UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

INSTITUTO DE FÍSICA E QUÍMICA DE SÃO CARLOS

PROPRIEDADES MAGNÉTICAS DE GÁS DE ELETRONS CONFINADO

José Roberto Drugowich de Felício

(Trabalho apresentado ao Instituto de Física e Química de São Carlos, USP, para obtenção do título de Mestre em Física.)

ORIENTADOR:

Dr. Sylvio Goulart Rosa Jr.

Departamento de Física e Ciência dos Materiais

São Carlos

1977

195

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

PROPRIEDADES MAGNÉTICAS DE GAS DE ELETRONS CONFINADO

José Roberto Drugowich de Felício

(Trabalho apresentado ao Instituto de Física e Química de São Carlos, USP, para obtenção do título de Mestre em Física.)

Orientador:
Dr.Sylvio Goulart Rosa Jr.

USP / IFQSC / SBI
8-2-000195

Banca Examinadora:

Dr.Sylvio Goulart Rosa Jr. (orientador)
Dr.Rogério C.Trajano da Costa (IFQSC/USP)
Dr.Silvio Roberto de A.Salinas (IFUSP)

Departamento de Física e Ciência dos Materiais
São Carlos, abril 1977

À

ANA SÍLVIA,

com carinho

Este trabalho foi realizado com o apoio financeiro do CNPq e FINEP.

ÍNDICE

Agradecimentos..... I
Resumo..... II
Abstract..... III
Contribuições Originais..... IV

CAPÍTULO I - Introdução..... 1

CAPÍTULO II - Susceptibilidade de um gas de eletrons confinado no regime clássico..... 12

CAPÍTULO III- Efeitos do confinamento bidimensional nas propriedades magnéticas do gas degenerado..... 22

CAPÍTULO IV - Efeitos do confinamento tridimensional nas propriedades magnéticas do gas de eletrons livres (alta temperatura)..... 42

CAPÍTULO V - O potencial harmônico tridimensional e as propriedades magnéticas a baixas temperaturas... 49

CAPÍTULO VI - Conclusões e sugestões para trabalhos futuros 61

Apêndice-A..... 63

Apêndice-B..... 65

Apêndice-C..... 67

Apêndice-D..... 70

Bibliografia..... 71

AGRADEÇO

ao Prof.Sylvio Goulart Rosa Jr., orientador dessa dissertação, por sua participação segura e decisiva.

aos professores Almir Massambani, Laercio G.de Freitas, Oscar Hipólito e Roberto Lobo que muito contribuiram para o meu ingresso na carreira científica.

aos companheiros Lidério, Luiz e Zilio, com quem tive o privilégio de conviver.

aos meus pais e irmãos, pela confiança e estímulo.

a Loreni e ao Paulo pela datilografia e impressão.

a todos os professores e funcionários do IFQSC/USP.

RESUMO

Os efeitos de confinamento por um potencial harmônico bi e tridimensional, nas propriedades magnéticas de um gás de elétrons livres, são investigados pelo uso da distribuição grand-canônica. No domínio de temperaturas altas uma extensão é feita aos trabalhos de Darwin e de Felderhof e Raval, para levar em conta efeitos de spin e verificar o limite de validade do seu procedimento.

A baixas temperaturas o trabalho dá uma descrição abrangente das propriedades magnéticas do gás de elétrons, considerando o sistema finito mas sem introduzir as complicações oriundas da condição de contorno ($\Psi=0$).

São analisados os limites em que a frequência característica do potencial de confinamento (ω_0) é muito maior ou muito menor do que a frequência de Larmor (ω_L), correspondendo respectivamente aos casos de confinamento forte ou fraco, e suas implicações sobre o comportamento do momento magnético do sistema.

ABSTRACT

The effects of confinement by a two or three-di - mensional harmonic potential on the magnetic properties of a free electron gas ate investigated by using the grand-canonical ensemble framework. At high temperatures an extension of Darwin's, Felderhof and Raval's works is made taking into account spin effects.

At low temperatures this work gives a comprehensive description of the magnetic properties of a free electron gas. The system is regarded as finite, but the boundary condition $\Psi=0$ is not introduced. The limits of weak and strong confinement are also analysed.

CAPÍTULO I
INTRODUÇÃO

No início do século vários artigos foram publica - dos, tentando explicar as propriedades magnéticas do gás de elé - trons livres. O objetivo era encontrar- com o uso da estatística clássica- uma susceptibilidade não nula para o gás de elétrons , que desde os tempos de Drude e Lorentz tem sido exaustivamente u- sado na interpretação de propriedades eletrônicas de metais.

Entretanto, Niels Bohr[1] mostrou- e mais tarde miss van Leeuwen[2] generalizou a prova- que trabalhando apenas com a teoria clássica* não se pode obter outro resultado que não zero pa

*Esse fato conhecido como Teorema de Bohr-van Leeuwen pode ser demonstrado[3] tomando-se por exemplo um sistema de N elétrons- descritos pelas coordenadas $q_1,\ldots q_{3N}$ e as correspondentes momenta $p_1,\ldots p_{3N}$- em um campo magnético uniforme na direção z. O momento magnético será dado por

$$m_z = \sum_{i=1}^{N} a_i^z(q_1,\ldots q_{3N})\,\dot{q}_i \qquad (1)$$

onde a_i^z só depende das posições. O uso do fator de Boltzman $(\overline{e^{-\beta H}})$, onde H (hamiltoniana) é dada por

$$H = \sum_{i=1}^{3N} \frac{1}{2m}\left(\vec{p}_i - \frac{e\vec{A}_i}{c}\right)^2 + eV(q_1,\ldots q_{3N}) \qquad (2)$$

permita calcular o momento magnético médio

$$\langle m\rangle = \int m_z \frac{e^{-\beta H}}{Z}\, dq_1\ldots dq_{3N}\, dp_1\ldots dp_{3N} \qquad (3)$$

Na expressão (3) Z é a função partição clássica

$$Z = \int e^{-\beta H}\, dq_1\ldots dq_{3N}\, dp_1\ldots dp_{3N} \qquad (4)$$

Substituindo (1) em (3) e usando as equações de Hamilton-Jacobi: $\dot{q}_i = \overline{\partial H/\partial p_i}$ e $\dot{p} = -\partial H/\partial q_i$ obtém-se o resultado

$$\langle m\rangle = \frac{1}{Z}\int \sum_i a_i^z(q_1\ldots q_{3N})\,\overline{\frac{\partial H}{\partial p_i}\, e^{-\beta H}}\, dq_1\ldots dq_{3N}\, dp_1\ldots dp_{3N} =$$

$$= -\frac{1}{\beta}\int \sum_i a_i^z\left(\frac{\partial e^{-\beta H}}{\partial p_i}\right) dq_1\ldots dq_{3N}\, dp_1\ldots dp_{3N}$$

$$\langle m\rangle = \frac{1}{\beta Z}\int \sum_i a_i^z(q_1\ldots q_{3N})\left[e^{-\beta H}\Big|_{p_i=-\infty}^{p_i=+\infty}\right] dq_1\ldots dq_{3N}\, dp_1\ldots dp_{i+1}\ldots dp_{3N} =$$

$$= 0$$

ra a susceptibilidade do sistema em questão. O que dava origem à resposta não nula encontrada anteriormente era o tratamento inadequado que se dispensava aos elétrons da fronteira. Fossem eles corretamente levados em conta e a corrente gerada pelos seus movimentos- delineando os limites do sistema- anularia exatamente a contribuição dos elétrons interiores, conforme se mostra esquematicamente na figura I.1.

Com o aparecimento da mecânica quântica, imediatamente dois problemas foram atacados: o paramagnetismo (de spin) e o diamagnetismo (orbital). O primeiro foi resolvido com sucesso por Pauli[4], em 1928 (veja também Frenkel[5] e Bloch[6]). O segundo só o foi em 1930, por Landau[7], que mostrou ser o diamagnetismo possível em gás de elétrons, em virtude da quantização do movimento orbital dos elétrons no campo magnético. Ele resolveu a equação de Schrödinger[8] para determinar os níveis de energia*,

* Substituindo $\vec{p}=\hbar/i\nabla$ e usando o gauge de Landau para representar o campo magnético na direção z, $\vec{A}=(0,xB,0)$ a hamiltoniana fica escrita como

$$-(\vec{p}-\frac{e\vec{A}}{c})^2\frac{1}{2m}\Psi=(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2})\frac{\hbar^2\Psi}{2m}+\frac{\hbar^2}{2m}(\frac{\partial}{\partial y}-\frac{ieBc}{hc})^2\Psi=-E\Psi \quad (1)$$

Tomando $\Psi=e^{i(k_y y+k_z z)}.u(x)$ obtém-se para u(x) a equação abaixo

$$u''(x)+\{\frac{2mE_1}{\hbar^2}-(k_y-\frac{eBx}{\hbar c})^2\}u(x)=0 \quad (2)$$

onde $E_1=E-\hbar^2k_z^2/2m$. Chamando $(\hbar c/eB)k_y=x_0$ e $eB/2mc=\omega_L$ a equação (2) fica

$$-\frac{\hbar^2}{2m}u''(x)+\frac{m}{2}(2\omega_L)^2(x-x_0)^2u(x)=E_1u(x) \quad (3)$$

que é exatamente a equação de Schrödinger para um oscilador harmônico que oscila com frequência $2\omega_L$ em torno do ponto x_0. Os auto-valores de (3) são conhecidos[9] e portanto

$$E_{1,n}=2\hbar\omega_L(n+1/2), \quad (4)$$

onde n é inteiro positivo qualquer. Esses níveis discretos de energia são chamados "níveis de Landau", e são degenerados conforme se indica no próximo rodapé.

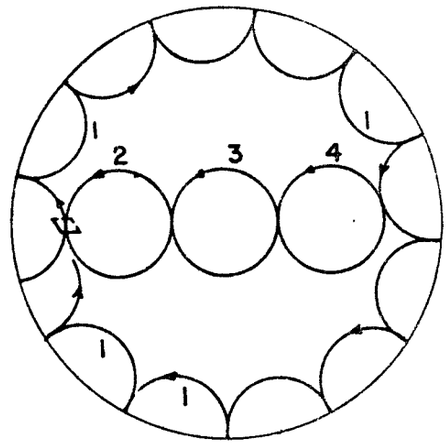

Figura I.1- Os elétrons da fronteira (1) cancelam a contribuição dos elétrons interiores (2,3 e 4).

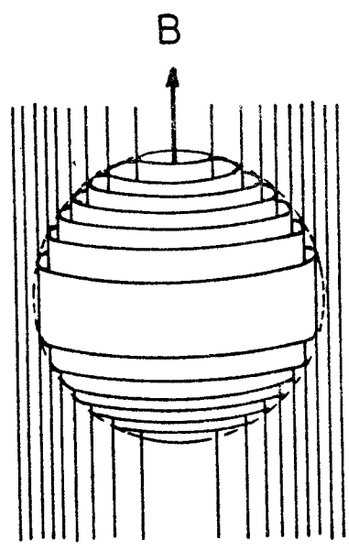

Figura I.2- O efeito do campo magnético na região do espaço dos k's que pode ser ocupada pelos elétrons (R.G.Chambers, Canad.J.Phys.34,1395)

e por soma direta sobre os mesmos (levando em conta a degenerescência†) encontrou a função de partição (Z). Na estatística de Boltzmann a magnetização é dada por

$$M = -NkT \frac{\partial}{\partial B} \ln Z \qquad (I.1)$$

onde N é o número de partículas e B a intensidade do campo magnético. Sabe-se no entanto que os elétrons em metais formam um gás altamente degenerado (mesmo a temperaturas ambientes), e portanto é necessário usar a estatística de Fermi-Dirac, onde a energia livre de Helmholtz (F) é escrita como

$$F - n\zeta = -2kT \sum_n \ln\{1+\exp[(\zeta - E_n)/kT]\} \qquad (I.2)$$

Foi Landau quem efetuou mais esse cálculo, outra vez usando explicitamente os níveis de energia (Veja Figuras I.3 e I.4).

---

†Degenerescência: supondo o gás contido em um volume definido por $-L_1/2 \leq x_1 \leq L_1/2$, ...$-L_2/2 \leq y \leq L_2/2$ e $-L_3/2 \leq z \leq L_3/2$, e impondo condições periódicas de contorno conclue-se que k_y e k_z só podem assumir valores múltiplos de $2\pi/L_2$ e $2\pi/L_3$ respectivamente. Como os auto-valores de (I.3) são independentes de k_y, a degenerescência de cada nível será dada pelo número de valores distintos tomados por k_y. Por outro lado k_y está relacionado com a origem do oscilador (em x)- através de $x_0 = (\hbar c/eB)k_y$- que não pode estar fora do sistema. Assim $(k_y)_{máx} = eB/\hbar c \times \ldots (x_0)_{máx}$, e $(k_y)_{min} = eB/\hbar c\ (x_0)_{min}$.
Dividindo agora o intervalo permitido a k_y pelo espaçamento entre dois k_y consecutivos, $(2\pi/L_2)$, obtém-se a degenerescência. (Veja também Wagner[14] e Kittel[15]).

$$\frac{(k_y)_{máx} - (k_y)_{min}}{2\pi/L_2} = \frac{eBL_1/\hbar c}{2\pi/L_2} = \frac{eBL_1L_2}{hc} = \frac{eBA}{hc} \quad ,$$

onde A é a área da amostra no plano perpendicular ao campo.

$$E_n=(n+\frac{1}{2})\hbar\omega_c+\frac{\hbar^2k_z^2}{2m}, \qquad \omega_c=\frac{B}{mc} \tag{I.3}$$

para uma partícula sob a ação de um campo magnético uniforme na direção z. Tendo em mãos a energia livre foi fácil encontrar a susceptibilidade orbital através de

$$\chi=\frac{M}{B}=-\frac{1}{B}\frac{\partial F}{\partial B} \tag{I.4}$$

que resultou negativa, pequena e independente da temperatura, em completa concordância com o que havia sido observado até então.

