I_{1}^{+} K_{3}^{+} - I_{3}^{-} K_{1}^{-})(I_{2}^{-} K_{2}^{-} - K_{2}^{+} I_{2}^{+})},$$
(2.62c)

$$A_{\mathbf{q}}^{4}(z) = \frac{2Q}{K(z_{0})q} \frac{(K_{3}^{+} I_{3}^{+} - I_{3}^{-} K_{3}^{-})(K_{1}^{-} I_{02} - I_{1}^{+} K_{02})}{(I_{1}^{+} K_{3}^{+} - I_{3}^{-} K_{1}^{-})(I_{2}^{-} K_{2}^{-} - K_{2}^{+} I_{2}^{+})} e^{-qz}.$$
(2.62d)

Nas expressões acima, as constantes são definidas por  $K_{i}^{\pm} = K_{0}(S_{i}) \stackrel{+}{=} K_{1}(S_{i}),$ (2.63)  $I_{i}^{\pm} = I_{0}(S_{i}) \stackrel{+}{=} I_{1}(S_{i}),$ 

onde os argumentos são determinados por

$$S_{1} = q \frac{KI z_{t}}{KI - KS} ,$$

$$S_{2} = q \frac{KS z_{t}}{KI - KS}, \qquad (2.64)$$

$$S_3 = - q z_0 + S_3$$

e,finalmente,

$$K_{02} = K_0(S_2)$$
,  $I_{02} = I_0(S_2)$ . (2.65)

Um idêntico procedimento é usado para encontrar as soluções para  $z_0$  na regiões 1 e 2 (fig 2.12).

Como uma observação, notamos que a solução acima não possui divergência em z=0, mas ainda permanece uma descontinuidade, não física, na derivada do potencial em z= 0 e  $z=-z_t$ , como pode ser visto na figura 2.13.

A maneira de se eliminar estas descontinuidades no campo elétrico, é construindo uma função dielétrica cuja derivada seja contínua para todo z. Para isto coloca-se uma nova função S(z), cuja derivada seja suave em todo o espaço. Uma possível escolha é

$$\{z + z_t + a_t - \frac{2a_t}{\pi} \cos[\frac{\pi(z+z_t)}{2a_t}]\}/2z_t$$
$$-z_t - a_t < z < -a_t$$

 $z < -z_t - a_t$ 

$$S(z) = \frac{(z+z_t)}{z_t} - z_t + a_t < z \le -a_t$$
 (2.66)



$$a_t < z_t$$

1

0



FIGURA 2.13- O potencial imagem para interfaçe líquido-vapor de Hélio obtido usando a constante dielétrica linear, para  $z_t = 6.8$  A.

Entretanto, com este S(z) não temos mais solução analítica para a equação diferencial (2.55). Em nosso trabalho usamos Runge-Kutta, para a região de transição. Para regiões distantes pode-se usar o resultado para a constante dielétrica linear. Cabe observar que a integral em q também é feita numericamente mas, felizmente, para z grande, o termo q=0 é o dominante. Deve-se também usar a expansão assintótica para K<sub>o</sub> e I<sub>o</sub> de maneira a reobter o potencial imagem clássico. Mostramos, na figura 2.14, o potencial imagem suave, obtido por este método, para  $a_t = 2.0$  Å e  $z_t$ = 6.8 Å. Estés são os melhores valores para se fitar o resultado experimental da absorção óptica elétrons na superfície de de um gás de Hélio liquido[18].



FIGURA 2.14- O potencial imagem para a constante dielétrica suave inclusive na derivada, dada pela equação (2.66) justaposto com o potencial para a constante dielétrica linear.  $z_t = 6.8$   $\stackrel{\circ}{A}$  e  $a_t = 2.0$   $\stackrel{\circ}{A}$ .

SERVIÇO DE BIBLIOTECA E INFORMAÇÃO - IFOSC

Outro motivo de interesse nesses potenciais é o fato de que, para interfaces cristalinas, permite uma junção mais natural entre a função de onda no potencial cristalino e a função de onda na região externa. Na figura 2.15, mostramos o potencial imagem para um elétron na interface de uma heterojunção semicondutora construida com  $Ga_{(1-x)}Al_{(x)}As$ -GaAs, e para uma concentração de aluminio, x=0.3.

Este último potencial é repulsivo para a região em que a carga se encontra, z>0. Isto porque, ao contrário do sistema anterior, temos agora KS > KI. Outra diferença entre este sistema e o formado pela interface Hélio-ar é que agora o potencial imagem é bem menor.



FIGURA 2.15- Potencial imagem suave para  $Ga_{(1-x)}Al_{(x)}As-GaAs$ , onde a concentração é x = 0.3.  $z_t=5.0$  Å e  $a_t=1.0$  Å.

2.7 Filme de Hélio

O sistema estudado até aqui, elétrons sobre Hélio,

torna-se instável para densidades superiores a  $10^9 \text{ e/cm}^2$ . O uso de um outro sistema, um filme de Hélio sobre um substrato, permite o estudo deste gás de elétrons para densidades até  $10^{11} \text{ e/cm}^2$  (figura 2.16).



d—Largura do filme

KD = 19.0 (Constante dieletrica do substrato) KI = 1.05723 (Constante dieletrica do Hetlio) KS = 1.0 (Constante dieletrica do vapor)

1

FIGURA 2.16- Elétrons sobre filme de Hélio, de largura d e constante dielétrica KI, depositado sobre um substrato, cuja constante dielétrica é KD.

Este novo sistema, além das altas densidades, será bem diferente do anterior devido, fundamentalmente, à presença do substrato o qual introduz modificações no potencial imagem. Tradicionalmente, este potencial é obtido, para ambos os sistemas, usando o método das imágens. Contudo, para o filme, surgem infinitas cargas imágens para que se possa satisfazer as condições de contorno nos planos (1) e (2), perpendiculares a z (figura 2.16). Pode-se também, fazer uma analogia com as infinitas imágens ópticas que apareceriam para um objeto situado na frente de espelhos localizados nestes planos. Com o método das imagens encontramos:

$$V_{im} = -\frac{\Lambda_0}{z} - \Lambda_1 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-a)^{n-1}}{(z+nd)} , \qquad (2.67)$$

onde as cargas efetivas são dadas por

$$\Lambda_0 = \frac{e^2(KI-1)}{4(KI+1)}, \qquad (2.68)$$

е

a a construction and a second sec A second secon A second secon

$$\Lambda_{1} = \frac{e^{2} KI (KD - KI)}{4 (KI + KD)(KI + 1)^{2}}, \qquad (2.69)$$

e a constante dielétrica efetiva é dada por

$$\mathbf{a} = \frac{(KI - 1)(KD - KI)}{(KI + 1)(KD + KI)}.$$
 (2.70)

Nestas expressões já estamos considerando o vácuo acima do filme, logo KS = 1 .

O primeiro termo de  $V_{im}$ , acima, é o potencial imagem clássico, sem o substrato. Para entendermos melhor o efeito deste substrato, vamos manter apenas o primeiro termo da série acima e, como a distância média dos elétrons à interface é bem pequena, i.é, <z> « d , podemos expandi-lo. Assim, até ordem linear em z, obtemos:

$$V_{im} = -\frac{\Lambda_0}{z} - \frac{\Lambda_1}{d} - \frac{\Lambda_1}{d^2} z \cdots \qquad (2.71)$$

O efeito do subtrato torna-se evidente nesta expansão. Além de adicionar um termo constante,  $-\Lambda_1/d$ , aos níveis do potencial imagem anterior, o termo linear em z simula um campo externo  $E_t = \Lambda_1/ed^2$ . Este campo interno é da ordem

37

de 850 V/cm para substrato de Safira e um filme de espessura d - 300 Å. Portanto, em comparação com os resultados anteriores, devemos esperar que, para este sistema, os níveis de energia sejam mais profundos e as distâncias médias sejam menores.

A série, em (2.67), não é somável em termos de funções conhecidas mas, felizmente, converge muito rapidamente, devido ao fato de que a constante dielétrica efetiva, <u>a</u>, ser muito pequena (a $\sim$ 0.023 para um filme de Hélio sobre o substrato de Safira). É interessante notar que o método de cálculo do potencial suave descrito na seção anterior, quando usado neste problema, permite-nos fazer a equivalência desta série com uma integral. Para isto devemos resolver a equação diferencial (2.55), onde a constante dielétrica varia como na figura 2.17.





é:

A solução geral para esta equação, quando  $\frac{d}{dz}K(z) = 0$ ,

$$A_q = A e^{qZ} + B e^{-qZ}$$
. (2.72)

Observando-se que a solução assintótica, para |z|→∞, deve se anular, temos que:

Região 1. 
$$A_q^1(z) = A_1 e^{-q z}$$
, (2.73a)

Região 2. 
$$A_q^2(z) = A_2 e^{q z} + B_2 e^{-q z}$$
, (2.73b)

Região 3. 
$$A_q^3(z) = A_3 e^{q z} + B_3 e^{-q z}$$
, (2.73c)

Região 4. 
$$A_q^4(z) = A_4 e^{q \cdot z}$$
. (2.73d)

Usando as condições de contorno para z=-d, z=0 e $z=z_0$ , encontramos as constantes A<sub>i</sub> acima. O potencial imagem, usando a fórmula (2.55), para  $z_0 > 0$  é dado por

$$V_{im}(z_0) = -\frac{e^2}{2} \int_0^\infty dq \, e^{-2q \, z_0} \, \left\{ \frac{(KI+1)(KI-KD) e^{-2q \, d} - (KI-1)(KI+KD)}{(KI-1)(KI-KD) e^{-2q \, d} - (KI+1)(KI+KD)} \right\} 74)$$

que é equivalente à expressão (2.67), obtida pelo método das imagens. Infelizmente não conseguimos expressar esta integral em termo de funções conhecidas. Contudo este é um exemplo de como a Física pode ser um bom guia na solução de problemas matemáticos e vice-versa. Note mais que, no limite de  $d\rightarrow\infty$ , esta integral pode ser obtida e o resultado é o potencial imagem do problema sem substrato.

Em nossos cálculos usamos o potencial imagem dado por (2.67), mantendo os seis primeiros termos de sua série. Como na seção anterior, nosso objetivo é entender o regime de altas densidades e para isto, acrescentando ao potencial imagem o termo de Hartree-Fock mais correlações. O mesmo método de cálculo descrito anteriormente se aplica inteiramente, a começar pelo parâmetro de corte  $\beta$ . Neste caso deve-se usar o mesmo  $\beta$  anterior por uma razão muito simples. Devemos esperar que os resultados obtidos sem a presença do substrato devem ser SERVIÇO DE BIBLIOTECA E INFORMAÇÃO - IFOSC

FISICA

recuperados ao fazermos d→∞ ou KD=KI. Um desses limites, KD→KI, é ilutrado na figura 2.18. Nesta figura mostramos nossos resultados para a distância media de um elétron á superfície como função da densidade eletrônica.



FIGURA 2.18- Resultados auto-consistente para as distâncias médias de um elétron à superfície do filme de Hélio depositado sobre Safira, KD = 19, como função da densidade eletrônica. A largura do filme é 100 Å. Dados para o substrato de vidro estão marcados com cruzes.

Note tambem que, como o substrato funciona como um campo elétrico intrínsico, a distância média agora é menor do que no caso anterior (figura 2.9). A linha contínua se refere ao substrato de Safira e o ponto isolado ao de vidro ( $N_E = 10^3$  $e/cm^2$ ). Este resultado pode ser entendido ao notar que diminuir a constante dielética do substrato tem o mesmo efeito de fazer  $KD \rightarrow KI$ , recuperando os resultados obtidos na ausência de substrato.

Note também que para este sistema há uma densidade crítica. Para densidades superiores a 10<sup>9</sup> e/cm<sup>2</sup>, pode-se reparar

que os dados se distânciam dos resultados obtidos na aproximação de 1-elétron. Esta densidade crítica aparece também nas diferenças de energia,  $\mathbf{S}_1 - \mathbf{S}_0$  e  $\mathbf{S}_2 - \mathbf{S}_0$  em função da densidade (figura 2.19).



FIGURA 2.19- Resultado auto-consistente para um filme de Hélio de 100 Å sobre substrato de safira , para transições inter-bandas como função da densidade eletrônica.

filme de Hélio sobre linhas continuas são As para Safira isolados são substrato de vidro. pontos para e os Notamos neste caso que as diferenças de energia são bem maiores devido ao termo constante e negativo na eq.(2.71) que torna o fundamental, δο, mais profundo. Novamente, estado quando diminuinos a constante dielétrica do substrato estas diferenças tendem para os valores encontrados para o sistema anterior.

(figura 2.10).

Uma outra maneira de recuperarmos resultados 05 anteriores é tomarmos o limite da espessura do filme,  $d \rightarrow \infty$ , que é ilustrado na figura 2.20. Aqui novamente mostramos a s energia diferenças de δ<sub>1</sub>-δ<sub>0</sub> е  $S_2 - S_0$ , para uma densidade eletrônica superficial fixa,  $N_E = 10^3 \text{ e/cm}^2$ , como função da largura do filme, entre 100  $\stackrel{0}{\text{A}}$  e 800  $\stackrel{0}{\text{A}}$ .



FIGURA 2.20- Resultados auto-consistentes para as transições inter-bandas como função da largura do filme. O campo interno aumenta as eergias de ligação e de transição.

Lamentavelmente, os resultados de absorpção óptica calculados para um filme, não podem ser comparados com dados experimentais. Contudo é bastante evidente a necessidade da

inclusão da interação elétron-elétron para densidades superiores a 10<sup>9</sup> e/cm<sup>2</sup>. No próximo capítulo mostraremos que os resultados teóricos para o caso sem substrato dão uma contribuição importante para um melhor entendimento de medidas da mobilidade eletrônica ao longo da interface liquído-vapor.

# CAPÍTULO III MOBILIDADE ELETRÔNICA

### 3.1 Introdução

Um dos objetivos deste capítulo é reproduzir resultados experimentais de medidas da mobilidade eletrônica, na interface He-ar; através de cálculos teóricos. Essas medidas, feitas por Mehrotra e outros [19], são obtidas em densidades entre 10<sup>8</sup> e 10<sup>9</sup> e/cm<sup>2</sup> (figura 3.1). Devemos frisar que, exatamente para esses valores, os efeitos de muitos corpos tornam-se relevantes.

A comparação dos resultados teóricos, usando os resultados auto-consistentes, com resultados experimentais é importante tanto para uma verificação da nossa teoria como também para mostrar a real necessidade de se incluir a interação elétron-elétron na descrição correta deste sistema.

Na figura 3.1, as linhas contínuas são resultados teóricos obtidos usando uma extensão de resultados anteriores [27-28]. Embora esses resultados variem com a densidade eletrônica, neles a interação elétron-elétron é completamente desprezada. A única dependência com a densidade é devida ao campo elétrico externo  $E_t$  (perpendicular à superfície) que pode ser determinado por  $E_t=2\pi N_E$ . Eles não reproduzem corretamente os dados experimentais na região acima do pico devido à fusão do cristal de Wigner. Note que esta aproximação está sempre muito abaixo dos valores medidos.

A temperatura de fusão foi predita teoricamente para o valor  $\Gamma$ =135, onde  $\Gamma$  é a razão entre a energia potencial e a energia cinética dada por  $\Gamma = e^2 \sqrt{N_E \pi} / K_B T$  [29]. Neste trabalho vamos nos concentrar na região flúida do sistema de elétrons,

i.é, acima da temperatura de fusão do cristal de Wigner.

FIGURA 3.1.- Inverso da mobilidade versus temperatura, para diversos valores da densidades eletrônica, N<sub>E</sub>. A curva sólida é um resultado teórico para espalhamento por riplons e átomos de vapor. Os valores da densidade são 5.3 para a), 1.05 para b), 2.1 para c), 3.2 para d), 6.3 para e) e 9.5 para f), medidos em unidades de  $10^8 \text{e/cm}^2$ . O símbolo I está indicando a barra de erro.



Adiantamos que os resultados teóricos se aproximam dos experimentais quando a interação elétron-elétron é incluída. Usando os resultados auto-consistentes [30] do capítulo anterior pode-se obter uma melhor concordância com a experiência. A seguir desenvolvemos a teoria necessária para o cálculo da mobilidade eletrônica.

### 3.2 Cálculo da mobilidade - Equação de Boltzmann

O sistema considerado aqui é o mesmo do capítulo anterior onde, os elétrons na superfície do Hélio, formam estados ligados na direção perpendicular à interface (direção z) e são livres para moverem-se na direção paralela (plano x-y). Vamos agora apresentar a teoria necessária para calcular a mobilidade desses elétrons quando submetidos a um campo elétrico  $\vec{E}$ , paralelo à interface. Vamos definir a densidade de corrente elétrica,  $\vec{J}$ , por:

$$\vec{J} = e \sum_{n} \int \frac{d^2k}{2\pi^2} f(S_{n,k}) \vec{v},$$
 (3.1)

onde e é a carga do elétron,  $\vec{v} = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\vec{k}} S_{n,k}$  é a velocidade,  $S_{n,k}$  é a energia de uma subbanda calculada auto-consistentemente no capítulo anterior e  $f(S_{n,k})$  é a função distribuição de elétrons de não equilíbrio, pois a distribuição dos elétrons entre os estados é modificada pela presença de forças externas. Se o sistema não estivesse submetido ao campo elétrico  $\vec{E}$ ,  $f(S_{n,k})$  seria a função de Fermi-Dirac.

Portanto para calcularmos  $\tilde{J}$ , devemos primeiro calcular f( $S_{n,k}$ ) através da solução da equação de Boltzmann [31]. Esta equação, para processos estacionários e na ausência de campos magnéticos e de gradientes de temperaturas, fica

reduzida a :

$$\widehat{\mathfrak{Q}} \mathbf{f}(\mathfrak{S}_{n,k}) = \frac{\mathbf{e}}{\hbar} \vec{\mathbf{E}} \cdot \nabla_{\vec{\mathbf{i}}} \mathbf{f}(\mathfrak{S}_{n,k})$$
(3.2)

onde  $\widehat{\Omega}$ f é conhecido como operador de colisão<sup>1</sup> e  $\vec{E}$  é o campo elétrico paralelo à interface.

For outro lado, para calcularmos a ação deste operador sobre f, devemos fazer uso da estatística na descrição dos processos físicos. Desta forma encontra-se que:

$$\hat{\mathfrak{Q}} f = \sum_{n'} \sum_{k'} \left[ W(\vec{k}' n' \rightarrow \vec{k} n) f(\mathfrak{S}_{n',k'}) - W(\vec{k} n \rightarrow \vec{k}' n') f(\mathfrak{S}_{n,k}) \right], (3.3)$$

onde W( $\vec{k}$ 'n' $\rightarrow \vec{k}$ n) é a probabilidade por unidade de tempo de que um elétron possa sofrer uma transição do estado  $\vec{k}$ ',n' para o estado  $\vec{k}$ ,n e, no caso de permitirmos apenas transições intrabanda, o n é conservado e podemos retirar o somatório em n' acima. Esta probabilidade depende do mecanismo de espalhamento e é calculada, basicamente, via regra de ouro de Fermi. Igualando (3.2) a (3.3) obtemos a seguinte equação:

$$\begin{split} & \stackrel{e}{\hbar} \vec{E} \nabla_{\vec{k}} f(\boldsymbol{S}_{n,k}) = \\ & = \sum_{n} \sum_{k} \sum_{k'} \left[ W(\vec{k}', n', \rightarrow \vec{k}, n) f(\boldsymbol{S}_{n',k'}) - W(\vec{k}, n \rightarrow \vec{k}', n') f(\boldsymbol{S}_{n,k}) \right], \end{split}$$

A solução geral desta equação resulta em um problema muito complicado. Usualmente, esta solução pode ser simplificada com a introdução do tempo de relaxação,  $\tau$ . Este tempo é definido ao supor-se que a restauração do equílibrio,

<sup>1</sup>Mostramos a dedução da fórmula (3.2) no apêndice A. Na literatura este operador é, algumas vezes, representado por  $\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{colisão}$ .

47

(3.4)

quando desligarmos as forças externas, é proporcional a quanto o sistema deslocou-se deste equilíbrio, i.é:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \hat{\mathfrak{L}} f = -\frac{(f - f_0)}{\tau}. \qquad (3.5)$$

Nesta expressão  $\tau$  é o tempo médio de relaxação do sistema e f<sub>o</sub> é a função de distribuição de equilíbrio. O tempo de relaxação  $\tau$  pode ser entendido como uma medida do retorno ao equilíbrio, que havia sido perturbado pelo campo externo.

Se as forças aplicadas não deslocam o sistema para muito longe do equilibrio, podemos introduzir uma aproximação adicional no cálculo de f. Neste caso podemos expandi-la como:

$$f = f_0 + f_1 + \dots,$$
 (3.6)

sendo  $f_1$  a correção anisotrópica, de primeira ordem, sobre a função de equilibrio. Dizemos que ela é anisotrópica por depender da direção de  $\vec{k}$  e de primeira ordem porque as derivadas de  $f_1$  serão consideradas de ordem superior. Esta função é escrita como:

$$\mathbf{f}_1 = \mathbf{g} \cdot \mathbf{\tilde{k}} \quad , \tag{3.7}$$

sendo  $\vec{g}$  uma função isotrópica em  $\vec{k}$ , i.é.,  $\vec{g}$  não depende da direção de  $\vec{k}$  mas, apenas, do seu módulo e será determinada através das equações acima.

Nestas aproximações, o tempo de relaxação é dado por:

$$\hat{\mathfrak{L}}f = -\frac{\vec{g}\cdot\vec{k}}{\tau}.$$
 (3.8)

É evidente, desta expressão, que para calcularmos  $\tau$ , devemos extrair a parte anisotrópica de  $\hat{\mathbf{Z}}$ f. Note que f<sub>0</sub> é isotrópica e portanto não contribui para a corrente eletrônica. Desta forma apenas o termo anisotrópico, f<sub>1</sub>, entrará no cálculo de  $\mathbf{J}$  em (3.1). Vamos então substituir a expansão (3.6) na equação (3.2) e separá-la em uma parte isotrópica e outra anisotrópica:

$$\begin{split} \hat{\mathfrak{Q}}f &= \frac{e\vec{E}}{\hbar} \cdot \nabla_{\vec{k}}f(\boldsymbol{S}_{k,n}) = \frac{e\vec{E}}{\hbar} \cdot \nabla_{\vec{k}}(f_{0} + \vec{g}\cdot\vec{k}) = \\ &= \frac{e\vec{E}}{\hbar} \cdot \left[\nabla_{\vec{k}}f_{0} + \nabla_{\vec{k}}\vec{g}\cdot\vec{k}\right] = \\ &= \frac{e\vec{E}}{\hbar} \cdot \left[\partial_{\boldsymbol{\epsilon}_{n,k}}f_{0} \nabla_{\vec{k}}\boldsymbol{S}_{k,n} + \vec{g} + (\partial_{k\times}g_{y})k_{y}\hat{i} + (\partial_{ky}g_{x})k_{x}\hat{j} + (\partial_{ky}g_{y})k_{y}\hat{j}\right] \end{split}$$

+  $(\partial_{k_{\times}} g_{\times}) k_{\times} \hat{i}$  +  $(\partial_{k_{y}} g_{y}) k_{y} \hat{j}$ ]. (3.9)