No mesmo ano entretanto, W.J.de Haas e P.M.van Alphen[10,11], trabalhando com bismuto a baixas temperaturas, detectaram um comportamento oscilatório da susceptibilidade em função do campo magnético. Peierls[12], foi o primeiro autor a fazer um modelo para entender esse estranho comportamento[††]. Mesmo assim

---

[††] Gás bidimensional a T=0 em campo magnético- começando com um campo muito intenso, todas as partículas ocuparão o nível mais baixo (veja figura). Diminuindo a intensidade do campo existirá um valor B_0 que é o menor capaz de suportar as N partículas no n=0. Esse campo é tirado da relação:

$$N=\frac{eB_0}{hc}A(2), \qquad \text{onde 2 é do spin.}$$

Diminuindo mais e mais o campo, vários valores serão atingidos tais que um outro nível começa a ser ocupado e isso acontece quando $B_n=B_0/(n+1)$, isto é quando $B=B_0/2$, o primeiro nível excitado também já estará completo. Para um campo intermediário $B_n\leq B\leq B_{n-1}$ o (n-1)-ésimo terá sido completado e o n-ésimo apenas parcialmente. A energia será dada pelo número de partículas vezes a energia do nível

$$\frac{2eBA}{hc}(\mu B)+\frac{2eBA}{hc}(3\mu B)+\ldots+\frac{2eBA}{hc}(2n-1)\mu B+(N-\frac{n2eBA}{hc}(2n+1)\mu B.$$

Mas
$$\frac{eBA2}{hc}=(\frac{eB_0A2}{hc})\frac{B}{B_0}=\frac{NB}{B_0}$$

Daí
$$E=\frac{NB}{B_0}\mu B\{1+3+\ldots+(2n-1)\}+(N-\frac{NB}{B_0}n)(2n+1)\mu B=\frac{NB}{B_0}\mu Bn^2+(N-\frac{NB}{B_0})\mu B(2n+1)=N\mu B\{2n+1-n(\frac{n+1}{B})B\}$$

e a magnetização vem pela derivada $M=-\partial E/\partial B$ (veja figuras I.5 e I.6).

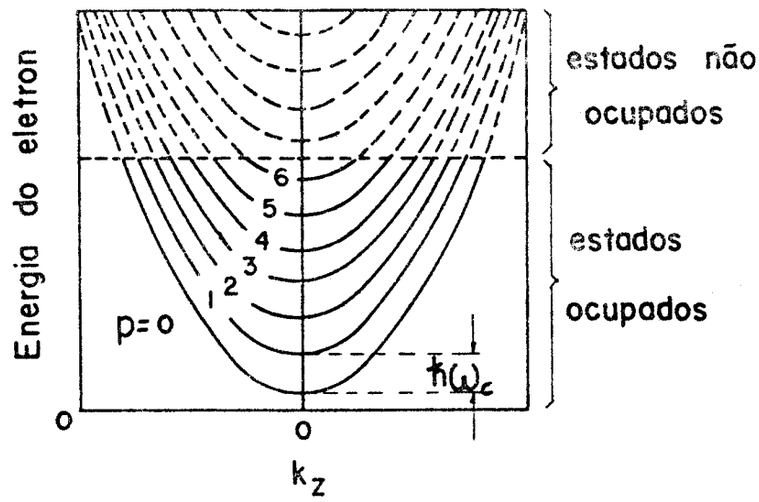

Figura I.3- Energia do elétron como função de k_z para os primeiros níveis de Landau (J.S.Blakemore, Solid State Physics , pag.226).

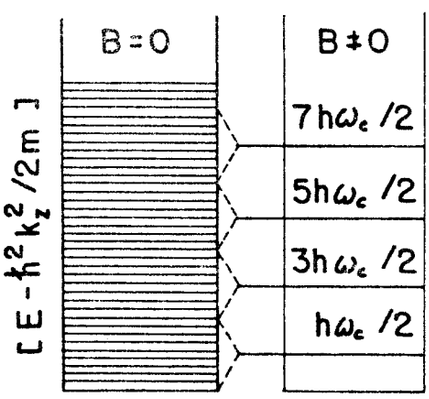

Figura I.4- Níveis de energia do elétron antes e depois da existência do campo magnético (J.S.Blakemore, Solid State Phys. pag.226).

foi Landau[13] quem deduziu a expressão completa para a susceptibilidade abrangendo inclusive a oscilação de Haas van Alphen (efeito dHvA).

Seguindo o trabalho de Peierls[16], Akhiezer tratou de uma só vez os efeitos magnéticos devido a spin e órbita. Mais tarde, Sondheimer e Wilson[17], continuando uma linha iniciada por Rumer[18,19], apresentaram um completo exame das propriedades magnéticas do gás de elétrons sem interação para campos e temperaturas quaisquer. Os fenômenos de baixa temperatura, por exemplo, são estudados com base na energia livre, que eles determinam essencialmente por uma transformada (inversa) de Laplace da função partição clássica, considerada de variável complexa. Esse procedimento torna claro a origem dos vários termos da susceptibilidade, e é matematicamente rigoroso. Mesmo assim essa publicação não esteve a salvo das críticas e pelo menos duas delas ainda hoje são discutidas. A primeira, apresentada por Dingle[20], diz respeito ao tamanho do sistema, que desde o início é tomado arbitrariamente grande de modo a tornar a susceptibilidade um efeito exclusivo de volume. É óbvio que procedendo dessa maneira, nenhuma análise é feita para verificar a partir de que dimensões se pode realmente desprezar as contribuições de superfície. O segundo ponto vulnerável reside no fato de ser o momento magnético calculado a partir de

$$\vec{M} = \frac{e}{2c} \int \vec{r} \times \vec{J}(\vec{r})\, d^3r \qquad (I.5)$$

igual a zero, contradizendo assim o resultado correto obtido pelo método imune[21] da função partição.

Para solucionar esse impasse, Felderhof e Raval resolveram uma situação modelo na qual não somente a função partição mas também a densidade de corrente local pode ser avaliada exatamente. Na realidade adicionaram um termo à hamiltoniana que simula um confinamento e que já havia sido proposta por Darwin[23], em 1930. A introdução do potencial harmônico cilindricamente simétrico, no plano perpendicular ao campo magnético, não oferece dificul

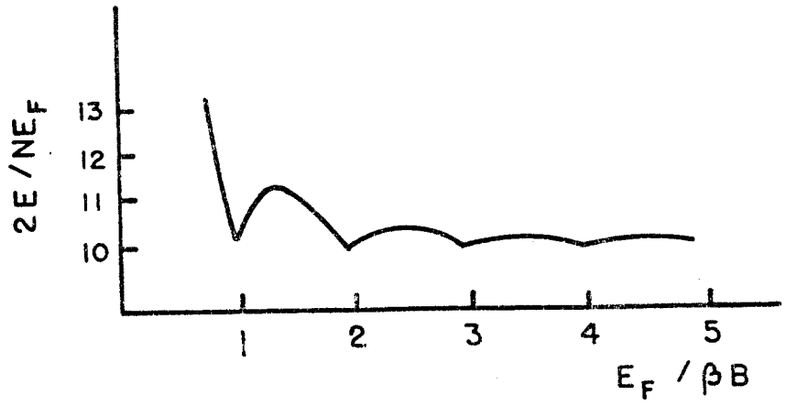

Figura I.5- Energia de um metal bidiomensional.

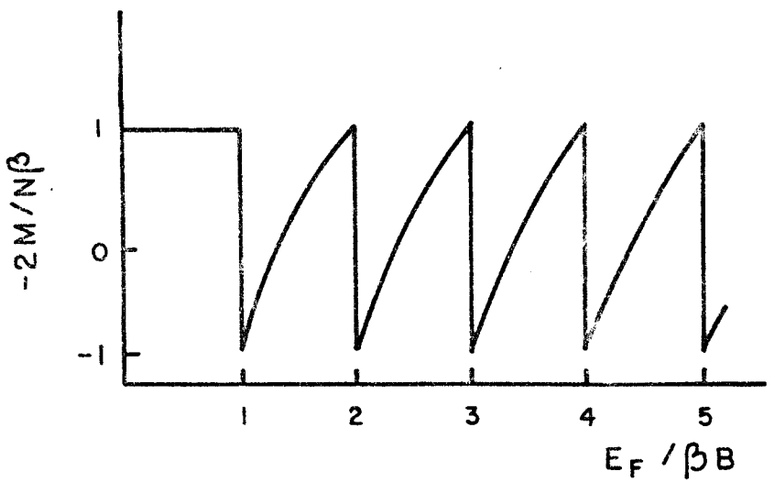

Figura I.6- Magnetização de um metal bidimensional (Progress in Low Temperatures Physics).

dades diferentes das encontradas por Wilson e Sondheimer[17], embora destrua a simetria de translação. A nova hamiltoniana é dada por

$$H = \frac{p^2}{2m} + \omega_L (xp_y - yp_x) + \frac{1}{2} m\omega_L^2 (x^2+y^2) + \frac{k}{2}(x^2+y^2) \qquad (I.6)$$

que substituída na equação de Bloch

$$HC = -\frac{\partial C}{\partial \beta} \qquad (I.7)$$

permite a determinação da matriz densidade (ou propagador). Em seguida eles calcularam a densidade de corrente (na estatística de Boltzmann) e concluiram que o gás roda uniformemente em torno do eixo paralelo ao campo. Além disso, tendo a densidade de corrente foi possível calcular o momento magnético por meio de (I.5), conduzindo a um resultado idêntico ao obtido pelo método da função partição.

Os citados autores não fizeram nenhum cálculo a baixas temperaturas, embora reconhecessem ter essa empresa importância fundamental para uma melhor descrição do diamagnetismo dos eletrons livres em metais. Esse foi o objetivo básico desse trabalho, e o método empregado foi desenvolvido por S.G.Rosa Jr. e W.T.Grandy Jr.[24]. A principal característica do método é reescrever a conhecida expressão para o potencial de Gibbs de um sistema de partículas (que nada mais é que o logaritmo da Grand-Função de Partição)

$$\ln Z_G = W = -\varepsilon \sum_n \ln\{1-\varepsilon\exp[\beta(\zeta-E_n)]\} = -\frac{F-N\zeta}{kT} \qquad (I.8)$$

usando uma representação integral (inversa de Mellin) para a função logaritmo[25]

$$\ln\{1-\varepsilon\exp[\beta(\zeta-E_n)]\} = \frac{\pi}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} \frac{(\cos\pi t)^{(1+\varepsilon)/2}}{(\operatorname{sen}\pi t)} t^{-1} e^{\beta\zeta t} \times$$

$$\times e^{-\beta t E_n} \, dt \qquad (I.9)$$

onde ζ é o potencial químico, e ε vale -1 para fermions e 1 para bosons. A expressão final após uma troca de ordem entre soma e integral, fica

$$W = -\frac{\varepsilon}{2\pi i}\int_{c-i\infty}^{c+i\infty} \frac{\pi(\cos\pi t)^{(1+\varepsilon)/2}\, e^{\beta\zeta t}}{t\,\mathrm{sen}\,\pi t}\left(\sum_n e^{-\beta t E_n}\right) dt \tag{I.10}$$

onde se obteve uma separação completa dos efeitos de dinâmica daqueles referentes à estatística obedecida pelas partículas. Os primeiros estão incorporados no termo

$$Z(\beta t) = \sum_n e^{-\beta t E_n} \tag{I.11}$$

que contêm todas as consequências de geometria finita, forma e dimensionalidade do sistema, além de levar em conta a presença de campos externos. Já os efeitos de estatística estão tomados em conta pelo termo $\varepsilon|\cos\pi t|^{(1+\varepsilon)/2}$. Para usar uma linguagem arrojada, poder-se-ia dizer que o termo acima, juntamente com $\{e^{\beta\zeta t}(t\,\mathrm{sen}\,\pi t)^{-1}\}$ aliados a operação integral no plano de Argand-Gauss são responsáveis por transformar as propriedades de uma partícula (contidas na função partição) em um potencial termodinâmico de muitas partículas. Dentro desse esquema Rosa e Grandy[24] conseguiram reproduzir não só os resultados da literatura para fermions, mas também aqueles encontrados por May[25] e Schafroth[26] para sistema de bosons.

O uso dessa estrutura permitiu identificar o resultado de Felderhof e Raval[22] para o momento magnético- a altas temperaturas- como sendo o primeiro termo de uma expansão na fugacidade obtida no Capítulo II.

No Capítulo III foram investigadas as mudanças introduzidas na susceptibilidade estacionária (de Landau) e oscilatória pelo potencial harmônico cilindricamente simétrico, estando o gás de elétrons a baixas temperaturas. Foram feitos os limites em que o potencial harmônico bidimensional se tornava arbitrariamente grande ou pequeno (forte ou fraco).

Os capítulos seguintes são dedicados ao cálculo das propriedades magnéticas do gás de elétrons sujeito a um potencial harmônico tridimensional. O comportamento a altas temperaturas- revelado no capítulo IV- se mostra semelhante, até certa ordem , ao do gás confinado pelo potencial bidimensional. Isso sugeriu o cálculo da matriz densidade e a seguir da corrente local e a conclusão é que o gás, nesse caso também, roda uniformemente em torno do eixo paralelo ao campo. No Capítulo V, são verificadas as influências desse potencial na susceptibilidade a baixas temperaturas. Outra vez são estudados os limites de potencial fraco e forte, comparado com a intensidade do campo magnético. Finalmente no Capítulo VI reunem-se algumas conclusões a respeito do que se fêz nesse trabalho e sugestões para outros, que deverão no futuro ser explorados.