Para um gás com dispersão parabólica  $\nabla_{\vec{k}} \, \boldsymbol{\delta}_{k,n} = \frac{\hbar^2 \vec{k}}{m} \, e$ como  $\mathbf{g}_i(\boldsymbol{\delta}) = \mathbf{g}_i(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m})$ . Então, as derivadas acima podem ser calculadas imediatamente e obtém-se  $\partial_{\mathbf{k}_j} \mathbf{g}_i = \frac{\hbar^2}{m} \mathbf{k}_j \, \partial_{\boldsymbol{\delta}} \mathbf{g}_i(\boldsymbol{\delta}) \, de$ maneira que, a equação (3.9) assume a forma:<sup>2</sup>  $\hat{\mathbf{L}} \mathbf{f} = [\vec{\mathbf{g}} + \mathbf{\delta}_k \partial_{\boldsymbol{\delta}} \vec{\mathbf{g}} + \frac{\hbar^2 \vec{k}}{m} \partial_{\boldsymbol{\delta}} \mathbf{f}_0 +$ 

$$+ \frac{\hbar^2}{m} \mathbf{k}_{\mathbf{X}} \mathbf{k}_{\mathbf{y}} \partial_{\mathbf{g}} (\mathbf{g}_{\mathbf{y}} \hat{\mathbf{i}} + \mathbf{g}_{\mathbf{X}} \hat{\mathbf{j}}) ]^3. \qquad (3.10)$$

Os dois primeiros termos, em (3.10), são isotrópicos enquanto os dois últimos são anisotrópicos. Como o último termo

<sup>2</sup>para simplificar a notação usaremos  $\mathbf{s} = \mathbf{s}_{k,n} e \ \mathbf{s}_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2 m}$ 

<sup>3</sup>aqui usamos o fato de que, devido à isotropia na relação de dispersãao,  $k_x^2 = k_y^2 = \frac{k^2}{2}$ 

é de ordem mais alta que os demais não o consideraremos, o que é equivalente a manter apenas  $f_0$  e  $f_1$  em (3.6). Embora estes detalhes sejam tediosos eles são fundamentais para se entender o que realmente está ocorrendo e eventualmente, aplicá-los a outros sistemas.

Separando  $\widehat{\mathfrak{Q}} f$  em uma parte isotrópica e uma parte anisotrópica temos:

$$\hat{\mathfrak{L}} f \Big]_{isotrópico} = \frac{e}{\hbar} \vec{E} \cdot (\vec{g} + \boldsymbol{\delta}_k \boldsymbol{\partial}_{\boldsymbol{\delta}} \vec{g}), \qquad (3.11a)$$

$$\hat{\mathfrak{Q}} f \Big]_{anisotrópico} = \frac{e\hbar}{m} \vec{E} \cdot \vec{k} \partial_{g} f_{0}. \qquad (3.11b)$$

Esta expressão permite calcular 1/ au imediatamente:

$$\frac{1}{\bar{\tau}} = -\frac{\hat{\mathbf{g}} \mathbf{f}_{anisotrópico}}{\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}} = -\frac{\mathbf{e} \hbar}{\mathbf{m}} \frac{\mathbf{\vec{E}} \cdot \mathbf{\vec{k}} \partial_{\mathbf{g}} \mathbf{f}_{o}}{\mathbf{g} \cdot \mathbf{\vec{k}}}.$$
 (3.12)

Desta equação encontramos que:

е

$$\vec{g} = - \frac{e\hbar}{m} \tau(\partial_{\mathbf{g}} f_0) \vec{E}, \qquad (3.13)$$

e, assim, a densidade de corrente  ${f J}$  pode ser escrita como:

$$\vec{J} = e \sum_{n,k} \int \frac{d^2k}{2\pi^2} f_1 \vec{v} = e \sum_{n,k} \int \frac{d^2k}{2\pi^2} \vec{g} \cdot \vec{k} \vec{v}.$$

Lembrando que  $\vec{v} = \frac{\hbar \vec{k}}{m}$ , temos:

$$\vec{J} = - \frac{e^2 \hbar^2}{m^2} \sum_{n} \int \frac{d^2 k}{2 \pi^2} \, \partial_g f_0 \, \tau \, (\vec{k} \cdot \vec{E}) \, \vec{k} \,. \qquad (3.14)$$

Se em (3.14) separarmos o termo independente do campo elétrico, temos que:

$$\vec{J} = -\frac{e^2\hbar^2}{m^2} K \vec{E},$$
 (3.15)

onde a conditividade elétrica é proporcional ao tensor K, definido por<sup>4</sup>:

$$\mathbb{K} = \frac{1}{2} \sum_{n} \int \frac{d^2 k}{2\pi^2} \, \partial_g f_0 \, \tau \, k^2. \qquad (3.16)$$

Logo, pela relação ôhmica,  $\vec{J} = \sigma \vec{E}$ , encontramos facilmente a condutividade elétrica:

$$\sigma = - \frac{e^2 \hbar^2}{m^2} \mathbb{K}. \qquad (3.17)$$

Por outro lado, a relação  $\sigma = e N_E \mu$ , define a mobilidade eletrônica  $\mu$ . Logo:

$$\mu = - \frac{e \hbar^2}{m N_{\rm E}} \mathbb{K} \quad . \tag{3.18}$$

Note que, K , dada por (3.16), depende de  $f_0$  e de  $\tau$ . Em nossos cálculos usaremos  $f_0$  como sendo a função de Fermi-Dirac portanto basta que calculemos  $\tau$  para determinarmos a mobilidade eletrônica.

mecanismos de espalhamento importantes no sistema em questão. Em linhas gerais,  $\tau$  será encontrado usando-se a equação (3.12), onde é definido em termos de  $\hat{\mathfrak{L}} f \Big|_{anisotrópico}$  Escrevendo o operador total  $\hat{\mathfrak{L}} f$ , em termos dos mecanismos de colisão (3.3) e, extraindo desta equação a parte anisotrópica, encontramos  $\hat{\mathfrak{L}} f \Big|_{anisotrópico}$  e consequentemente  $\tau$ . Faremos isto na próxima seção.

# 3.3 Cálculo do tempo de relaxação $\tau$

Na região de temperatura em que os experimentos são realizados [19], (figura 3.1), devemos considerar apenas dois mecanismos de espalhamento importantes:

i) Espalhamento devido a excitações superficiais no Hélio líquido (ripplons) e,

ii) Espalhamento por vapor de átomos de He, que se evaporam da superfície líquida à medida que a temperatura aumenta.

Temos portanto de calcular dois tempos de relaxação, ou seja:  $\tau_{\rm R}$ , o tempo de relaxação associado ao espalhamento devido aos ripplons e,  $\tau_{\rm G}$ , o tempo de relaxação associado ao espalhamento devido aos átomos de vapor.

O tempo de relaxação completo,  $\tau$ , que entrará no cálculo deve ser obtido de  $[22]^5$ , pela regra de Matthiessen, supondo que os mecaπismos de espalhamento ocorram em regimes distintos:

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_{\rm R}} + \frac{1}{\tau_{\rm G}}$$
(3.19)

$${}^{5}\hat{\mathfrak{Q}}f = \hat{\mathfrak{Q}}f \Big|_{\mathsf{RIPPLON}} + \hat{\mathfrak{Q}}f \Big|_{\mathsf{GAS}}$$

3.4 Tempo de relaxação para os Ripplons.

O espalhamento dominante, a baixas temperaturas, é o devido às ondas na superfície do Hélio pois, nestas temperaturas não há um desprendimento significativo de átomos do líquido. Estas ondas podem ser quantizadas e são semelhantes aos fonons de um cristal sendo que, no presente caso, recebem o nome de ripplons. Estas excitações obedecem a uma relação de dispersão dada por [32]:

$$\omega_{q}^{2} = (g q + \frac{\alpha}{\rho} q^{3}),$$
 (3.20)

onde g é a constante gravitacional,  $\alpha$  é a tensão superficial e  $\rho$  é a densidade de massa do Hélio líquido.

Para calcularmos  $\tau_{\rm R}$  devemos saber como os elétrons do gás interagem com estas excitações superficiais. A exemplo da interação elétron-fonon no problema do polaron [33], a forma para a interação elétrons-ripplon, proposta por Saitoh [27], e baseada nos trabalhos de Cole [32] e Monarkha e Shikin[34], tem a forma de:

$$\mathbf{H}_{e-R} = \frac{1}{\sqrt{S}} \sum_{q} F_{q}(z) e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} (\mathbf{a}_{\vec{q}} + \mathbf{a}_{-\vec{q}}^{+}), \qquad (3.21)$$

onde a força de interação elétron-ripplon é dada por:

$$F_{q}(z) = \left(\frac{\hbar q}{2\rho \omega_{q}}\right)^{1/2} \left\{ e \vec{E}_{t} - \frac{\hbar^{2} q^{2}}{m a_{0}} \left[ -\frac{K_{1}(q z)}{q z} - \frac{1}{(q z)^{2}} \right] \right\}, \quad (3.22)$$

e o raio de Bohr efetivo é escrito como:

$$a_0 = \left(\frac{\hbar^2}{m e^2}\right) \frac{4 KS (KI + KS)}{(KI - KS)}.$$
 (3.23)

Nestas fórmulas S é a área do sistema,  $K_1$  é a função de Bessel modificada,  $E_t$  é o campo elétrico perpendicular à superfície e  $a_q^+$  é um operador bosônico que cria uma excitação superficial com número de onda q.

Uma vez obtido o potencial de interação elétronripplon, estamos aptos a calcular  $W(\vec{k}'n' \rightarrow \vec{k}\vec{n})$ , a probabilidade de transição de um elétron, em um estado inicial  $\vec{k}',n'$ , sofrer uma transição para um estado final  $\vec{k}n$ , sob a ação deste potencial espalhador. Como já mencionamos anteriormente, isto será feito via regra de ouro de Fermi e considerando também efeitos estatísticos. Nesta transição dois processos podem ocorrer:

Os elétrons passam de um estado inicial |k',n'> para um estado final |k,n> de duas maneiras: i) absorvendo um ripplon ou, ii) emitindo um ripplon.

Pela regra de ouro de Fermi temos que, a probabilidade de transição por unidade de tempo é:

i) 
$$\Gamma_{i \to f}^{i} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle i| H_{e-R} |f\rangle|^{2} \delta(S_{k}+S_{n}-S_{k},-S_{n},-\hbar\omega_{q})$$

$$(3.24a)$$

onde os estados iniciais e finais são  $|i\rangle = |\vec{k}', n'\rangle a_{\mathbf{q}}|0\rangle$  e  $|f\rangle$ =  $|\vec{k}, n\rangle |0\rangle$ .

$$\text{ii)} \Gamma_{i \to f}^{2} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle i| H_{e-R} | f \rangle |^{2} \delta(\mathbf{s}_{k} + \mathbf{s}_{n} - \mathbf{s}_{k}, -\mathbf{s}_{n}, +\hbar\omega_{q}),$$

$$(3.24b)$$

onde os estados iniciais e finais são agora, |i> =  $|\vec{k}',n'>|0>$ 

(3.25a)

e  $|f\rangle = |\vec{k}, n\rangle a_q^+ |0\rangle$ . Nesta expressão  $|0\rangle$  é o vácuo das excitações superficiais, onde nós não podemos aniquilar ripplons, i.é,  $a_q|0\rangle = 0$ .

Usando (3.21) para  $H_{e-R}$ , temos que

i) 
$$\Gamma_{i \to f}^{1} = \frac{2\pi}{\hbar S} |\langle n'|F_q(z)|n \rangle|^2 \delta(\mathbf{s}_k + \mathbf{s}_n - \mathbf{s}_k) - \mathbf{s}_n, -\hbar\omega_q),$$

onde a conservação do momento linear é  $\vec{q} = \vec{k}' - \vec{k}'$ .

ii) 
$$\Gamma_{i \to f}^2 = \frac{2\pi}{\hbar S} |\langle n'|F_q(z)|n \rangle|^2 \delta(\delta_k + \delta_n - \delta_k) - \delta_n + \hbar \omega_q$$

(3.25b) onde a conservação do momento linear é  $\vec{q}$  =  $\vec{k}'$  -  $\vec{k}$ .

Se o número,  $N_q$ , de ripplons na temperatura T contribuem para que uma absorção ocorra, então a probalidade de transição (3.25a) deve ser multiplicada por  $N_q$  afim de termos a contribuição total. A estatística de bósons para o número

médio de ripplons com energia  $\hbar \omega_{\mathbf{q}}$ , nos dá que N<sub>q</sub> :

$$N_{q} = \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar\omega_{q}}{K_{e}T}\right) - 1}, \qquad (3.26)$$

onde a relação de dispersão de ripplons,  $\omega_{\mathbf{q}}$ , é dada por (3.20).

No caso de uma emissão de ripplons, o número total de ripplons N<sub>q</sub> será acrescido de 1. Assim W(k',n'→k,n) deve ser escrita como:

$$W(\vec{k}', n' \rightarrow \vec{k}, n) = \frac{2\pi}{\hbar S} |\langle n'|F_{q}(z)|n \rangle|^{2} [N_{q} \delta(S_{k}+S_{n}-S_{k}, -S_{n}, -\hbar\omega_{q}) + (N_{q} + 1)^{2} \delta(S_{k}+S_{n}-S_{k}, -S_{n}, +\hbar\omega_{q})], \quad (3.27)$$

onde  $\vec{q} = \vec{k} - \vec{k}$ ' é devida à conservação do momento linear.

Portanto, considerando apenas as transições intrabanda, i.é, o número quântico n sendo conservado no espalhamento, podemos então escrever Ŷf dada por (3.3) como:

$$\hat{\mathfrak{Q}} \mathbf{f} = \sum_{\mathbf{k}'} \left[ \mathbb{W}(\vec{k} \cdot \mathbf{n} \rightarrow \vec{k} \cdot \mathbf{n}) \quad \mathbf{f}(\vec{k} \cdot \mathbf{n}) - \mathbb{W}(\vec{k} \cdot \mathbf{n} \rightarrow \vec{k} \cdot \mathbf{n}) \quad \mathbf{f}(\vec{k} \cdot \mathbf{n}) \right] =$$

$$= \frac{2\pi}{\hbar S} \sum_{\mathbf{k}'} |\mathbf{F}_{\mathbf{q}}^{n}|^{2} \left\{ \left[ N_{\mathbf{q}} \mathbf{f}(\vec{k} \cdot) - (N_{\mathbf{q}} + 1) \quad \mathbf{f}(\vec{k}) \right] \delta(\mathbf{s}_{\mathbf{k}} - \mathbf{s}_{\mathbf{k}}, -\hbar\omega_{\mathbf{q}}) \right\}$$

+

$$\left[ (N_{\mathbf{q}} + 1) f(\vec{k}') - N_{\mathbf{q}} f(\vec{k}) \right] \delta(\mathbf{s}_{\mathbf{k}} - \mathbf{s}_{\mathbf{k}} + \hbar \omega_{\mathbf{q}}) \bigg\},$$
(3.28)

onde  $|\vec{q}| = |\vec{k} - \vec{k}'|$  e o elemento de matriz para a interação é dado por

$$|F_{q}^{n}|^{2} = |\langle n|F_{q}(z)|n\rangle|^{2} = \left|\int_{0}^{\infty} \Phi_{n}^{2}(z)F_{q}(z)dz\right|^{2}.$$
(3.29)

O tempo de relaxação é calculado por (3.12) usando apenas a parte anisotrópica do operador  $\vec{\Omega}$ f acima. Substituindo neste operador a expansão (3.6) para f e retendo apenas a parte anisotrópica encontramos :

$$\hat{\mathbf{g}} \mathbf{f} = \frac{2\pi}{\hbar S} \sum_{\mathbf{k}'} \left| \mathbf{F}_{\mathbf{q}}^{n} \right|^{2} \vec{\mathbf{g}} \left\{ \begin{bmatrix} \mathbf{N}_{\mathbf{q}} & \vec{\mathbf{k}'} - (\mathbf{N}_{\mathbf{q}}+1) & \vec{\mathbf{k}} \end{bmatrix} \delta(\mathbf{s}_{\mathbf{k}} - \mathbf{s}_{\mathbf{k}}, -\hbar\omega_{\mathbf{q}}) + \left[ (\mathbf{N}_{\mathbf{q}}+1) & \vec{\mathbf{k}'} - \mathbf{N}_{\mathbf{q}} & \vec{\mathbf{k}} \end{bmatrix} \delta(\mathbf{s}_{\mathbf{k}} - \mathbf{s}_{\mathbf{k}}, + \hbar\omega_{\mathbf{q}}) \right\}.$$

$$(3.30)$$

Para subtrairmos o termo anisotrópico neste operador, de primeira ordem, usamos o fato de que a energia do ripplon é muito menor que a energia do elétron. Logo, expandindo a função delta em potências de  $\hbar\omega_q$ , temos que:

$$\delta(\mathbf{s}_{k}, -\mathbf{s}_{k} + \hbar \omega_{q}) = (1 \pm \hbar \omega_{q} \partial_{\mathbf{s}_{k}}, + \cdots) \delta(\mathbf{s}_{k}, -\mathbf{s}_{k})(3.31)$$
Ao substituir (3.31) na fórmula para  $\hat{\mathbf{L}} \mathbf{f}, (3.30)$  e  
lembrando que o somatório em  $\mathbf{k}'$  pode ser transformado em uma  
integral em  $\mathbf{s}_{k}$ , torna-se evidente que o termo anisotrópico em  
1<sup>a</sup> ordem será devido a termos que contenham apenas  $\delta(\mathbf{s}_{k}, -\mathbf{s}_{k})$ ,  
pois os demais contribuirão com derivadas e portanto são termos  
de ordem superior. Assim, retendo em (3.30) somente os  
coeficientes de  $\delta(\mathbf{s}_{k}, -\mathbf{s}_{k})$ , encontramos que:

$$\hat{\mathfrak{D}} f_{anisotrópico} = \frac{2\pi}{\hbar S} \sum_{k'} |F_q^n|^2 (2 N_q + 1) \vec{\mathfrak{g}} \cdot (\vec{k'} - \vec{k}) \delta(s_k - s_{k'}), \qquad (3.32)$$

onde  $\vec{q} = \vec{k}' - \vec{k}$ .

Usando a fórmula (3.12) para au temos:

$$\frac{1}{\tau_{\rm R}} = -\frac{\hat{\mathfrak{L}} \mathbf{f}_{\rm anisotrópico}}{\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}} =$$

$$= -\frac{2\pi}{\hbar S} \frac{1}{\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}} \sum_{\mathbf{k}'} |\mathbf{F}_{\mathbf{q}}^{n}|^{2} (2 N_{\mathbf{q}} + 1) \mathbf{g} \cdot \mathbf{q} \delta(\mathbf{s}_{\mathbf{k}} - \mathbf{s}_{\mathbf{k}'}). (3.33)$$

Por outro lado como  $\vec{g}$ , dado em (3.13), é proporcional ao campo elétrico  $\vec{E}$ , então ao colocarmos o campo na direção x, podemos escrever  $\vec{g} = -g\hat{i}$ ,  $\vec{k} = -k\hat{i}$ ,  $\vec{q} = q(\cos\theta\hat{i} + \sin\theta\hat{j})$ , de maneira que (3.33) torna-se:

$$\frac{1}{\tau_{\mathsf{R}}} = \frac{2\pi}{\hbar S} \sum_{\mathbf{q}} \left| F_{\mathbf{q}}^{n} \right|^{2} (2 N_{\mathbf{q}} + 1) \frac{\vec{k} \cdot \vec{\mathbf{q}}}{k^{2}} \delta(\mathbf{s}_{k} - \mathbf{s}_{k}). \quad (3.34)$$

Nesta fórmula o somatório em k' foi substituído por um somatório em q, observando a conservação do momento linear  $\vec{k}' = \vec{k} + \vec{q}$ . Para que esta expressão fique adequada para os cálculos numéricos devemos transformar o somatório sobre q em uma integral e eliminarmos a função  $\delta$  integrando sobre o módulo de q. Desta forma obtém-se que<sup>6</sup>:

$$\frac{1}{\tau_{\rm R}} = \frac{m}{2\pi\hbar^3} \int_{0}^{2\pi} d\theta \ \vartheta(q) \ (1 - \cos\theta), \qquad (3.35)$$

onde

$$\vartheta(\mathbf{q}) = |\mathbf{F}_{\mathbf{q}}^{n}|^{2} (2 N_{\mathbf{q}} + 1),$$
 (3.36)

e q está relacionado com o momento linear do elétron, k, por:

$$q = 2 k \sin \frac{\theta}{2}$$
. (3.37)

#### 3.5 Tempo de relaxação para o Gás de Átomos

Para calcularmos  $\tau_{\rm G}$  repetimos o procedimento da secção anterior com algumas modificações que, quando importantes, as reproduziremos. Para a interação elétron-Gás usaremos o Hamiltoniano proposto por Saitoh[27]. Este Hamiltoniano é obtido de uma transformada de Fourier de um potencial tipo delta:

$$\mathbf{H}_{\mathbf{e}-\mathbf{G}} = \frac{1}{\widetilde{\Omega}} \sum_{\mathbf{\vec{q}}, \mathbf{\vec{k}}_{t}, \mathbf{K}_{z}, \mathbf{K}_{z}} \eta_{\mathbf{G}} (\mathbf{K}_{z} - \mathbf{K}_{z}') \mathbf{e}^{\mathbf{i} \mathbf{\vec{q}} \cdot \mathbf{\vec{r}}} \mathbf{b}_{\mathbf{\vec{K}}_{t} - \mathbf{\vec{q}}, \mathbf{K}_{z}}^{+}, \mathbf{b}_{\mathbf{\vec{K}}_{t}, \mathbf{K}_{z}}^{-},$$

nesta fórmula  $\Omega$  é o volume do sistema e  $\mathbf{b}_{\mathrm{Kt},\mathrm{Kz}}$  é o operador de destruição de um átomo de Hélio com vetor de onda  $(\vec{\mathrm{Kt}},\mathrm{Kz})^7$  e

$$\eta_{\rm G}({\rm K}_z) = U_{\rm G} < n | e^{i K_z \cdot z} | n > {}^8,$$
  
(3.39)

onde a constante  $U_G$  está relacionda com a seção de choque do átomo de Hélio.

Usando o mesmo procedimento do estudo dos ripplons vamos agora escrever o operador de colisão  $\hat{\Omega}$ f para o Gás. Fazemos a seguir uma adaptação dos cálculos do Saitoh para que possamos usar as nossas funções de onda auto-consistentes. O operador de colisão, para este caso, pode ser escrito como[31]:

$$\hat{\Omega} f(\vec{k}) = \frac{2\pi}{\hbar\Omega^2} \sum_{\vec{q},\vec{k}_z,K_z} |\eta_{G}| (Kz-Kz')|^2 f_{G}(\vec{K}t,Kz) \cdot \left\{ f(\vec{k}+\vec{q}) \ \delta\left[ \delta_{\vec{k}+\vec{q}} - \delta_{\vec{k}} + \frac{\hbar^2}{2M} (Kt^2 - (\vec{K}t+\vec{q})^2) + \frac{\hbar^2}{2M} (Kz^2 - Kz'^2) \right] - f(\vec{k}) \ \delta\left[ \delta_{\vec{k}} - \delta_{\vec{k}+\vec{q}} + \frac{\hbar^2}{2M} (Kt^2 - (Kt-\vec{q})^2) + \frac{\hbar^2}{2M} (Kz^2 - Kz'^2) \right] \right\}, \quad (3.40)$$

onde M é a massa do átomo de Hélio e  $f_G(\vec{K}t,Kz)$  é a função de distribuição do gás de Hélio :

$$\mathbf{f}_{\rm G}(\vec{K}_{\rm t},Kz) = \left(\frac{2\pi\hbar^2}{{\rm M}K_{\rm B}T}\right)^{3/2} N_{\rm G} \exp \left\{-\hbar^2 \left(K_{\rm T}^2 + K_{\rm Z}^2\right) / 2{\rm M}K_{\rm B}T\right\}, (3.41)$$

onde a densidade de saturação de vapor,  $N_G$ , é dada por:

 ${}^{7}\vec{K}_{t} = (Kx\hat{i} + Ky\hat{j})$   ${}^{8} < n|f(z)|n > \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \Phi_{n}^{2}(z)f(z)dz$ , será feita numericamente pois  $\Phi$ são as nossa funções de onda auto-consistentes

$$N_{G} = \left(\frac{MK_{B}T}{2\pi\hbar^{2}}\right)^{3/2} e^{-Q/K_{B}T}$$
(3.42)

e Q é a energia de vaporização.