CAPÍTULO II

SUSCEPTIBILIDADE DE UM GÁS DE ELÉTRONS CONFINADO

1. A função de partição

Considera-se um gás de elétrons livres de carga $-e$, massa m, confinado por um potencial harmônico bidimensional $V(r)=1/2k(x^2+y^2)$ e sob influência de um campo magnético uniforme $\vec{B}$ na direção z. Adotando-se o gauge simétrico (cilíndrico) para o potencial vetor $\vec{A}(\vec{r})=B/2(-y,x,o)$, a hamiltoniana clássica de um elétron livre se expressa por

$$H = \frac{p^2}{2m} + \omega_L(xp_y - yp_x) + \frac{1}{2} m\omega_L^2(x^2+y^2) + \frac{1}{2} k(x^2+y^2) \tag{II.1}$$

com a introdução da frequência de Larmor $\omega_L = eB/2mc$, e da frequência de Larmor modificada $\Omega_L = |\omega_L^2+\omega_o^2|^{1/2}$, onde $\omega_o^2 = k/m$, e mais a substituição do momento p pelo operador $-i\hbar\text{grad}$ obtém-se a hamiltoniana quântica de uma partícula

$$H = -\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m} - i\hbar\omega_L\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right) + \frac{1}{2} m\Omega_L^2(x^2+y^2) \tag{II.2}$$

Denotando-se por Ψ_n as auto-funções e por E_n as auto-energias de H, a equação de Schrödinger para os estados estacionários fica

$$H\Psi_n = E_n\Psi_n \tag{II.3}$$

e a função de partição de um único elétron pode então ser calculada através de

$$Z(\beta) = \sum_n e^{-\beta E_n} \tag{II.4}$$

Neste ponto deve-se notar que o cálculo direto da função partição consta de dois passos: primeiro a determinação dos níveis de energia e segundo a soma sobre esses níveis. Essa árdua tarefa nem sempre pode ser executada, e para superar esse obstáculo é costume usar a matriz densidade canônica, definida por

$$C(\vec{r}'\vec{r}\beta) = \sum_n \Psi_n^*(\vec{r}')e^{-\beta E_n}\,\Psi_n(\vec{r}) \qquad (II.5)$$

cuja integração (para $\vec{r}=\vec{r}'$) fornece a função partição

$$\int\sum_n \Psi_n^*(\vec{r})e^{-\beta E_n}\,\Psi_n(\vec{r})d^3r = \sum_n e^{-\beta E_n} = Z(\beta) \qquad (II.6)$$

Dessa forma o problema passou a ser a determinação da matriz densidade, que satisfaz a equação de Bloch

$$-HC(\vec{r}\vec{r}'\beta) = \frac{\partial}{\partial B}\,C(\vec{r}\vec{r}'\beta) \qquad (II.7)$$

A condição de contorno a ser satisfeita por $C(\vec{r}\vec{r}'\beta)$ é no limite de $\underline{k}$ e $\underline{B}$ nulos, reproduzir o conhecido propagador de uma partícula livre

$$C(\vec{r}\vec{r}'\beta) = \left(\frac{m}{2\pi\beta\hbar^2}\right)^{3/2} \exp\{-\frac{m}{2\beta\hbar^2}|\vec{r}-\vec{r}'|^2\} \qquad (II.8)$$

Seguindo o procedimento de Sondheimer e Wilson, propõe-se para

$$\{\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m} + i\hbar\omega_L(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}) - \frac{m\Omega_L^2}{2}(x^2+y^2)\}C(\vec{r}\vec{r}'\beta) =$$

$$= \frac{\partial}{\partial B}\,C(\vec{r}\vec{r}'\beta) \qquad (II.9)$$

a solução tentativa

$$C(\vec{r}\vec{r}'\beta)=f(\beta)\exp\{-ig(\beta)(x'y-y'x)+h(\beta)(xx'+yy') -$$

$$- \frac{k(\beta)}{2}(x^2+y^2+x'^2+y'^2) - \frac{m}{2\beta\hbar^2}(z-z')^2\} \qquad (II.10)$$

Para (II.10) satisfazer (II.9) é preciso que $f(\beta)$, $g(\beta)$, $h(\beta)$ e $k(\beta)$ obedeçam um sistema de equações diferenciais acoplados, cuja solução é o conjunto abaixo indicado, onde $E=h\omega_L$ e $\varepsilon=h\omega_L$

$$f(\beta)=\left(\frac{m}{2\pi\beta\hbar^2}\right)^{3/2}\frac{\beta E}{\operatorname{senh}\beta E}$$

$$g(\beta)=\frac{mE}{\hbar^2}\,\frac{\operatorname{senh}\beta\varepsilon}{\operatorname{senh}\beta E}$$

$$h(\beta)=\frac{mE}{\hbar^2}\,\frac{\cosh\beta\varepsilon}{\operatorname{senh}\beta E} \qquad \text{(II.11)}$$

$$k(\beta)=\frac{mE}{\hbar^2}\,\operatorname{cotgh}\beta E$$

Ao substituir essas funções para $\vec{r}=\vec{r}\,'$ em (II.10) e integrar em x,y e z obtém-se a função partição ignorando spin. O resultado é

$$Z(\beta)=\frac{L}{2\lambda}\,[\cosh\beta E-\cosh\beta E]^{-1} \qquad \text{(sem spin)} \qquad \text{(II.12)}$$

onde $\underline{L}$ é a dimensão do sistema na direção z, e $\underline{\lambda}$ é o comprimento de onda térmico dado por $(\hbar^2/2\pi mkT)^{1/2}$. Para levar em conta efeitos de spin basta multiplicar por $2\cosh[\beta\mu Bg/2]$*, e ficar com

$$Z(\beta)=\frac{L\cosh(\beta\mu Bg/2)}{2\lambda\,\operatorname{senh}\left[\frac{\beta(E+\varepsilon)}{2}\right]\operatorname{senh}\left[\frac{\beta(E-\varepsilon)}{2}\right]} \qquad \text{(com spin)} \qquad \text{(II.13)}$$

expressão na qual se utilizou a identidade trigonométrica

$$\cosh(\beta E)-\cosh(\beta\varepsilon)=2\operatorname{senh}\left[\frac{\beta(E+\varepsilon)}{2}\right]\operatorname{senh}\left[\frac{\beta(E-\varepsilon)}{2}\right] \qquad \text{(II.14)}$$

---

* Veja Apêndice-A.

Doravante, por simplicidade de notação adotaremos os parâmetros

$$\beta\mu Bg/2=a$$
$$\beta(E+\varepsilon)/2=\theta_+ \qquad \text{(II.15)}$$
$$\beta(E-\varepsilon)/2=\theta_-$$

que permitem escrever $Z(\beta)$ na sua forma final

$$Z(\beta) = \frac{L\ \cosh a}{2\lambda\ \operatorname{senh}\theta_+ \operatorname{senh}\theta_-} \qquad \text{(II.16)}$$

Uma alternativa interessante para calcular a função de partição é diagonalizar a hamiltoniana e somar sobre os nívies de energia determinados†.

2. O potencial de Gibbs e as propriedades magnéticas a temperaturas altas

Combinando as equações (I.10) e (II.16) a expressão para o potencial de Gibbs do gás confinado fica

$$W= -\frac{\varepsilon}{2\pi i}\int_{c-i\infty}^{c+i\infty} \frac{\pi(\cos\pi t)^{(1+\varepsilon)/2}\ e^{\beta\zeta t}\ Z(\beta t)\ dt}{t\ \operatorname{sen}(\pi t)} =$$

$$= \frac{1}{2\pi i}\int_{c-i\infty}^{c+i\infty} \frac{\pi e^{\beta\zeta t}\ L\ \cosh at\ dt}{t\ \operatorname{sen}(\pi t)\ 2\lambda t^{1/2}\ \operatorname{senh} t\theta_+ \operatorname{senh}\theta_-} \qquad \text{(II.17)}$$

onde já tomou-se $\varepsilon=-1$ (por se tratar de elétrons).

Para que se possa seguir adiante é preciso saber qual o regime de degenerescência do gás. Essa informação a respeito da densidade e da temperatura, que fisicamente está relacionada com o princípio de exclusão de Pauli, irá fornecer o argumento ne-

†Veja Apêndice-B.

cessário matematicamente para que se possa fechar o contorno c à esquerda ou à direita do eixo imaginário. O que será analisado a seguir é o caso em que o contorno é fechado à direita correspondendo ao intervalo em que o sistema está desde completamente clássico até moderadamente degenerado.

2.a) Estatística de Boltzmann

Se o número de ocupação não for suficientemente grande nem a temperatura tão baixa para exigir o uso do princípio de exclusão de Pauli, então a estatística de Boltzmann poderá ser usada e dessa maneira o momento magnético estará diretamente relacionado com a função de partição, conforme se indica a seguir

$$\text{i)} \quad Z_N(\beta) = Z_1^N(\beta)/N! \qquad \text{(II.18)}$$

(independência das partículas)

$$\text{ii)} \quad F = -kT\ell n Z_N(\beta) = -NkT\ell n\, Z_1'(\beta) \qquad \text{(II.19)}$$

$$\text{iii)} \quad m = -\left.\frac{\partial F}{\partial B}\right)_T = NkT\,\frac{\partial}{\partial B}\,\ell n Z_1(\beta) \qquad \text{(II.20)}$$

Esse cálculo usando o ensemble canônico foi feito recentemente por Felderhof e Raval[22] e resulta para o momento magnético total do sistema (sem considerar a contribuição paramagnética de spin)

$$m = -N\mu\left\{\frac{\gamma\,\mathrm{senh}\beta E - \mathrm{senh}\beta\varepsilon}{\cosh\beta E - \cosh\beta\varepsilon}\right\} \qquad \text{(II.21)}$$

onde $\mu = e\hbar/2mc$ é o magneton de Bohr, e $\gamma = \omega_L/\Omega_L$ razão das frequências.

Entretanto, uma resposta melhor e dentro de limites mais amplos pode ser conseguida com o uso do ensemble grand-canônico a partir do uso de (II.17). Supondo então que ω_L, Ω_L e ζ satis-

façam a relação abaixo*

$$\zeta \leq \hbar(\Omega_L - \omega_L) \qquad (II.22)$$

a integral no arco BCA vai a zero quando o raio se tornar arbitrariamente grande (veja figura II.1).

Com isso W será escrito em função dos resíduos calculados nos polos do integrando de (II.17) que ficam à direita do caminho C. Essas singularidades são provenientes do termo cosec(πt) e estão localizadas no eixo real nos pontos 1,2,3,4,...n.... Usando o teorema de Cauchy obtém-se para o potencial termodinâmico

$$W = -\frac{L}{2\lambda} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n e^{\beta\zeta n} \cosh(an)}{n^{3/2} \operatorname{senh}(n\theta_+)\operatorname{senh}(n\theta_-)} \qquad (II.23)$$

O cálculo do resíduo foi feito com o auxílio do teorema segundo o qual

$$\operatorname{Res}\left\{\frac{f(z)}{g(z)}\right\}_{z=z_0} = \frac{f(z_0)}{g(z_0)} \qquad (II.24)$$

válido apenas para polos simples. A expressão obtida para o potencial de Gibbs é então uma série na fugacidade $\Lambda = e^{\beta\zeta}$, e dependendo da pequenez de Λ poder-se-á interromper a série sem distanciar-se muito do resultado correto. Se o primeiro termo já for representativo ter-se-á

$$W \simeq \frac{L\, e^{\beta\zeta} \cosh a}{2\lambda \operatorname{senh}\theta_+ \operatorname{senh}\theta_-} \qquad (II.25)$$

e o momento magnético

$$m = \frac{1}{\beta}\frac{\partial}{\partial B} W \simeq \frac{L}{\lambda B}\frac{\partial}{\partial B}\left\{\frac{e^{\beta\zeta}\cosh(\beta\mu Bg/2)}{\cosh\beta E - \cosh\beta\varepsilon}\right\}$$

---

* Veja Apêndice-C.