Usando a seguinte representação integral para a função δ:

$$\delta(\mathbf{x}) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\mathbf{t}}{2\pi} e^{i\mathbf{t}\cdot\mathbf{x}}$$
(3.43)

podemos fazer a integração sobre  $\vec{K}_t$  e sobre Kz. Estes detalhes podem ser vistos no APÊNDICE C . Assim obtemos:

$$\begin{split} \widehat{\mathfrak{Q}} f &= \frac{2\pi N_{G}}{\hbar\Omega} \sum_{\vec{q},p} \left| \eta_{G}(p) \right|^{2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dt}{2\pi} \left\{ f(\vec{k}+\vec{q}) & \exp\{ it(\hat{s}_{\vec{k}+\vec{q}}-\hat{s}_{\vec{k}}) - \hbar^{2}(it+t^{2}K_{B}T) (q^{2}+p^{2})/2M \} - \right. \end{split}$$

$$f(\vec{k}) = \exp\{-it (\delta_{\vec{k}+\vec{q}} - \delta_{\vec{k}}) - \hbar^2(it + t^2 K_B T)(q^2 + p^2)/2M\}$$
 (3.44)

Devido ao fato de que a massa de um elétron seja muito menor que a massa de um átomo de He, m  $\ll$  M, vamos expandir a exponencial desta expressão até 1<sup>a</sup> ordem em 1/M. Além disso, usamos novamente a representação integral para a função  $\delta$  para escrever o integrando como coeficientes de  $\delta(\mathbf{S}_{\vec{k}+\vec{q}} - \mathbf{S}_{\vec{k}})$  e suas derivadas (detalhes também no APÊNDICE C) e encontramos:

60

$$\hat{\mathfrak{L}} \mathbf{f} = \frac{2\pi N_{G}}{\hbar\Omega} \sum_{\mathbf{q},\mathbf{p}} |\eta_{G}(\mathbf{p})|^{2} \left\{ f\left(\mathbf{k}+\mathbf{q}\right) \left(1 - \frac{\hbar^{2}}{2M}(\mathbf{q}^{2}+\mathbf{p}^{2})\partial_{\mathbf{g}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}} + \frac{\hbar^{2}K_{B}T}{2M}(\mathbf{q}^{2}+\mathbf{p}^{2})\partial_{\mathbf{g}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}}\right) - f\left(\mathbf{k}\right) \left(1 + \frac{\hbar^{2}}{2M}(\mathbf{q}^{2}+\mathbf{p}^{2})\partial_{\mathbf{g}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}} + \frac{\hbar^{2}K_{B}T}{2M}(\mathbf{q}^{2}+\mathbf{p}^{2})\partial_{\mathbf{g}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}}\right) \right\} \delta(\mathbf{g}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \mathbf{g}_{\mathbf{k}}).$$

$$(3.45)$$

Para isolarmos o termo anisotrópico em  $1^{\underline{a}}$  ordem na expressão acima, como foi feito para o caso dos ripplons, devemos manter apenas os coeficientes de  $\delta$ , sem derivadas. Fazendo isto e usando o fato de que  $f = f_0 + \vec{g} \cdot \vec{k}$  além da definição de  $\tau$  dada por (3.12) temos, finalmente:

$$\frac{1}{\tau_{\rm G}} = -\frac{2\pi\,\mathrm{N}_{\rm G}}{\hbar\Omega} \,\frac{1}{\vec{\mathbf{g}}\cdot\vec{\mathbf{k}}} \,\sum_{\mathbf{p}} \,\left|\eta_{\rm G}(\mathbf{p})\right|^2 \,\sum_{\vec{\mathbf{q}}} \,\vec{\mathbf{g}}\cdot\vec{\mathbf{q}} \,\delta(\mathbf{S}_{\vec{\mathbf{k}}+\vec{\mathbf{q}}} - \mathbf{S}_{\vec{\mathbf{k}}})\,. \tag{3.46}$$

Queremos adequar esta fórmula para cálculos numéricos. Para tal usando (3.13) para g e somando sobre q ( veja o APÊNDICE C), podemos reescrever:

$$\frac{1}{\tau_{\rm G}} = \frac{N_{\rm G} U_{\rm G}^2 m}{\pi \hbar^3 2} \int_{-\infty}^{\infty} |\mathbf{f}_{\rm n}(\mathbf{p})|^2 d\mathbf{p}, \qquad (3.47)$$

onde

$$|\mathbf{f}_{n}(\mathbf{p})|^{2} = |\langle n| e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{z}} |n \rangle|^{2}.$$
 (3.48)

Neste ponto estamos prontos para calcular a mobilidade usando os tempos de relaxação obtidos nesta seção e lembrando que o tempo de relaxação total será dado pela regra de Matthiessen,  $1/\tau = 1/\tau_{\rm R} + 1/\tau_{\rm G}$ .

# 3.6 Discussão dos resultados

Para relembrarmos os resultados mais importantes que foram conseguidos nas seções anteriores, disporemos abaixo algums das fórmulas obtidas para a mobilidade:

$$\mu = - \frac{e \hbar^2 1}{m N_{\rm E}} \, {\rm K} \,, \tag{3.18}$$

onde

$$\mathbb{K} = \frac{1}{2} \sum_{n} \int \frac{d^2 k}{2 \pi^2} \, \partial_{g} f_0 \, \tau \, k^2. \qquad (3.16)$$

Para a função de distribuição eletrônica de equilíbrio, f<sub>o</sub>, usamos a função de Fermi-Dirac:

$$f_{0} = \frac{1}{\exp(\frac{\delta - \mu_{F}}{K_{B}T}) + 1},$$
 (3.49)

onde  $\mu_{\rm F}$  é o potencial químico que precisa ser determinado. Para isto devemos calcular a densidade, N<sub>E</sub>, definida por:

$$N_{\rm E} = \sum_{\rm n} \int \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^2} f_0 = \frac{K_{\rm B}T}{\pi\hbar^2} \sum_{\rm n} \ln\left(1 + \exp\left(\frac{s - \mu_{\rm F}}{K_{\rm B}T}\right)\right) (3.50)$$

É importante notarmos que a densidade eletrônica  $N_E$  é fixa para cada experiência. Em nosso trabalho consideramos que as duas primeiras subbandas podem estar populadas (devido à temperatura) e assim a fórmula acima (3.50) se transforma em uma equação do segundo grau para a variável  $exp(\frac{\mu_F}{K_BT})$  e resolvendo-a achamos a solução em termos de  $N_E$  e  $S_n^9$ .

<sup>9</sup>é interessante notar que se tivessemos escrito  $f_0$  como a função de Maxwell-Boltzmann o termo, em  $\mu$ , advindo de K, que contem  $\mu_F$ , se cancela com o  $N_E$  do denominador e encontramos a formula de Monarkha [27] para a mobilidade eletrônica. Como pode ser notado pela figura 3.2, a ocupação eletrônica da segunda subbanda é desprezível para temperaturas menores que 4.5 K, quando a densidade eletrônica é 9.5  $10^3 \text{ e/cm}^2$ . Já para uma densidade menor, 1.05  $10^3 \text{ e/cm}^2$ , a ocupação da primeira subbanda é refletida nos resultados obtidos para a mobilidade , mesmo em temperaturas T ~ 2.8 K.



FIGURA 3.2- Contribuição do primeiro estado excitado no cálculo da mobilidade eletrônica, para dois diferentes valores da densidade eletrônica, 1.05 10<sup>3</sup> e 9.5 10<sup>8</sup>e/cm<sup>2</sup>. Nas curvas a) e c) se encontra incluída a contribuição do primeiro estado excitado; e nas curvas b) e d) estam,os considerando que a mobilidade é devida somente aos elétrons no estado fundamental.

SERVIÇO DE BIBLIOTECA E INFORMAÇÃO - IFOSC FÍSICA Como foi mencionado no início deste capítulo, o nosso objetivo era comparar nossos resultados teóricos para a mobilidade com os dados experimentais obtidos por Mehrotra e outros[19]. Abaixo, nas figuras 3.3a e 33.b, mostramos nossos resultados, a baixas densidades eletrônicas, junto com estes dados experimentais e, também os cálculos obtidos sem inclusão dos efeitos devidos à interação elétron-elétron.



FIGURA 3.3a- Resultados para o inverso da mobilidade eletrônica em superfície de Hélio, para baixas densidades. Os pontos são resultados experimentais da ref.[19], a linha tracejada são resultados teóricos que não incluem interação elétron-elétron e a linha sólida são os nossos resultados auto-consistentes. Note que a essas densidades ambos os resultados obtém boa concordância com a experiência. Os picos são devidos à fusão do cristal de Wigner. I é a barra de erro experimental.


FIGURA 3.3b- O mesmo que na figura 3.3a para uma densidade um pouco maior,  $N_E = 1.05 \ 10^8 \ e/cm^2$ .

Para baixas densidades eletrônicas (figura 3.3a e 3.3b), podemos notar que, nas regiões acima da fusão do cristal de Wigner, tanto os nossos resultados como os obtidos por Mehrotra apresentam uma concordância muito boa com os dados experimentais. Contudo, para o sistema com altas densidades é o nosso cálculo, que considera os efeitos da interação elétronelétron, o que mais se aproxima dos dados experimentais. Isto pode ser melhor entendido ao notar que o efeito do potencial de Hartree (capitulo II) é diminuir a distância média de um superfície. Logo, o fato elétron à de se aproximar da superficie faz com que o elétron seja mais fortemente espalhado

pelos ripplons e pelos átomos de vapor. Consequentemente, a mobilidade deve diminuir e, portanto, o inverso da mobilidade aumentar. Isto pode ser claramente observado nas figuras 3.4a, 3.4b e 3.4c.



FIGURA 3.4- Resultados para o inverso da mobilidade eletrônica na superfície de Hélio. Estes dados são para altas densidades eletrônicas. O resultado teórico que não incluem a interação elétron-elétron é o mostrado pelacurva tracejada, os dados experimentais estão representados por pontos e o nosso resultado auto-consistente para a mobilidade é o representado pela curva sólida, sendo os que mais se aproxima deste do resultado esperimental.



FIGURA 3.4b- O mesmo que na figura 3.4b para densidade  $N_E = 6.3 \ 10^8 \ e/cm^2$ .



FIGURA 3.4c- O mesmo que em 3.4a e b, para densidade eletrônica  $N_E$  = 9.5  $10^8$  e/cm<sup>2</sup>.