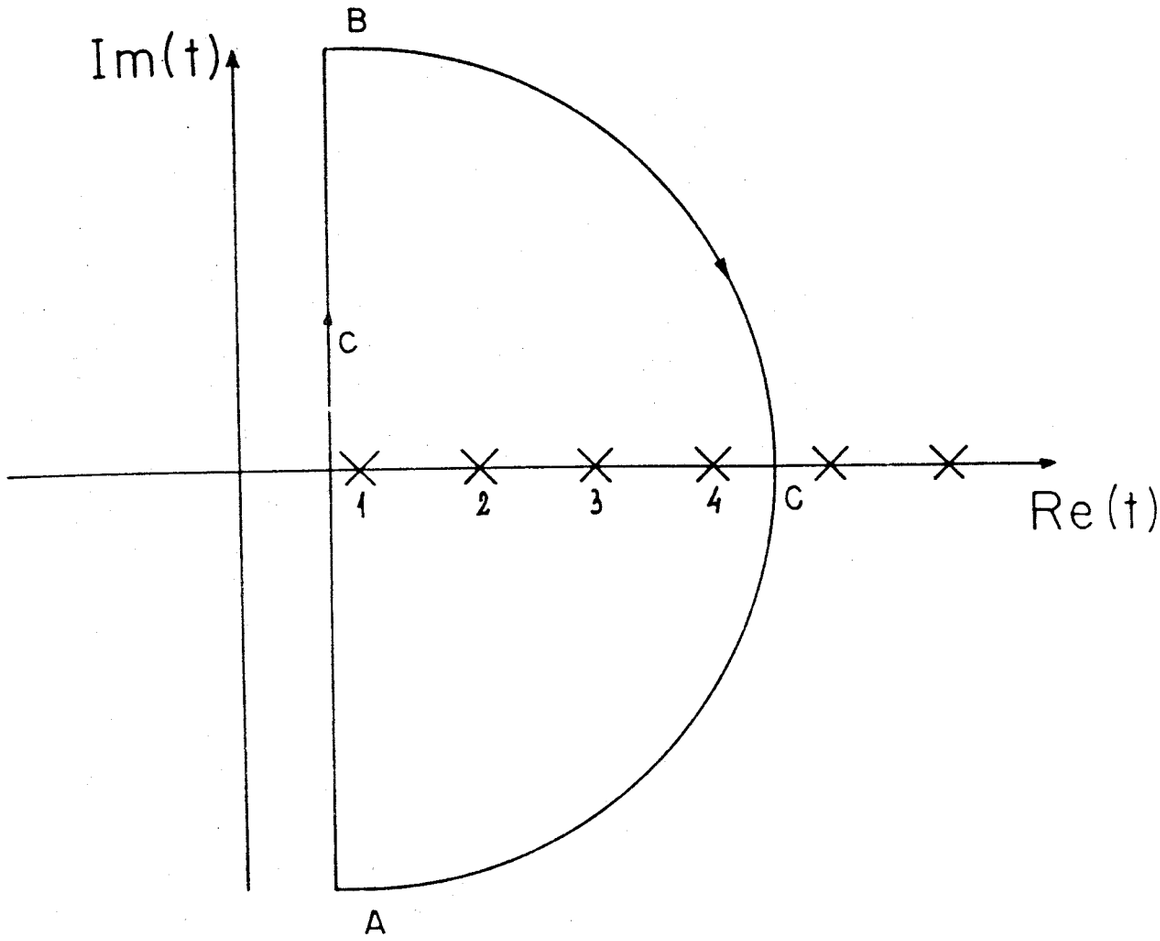

Figura II.1- O caminho de integração (II.23).

$$m \simeq \frac{L\, e^{\beta\zeta} \cosh(\beta\mu Bg/2)}{\lambda|\cosh\beta E - \cosh\beta\varepsilon|} \{ \frac{\mu g}{2} \operatorname{tgh}(\beta\mu Bg/2) -$$

$$- \frac{\gamma \operatorname{senh}\beta E - \operatorname{senh}\beta\varepsilon}{|\cosh\beta E - \cosh\beta\varepsilon|} \mu \} \qquad (II.26)$$

Eliminando a fugacidade por meio do número de partículas

$$N = \frac{1}{\beta} \frac{\partial W}{\partial \zeta} \simeq \frac{L\, e^{\beta\zeta} \cosh a}{\lambda|\cosh\beta E - \cosh\beta\varepsilon|} \qquad (II.27)$$

chega-se a

$$m \simeq N\mu\{\operatorname{tgh}(\beta\mu B) - \frac{\gamma \operatorname{senh}\beta E - \operatorname{senh}\beta\varepsilon}{|\cosh\beta E - \cosh\beta\varepsilon|}\} \quad . \qquad (II.28)$$

Na expressão acima já se fez g=2 (eletron) na contribuição do spin, e nota-se ainda a presença de uma contribuição diamagnética (orbital), idêntica aquela obtida por Felderhof e Raval usando ensemble canônico (veja eq.(II.21)). A fórmula (II.28) permite investigar vários limites de interesse que são relacionados abaixo

i) Campo magnético fraco ($\beta\mu B \ll 1$)

Nesse caso o momento magnético total é dado por

$$m \simeq N\mu^2\beta\{1 - \frac{\frac{\operatorname{senh}\beta\varepsilon_0}{\beta\varepsilon_0} - 1}{\cosh\beta\varepsilon_0 - 1}\} B \quad , \quad \text{onde } \varepsilon_0 = \hbar\omega_0 \qquad (II.29)$$

Se além disso o potencial confinante for fraco ($\omega_0 \to 0$) a resposta que se obtém é escrita como

$$m \simeq N\mu^2\beta\{1 - \frac{1}{3}\}B = \frac{2}{3} N\mu^2\beta B \qquad (II.30)$$

ii) Confinamento fraco ($\omega_0 \to 0$)

Dentro dessa aproximação o momento magnético total

é dado por

$$m \simeq N\mu\{\tanh(\beta\mu B) - [\mathrm{cotgh}(\beta\mu B) - \frac{1}{\beta\mu B}]\} \qquad (II.31)$$

expressão na qual se destaca a presença da função de Langevin representando a parte diamagnética. Se agora fizer-se o limite de campo magnético fraco ($\beta\mu B << 1$) uma vez mais se obtém

$$m \simeq \frac{2}{3} N\mu^2 \beta B \qquad (II.32)$$

idêntica à resposta de um gas livre em presença de campo magnético fraco.

2.b) <u>O limite em que o potencial de confinamento desaparece</u>

Esse limite é de particular interesse desde que ele conduz a um problema sobre o qual muito se sabe, embora ainda não seja uma questão completamente resolvida. Nessa secção o que se pretende é tomar, desde a função de partição, ω_0 indo a zero e no final comparar os resultados com aqueles obtidos no item anterior. Assim

$$Z(\beta) \underset{\omega_0 \to 0}{\simeq} (\frac{L}{2\lambda}) \frac{\cosh(\beta\mu B)\ 4\beta\mu B}{\mathrm{senh}(\beta\mu B)\ (\beta\hbar\omega_0)^2} \qquad (II.33)$$

colocada na expressão (I.10) para o potencial de Gibbs fornece em primeira aproximação

$$W \underset{\omega_0 \to 0}{\simeq} (\frac{L}{2\lambda}) \frac{e^{\beta\zeta} \cosh(\beta\mu B) 4\beta\mu B}{\mathrm{senh}(\beta\mu B)(\beta\hbar\omega_0)^2} \qquad (II.34)$$

Derivando em relação ao campo e depois em relação ao potencial químico obtém-se para o momento magnético total

$$m \simeq N\mu\{\tanh(\beta\mu B) - [\mathrm{cotgh}(\beta\mu B) - \frac{1}{\mu\beta B}]\} \ . \qquad (II.35)$$

que coincide com a expressão (II.31) onde a aproximação foi feita após a obtenção do momento magnético.

Essa coerência de resultados pode ser considerada como um teste para a aproximação utilizada em (II.33) na função de partição. Doravante essa função de partição será útil para o entendimento de várias modificações introduzidas pelo confinamento que não se comportam tão bem como o momento magnético a temperaturas altas.

CAPÍTULO III

EFEITOS DO CONFINAMENTO BIDIMENSIONAL NAS PROPRIEDADES MAGNÉTICAS DO GAS DEGENERADO

Quando a temperatura for suficientemente baixa e ou a densidade tão alta que o princípio de exclusão de Pauli não possa mais ser desconsiderado, a condição (II.22)- indispensável para que a integral no arco BCA à direita do eixo real fosse a zero- não mais se verificará (veja figura (II.1)). Portanto não se pode usar os resultados do capítulo anterior.

Para isso recorre-se novamente à expressão integral (II.17) para o potencial de Gibbs e desta vez fecha-se o contorno à esquerda e procura-se obviamente determinar a relação entre ζ (potencial químico), B (campo magnético) e ω_0 (frequência característica do potencial de confinamento) para que a integral nos arcos BD e CA se anulem* (veja figura III.1(a)).

A análise do integrando permite encontrar os polos e um ponto de ramificação, que são relacionados abaixo:

$$\cdot \text{ polos simples} \begin{cases} \text{i)} \quad t = \dfrac{in\pi}{\theta_+} \\ \text{ii)} \quad t = \dfrac{in\pi}{\theta_-} \end{cases} , \quad \text{com } n=\ldots-2,-1,0,1,2,\ldots \qquad \text{(III.1)}$$

ponto de ramificação: t=0 (corte: eixo real negativo).

Não foram relacionados acima os polos à direita do eixo imaginário devido a sua localização (fora do contorno).

Sendo nula a integral nos arcos BD e CA, o caminho c pode ser substituido pelo caminho σ e pelos contornos envolvendo os polos no eixo imaginário[27], conforme indica a figura III.1(b).

Desde o trabalho de Sondheimer e Wilson[17] entretanto, sabe-se que a integral no caminho σ está relacionada com a susceptibilidade estacionária e os resíduos é que determinarão existên

---

* A condição é $\zeta > \hbar(\omega_L - \Omega_L)$ |Veja Apêndice-C|.

cia do efeito oscilatório (dHνA).

Sendo assim, os tratamentos para um e outro caso , serão dados separadamente.

1. Susceptibilidade estacionária

Essa parte da resposta do gas de eletrons virá de

$$W_{est} \simeq \frac{1}{2\pi i} \int_{\sigma} \left(\frac{L\pi}{2\lambda}\right) \frac{e^{\beta\zeta t} \cosh(at)\, dt}{t^{3/2} \operatorname{sen}\pi t \operatorname{senh} t\theta_{+} \operatorname{senh} t\theta_{-}} \qquad \text{(III.2)}$$

A expressão acima pode ser calculada expandindo-se o integrando nas proximidades de t=0, e usando a representação integral de Hankel

$$\frac{1}{2\pi i} \int_{\sigma} \frac{e^{t} dt}{t^{Z}} = \frac{1}{\Gamma(Z)} \qquad \text{(III.3)}$$

O resultado dessa expansão é

$$W_{est} \simeq \frac{1}{2\pi i} \left(\frac{L}{2\lambda}\right) \frac{1}{\beta^2(E^2-\varepsilon^2)} \{4(\beta\zeta)^{7/2} \int \frac{e^{t}dt}{t^{9/2}} +$$

$$+ a^2(\beta\zeta)^{3/2} \int \frac{e^{t}dt}{t^{5/2}} + \frac{2\pi^2}{3} (\beta\zeta)^{3/2} \int \frac{e^{t}dt}{t^{5/2}} +$$

$$+ \frac{-\beta^2(E^2+\varepsilon^2)}{3} (\beta\zeta)^{3/2} \int \frac{e^{t}dt}{t^{5/2}} + \frac{2\pi^2}{3} (\beta\zeta)^{-1/2} \int \frac{e^{t}dt}{t^{1/2}} +$$

$$+ \frac{-(\beta\zeta)^{-1/2}}{180} \beta^2(E^2+\varepsilon^2)[\pi^2+30a^2] \int \frac{e^{t}dt}{t^{1/2}} + \frac{7}{720} [\pi^2 +$$

$$+ \beta^4(E^4+4E^2\varepsilon^2+\varepsilon^4)](\beta\zeta)^{-1/2} \int \frac{e^{t}dt}{t^{1/2}} \} \qquad \text{(III.4)}$$

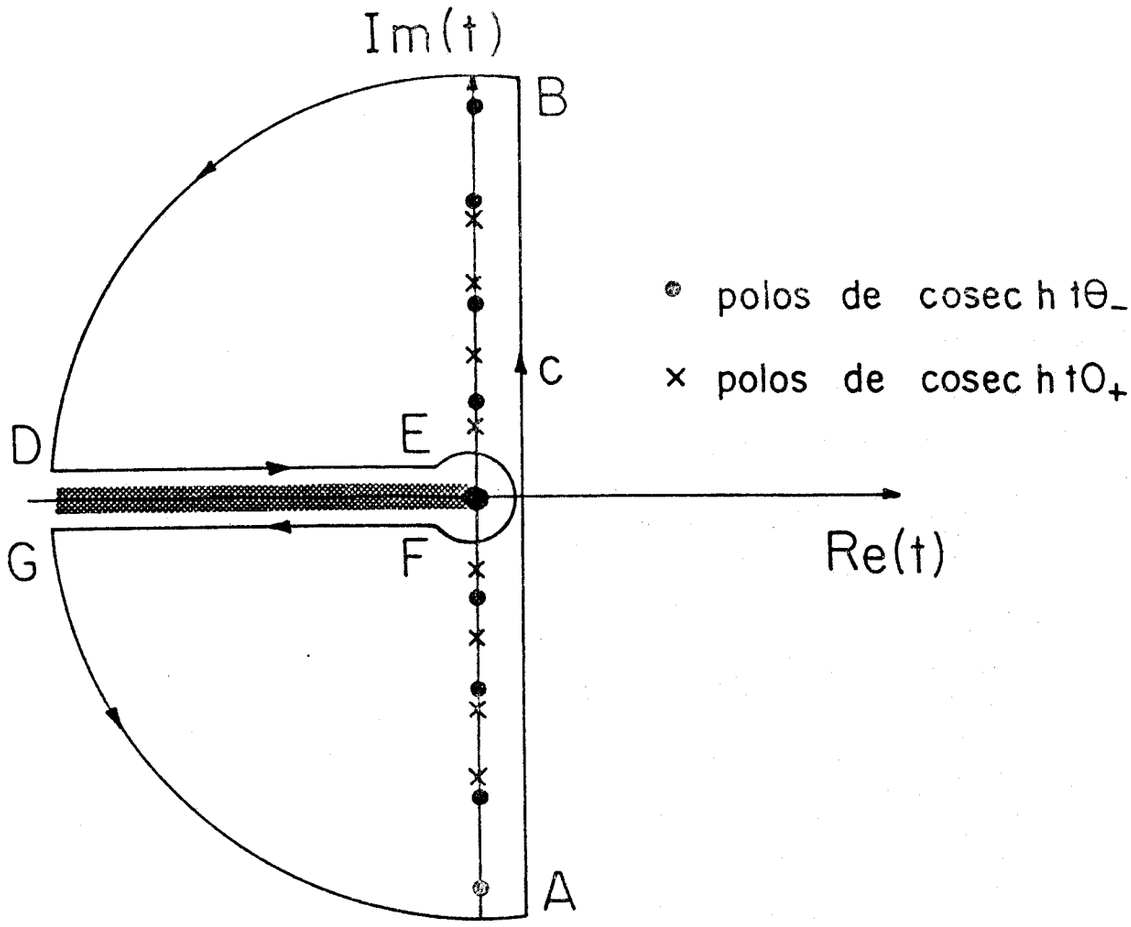

Figura III.1(a)