Note que o potencial de Hartree leva em conta os efeitos de muitos corpos apenas para a direção z. No plano x-y, existem tentativas para acrescentar esta interação usando a constante dielétrica para o gás de elétrons na aproximação RPA. Nós também a incluímos em nossos cálculos porém verificamos que blindar a interação dos elétrons com os centros espalhadores fornece um resultado contrário ao esperado (i.é um aumento da mobilidade). Isto talvez possa sugerir que se tente uma maneira mais apropriada para tratar a correlação eletrônica na direção x-y CONCLUSÃO

Nesta tese estudamos os efeitos da interação elétronelétron sobre camadas eletrônicas na superfície de Hélio e também na superfície de filme de Hélio sobre substrato isolante, em especial a safira e o vidro. Usamos o potencial de Hartree-Fock para incluir estes efeitos e mostramos, através de cálculos auto-consistentes, que existe uma densidade limite, acima da qual, esses elétrons não podem mais serem tratados na aproximação de 1-elétron. Esta densidade limite é de 10<sup>3</sup> e/cm<sup>2</sup> para elétrons sobre Hélio e 10<sup>9</sup> e/cm<sup>2</sup> para elétrons sobre filmes de Hélio. Nossos resultados para baixas densidades revelam uma concordância com dados experimentais obtidos ótima por espectroscopia óptica. Para regiões de altas densidades calculamos a mobilidade destes elétrons, quando submetidos a um campo elétrico paralelo à interface e, os resultados obtidos são muito próximos dos dados experimentais para o sistema, nas regiões de temperaturas acima da fusão do cristal de Wigner. Com a intenção de melhorar estes resultados incluimos а constante dielétrica, na aproximação RPA, para 0 gás eletrônico. Verificamos que o uso desta aproximação na blindagem dos elétrons conduz a resultados piores que o esperado. Na realidade, o efeito da blindagem eletrônica no potencial de espalhamento por ripplons e por átomos de vapor, conduziu os resultados na direção oposta à desejada. Seria interessante tentar melhorar esta aproximação na esperança de se tratar melhor a correlação elétron-elétron e, assim, obterse melhores resultados teóricos.

Estamos terminado cálculos para camadas eletrônicas na interface GaAlAs/GaAs, onde usamos o potencial imagem suave obtido no capítulo III, e calculando a relação de dispersão para a frequência de plasmons-polaritons superficiais, como

70

## função do vetor de onda paralelo à interface.

.

Para encontrarmos a função distribuição eletrônica de não equilíbrio devemos, em primeiro lugar, calcular a sua derivada temporal:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\mathbf{f} = \frac{\partial}{\partial t}\mathbf{f} + \frac{\partial}{\partial t}\mathbf{\vec{r}}\cdot\mathbf{\nabla}_{\vec{r}}\mathbf{f} + \frac{\partial}{\partial t}\mathbf{\vec{k}}\cdot\nabla_{\vec{k}}\mathbf{f}. \qquad (A.1)$$

Na aproximação semiclássica, a força total exercida sobre o elétron é dada por

$$\vec{F} = \hbar \frac{\partial}{\partial t} \vec{k}$$
 (A.2)

e, como a velocidade eletrônica é  $\vec{v} = \frac{\partial}{\partial t}\vec{r}$ , então (A.1) é reescrita como:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\mathbf{f} = \frac{\partial}{\partial t}\mathbf{f} + \vec{\mathbf{v}}\cdot\vec{\nabla}_{\vec{r}}\mathbf{f} + \frac{1}{\hbar}\vec{F}\cdot\nabla_{\vec{k}}\mathbf{f}. \qquad (A.3)$$

Devido à conservação do número de estados, temos  $\frac{d}{dt}f$ = 0. Assim:

$$-\frac{\partial}{\partial t}f = \vec{v}\cdot\vec{\nabla}_{\vec{r}}f + \frac{1}{\hbar}\vec{F}\cdot\nabla_{\vec{k}}f. \qquad (A.4)$$

A força, F, pode ser separada em um termo que inclui apenas as forças internas devidas aos mecanismos de espalhamento, tais como impurezas e ripplons,  $ec{F}_{colisão}$ , e em um segundo termo devido somente às forças externas,  $\vec{F}_e$ . Assim temos

$$-\frac{\partial}{\partial t}f = \vec{v}\cdot\vec{\nabla}_{\vec{r}}f + \frac{1}{\hbar}\vec{F}_{e}\cdot\nabla_{\vec{k}}f + \frac{1}{\hbar}\vec{F}_{col}\cdot\nabla_{\vec{k}}f. \qquad (A.5)$$

É imediato, nesta expressão, notar-se que podemos separar  $\frac{\partial}{\partial t}f$  em duas partes: uma relativa aos processos externos,  $\frac{\partial}{\partial t}f$ e e outra devida aos processos internos  $\frac{\partial}{\partial t}f$ <sub>cousão</sub>, onde:

$$-\frac{\partial}{\partial t}f]_{\mathbf{e}} = \vec{v}\cdot\vec{\nabla}_{\vec{r}}f + \frac{1}{\hbar}\vec{F}_{\mathbf{e}}\cdot\nabla_{\vec{k}}f \qquad (A.6)$$

1

е

$$-\frac{\partial}{\partial t}f\Big]_{\text{colisão}} = \frac{1}{\hbar} \vec{F}_{\text{col}} \cdot \nabla_{\vec{k}} f. \qquad (A.7)$$

No texto chamamos  $\frac{\partial}{\partial t}f$ <sub>colisão</sub> de  $\hat{\Omega}f$ , para que não haja confusão deste operador com uma derivada parcial comum. Para processos estacionários, i.é., processos que não dependem explicitamente do tempo, temos  $\frac{\partial}{\partial t}f = 0$  e, portanto,

$$\frac{\partial}{\partial t} f \Big]_{\text{colisão}} = - \frac{\partial}{\partial t} f \Big]_{e} , \qquad (A.8)$$

ou seja:

$$\frac{\partial}{\partial t} f \Big]_{colisão} = \hat{\Omega} f = \vec{v} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{r}} f + \frac{1}{\hbar} \vec{F}_{e} \cdot \nabla_{\vec{k}} f . \qquad (A.9)$$

Assim se, como no presente trabalho, considerarmos que a força externa é devida apenas a um campo elétrico  $\vec{E}$ ,

então  $\vec{F}_e = -e\vec{E}$  e  $\vec{v} = 0$ . Logo, o operador de colisão pode ser escrito como:

$$\hat{\mathfrak{L}} \mathbf{f} = - \frac{\mathbf{e}}{\hbar} \vec{\mathbf{E}} \cdot \nabla_{\vec{k}} \mathbf{f} , \qquad (A.10)$$

que é a fórmula (3.2) no capitulo III.

Quando o campo elétrico  $\vec{E}$  é desligado, temos então um processo dependente do tempo, que induz o sistema voltar à uma função distribuição de equilíbrio, f<sub>o</sub>, assim:'

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{f} = \hat{\mathbf{g}} \mathbf{f} \,. \tag{A.11}$$

O tempo de relaxação, au, é introduzido ao supor que este processo de volta ao equilíbrio é proporcional ao deslocmento do equilíbrio, i.é.:

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{f} = \hat{\mathbf{g}} \mathbf{f} = -\frac{1}{\tau} \left( \mathbf{f} - \mathbf{f}_0 \right). \tag{A.12}$$

O tempo de relaxação pode ser melhor entendido ao integrarmos esta expressão obtendo que:

$$f(\vec{k}, t) - f_0(\vec{k}) = [f(\vec{k}, 0) - f_0(\vec{k})] e^{-\frac{t}{\tau}}.$$
 (A.13)

Note que se o tempo de relaxação do sistema é pequeno,  $\tau \rightarrow 0$ , temos que  $f(\vec{k},t) \rightarrow f_0$ , i.é, o equilíbrio é obtido instantaneamente. Por outro lado, se  $\tau$  for grande, o sistema levará um tempo também grande para atingir o equilíbrio. Daí o

SERVIÇO	DE	BIBLIOTECA	E	INFORMAÇÃO		IFQSC
FÍSICA						

## APÊNDICE B

A densidade de corrente  $\vec{J}$  é dada por:

$$\vec{J} = - \frac{e^2 \hbar^2}{m^2} \sum_{0} \int \frac{d\vec{k}}{2\pi^2} \,\partial_{g} f_{0} \ \tau \ \vec{k} \cdot \vec{E} \ \vec{k} \,. \qquad (2.10)$$

A componente i de  $\vec{J}$  pode ser escrita como:

$$J_{i} = - \frac{e^{2}\hbar^{2}}{m^{2}} \sum_{j} \sum_{n} \int \frac{d\vec{k}}{2\pi^{2}} \partial_{g} f_{0} \tau k_{j} E_{j} k_{i}. \quad (B.1)$$

Se definimos  $\mathbb{K}^{i \ j}$  como sendo:

$$\mathbb{K}^{i \quad j} = \sum_{n} \int \frac{d\vec{k}}{2\pi^2} \,\partial_{\mathbf{g}} f_0 \quad \tau \quad k_j \quad k_i. \qquad (B.2)$$

Podemos reescrever  $J_i$  como:

$$J_{i} = - \frac{e^{2}\hbar^{2}}{m^{2}} \sum_{j} \mathbb{K}^{i \ j} \mathbb{E}_{j}.$$
 (B.3)

Como a integral em K<sup>i j</sup> se anula para i  $\neq$  j, então:

$$\mathbb{K}^{i \ j} = \mathbb{K}^{i \ i} \ \delta_{i \ j} . \tag{B.4}$$

Substituindo esta expressão em (B.3) temos:

$$J_{i} = - \frac{e^{2}\hbar^{2}}{m^{2}} \quad \mathbb{K}^{i \ i} E_{i}$$
 (B.5)

Por outo lado, como  $k_i^2 = \frac{1}{2}k^2$ , temos que:

$$\mathbb{K}^{1} = \mathbb{K}^{2} = \mathbb{K} = \frac{1}{2} \sum_{n} \int \frac{d\vec{k}}{2\pi^{2}} \partial_{g} f_{0} \tau k^{2} \qquad (B.6)$$

E  $\mathbf{J}_i$  pode ser escrito como:

$$J_{i} = -\frac{e^{2}\hbar^{2}}{m^{2}} \quad K \quad E_{i}$$
 (B.7)

Então

.

•

$$\vec{J} = \sum_{i} J_{i} \hat{e}_{i} = -\frac{e^{2}\hbar^{2}}{m^{2}} K \sum_{i} E_{i} \hat{e}_{i}$$
 (B.8)

$$= - \frac{e^2 \hbar^2}{m^2} K \vec{E}$$
 (3.15)

## APÊNDICE C

Neste apêndice fazemos alguns detalhes dos cálculos para os tempos de relaxação  $\tau_{\rm R} \ e \ \tau_{\rm G}$ . O primeiro deles referese às passagens matemáticas que servem para transformarmos a fórmula para  $\tau_{\rm R}$ , (3.34), em uma outra, (3.35), acessível a cálculos numéricos. A expresão, para o tempo de relaxação para ripplons, que queremos transformar é :

$$\frac{1}{\tau_{\rm R}} = \frac{2\pi}{\hbar S} \sum_{\mathbf{q}} |\gamma_{\mathbf{q}}^n|^2 (2N\mathbf{q}+1) \frac{\vec{k} \cdot \vec{\mathbf{q}}}{k^2} \delta(\mathbf{s}_k - \mathbf{s}_{k'}) \qquad (3.34)$$

onde é observada a consevação do momento paralelo,  $\vec{k}' = \vec{k} - \vec{q}$  e  $\mathbf{S}_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ . Transformando o somatório sobre q em uma integral:

$$\frac{1}{S} \sum_{\vec{q}} \rightarrow \int \frac{d\vec{q}}{(2\pi)^2} = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^{2\pi} d\theta \int_0^{\infty} q \, dq, \qquad (C.1)$$

temos que:

$$\frac{1}{\tau_{\rm R}} = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{0}^{2\pi} d\theta \int_{0}^{\infty} dq \, \vartheta(q) - \frac{q^2}{k} \cos\theta \, \delta(s_{\rm k} - s_{\rm k'}) \qquad (C.2)$$

onde  $\vartheta(q) = |\gamma_q^n|^2 (2Nq + 1)$ . Observe que a função  $\delta$  pode ser escrita como:

$$\delta(\mathbf{s}_{|\vec{k}-\vec{q}|} - \mathbf{s}_{\vec{k}}) = \frac{2\mathbf{m}}{\hbar^2} \delta(\mathbf{q}^2 - 2\vec{k} \cdot \vec{q})$$
(C.3)

e a substituindo na exbressão (C.2) para  $1/\tau_{\rm R}$  obtém-se que:

$$\frac{1}{\tau_{\rm R}} = \frac{m}{\pi \hbar^3} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} d\theta \int_{0}^{\infty} dq \ \vartheta(q) \quad \frac{q^2}{k} \cos\theta \ \delta(q^2 - 2 \vec{k} \cdot \vec{q}), \qquad (C.4)$$

A função  $\delta$ , nesta expressãote restringe o intervalo de integração de  $\theta$  a intervalos em que  $\cos\theta > 0$ . Isto aontece porque, como q e k são positivos,  $\cos\theta$  também deve ser para que o vínculo imposto pela  $\delta$ ,  $q^2 = 2k\cos\theta$ , seja satisfeito.