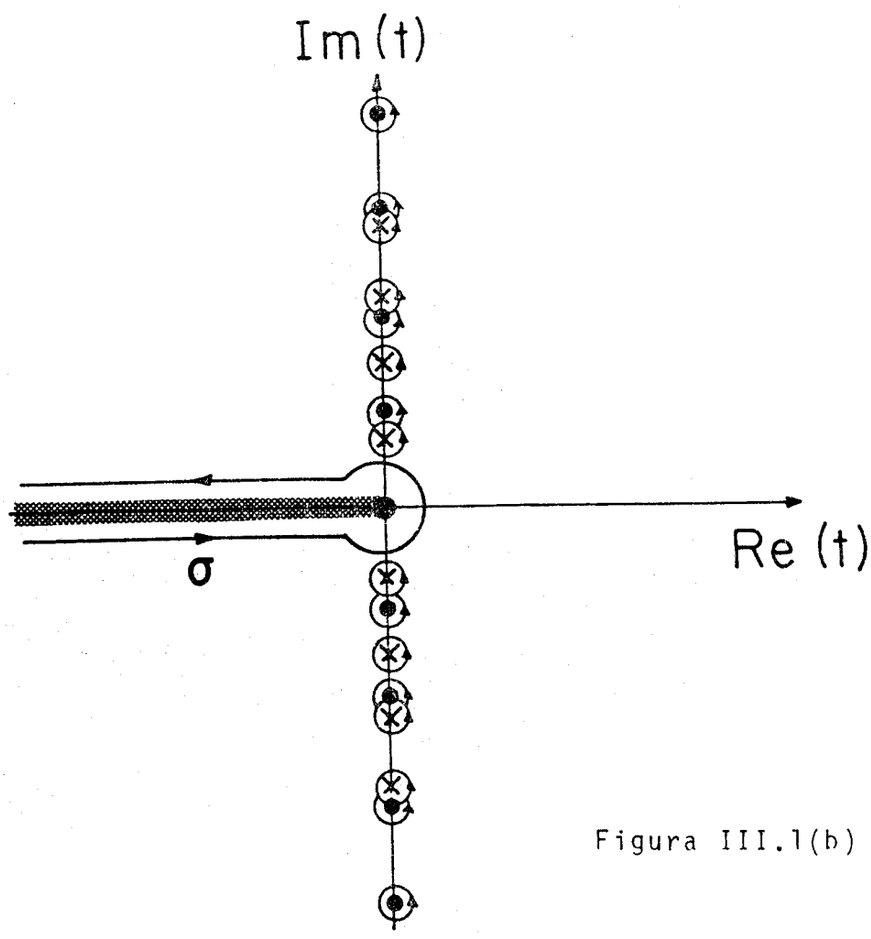

Figura III.1(b)

que após o reconhecimento das integrais e o uso da tabela (28)

$$\Gamma(1/2)=\sqrt{\pi};\quad \Gamma(3/2)=\frac{\sqrt{\pi}}{2};\quad \Gamma(3/2)=\frac{3\sqrt{\pi}}{4}\ ;\quad \Gamma(9/2)=\frac{105\sqrt{\pi}}{16}$$

assume a forma

$$W_{est}\simeq\frac{(L/2\lambda)}{(\beta\hbar\omega_0)^2}\left\{\frac{64}{105\sqrt{\pi}}(\beta\zeta)^{7/2}+\left[-\frac{4\beta^2(E^2+\varepsilon^2)}{9\sqrt{\pi}}+\right.\right.$$

$$\left.+\frac{8a^2}{3\sqrt{\pi}}\right](\beta\zeta)^{3/2}+\frac{8\pi^2}{9}(\beta\zeta)^{3/2}+\frac{67\pi^{3/2}}{90}(\beta\zeta)^{-1/2}-$$

$$-\frac{a^2\beta^2}{6\sqrt{\pi}}(E^2+\varepsilon^2)(\beta\zeta)^{-1/2}-\frac{\pi^{3/2}\beta^2}{180}(E^2+\varepsilon^2)(\beta\zeta)^{-1/2}+$$

$$\left.+\frac{7\beta^4}{720\sqrt{\pi}}(E^4+4E^2\varepsilon^2+\varepsilon^4)(\beta\zeta)^{-1/2}\right\}\qquad\text{(III.5)}$$

Neste ponto torna-se imprescindível voltar as variáveis originais $\underline{B}$ e ω_0, através das relações $E=h|\omega_L^2+\omega_0^2|^{1/2}$, $\varepsilon=h\omega_L$, $\omega_L=eB/2mc$ e $a=\beta\mu Bg/2$. Assim com

$$\beta^2(E^2+\varepsilon^2)=2\beta^2\hbar^2\omega_L^2+\beta^2\hbar^2\omega_0^2=2\beta^2\mu^2B^2+(\beta\hbar\omega_0)^2\qquad\text{(III.6)}$$

$$\beta^2(E^2-\varepsilon^2)=\beta^2\hbar^2[\omega_L^2+\omega_0^2-\omega_L^2]=(\beta\hbar\omega_0)^2\qquad\text{(III.7)}$$

$$\beta^4[E^4+4E^2\varepsilon^2+\varepsilon^4]=\beta^4\hbar^4[2\omega_L^4+6\omega_L^2\omega_0^2+5\omega_0^4]=\beta^4[2\mu^4B^4+$$

$$+\ 6\mu^2B^2(\hbar\omega_0)^2+5(\hbar\omega_0)^4]\qquad\text{(III.8)}$$

o potencial fica explicitamente em termos do campo $\underline{B}$.

$$W_{est} \simeq \frac{(L/2\lambda)}{(\beta\hbar\omega_0)^2} \{\frac{64}{105\sqrt{\pi}} (\beta\zeta)^{7/2} + [\frac{2\beta^2\mu^2B^2g^2}{3\sqrt{\pi}} -$$

$$- \frac{8\beta^2\mu^2B^2}{9\sqrt{\pi}}] (\beta\zeta)^{3/2} + \ldots \} \qquad (III.9)$$

Note que os termos estão sendo abandonados devido ao fato de $(\beta\zeta)$ ser muito grande, e $\underline{B}$ serve para detectar a contribuição de spin. A seguir o momento magnético vem dado por

$$m_{est} = \frac{1}{\beta} \frac{\partial W_{est}}{\partial B} \simeq (\frac{L}{\lambda}) \frac{8}{3\sqrt{\pi}} \{1 - \frac{1}{3}\} \frac{\mu^2 B}{\zeta} (\beta\zeta)^{5/2} \qquad (III.10)$$

e depois de eliminar ζ por meio de

$$N = \frac{1}{\beta} \frac{\partial W}{\partial \zeta} \simeq \frac{1}{\beta} \frac{\partial W_{est}}{\partial \zeta} = (\frac{L}{2\lambda}) \frac{7(64)(\beta\zeta)^{5/2}}{2\ 105\sqrt{\pi}(\beta\hbar\omega_0)^2} =$$

$$= \frac{112}{105} (\frac{L}{\lambda}) \frac{(\beta\zeta)^{5/2}}{\sqrt{\pi}(\beta\hbar\omega_0)^2} \qquad (III.11)$$

fica

$$m_{est} \simeq \frac{105}{112} (\frac{8}{3}) \frac{N\mu^2 B}{\zeta} (1 - \frac{1}{3}) = \frac{35 N\mu^2 B}{14\ \zeta} (1 - \frac{1}{3}) \qquad (III.12)$$

ou ainda

$$\chi_{est} \simeq \frac{35\ N\mu^2}{14\ \zeta} (1 - \frac{1}{3}) \qquad (III.13)$$

Antes de passar a examinar a susceptibilidade oscilatória, alguns pontos precisam ficar esclarecidos no procedimento acima.

i) para encontrar o número de partículas em (III.11) é necessário supor que os termos oscilatórios dêem uma contribuição desprezível, o que é verdade se a situação considerada obedecer $\mu B/\zeta << 1$.

ii) também se supôs que o potencial químico é pouco afetado pelo campo magnético (Wilson também supõe esse fato).

iii) o resultado indica que em primeira aproximação a modificação introduzida pelo potencial harmônico não depende de k (ou ω_0). Entretanto não se pode fazer $\omega_0=0$ pois nesse caso a expressão (III.11) não está bem definida.

Finalmente a análise de (III.12) revela que tanto a susceptibilidade paramagnética (efeito de spin) como a diamagnética (efeito de órbita) tiveram seu módulo modificado na presença do confinamento[17], mas a relação entre eles continua sendo de 3 para 1. Esse fato embora curioso não é estranho aos iniciados no assunto, que sabem ser a relação (3 para 1) mantida em vários outros casos discutidos na literatura (veja por exemplo Hebborn e March[29].

O próximo passo é verificar o comportamento oscilatório do momento magnético. Conforme (III.1) no eixo imaginário existem duas carreiras de polos simples: a de $\operatorname{cosech} t\theta_+$ e a de $\operatorname{cosh} ect\theta_-$. Porém dependendo da relação entre ω_L e ω_0 esses polos poderão eventualmente coincidir dando origem a polos de segunda ordem que exigirão um novo tratamento. Na próxima secção se analisará a primeira situação e a seguir a coincidência de polos será tomada em conta.

2) <u>Polos simples</u>

A integral nos contornos envolvendo os polos é igual a $2\pi i$ vezes o resíduo correspondente, e a ordem dos polos faculta o uso da relação (II.24). O resíduo em $t=in\pi/\theta_+$ pode ser somado com o resíduo em $t=-in\pi/\theta_+$, conforme se indica abaixo:

$$\left[\text{Res em } t=\frac{in\pi}{\theta_+}\right] = \left(\frac{L\pi}{2\lambda}\right) \frac{e^{i\beta\zeta n\pi/\theta_+} \cos(an\pi/\theta_+)(-1)^n}{\operatorname{senh}\left(\frac{n\pi^2}{\theta_+}\right)\left(\frac{in\pi}{\theta_+}\right)^{3/2} i\operatorname{sen}\left(\frac{n\pi\theta_-}{\theta_+}\right)\theta_+} \tag{III.14}$$

$$\left[\text{Res em } t=\frac{-in\pi}{\theta_+}\right]=\left(\frac{L\pi}{2\lambda}\right)\frac{e^{-i\beta\zeta n\pi/\theta_+}\cos(an\pi/\theta_+)(-1)^n}{\operatorname{senh}(-n\pi^2/\theta_+)(-\frac{in\pi}{\theta_+})^{3/2}i\operatorname{sen}(-\frac{n\pi\theta_-}{\theta_+})\theta_+} \tag{III.15}$$

$$\text{SOMA}=\left(\frac{L\pi}{\lambda}\right)\frac{(-1)^n\theta_+^{1/2}\cos(n\pi a/\theta_+)\cos\left[\frac{\beta\zeta n\pi}{\theta_+}+\frac{\pi}{4}\right]}{(n\pi)^{3/2}\operatorname{senh}(n\pi^2/\theta_+)\operatorname{sen}(n\pi\theta_-/\theta_+)} \tag{III.16}$$

Analogamente para os polos de cosechtθ_- ter-se-á.

$$\left\{\begin{array}{c}\text{Res em } t=in\pi/\theta_- \\ + \\ \text{Res em } t=-in\pi/\theta_-\end{array}\right\}=\left(\frac{L\pi}{\lambda}\right)\frac{(-1)^n\theta_-^{1/2}\cos(n\pi a/\theta_-)\cos\left[\frac{\beta\zeta n\pi}{\theta_-}+\frac{\pi}{4}\right]}{\operatorname{senh}(n\pi^2/\theta_-)(n\pi)^{3/2}\operatorname{sen}[n\pi\theta_+/\theta_-]} \tag{III.17}$$

Reunindo todas as contribuições obtém-se para a parte oscilatória do potencial de Gibbs

$$W_{osc}=\left(\frac{L\pi}{2\lambda}\right)\left\{\sum_{n=1}^{\infty}\frac{(-1)^n\theta_+^{1/2}\cos[\beta\mu Bgn\pi/2\theta_+]\cos\left[\frac{\beta\zeta n\pi}{\theta_+}+\frac{\pi}{4}\right]}{(n\pi)^{3/2}\operatorname{senh}[n\pi^2/\theta_+]\operatorname{sen}[n\pi\theta_-/\theta_+]}+\right.$$

$$\left.+\sum_{n=1}^{\infty}\frac{(-1)^n\theta_-^{1/2}\cos[\beta\mu Bgn\pi/2\theta_-]\cos\left[\frac{\beta\zeta n\pi}{\theta_-}+\frac{\pi}{4}\right]}{(n\pi)^{3/2}\operatorname{senh}[n\pi^2/\theta_-]\ \operatorname{sen}[n\pi\theta_+/\theta_+]}\right\} \tag{III.18}$$

Essa expressão permite que sejam feitos limites de potencial fraco e forte em relação ao campo magnético, mas o caso de $k\to 0$ precisa ser considerado com cuidado (Veja apêndice-D).

2.a) <u>Potencial fraco em relação ao campo magnético</u>

$$\frac{\omega_0}{\omega_L}<<1 \quad \text{e} \quad \beta\hbar\omega_0\simeq 1$$

Nesse limite as funções θ_+ e θ_- podem ser expandi - das

$$\theta_+ = \frac{\beta\hbar}{2}(\Omega_L+\omega_L) \simeq \frac{\beta\hbar\omega_L}{2}\left\{\left(1+\frac{\omega_o^2}{\omega_L^2}\right)^{1/2}+1\right\} \simeq \beta\hbar\omega_L\left\{1+\left(\frac{\omega_o}{2\omega_L}\right)^2\right\}. \tag{III.19}$$

$$\theta_- = \frac{\beta\hbar}{2}(\Omega_L-\omega_L) \simeq \beta\hbar\omega_L\left(\frac{\omega_o}{2\omega_L}\right)^2 \tag{III.20}$$

$$\frac{\theta_+}{\theta_-} = \frac{\Omega_L+\omega_L}{\Omega_L-\omega_L} \simeq \frac{2+\omega_o^2/2\omega_L^2}{\omega_o^2/2\omega_L^2} = 1 + \left(\frac{2\omega_L}{\omega_o}\right)^2 \tag{III.21}$$

$$\frac{\theta_-}{\theta_+} = \frac{\Omega_L-\omega_L}{\Omega_L+\omega_L} \simeq \frac{\omega_o^2/2\omega_L^2}{2+\omega_o^2/2\omega_L^2} = \frac{1}{1+(2\omega_L/\omega_o)^2} \simeq \left(\frac{\omega_o}{2\omega_L}\right)^2 \left[1 - \left(\frac{\omega_o}{2\omega_L}\right)^2\right] \tag{III.22}$$

Substituindo em (III.18) tem-se

$$W_{osc} \simeq \frac{L\pi}{\lambda}\left\{\sum_{n=1}^{\infty}\frac{(-1)^n\cos\left[\frac{\beta\mu Bgn\pi}{2\beta\hbar\omega_L}\left(1-\frac{\omega_o^2}{4\omega_L^2}\right)\right]\cos\left[\frac{\beta\zeta n\pi}{\beta\hbar\omega_L}\left(1-\frac{\omega_o^2}{4\omega_L^2}\right)+\frac{\pi}{4}\right]}{(n\pi)^{3/2}\,\mathrm{senh}\left[\frac{n\pi^2}{\beta\hbar\omega_L}\left(1-\frac{\omega_o^2}{4\omega_L^2}\right)\right]\mathrm{sen}\left[n\pi\left(\frac{\omega_o^2}{4\omega_L^2}\right)\right]} + \right.$$

$$\left.\sum_{n=1}^{\infty}\frac{(-1)^n(\beta\hbar\omega_L)^{1/2}\cos\left[\frac{\beta\mu Bgn\pi}{2\beta\hbar\omega_L}\left(\frac{4\omega_L^2}{\omega_o^2}\right)\right]\cos\left[\frac{\beta\zeta n\pi}{\beta\hbar\omega_L}\left(\frac{4\omega_L^2}{\omega_o^2}\right)+\frac{\pi}{4}\right]}{(n\pi)^{3/2}\,\mathrm{senh}\left[\frac{n\pi^2}{\beta\hbar\omega_L}\left(\frac{4\omega_L^2}{\omega_o^2}\right)\right]\mathrm{sen}\; n\pi\left[1+\frac{4\omega_L^2}{\omega_o^2}\right]}\right\} \tag{III.23}$$

A essa altura é preciso fazer a hipótese de que os primeiros termos sejam representativos, o que é razoável em face da presença do seno hiperbólico no denominador. Além disso, antes de calcular o momento magnético é preciso fazer um exame cuidadoso dos períodos das funções oscilatórias- que são muitas- presentes em (III.23), considerando a contribuição da função que varia mais rápido apenas. A razão para isso é que se assim não for feito, fatalmente cair-se-á num emaranhado matemático do qual dificilmente se extrairá algum resultado compreensível. Neste caso as funções "rápidas" são aquelas que tem o $\zeta/\hbar\omega_L$ que é muito maior que a unidade.

Finalmente é importante notar que a primeira série guarda as características do efeito dHvA no caso livre (k=0), inclusive a periodicidade em 1/B (inverso do campo), enquanto que a segunda tem definitivamente um comportamento novo, que se traduz principalmente pela periodicidade em B (no próprio campo).

Após essas considerações, pode-se calcular o momento magnético por derivar W_{osc} com relação ao campo e dividir por β . Assim

$$m_{osc} = \frac{1}{\beta}\frac{\partial}{\partial B} W_{osc} \qquad \text{(III.24)}$$

que fornece para o momento no limite de potencial fraco (p.f)

$$m_{osc}^{p.f.} \simeq \left(\frac{\pi L}{\lambda}\mu\right)\left\{\sum_{n=1}^{\infty} \frac{(\zeta/\hbar\omega_L)(\beta\hbar\omega_L)^{-1/2}\operatorname{cotg}\left[n\pi\frac{\omega_0^2}{4\omega_L^2}\right]}{(n\pi)^{1/2}\operatorname{senh}\left[\frac{n\pi^2}{\beta\hbar\omega_L}\right]} \operatorname{sen}\left[\frac{n\pi\zeta}{\hbar\omega_L}+\frac{\pi}{4}\right]+\right.$$

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^{n+1}2(\zeta/h\omega_0)(\beta\hbar\omega_L)^{-1/2}\operatorname{cotg}\left[n\pi\left(\frac{4\omega_L^2}{\omega_0^2}\right)\right]}{(n\pi)^{1/2}\operatorname{senh}\left[\frac{n\pi^2 4\beta\hbar\omega_L}{(\beta\hbar\omega_0)^2}\right]} \times$$

$$\left.\operatorname{sen}\left[\frac{n\pi\zeta}{\hbar\omega_0}\left(\frac{\omega_L}{\omega_0}\right)+\frac{\pi}{4}\right]\right\} \qquad \text{(III.25)}$$

É importante observar ainda que a primeira série tem o mesmo período do momento oscilatório no caso livre ($\omega_0=0$), calculado por Sondheimer e Wilson[17].

2.b) <u>Potencial forte comparado com o campo magnético</u>

$$\frac{\omega_L}{\omega_0} << 1 \quad e \quad \beta\hbar\omega_L \simeq 1$$

As funções θ_+ e θ_- são agora calculadas nessa aproximação e logo após substituídas no potencial de Gibbs.

$$\theta_+ = \frac{\beta\hbar}{2}\{[\omega_L^2+\omega_0^2]^{1/2}+\omega_L\} \simeq \frac{\beta\hbar\omega_0}{2}\{1+\frac{\omega_L}{\omega_0}+\frac{\omega_L^2}{2\omega_0^2}+\ldots\} \simeq$$

$$\simeq \frac{\beta\hbar\omega_0}{2}\{1+y+\frac{y^2}{2}+\ldots\} \qquad \text{(III.26)}$$

$$\theta_- = \frac{\beta\hbar}{2}\{[\omega_L^2+\omega_0^2]^{1/2}-\omega_L\} \simeq \frac{\beta\hbar\omega_0}{2}\{1-\frac{\omega_L}{\omega_0}+\frac{\omega_L^2}{2\omega_0^2}+\ldots\} \simeq$$

$$\simeq \frac{\beta\hbar\omega_0}{2}\{1-y+\frac{y^2}{2}+\ldots\} \qquad \text{(III.27)}$$

$$\frac{1}{\theta_+} \simeq \frac{}{\frac{\beta\hbar\omega_0}{2}\{1+y+\frac{y^2}{2}+\ldots\}} \simeq \frac{2}{\beta\hbar\omega_0}\{1-y-\frac{y^2}{2}+\frac{y^2}{2}+\ldots\} \simeq$$

$$\simeq \frac{2}{\beta\hbar\omega_0}\{1-y+\frac{y^2}{2}\} \qquad \text{(III.28)}$$

$$\frac{1}{\theta_-} \simeq \frac{1}{\frac{\beta\hbar\omega_0}{2}\{1-y+\frac{y^2}{2}+\ldots\}} \simeq \frac{2}{\beta\hbar\omega_0}\{1+y+\frac{y^2}{2}-\frac{y^2}{2}+\ldots\} \simeq$$

$$\simeq 2/\beta\hbar\omega_0\{1+y+y^2/2+\ldots\} \qquad \text{(III.29)}$$

$$\theta_+/\theta_- \simeq 1+2y+2y^2 \qquad \text{(III.30)}$$

$$\theta_-/\theta_+ \simeq 1-2y+2y^2 \quad , \quad \text{onde } y=\omega_L/\omega_o \text{ e } y<<1 \qquad \text{(III.31)}$$

Potencial de Gibbs para o caso de polos simples e confinamento forte

$$W \simeq \left(\frac{L\pi}{\lambda}\right)\left\{ \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n(\beta\hbar\omega_o/2)^{1/2}\cos\left[\frac{\mu B n\pi 2}{\hbar\omega_o}(1-y)\right]\cos\left[\frac{n\pi\zeta 2}{\hbar\omega_o}(1-y)+\frac{\pi}{4}\right]}{(n\pi)^{3/2}\,\mathrm{senh}\left[\frac{2n\pi^2}{\beta\hbar\omega_o}(1-y)\right]\mathrm{sen}\left[n\pi(1-2y+2y^2)\right]} + \right.$$

$$\left. \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n(\beta\hbar\omega_o)^{1/2}\cos\left[\frac{\mu B n\pi 2}{\hbar\omega_o}(1+y)\right]\cos\left[\frac{n\pi\zeta 2}{\hbar\omega_o}(1+y)+\frac{\pi}{4}\right]}{(n\pi)^{3/2}\,\mathrm{senh}\left[\frac{2n\pi^2}{\hbar\omega_o}(1+y)\right]\mathrm{sen}\left[n\pi(1+2y+2y^2)\right]} \right\}$$

(III.32)

O forte confinamento faz com que a oscilação no inverso do campo desapareça e nenhuma das duas séries guarda agora o traço principal do efeito dHvA. Obedecendo as mesmas observações do caso do potencial fraco chega-se a

$$m^{p.forte}_{osc.} \simeq -\left(\frac{L\pi}{\lambda}\right)\mu\left\{ \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(\beta\hbar\omega_o/2)^{-1/2}(\zeta/\hbar\omega_o)\mathrm{cotg}\left[\frac{2n\pi\omega_L}{\omega_o}\right]\mathrm{sen}\left[\frac{2n\pi\zeta}{\hbar\omega_o}\left(1-\frac{\omega_L}{\omega_o}\right)+\frac{\pi}{4}\right]}{(n\pi)^{1/2}\,\mathrm{senh}\left|\frac{2n\pi^2 kT}{\hbar\omega_o}\right|} \Big/ (n\pi)^{1/2}\,\mathrm{senh}\left[\frac{2n\pi^2 kT}{\hbar\omega_o}\right] + \right.$$

$$\left. \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(\beta\hbar\omega_o/2)^{-1/2}(\zeta/\hbar\omega_o)\mathrm{cotg}\left[\frac{2n\pi\omega_L}{\omega_o}\right]\mathrm{sen}\left[\frac{2n\pi\zeta}{\hbar\omega_o}\left(1+\frac{\omega_L}{\omega_o}\right)+\frac{\pi}{4}\right]}{(n\pi)^{1/2}\,\mathrm{senh}\left|\frac{2n\pi^2 kT}{\hbar\omega_o}\right|} \Big/ (n\pi)^{1/2}\,\mathrm{senh}\left[2n\pi^2 kT/\hbar\omega_o\right] \right\} \qquad \text{(III.33)}$$

e pelo uso da identidade trigonométrica

$$\mathrm{sen}(a+b)+\mathrm{sen}(a-b)=2\ \mathrm{sen}a\ \cos b \qquad \text{(III.34)}$$

o momento magnético pode ser escrito como

$$m^{p.f}_{osc.} \simeq -\left(\frac{L\pi}{\lambda}\right)\mu \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(\beta\hbar\omega_o)^{-1/2}(2\zeta/\hbar\omega_o)\mathrm{cotg}\left[\frac{2n\pi\omega_L}{\omega_o}\right]}{(n\pi)^{1/2}\ \mathrm{senh}\left[\frac{2n\pi^2 kT}{\hbar\omega_o}\right]}\ \mathrm{sen}\left[\frac{2n\pi\zeta}{\hbar\omega_o} + \right.$$

$$\left. + \frac{\pi}{4}\right]\cos\left[\frac{2n\pi\zeta}{\hbar\omega_o}\left(\frac{\omega_L}{\omega_o}\right)\right] \qquad \text{(III.35)}$$