Note que, devido à função  $\delta$ , poderemos integrar sobre q fazendo a seguinte mudança de variável:

$$y = q^2 - 2k\cos\theta \qquad (C.5)$$

Ou seja:

$$q = \frac{2 k \cos \theta}{2} + \frac{1}{2} \sqrt{(2 k \cos \theta)^2 + 4 y}$$
(C.6)

e dy =  $(2q - 2k\cos\theta)dq$  de maneira que:

$$dq = \frac{dy}{(2q - 2k\cos\theta)} = \frac{dy}{\sqrt{(2k\cos\theta)^2 + 4y}}$$
(C.7)

Assim:

$$\frac{1}{\tau_{\rm R}} = \frac{m}{\pi \hbar^3} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} d\theta \int_{0}^{\infty} \frac{dy}{\sqrt{(2 \, k \cos \theta)^2 + 4 \, y}} \, \vartheta(q(y)) \quad \frac{q^2(y)}{k} \, \cos \theta \, \, \delta(y)$$

$$= \frac{m}{\pi \hbar^3} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} d\theta \quad \frac{\vartheta(q(0))}{2 k \cos \theta} \quad \frac{q^2(0)}{k} \cos \theta \qquad (C.8)$$

onde

$$\mathbf{q}(\mathbf{0}) = 2\mathbf{k}\cos\theta. \tag{C.9}$$

1

Ou ainda

$$\frac{1}{\overline{\tau}_{R}} := \frac{\mathfrak{m}}{\pi \hbar^{3}} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} d\theta \quad \vartheta(q(0)) \, \cos^{2}\theta. \qquad (C.10)$$

Fazendo  $\theta \rightarrow \frac{\theta}{2} - \frac{\pi}{2}$  nesta fórmula chegamos exatamente à a expressão (3.35), do capítulo III.

Os próximos cálculos são relativas ao tempo de relaxação  $\tau_{\rm G}$ . A seguir fazemos em detalhes duas integrais para mostrar como se chega à fórmula para o operador de colisão, dada por (3.45), partindo de de sua expressão (3.40) dada a seguir:

$$\hat{\mathbf{\mathfrak{L}}} \mathbf{f}(\vec{\mathbf{k}}) = \frac{2\pi}{\hbar\Omega^2} \sum_{\vec{q},\vec{K}_{\vec{\tau}},\vec{K}_{\vec{z}},\vec{K}_{\vec{z}}} |\eta_{G}(\mathbf{K}\mathbf{z}-\mathbf{K}\mathbf{z}')|^{2} \mathbf{f}_{G}(\vec{K}_{t},\mathbf{K}\mathbf{z}) \cdot \left(\mathbf{f}(\vec{\mathbf{k}}+\vec{q}) \ \delta(\mathbf{\mathfrak{E}}_{\vec{k}+\vec{q}}-\mathbf{\mathfrak{E}}_{\vec{k}}+\frac{\hbar^{2}}{2M}(\mathbf{K}^{2}-(\vec{K}_{t}+\vec{q})^{2})+\frac{\hbar^{2}}{2M}(\mathbf{K}^{2}_{\vec{z}}-\mathbf{K}^{\prime}_{\vec{z}})) - \right) - \left(\mathbf{f}(\vec{\mathbf{k}}) \ \delta(\mathbf{\mathfrak{E}}_{\vec{k}}-\mathbf{\mathfrak{E}}_{\vec{k}+\vec{q}}+\frac{\hbar^{2}}{2M}(\mathbf{K}^{2}-(\mathbf{K}^{2}_{\vec{t}}-\vec{q})^{2})+\frac{\hbar^{2}}{2M}(\mathbf{K}^{2}_{\vec{z}}-\mathbf{K}^{\prime}_{\vec{z}}))\right)$$
(3.40)

$$\mathbf{f}_{G}(\vec{K}_{t},Kz) = \left(\frac{2\pi\hbar^{2}}{MK_{B}T}\right)^{3/2} N_{G} \exp\{-\hbar^{2}(K\hat{t}+K\hat{z})/2MK_{B}T\} \quad (3.41)$$

 $\label{eq:transformando} \text{ os somatórios sobre } \vec{K}_t \quad e \quad Kz \quad em$  integrais

$$\frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{K}\mathbf{Z}} \sum_{\vec{\mathbf{K}}\mathbf{t}} \rightarrow \int \frac{\mathbf{d}\vec{\mathbf{K}}\mathbf{t} \ \mathbf{d}\mathbf{K}\mathbf{z}}{(2 \pi)^3}$$

(C.11)

e usando B =  $(\frac{2\pi\hbar^2}{MK_BT})^{3/2} N_G$ , mais a representação integral para a função  $\delta$ :

$$\delta(\mathbf{x}) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dt}{2\pi} e^{i t \mathbf{x}}, \qquad (C.12)$$

o operador de colisão , (3.40) ,é reescrito como:

$$\hat{\mathfrak{L}} f = \frac{B}{(2\pi)^2 \hbar \Omega} \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{K}_{\mathbf{z}'}} \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{K} \mathbf{z} \int d\mathbf{\vec{K}} t |\eta_{\mathbf{G}}(\mathbf{K} \mathbf{z} - \mathbf{K} \mathbf{z}')|^2$$

$$\cdot \exp\{-\hbar^{2}(K_{r}^{2}+K_{z}^{2})/2MK_{B}T\}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dt}{2\pi} \left\{ f\left(\vec{k}+\vec{q}\right) \cdot exp\left\{ it\left(\vec{s}_{\vec{k}+\vec{q}}-\vec{s}_{\vec{k}}\right)+\frac{it\hbar^{2}}{2M}\left(K_{z}^{2}-K_{z}'^{2}-q^{2}-2\vec{K}_{t}\cdot\vec{q}\right)\right\} - \frac{1}{2M}\left(K_{z}^{2}-K_{z}'^{2}-q^{2}-2\vec{K}_{t}\cdot\vec{q}\right)\right\} - \frac{1}{2}\left(K_{z}^{2}-K_{z}'^{2}-q^{2}-2\vec{K}_{t}\cdot\vec{q}\right)\right\} - \frac{1}{2}\left(K_{z}^{2}-K_{z}'^{2}-q^{2}-2\vec{K}_{t}\cdot\vec{q}\right)\right)$$

$$-f(\vec{k}) \exp\{-it(\vec{s}_{\vec{k}+\vec{q}}-\vec{s}_{\vec{k}})+\frac{it\hbar^{2}}{2M}(K_{\vec{z}}^{2}-K_{\vec{z}'}-q^{2}-2\vec{K}_{t}\cdot\vec{q})\}]$$
(C.13)

Fazendo uma nova mudança de variável, $K_{Z}' = p + K_{Z}$ , obtém-se que:

SERVIÇO DE BIBLIOTECA E INFORMAÇÃO - IFQSC FÍSICA

$$\hat{\mathfrak{L}} \mathbf{f} = \frac{B}{(2\pi)^2 \hbar \Omega} \sum_{\mathbf{\vec{q}}, \mathbf{p}} \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{K} \mathbf{z} \int d\mathbf{\vec{K}} t |\eta_{\mathsf{G}}(\mathbf{p})|^2 + \dots$$

$$\cdot \exp\{-\hbar^{2}(K_{t}^{2}+K_{z}^{2})/2MK_{e}T\}$$

$$\cdot \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d} t}{2\pi} \left\{ f\left(\vec{k} + \vec{q}\right) \cdot exp\left\{i t\left(\hat{s}_{\vec{k} + \vec{q}} - \hat{s}_{\vec{k}}\right) + \frac{i t\hbar^2}{2M}\left(-p^2 - q^2 - 2 pK_Z - 2\vec{K}_t \cdot \vec{q}\right)\right\} - \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d} t}{2M} \left\{ -p^2 - q^2 - 2 pK_Z - 2\vec{K}_t \cdot \vec{q} \right\} - \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d} t}{2M} \left\{ -p^2 - q^2 - 2 pK_Z - 2\vec{K}_t \cdot \vec{q} \right\} - \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d} t}{2M} \left\{ -p^2 - q^2 - 2 pK_Z - 2\vec{K}_t \cdot \vec{q} \right\} - \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d} t}{2M} \left\{ -p^2 - q^2 - 2 pK_Z - 2\vec{K}_t \cdot \vec{q} \right\} - \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d} t}{2M} \left\{ -p^2 - q^2 - 2 pK_Z - 2\vec{K}_t \cdot \vec{q} \right\} - \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d} t}{2M} \left\{ -p^2 - q^2 - 2 pK_Z - 2\vec{K}_t \cdot \vec{q} \right\} - \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d} t}{2M} \left\{ -p^2 - q^2 - 2 pK_Z - 2\vec{K}_t \cdot \vec{q} \right\} - \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d} t}{2M} \left\{ -p^2 - q^2 - 2 pK_Z - 2\vec{K}_t \cdot \vec{q} \right\} + \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d} t}{2M} \left\{ -p^2 - q^2 - 2 pK_Z - 2\vec{K}_t \cdot \vec{q} \right\} + \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d} t}{2M} \left\{ -p^2 - q^2 - 2 pK_Z - 2 \vec{K}_t \cdot \vec{q} \right\} + \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d} t}{2M} \left\{ -p^2 - q^2 - 2 pK_Z - 2 \vec{K}_t \cdot \vec{q} \right\} + \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d} t}{2M} \left\{ -p^2 - q^2 - 2 pK_Z - 2 \vec{K}_t \cdot \vec{q} \right\} + \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d} t}{2M} \left\{ -p^2 - q^2 - 2 pK_Z - 2$$

$$- f(\vec{k}) \exp\{-i t(\$_{\vec{k}+\vec{q}} - \$_{\vec{k}}) + \frac{i t\hbar^{2}}{2M}(-p^{2} - q^{2} - 2 pK_{Z} - 2\vec{k}_{t} \cdot \vec{q})\}]$$
(C.14)

.