3) <u>Polos duplos</u>

A fórmula (III.18) para o potencial de Gibbs só pode ser usada quando a relação θ_+/θ_- não for razão de inteiros, pois se isso acontecer o seno que aparece no denominador da segunda série se anularia levando a uma divergência indesejável. Para resolver essa dificuldade basta lembrar que quando θ_+/θ_- for da forma p/q com p,q e Z_+, alguns polos de $\mathrm{cosech}(t\theta_+)$ coincidirão com outros de $\mathrm{cosech}(t\theta_-)$, dando origem a polos duplos, cujo resíduo precisa ser calculado de outra maneira que não por (II.24). Supondo $p=\ell$ e $q=1$ todos os polos de $\mathrm{cosech}\,t\theta_-$ coincidirão com polos de $\mathrm{cosech}(t\theta_+)$, e os resíduos se calculam (Churchill[30]) através da série de Laurent. Para isso faz-se a expansão do integrando nas proximidades do polo duplo residente em $in\pi/\theta_-$, usando a variável auxiliar $\underline{s} = (t-in\pi/\theta_-)$. Tem-se

$$e^{\beta\zeta t} = e^{i\beta\zeta n\pi/\theta_-}\left[1+\beta\zeta s+\frac{(\beta\zeta s)^2}{2}+\frac{(\beta\zeta s)^3}{6}+\frac{(\beta\zeta s)^4}{24}+..\right]$$

$$\text{(III.36)}$$

$$\frac{1}{\operatorname{senh}\theta_+ t} = \frac{1}{\operatorname{senh}\ell\theta_-(s+in\pi/\theta_-)} = \frac{1}{\operatorname{senh}in\ell\pi\cosh s\ell\theta_- + \operatorname{senh}s\ell\theta_-\cosh in\ell\pi} =$$

$$= \frac{(-1)^{\ell n}}{\operatorname{senh}s\ell\theta_-} \simeq (-1)^{\ell n}\left\{\frac{1}{s\ell\theta_-} - \frac{s\ell\theta_-}{6} + \frac{7}{360}(s\ell\theta_-)^3 + \ldots\right\} \quad \text{(III.37)}$$

$$\frac{1}{\operatorname{senh}\theta_-(in\pi/\theta_- + s)} = \frac{1}{i\operatorname{sen}n\pi\cosh s\theta_- + \operatorname{senh}s\theta_-\cos n\pi} \simeq (-1)^n\left\{\frac{1}{s\theta_-} - \right.$$

$$\left. - \frac{s\theta_-}{6} + \frac{7}{360}(s\theta_-)^3 + \ldots\right\} \quad \text{(III.38)}$$

$$\cosh a\left(\frac{in\pi}{\theta_-} + s\right) = \cos\left(\frac{n\pi a}{\theta_-}\right)\cosh as + i\operatorname{sen}\left(\frac{n\pi a}{\theta_-}\right)\operatorname{senh}(as) \simeq$$

$$\simeq \cos\left(\frac{n\pi a}{\theta_-}\right)\left\{1 + i\pi s\operatorname{tg}\left(\frac{n\pi a}{\theta_-}\right) + \frac{(\pi s)^2}{2} + \ldots\right\} \quad \text{(III.39)}$$

$$\frac{1}{\left(\frac{in\pi}{\theta_-} + s\right)^{3/2}} \simeq \frac{1}{\left(\frac{in\pi}{\theta_-}\right)^{3/2}}\left[1 + \frac{3is\theta_-}{2n\pi} - \frac{15}{4}\left(\frac{s\theta_-}{n\pi}\right)^2 + \ldots\right] \quad \text{(III.40)}$$

$$\frac{1}{\operatorname{sen}\pi\left(\frac{in\pi}{\theta_-} + s\right)} \simeq \frac{1}{i\operatorname{senh}\frac{n\pi^2}{\theta_-}}\left[1 + i\pi s\operatorname{cotgh}\left(\frac{n\pi^2}{\theta_-}\right) + \frac{(\pi s)^2}{2} + \ldots\right]$$

$$\text{(III.41)}$$

O que se faz em seguida é multiplicar as expansões individuais obtendo uma série do tipo

$$\frac{L\pi}{2\lambda}\left\{\frac{e^{\beta\zeta t}\cosh at\,(2\pi i)^{-1}}{t^{3/2}\operatorname{sen}\pi t\,\operatorname{senh}t\theta_+\operatorname{senh}t\theta_-}\right\} = \sum_{n=0}^{\infty} a_n s^n + \sum_{n=1}^{\infty}\frac{b_n}{s^n} \tag{III.42}$$

onde se destaca o coeficiente do termo s^{-1}

$$b_1 = \frac{1}{2\pi i}\int_{c'} f(t)dt \tag{III.43}$$

que é justamente o resíduo de f(t) (integrando).

É fácil concluir daí que $2\pi i b_1$ é o resultado da integral no contorno c' em volta da singularidade.

Reunindo as contribuições dos polos duplos simétricos em relação a origem (n e -n) obtém-se

$$-\left(\frac{L\pi}{\lambda}\right)\left\{\left\{\frac{(-1)^{n(\ell+1)}\cos\left[\frac{\beta\zeta n\pi}{\theta_-}+\frac{\pi}{4}\right]}{(\ell\theta_-)\ \operatorname{senh}(n\pi^2/\theta_-)}\left(\frac{\theta_-}{n\pi}\right)^{3/2}\left\{\cos\left(\frac{n\pi a}{\theta_-}\right)\left[\frac{\pi}{\theta_-}\operatorname{cotgh}\left(\frac{n\pi^2}{\theta_-}\right)\right.\right.\right.\right.$$

$$\left.+\frac{3}{2n\pi}\right]+\frac{a}{\theta_-}\operatorname{sen}\left(\frac{n\pi a}{\theta_-}\right)\right\}+\frac{(-1)^{n(\ell+1)}\operatorname{sen}\left[\frac{\beta\zeta n\pi}{\theta_-}+\frac{\pi}{4}\right]}{\ell\theta_-\ \operatorname{senh}|n\pi^2/\theta_-|}\left(\frac{\theta_-}{n\pi}\right)^{3/2}$$

$$\left.\left.\left\{\frac{\beta\zeta}{\theta_-}\cos\left(\frac{n\pi a}{\theta_-}\right)\right\}\right\}\right\} \tag{III.44}$$

Obviamente a parte oscilatória do potencial de Gibbs será a soma de todos os resíduos calculados nos polos simples de $\operatorname{cosecht}\theta_+$ e de todos os resíduos correspondentes aos polos duplos de $\operatorname{cosecht}\theta_+$ e $\operatorname{cosecht}\theta_-$ conforme (III.44). Sendo assim eliminando de (III.18) os resíduos dos polos duplos (vide restrição)

$$W_{osc} = \left(\frac{L\pi}{\lambda}\right)\Bigg\{ \sum_{n=1}^{\infty}{}' \frac{(-1)^n \theta_+^{1/2} \cos\left[\frac{\beta\mu B g n\pi}{2\theta_+}\right] \cos\left[\frac{\beta\zeta n\pi}{\theta_+} + \frac{\pi}{4}\right]}{(n\pi)^{3/2} \operatorname{senh}\left|\frac{n\pi^2}{\theta_+}\right| \operatorname{sen}\left|\frac{n\pi\theta_-}{\theta_+}\right|} +$$

$$- \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^{n(\ell+1)} \cos(n\pi a/\theta_-)}{\ell\theta_-^{1/2}(n\pi)^{3/2} \operatorname{senh}|n\pi^2/\theta_-|} \Big[\pi \operatorname{cotgh}\left(\frac{n\pi^2}{\theta_-}\right) + \frac{3\theta_-}{2n\pi} +$$

$$+ \operatorname{atg}\left(\frac{n\pi a}{\theta_-}\right)\Big] \cos\left[\frac{\beta\zeta n\pi}{\theta_-} + \frac{\pi}{4}\right] +$$

$$- \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^{n(\ell+1)} \cos(n\pi a/\theta_-)}{\ell\theta_-^{1/2}(n\pi)^{3/2} \operatorname{senh}\left[\frac{n\pi^2}{\theta_-}\right]} (\beta\zeta) \operatorname{sen}\left[\frac{\beta\zeta n\pi}{\theta_-} + \frac{\pi}{4}\right] \Bigg\}$$

(III.45)

Essa expressão, embora exata, não permite tirar conclusões a respeito do momento magnético. Para que isso possa ser feito é preciso investigar os limites de potencial fraco e forte.

3.a) <u>Potencial fraco</u>

Usando as aproximações (III.19),.... (III.22) tem-se

$$W_{osc.}^{p.f} \simeq \left(\frac{L\pi}{\lambda}\right)\Bigg\{ \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n (\beta\hbar\omega_L)^{1/2} \cos\left[\frac{\mu\beta c n\pi}{2\hbar\omega_L}\left(1 - \frac{\omega_o^2}{4\omega_L^2}\right)\right]}{(n\pi)^{3/2} \operatorname{senh}\left[\frac{n\pi^2}{\beta\hbar\omega_L}\left(1 - \frac{\omega_o^2}{4\omega_L^2}\right)\right]} \cos\Bigg[\frac{\zeta n\pi}{\hbar\omega_L}\Big(1 -$$

$$- \frac{\omega_o^2}{4\omega_L^2}\Big) + \frac{\pi}{4}\Bigg]\Bigg\} + \ldots$$

$$-\left(\frac{L\pi}{\lambda}\right)\left\{\sum_{n=1}^{\infty}\frac{(-1)^{n(\ell+1)}(\beta\hbar\omega_L)^{-1/2}\left(\frac{2\omega_L}{\omega_0}\right)\cos\left[\frac{\mu Bgn\pi}{2\hbar\omega_L}\frac{4\omega_L^2}{\omega_0^2}\right]}{\ell(n\pi)^{3/2}\,\mathrm{senh}\left[\frac{n\pi^2}{\beta\hbar\omega_L}\frac{4\omega_L^2}{\omega_0^2}\right]}\right.$$

$$\left[\pi\,\mathrm{cotgh}\left[\frac{n\pi^2}{\hbar\omega_L}\frac{4\omega_L^2}{\omega_0^2}\right]+\frac{3\beta\hbar\omega_L}{2n\pi}\left(\frac{\omega_0^2}{4\omega_L^2}\right)+\mathrm{atg}\left[\frac{n\pi\mu Bg}{2\hbar\omega_L}\left(\frac{4\omega_L^2}{\omega_0^2}\right)\right]\cos\left[\frac{\zeta n\pi}{\hbar\omega_L}\left(\frac{4\omega_L^2}{\omega_0^2}\right)+\right.\right.$$

$$\left.\left.+\frac{\pi}{4}\right]\right]+\sum_{n=1}^{\infty}\frac{(-1)^{n(\ell+1)}(\beta\hbar\omega_L)^{-1/2}\left(\frac{2\omega_L}{\omega_0}\right)\cos\left[\frac{\mu Bgn\pi}{2\hbar\omega_L}\left(\frac{4\omega_L^2}{\omega_0^2}\right)\right]}{\ell(n\pi)^{3/2}\,\mathrm{senh}\left[\frac{n\pi^2}{\beta\hbar\omega_L}\left(\frac{4\omega_L^2}{\omega_0^2}\right)\right]}\,(\beta\zeta)$$

$$\left.\mathrm{sen}\left[\frac{\zeta n\pi}{\hbar\omega_L}\left(\frac{4\omega_L^2}{\omega_0^2}\right)+\frac{\pi}{4}\right]\right\} \qquad \text{(III.46)}$$

Usando uma vez mais a aproximação $\mu B \ll \zeta$, obtém-se a parte oscilatória do momento magnético

$$m_{osc.}^{p.f.}\simeq\left(\frac{L\pi}{\lambda}\right)\mu\left\{\sum_{n=1}^{\infty}\frac{\left(\frac{\zeta}{\hbar\omega_L}\right)(\beta\hbar\omega_L)^{-1/2}\mathrm{cotg}\left[n\pi\left(\frac{\omega_0^2}{4\omega_L^2}\right)\right]}{(n\pi)^{1/2}\,\mathrm{senh}\left[\frac{n\pi^2 kT}{\hbar\omega_L}\right]}\,\mathrm{sen}\left[\frac{n\pi\zeta}{\hbar\omega_L}+\frac{\pi}{4}\right]+\right.$$

$$\sum_{n=1}^{\infty}\frac{(-1)^{n(\ell+1)}8(\zeta/\hbar\omega_0)(\beta\hbar\omega_L)^{-1/2}(\omega_L/\omega_0)\cos\left[\frac{\mu Bgn\pi}{2\hbar\omega_L}\left(\frac{4\omega_L^2}{\omega_0^2}\right)\right]}{\ell(n\pi)^{1/2}(\beta\hbar\omega_0)^2\,\mathrm{senh}\left[\frac{n\pi^2}{\hbar\omega_L}\left(\frac{4\omega_L^2}{\omega_0^2}\right)\right]}\times$$

$$\left[\pi\,\mathrm{cotgh}\left[\frac{n\pi^2}{\beta\hbar\omega_L}\left(\frac{4\omega_L^2}{\omega_o^2}\right)\right]+\frac{3\beta\hbar\omega_L}{2n\pi}\left(\frac{\omega_o^2}{4\omega_L^2}\right)+\mathrm{atg}\left[\frac{n\pi\mu Bg}{2\hbar\omega_L}\left(\frac{2\omega_L}{\omega_o}\right)^2\right]\right]\times$$

$$\mathrm{sen}\left|\frac{n\pi\zeta}{\hbar\omega_L}\left(\frac{2\omega_L}{\omega_o}\right)^2+\frac{\pi}{4}\right|+$$

$$-\sum_{n=1}^{\infty}\frac{(-1)^{n(\ell+1)}8}{\ell(n\pi)^{1/2}}\left(\frac{\zeta}{\hbar\omega_o}\right)^2\frac{(\beta\hbar\omega_L)^{1/2}\cos\left[\frac{\mu Bgn\pi}{2\hbar\omega_L}\left(\frac{2\omega_L}{\omega_o}\right)^2\right]}{(\beta\hbar\omega_o)\,\mathrm{senh}\left[\frac{n\pi^2}{\beta\hbar\omega_L}\left(\frac{2\omega_L}{\omega_o}\right)^2\right]}\times$$

$$\cos\left[\frac{n\pi\zeta}{\hbar\omega_L}\left(\frac{2\omega_L}{\omega_o}\right)^2+\frac{\pi}{4}\right]\Big\} \qquad \text{(III .47)}$$

Outra vez é preciso notar que a primeira série é quem vai dar o dHvA no limite de $k\to 0$ conforme secção IV.