Isolando os termos em  $\vec{K}_t$  acima ficamos com as seguintes integrais:

$$I_{1} = \int d\vec{K}_{t} \exp\{-\frac{\hbar^{2}}{2MK_{B}T} Kt^{2} - \frac{i t \hbar^{2}}{2M} 2 \vec{K}_{t} \cdot \vec{q} \}$$
(C.15)  
$$I_{2} = \int d\vec{K}_{t} \exp\{-\frac{\hbar^{2}}{2MK_{B}T} Kt^{2} + \frac{i t \hbar^{2}}{2M} 2 \vec{K}_{t} \cdot \vec{q} \}$$

Basta que façamos apenas uma dessa integrais pois  $I_1 = I_2$ . Assim:

$$I_{1} = \int_{-\infty}^{\infty} dK_{1} \int_{-\infty}^{\infty} dK_{2} \exp \left\{ -\frac{\hbar^{2}}{2MK_{B}T} (K_{1}^{2} + K_{2}^{2}) - \frac{i t \hbar^{2}}{2M} 2(K_{1}q_{1} + K_{2}q_{2}) \right\} =$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dK_{1} \exp\{-\frac{\hbar^{2}}{2MK_{B}T} (K_{1}^{2} + i t K_{B}T 2 K_{1}q_{1}) \}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dK_{2} \exp\{-\frac{\hbar^{2}}{2MK_{B}T} (K_{2}^{2} + i t K_{B}T 2 K_{2}q_{2}) \}. \qquad (C.16)$$

Completando o quadrado na exponencial,

•

$$I_{1} = \int_{-\infty}^{\infty} dK_{1} \quad \exp\{-\frac{\hbar^{2}}{2MK_{B}T} \left[ (K_{1} + a_{1})^{2} + a_{1}^{2} \right] \} \cdot \int_{-\infty}^{\infty} dK_{2} \quad \exp\{-\frac{\hbar^{2}}{2MK_{B}T} \left[ (K_{2} + a_{2})^{2} + a_{2}^{2} \right] \} \quad (C.17)$$

onde

$$\mathbf{a}_{j} = i \mathbf{t} \mathbf{K}_{\mathsf{B}} \mathbf{T} \mathbf{q}_{j} \tag{C.18}$$

1

Fazendo a integral Gaussiana e usando (C.18) temos:

$$I_{1} = \frac{2\pi M K_{B}T}{\hbar^{2}} \exp\{-\frac{\hbar^{2} t^{2} K_{B}T}{2M} q^{2}\}$$
(C.19)

Substituindo este resultado em (C.14):

$$\hat{\mathbf{g}} \mathbf{f} = \frac{\mathbf{B}\mathbf{M}\mathbf{K}_{\mathsf{B}}\mathbf{T}}{2\pi\hbar\Omega} \sum_{\vec{q},p} |\eta_{\mathsf{G}}(\mathbf{p})|^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\,t}{2\,\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{K}z \, \exp\{-\frac{\hbar^2\,\mathbf{K}_{\mathsf{Z}}^2}{2\,\mathsf{M}\,\mathsf{K}_{\mathsf{B}}\mathbf{T}}\} +$$

$$\cdot \left[ f\left(\vec{k}+\vec{q}\right)\cdot \exp\left\{it\left(\delta_{\vec{k}+\vec{q}}-\delta_{\vec{k}}\right)-\frac{it\hbar^{2}}{2M}\left(p^{2}+q^{2}+2pK_{Z}\right)\right\}\right] -$$

$$- f(\vec{k}) \exp\{-i t (\$_{\vec{k} + \vec{q}} - \$_{\vec{k}}) - \frac{i t \hbar^2}{2M} (p^2 + q^2 - 2 p K_Z) \} ] \cdot$$

.

.

$$exp\{-\frac{\hbar^2 t^2 K_B T}{2M} q^2\}$$
 (C.20)

Separando os termos em Kz nesta fórmula devemos fazer a seguinte integral :

$$I_{Z} = \int_{-\infty}^{\infty} dKz \, \exp\{-\frac{\hbar^{2}}{2MK_{B}T}Kz^{2} - \frac{it\hbar^{2}}{2M}2pKz\}$$
(C.21)

1

Pelo mesmo método de completar o quadrado temos:

$$I_{Z} = \sqrt{\frac{2MK_{B}T}{\hbar^{2}}} \exp\{-\frac{\hbar^{2}t^{2}K_{B}T}{2M}p^{2}\}$$
 (C.22)

Substituindo  $I_z$  em (C.20) temos:

$$\hat{\mathfrak{L}} f = \frac{2\pi N_G}{\hbar\Omega} \sum_{\vec{q},p} |\eta_G(p)|^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dt}{2\pi}$$

$$\left[ f(\vec{k}+\vec{q}) \exp\{i t(\vec{s}_{\vec{k}+\vec{q}}-\vec{s}_{\vec{k}})-\hbar^2(i t+t^2 K_B T)(q^2+p^2)/2M\} - \right]$$

$$-f(\vec{k}) \exp\{-it(\hat{s}_{\vec{k}+\vec{q}}-\hat{s}_{\vec{k}})-\hbar^{2}(it+t^{2}K_{g}T)(q^{2}+p^{2})/2M\}] \qquad (3.44)$$

Vamos agora expandir a exponencial até  $1^{\frac{a}{2}}$  ordem em  $\frac{1}{M}$ 

$$\hat{\mathfrak{L}} \mathbf{f} = \frac{2 \pi N_G}{\hbar \Omega} \sum_{\vec{q}, p} |\eta_G(p)|^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d \mathbf{t}}{2 \pi}$$

$$\cdot \left[ f(\vec{k}+\vec{q})\exp\{it(\vec{S}_{\vec{k}+\vec{q}}-\vec{S}_{\vec{k}})\} - f(\vec{k})\exp\{-it(\vec{S}_{\vec{k}+\vec{q}}-\vec{S}_{\vec{k}})\} \right] \cdot$$

$$\cdot \left[ 1 - \frac{\hbar^2}{2M} (i t + t^2 K_B T) (q^2 + p^2) \right]$$
 (C.23)

Extraindo os termos em t somente do coeficiente de  $f(\vec{k}+\vec{q})$  (para  $f(\vec{k})$  o procedimento é similar), temos:

$$I_{t} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dt}{2\pi} \exp\{i t (\hat{s}_{\vec{k}+\vec{q}} - \hat{s}_{\vec{k}}) [1 - \frac{\hbar^{2}}{2M}(i t + t^{2}K_{B}T)(q^{2} + p^{2})] (C.24)$$

E novamente usando a representação integral para a função  $\delta$  podemos imediatamente verificar que o 1º- termo de (C.24) é  $\delta(\mathbf{s}_{k+q} - \mathbf{s}_k)$  e o 2º- e o 3º- são derivada primeira e segunda respectivamente. Desta forma obtém-se a expressão (3.45) para  $\Omega$ f, no capítulo III.

A seguir faremos alguns cálculos para um melhor esclarecimento de como se chega à expressão final para  $\tau_{\rm G}$ .De (3.46) temos que:

$$\frac{1}{\tau_{\rm G}} = -\frac{N_{\rm G}}{(2\pi)^2\hbar} \frac{1}{\vec{\mathbf{g}}\cdot\vec{\mathbf{k}}} \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{p} |\eta_{\rm G}(\mathbf{p})|^2 \int_{0}^{2\pi} d\theta \int_{0}^{\infty} q \, d\mathbf{q} \, \vec{\mathbf{g}}\cdot\vec{\mathbf{q}} \, \delta(\mathbf{S}_{\vec{\mathbf{k}}+\vec{\mathbf{q}}} - \mathbf{S}_{\vec{\mathbf{k}}}). \tag{C.25}$$

fazendo  $\vec{g} = -g\hat{i}$ ,  $\vec{k} = -k\hat{i}$  e  $\vec{q} = q(\cos\theta\hat{i} + \sin\theta\hat{j})$ , tem-se que:

$$\frac{1}{\tau_{\rm G}} = -\frac{N_{\rm G}}{(2\pi)^2 \hbar} \frac{1}{k} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\mathbf{p} \left| \eta_{\rm G}(\mathbf{p}) \right|^2 \int_{0}^{2\pi} \mathrm{d}\theta \int_{0}^{\infty} q^2 \,\mathrm{d}\mathbf{q} \,\cos\theta \,\,\delta(\mathbf{s}_{\vec{k}+\vec{q}} - \mathbf{s}_{\vec{k}})(\mathrm{C.26})$$

Reescrevendo a  $\delta$  como em (C.3) obtemos:

$$\frac{1}{\tau_{\rm G}} = -\frac{N_{\rm G} \, 2\,\mathrm{M}}{(\,2\,\pi\,)^2 \hbar^3} \frac{1}{\mathrm{k}} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\,\mathbf{p} \, \left| \eta_{\rm G}(\mathbf{p}) \right|^2 \int_{-\pi/2}^{-\pi/2} \mathrm{d}\theta \cos\theta \int_{0}^{\infty} \mathbf{q}^2 \, \mathrm{d}\,\mathbf{q} \quad \delta(\mathbf{q}^2 - 2\,\mathrm{k}\,\mathbf{q}\cos\theta) \qquad (C.27)$$

Por fim, fazendo uma mudança de variável, como em (C.5), integramos primeiro sobre q e depois sobre  $\theta$ , para obter uma expressão mais simples, (3.47), para  $\tau_{\rm G}$ .

## BIBLIOGRAFIA

[1] Sommer, W.T.; Tese de Doutorado, Univesidade de Stanford EUA(não publicada)

[2] Cole, M.W. e Cohen, M.H.; Phys. Rev. Lett. 23, 1283(1969)

[3] Shikin, V.B.; Sov. Phys. JETP 31,936(1970)

[4] Willians,R.,Crandall,R.S.eWillis,A.H.;Phys.Rev.Lett.,26,7 (1971)

[5] Sommer, W.T. e Tanner, D.J.; Phys. Rev. Lett 27, 1345(1971)

[6] Cole, M.W.; Rev. Mod. Phys.; 46, 451, (1974)

[7] Shikin, V.B. e Monarkha, Yu.P. ; Sov. J. Low Temp. 1,459(1975)

[8] Crandall, R.S.; Phys.Rev.A6, 2, 790(1972)

[9] Grimes, C.C.; Surf. Sc., 73, 379(1978)

[10] Monarkha, Yu.P. e Shikin, V.B.; Sov. J. Low

Temp. Phys. 8,279(1982)

[11] Ando, T., Fowler, A.B. e Stern, F.; Rev. Mod. Phys.; 54, 437, (1982)

[12] Studart, N. e Hipolito, O. ; Rev. Bras. Fis. 16, 2, 194(1986)

[13] Dahm, A. J. e Vinen, W.F.; Physics Today, fev. (1987)

[14] Sanders, T.M. e Weinreich, G. ; Phys. Rev. B 13, 4810(1976)

[15] Hipolito, O., de Felicio, J.R.D. e Farias, G.A.; Solid St. Comm.

28,365(1978)

[16] Stern, F.; Phys. Rev. B 17, 12, 5009(1978)

[17] Hsing-Mei Huang, Yu Ming Shih w Chia-Wei Woo;

J. Low Temp. Phys. 14,413(1974)

[18] Grimes,C.C. e Brown,T.R., Burns,M.L. e Zipfel,C.L.; Phys. Rev.B 13,140(1976)

[19] Mehrotra,R., Guo,C.J., Ruan,Y.Z., Mast,D.B. e Dahm,A.J.; Phys. Rev.B 29,5239(1984)

[20] Sommer, W.T.; Phys.Rev.Lett.12,271(1964)

[21] Landau,L.D. e Lifshitz,E.M.; Electrodynamics of Continuous Medi a(Pergamon Press, London 1960)

[22] Ashcroft, N.W. e Mermin, N.D.; Solid State Physics

- (Holt, Renehart & Winston, 1976)
- [23] Hedin, L. e Lundqvist, B. I.; J. Phys. C 4, 2064(1971)
- [24] Merzbacher, E.; Quantum Mechanics (John Wiley & Sons)
- [25] Abramovicz, M. e Stegun, I.; Handbook of Mathematical Functions (Dover, Nova York, 1968)
- [26] Jackson, J.D.; Eletrodinâmica Clássica
- (Guanabara Dois.,1983)
- [27] Saitoh, M.J.; J. Phys. Soc. of Jap. 42, 1, 201(1977)
- [28] Monarkha, Yu.P.; Sov. J. Low Temp. Phys. 2,600(1976)
- [29] Kajita,K.; Surf.Sc., 196,29(1988)
- [30] Pereira, M.C. e Marques, G.E.; Physica B1, 153, 1(1988)
- [31] Kireev, P.S.; Semiconductor Physics (Mir Publishers, 1978)
- [32] Cole, M.W.; Phys. Rev.B 2,4239(1970)
- [33] Frölich, H., Pelzer, H. eZienau, S.; Philos. Magaz. 41, 221(1950)
- [34] Shikin, V.B.e Monarkha, Yu.P.; J.LowTemp.Phys.16, 193(1974)