3.b) <u>Potencial forte</u>

Por usar os resultados das aproximações (III.26) a (III.31) chega-se a

$$W^{p.f.}_{osc.}\simeq-\left(\frac{\pi L}{\lambda}\right)\Big\{\sum_{n=1}^{\infty}\frac{(\beta\hbar\omega_o/2)^{-1/2}\,\mathrm{cotg}\left|\frac{2n\pi\omega_L}{\omega_o}\right|}{(n\pi)^{3/2}\,\mathrm{senh}\left[\frac{2n\pi^2}{\beta\hbar\omega_o}\right]}\cos\Big[\frac{2n\pi\zeta}{\hbar\omega_o}\Big(1-$$

$$-\frac{\omega_L}{\omega_o}\Big)+\frac{\pi}{4}\Big]\Big\}-\left(\frac{\pi L}{\lambda}\right)\sum_{n=1}^{\infty}\frac{(-1)^{n(\ell+1)}(\beta\hbar\omega_o/2)^{-1/2}\cos\left[\frac{2n\pi\omega_L}{\omega_o}\right]}{\ell(n\pi)^{3/2}\,\mathrm{senh}\left[\frac{2n\pi^2}{\beta\hbar\omega_o}\right]}\times$$

$$\{\frac{5}{4}\ \frac{\beta\hbar\omega_o}{n\pi}\ \cos[\frac{2n\pi\zeta}{\hbar\omega_o}\ (1+\frac{\omega_L}{\omega_o})+\frac{\pi}{4}+(\beta\zeta)\,\mathrm{sen}[\frac{2n\pi\zeta}{\hbar\omega_o}\ (1+\frac{\omega_L}{\omega_o})+\frac{\pi}{4}]\}$$

(III.48)

e o comentário a fazer é que nesse caso as funções são periódicas em B.

Prosseguindo obtém-se para o momento magnético

$$m^{p.f.}_{osc.} \simeq -\frac{\pi L\mu}{\lambda}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{(\zeta/\hbar\omega_o)\mathrm{cotg}[\frac{2n\pi\omega_L}{\omega_o}]\ (\beta\hbar\omega_o/2)^{-1/2}}{(n\pi)^{1/2}\ \mathrm{senh}[\frac{2n\pi^2}{\beta\hbar\omega_o}]}\ \times$$

$$\{\mathrm{sen}\left[\frac{2n\pi\zeta}{\hbar\omega_o}\ (1-\frac{\omega_L}{\omega_o})+\frac{\pi}{4}\right]\}-\frac{\pi L\mu}{\lambda}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{(-1)^{n(\ell+1)}(\frac{\beta\hbar\omega_o}{2})^{-1/2}(\frac{\zeta}{\hbar\omega_o})}{\ell(n\pi)^{1/2}\ \mathrm{senh}\ [\frac{2n\pi^2}{\beta\hbar\omega_o}]}$$

$$\cos[\frac{2n\pi\omega_L}{\omega_o}]\{-\frac{5}{2}\ \mathrm{sen}\ [\frac{2n\pi\zeta}{\hbar\omega_o}\ (1+\frac{\omega_L}{\omega_o})+\frac{\pi}{4}]+2n\pi(\frac{\zeta}{\hbar\omega_o})\cos\ [\frac{2n\pi\zeta}{\hbar\omega_o}\ (1+$$

$$+\frac{\omega_L}{\omega_o})+\frac{\pi}{4}]\} \qquad \text{(III. 49)}$$

4) Alteração no efeito de Haas-van Alphen no limite de confinamento fraco ($\omega_0 \to 0$)

Trabalhando com a função de partição

$$Z(\beta) \underset{\omega_0 \to 0}{\simeq} \left(\frac{L}{2\lambda}\right) \frac{\cosh(\beta\mu B)\ 4\beta\mu B}{\operatorname{senh}(\beta\mu B)\ (\beta\hbar\omega_0)^2} \qquad \text{(III.50)}$$

já testada em 2.b) pode-se obter o potencial de Gibbs (parte oscilatória) como

$$W_{osc} \simeq \frac{1}{2\pi i} \left(\frac{L\pi}{2\lambda}\right) \sum_{n=-\infty}^{\infty} \oint \frac{e^{\beta\zeta t} \cosh(at)\ dt}{t^{5/2}\theta_{-} \operatorname{senh}(t\beta\mu B)\ \operatorname{sen}(\pi t)}$$

(III.51)

onde a integral é feita em torno dos pontos ($in\pi/\beta\mu B$) que são singularidades de cosech($\beta\mu Bt$). Assim

$$W_{osc} \simeq \left(\frac{L\pi}{\lambda}\right) \sum_{n=1}^{\infty} \frac{4(\beta\mu B)^{5/2} \cos\left[\frac{n\pi\zeta}{\mu B} + \frac{\pi}{4}\right]}{(n\pi)^{5/2}\ (\beta\hbar\omega_0)^2 \operatorname{senh}\left[\frac{n\pi^2}{\beta\mu B}\right]} \qquad \text{(III.52)}$$

e o momento magnético fica

$$m \simeq \frac{L\pi}{\lambda} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{4(\beta\mu)^{3/2}\ \zeta B^{1/2} \operatorname{sen}\left[\frac{n\pi\zeta}{\mu B} + \frac{\pi}{4}\right]}{(n\pi)^{3/2}\ (\beta\hbar\omega_0)^2 \operatorname{senh}\left[\frac{n\pi^2}{\beta\mu B}\right]} \qquad \text{(III.53)}$$

Usando a relação entre o potencial químico e o número de partículas dado em (III.11) chega-se a um momento magnético por partícula

$$\frac{m}{N} \simeq \frac{15\ \pi^{3/2}(\beta\mu B)^{1/2}}{4\ (\beta\zeta)^{3/2}}\ \mu \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\operatorname{sen}\left[\frac{n\pi\zeta}{\mu B} + \frac{\pi}{4}\right]}{\operatorname{senh}\left[n\pi^2/\beta\mu B\right](n\pi)^{3/2}}$$

(III.54)

contrastando com

$$\frac{m}{N} \simeq \frac{3\pi}{2(\beta\zeta)^{1/2}} \frac{\mu}{(\beta\mu B)^{1/2}} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\operatorname{sen}\left[\frac{n\pi\zeta}{\mu B} - \frac{\pi}{4}\right]}{(n\pi)^{1/2} \operatorname{senh}\left[n\pi^2/\beta\mu B\right]} \tag{III.55}$$

obtido por Sondheimer e Wilson[17], para o caso de $\omega_0=0$.

CAPÍTULO IV

EFEITOS DE CONFINAMENTO TRIDIMENSIONAL NAS PROPRIEDADES MAGNÉTICAS DE GÁS DE ELÉTRONS LIVRES (ALTA TEMPERATURA)

1. A função de partição

A simplicidade com que se consegue tratar sistemas finitos (ou confinados) pelo artifício do potencial harmônico sugere que façamos o mesmo para tratar a direção paralela ao campo.

A hamiltoniana quântica de um elétron com carga elétrica -e, massa m para essa configuração é

$$H = -\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m} - i\omega_L\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right) + \frac{m\Omega_L^2}{2}(x^2+y^2)+\frac{1}{2}m\omega_0^2 z^2 \qquad (IV.1)$$

que pode ser diagonalizada com operadores de criação e destruição, assumindo a forma

$$H = \hbar\omega_+\left(a_1^\dagger a_1+\frac{1}{2}\right)+\hbar\omega_-\left(a_2^\dagger a_2+\frac{1}{2}\right)+\hbar\omega_0\left(a_3^\dagger a_3+\frac{1}{2}\right) \qquad (IV.2)$$

Essa hamiltoniana é essencialmente a de um oscilador harmônico tridimensional anisotrópico com os operadores dados por

$$a_1 = \frac{1}{2}\left(\frac{m\Omega_L}{\hbar}\right)^{1/2}(x-iy) + \frac{i}{2(m\hbar\Omega_L)^{1/2}}(p_x-ip_y) \qquad (IV.3)$$

$$a_2 = \frac{1}{2}\left(\frac{m\Omega_L}{h}\right)^{1/2}(x+iy) + \frac{i}{2(mh\Omega_L)^{1/2}}(p_x+ip_y) \qquad (IV.4)$$

$$a_3 = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{m\omega_o}{\hbar}\right)^{1/2} Z + \frac{i \quad P_z}{\sqrt{2}\ (m\hbar\omega_o)^{1/2}} \qquad (IV.5)$$

A equação de Schrödinger nesse caso tem auto-valores conhecidos

$$E_{n,m,p} = (n+\frac{1}{2})\hbar\omega_+ + (m+\frac{1}{2})\hbar\omega_- + (p+\frac{1}{2})\hbar\omega_o \qquad (IV.6)$$

onde $\omega_\pm = (\Omega_L \pm \omega_L)$. A função de partição para uma partícula pode ser encontrada por soma direta

$$Z(\beta) = \sum_{n,m,p} e^{-\beta E_{nmp}} = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta(n+1/2)\hbar\omega_+} \sum_{m=0}^{\infty} e^{-\beta(m+}$$

$$+1/2)\hbar\omega_- \sum_{p=0}^{\infty} e^{-\beta(p+1/2)\hbar\omega_o} =$$

$$= \left(\frac{e^{-\beta\hbar\omega_+/2}}{1-e^{-\beta\hbar\omega_+}}\right) \left(\frac{e^{-\beta\hbar\omega_-/2}}{1-e^{-\beta\hbar\omega_-}}\right) \left(\frac{e^{-\beta\hbar\omega_o/2}}{1-e^{-\beta\hbar\omega_o}}\right) \qquad (IV.7)$$

ou ainda

$$Z(\beta) = [8\,\mathrm{senh}(\beta h\omega_+/2)\,\mathrm{senh}(\beta h\omega_-/2)\,\mathrm{senh}(\beta h\omega_o/2)]^{-1} \qquad (IV.8)$$

Para levar em conta efeito de spin basta multiplicar por $2\cosh(\beta\mu Bg/2)$, conforme Apêndice-A e doravante a função de partição a ser utilizada se escreve

$$Z(\beta) = \frac{\cosh(a)}{4\,\mathrm{senh}\theta_+\,\mathrm{senh}\theta_-\,\mathrm{senh}\theta_o} \qquad (IV.9)$$

onde substituiu-se

$$\frac{\beta\hbar\omega_+}{2} = \frac{\beta\hbar}{2}[\Omega_L+\omega_L] = \frac{\beta(E+\varepsilon)}{2} = \theta_+$$

$$\frac{\beta\hbar\omega_-}{2} = \frac{\beta\hbar}{2}[\Omega_L-\omega_L] = \frac{\beta(E-\varepsilon)}{2} = \theta_- \quad , \quad e$$

$$\frac{\beta\hbar\omega_o}{2} = \theta_o$$

Colocando (IV.9) em (II.17) pode-se calcular o potencial de Gibbs. Se ζ,B e k satisfizerem a condição

$$\zeta<\hbar[\Omega_L + \frac{\omega_o}{2} - \omega_L] \qquad (IV.10)$$

então a integral no caminho c será igual a $-2\pi i\Sigma$resíduos calculados nos polos de $\operatorname{cosec}\pi t$ que ficam à direita da origem (isso porque a integral no arco BCA se anula quando $R\to\infty$). Sendo assim

$$W= \frac{1}{2\pi i}\int_{c-i\infty}^{c+i\infty} \frac{\pi\ e^{\beta\zeta t}\cosh(at)\ dt}{4t\,\mathrm{sen}\pi t\,\mathrm{senh}t\theta_+\,\mathrm{senh}t\theta_-\,\mathrm{senh}t\theta_o} = -$$

$$-\sum_{n=1}^{\infty} \mathrm{RES}\left\{\frac{\pi\ e^{\beta\zeta t}\cosh(at)}{4t\,\mathrm{sen}\pi t\,\mathrm{senh}t\theta_+\,\mathrm{senh}t\theta_-\,\mathrm{senh}t\theta_o}\right\}_{t=n}$$

$$W = -\sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n\ e^{\beta\zeta n}\cosh(an)}{4n\,\mathrm{senh}n\theta_+\,\mathrm{senh}n\theta_-\,\mathrm{senh}n\theta_o} \qquad (IV.11)$$

e o momento magnético total vem dado por

$$m= -\sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n\ e^{\beta\zeta n}}{2n\,\mathrm{senh}(\frac{\beta\hbar\omega_o}{2}n)\ \beta}\ \frac{\partial}{\partial B}\left[\frac{\cosh(\beta\mu Bqn/2)}{\cosh\beta\hbar\Omega_L-\cosh\beta\hbar\omega_L}\right]$$

(IV.12)

Face à rápida convergência da série o primeiro termo já será uma boa aproximação e dessa maneira

$$m \simeq \frac{e^{\beta\zeta}\cosh[\beta\mu Bg/2]\quad \mu}{2\operatorname{senh}[\frac{\beta\hbar\omega_o}{2}][\cosh\beta\hbar\Omega_L-\cosh\beta\hbar\omega_L]}\{\tanh(\beta\mu Bg/2)-$$

$$-\frac{\gamma\operatorname{senh}\beta\hbar\Omega_L-\operatorname{senh}\beta\hbar\omega_L}{\cosh\beta\hbar\Omega_L-\cosh\beta\hbar\omega_L}\} \qquad (IV.13)$$

Eliminando a fugacidade por meio de

$$N = \frac{1}{\beta}\frac{\partial W}{\partial\zeta} \simeq \frac{e^{\beta\zeta}\qquad \cosh|\beta\mu Bg/2|}{2\operatorname{senh}(\beta\hbar\omega_o/2)|\cosh\beta\hbar\Omega_L-\cosh\beta\hbar\omega_L|} \qquad (IV.14)$$

resulta para o momento magnético

$$m \simeq N\mu\{\tanh(\beta\mu B)-\frac{\gamma\operatorname{senh}\beta\hbar\Omega_L-\operatorname{senh}\beta\hbar\omega_L}{\cosh\beta\hbar\Omega_L-\cosh\beta\hbar\omega_L}\} \qquad (IV.15)$$

onde γ é a razão de frequências (ω_L/Ω_L).

O resultado acima coincide com o (II.25) para o caso do confinamento bidimensional, indicando que pelo menos em primeira aproximação não há diferença entre as duas situações no tocante a resposta a um campo magnético uniforme e estático.

Essa aparente semelhança entre o comportamento do gas frente a um e outro confinamento sugere a averiguação das propriedades locais (a altas temperaturas) na configuração atual a fim de comparar com os resultados já obtidos para o caso do confinamento bidimensional.

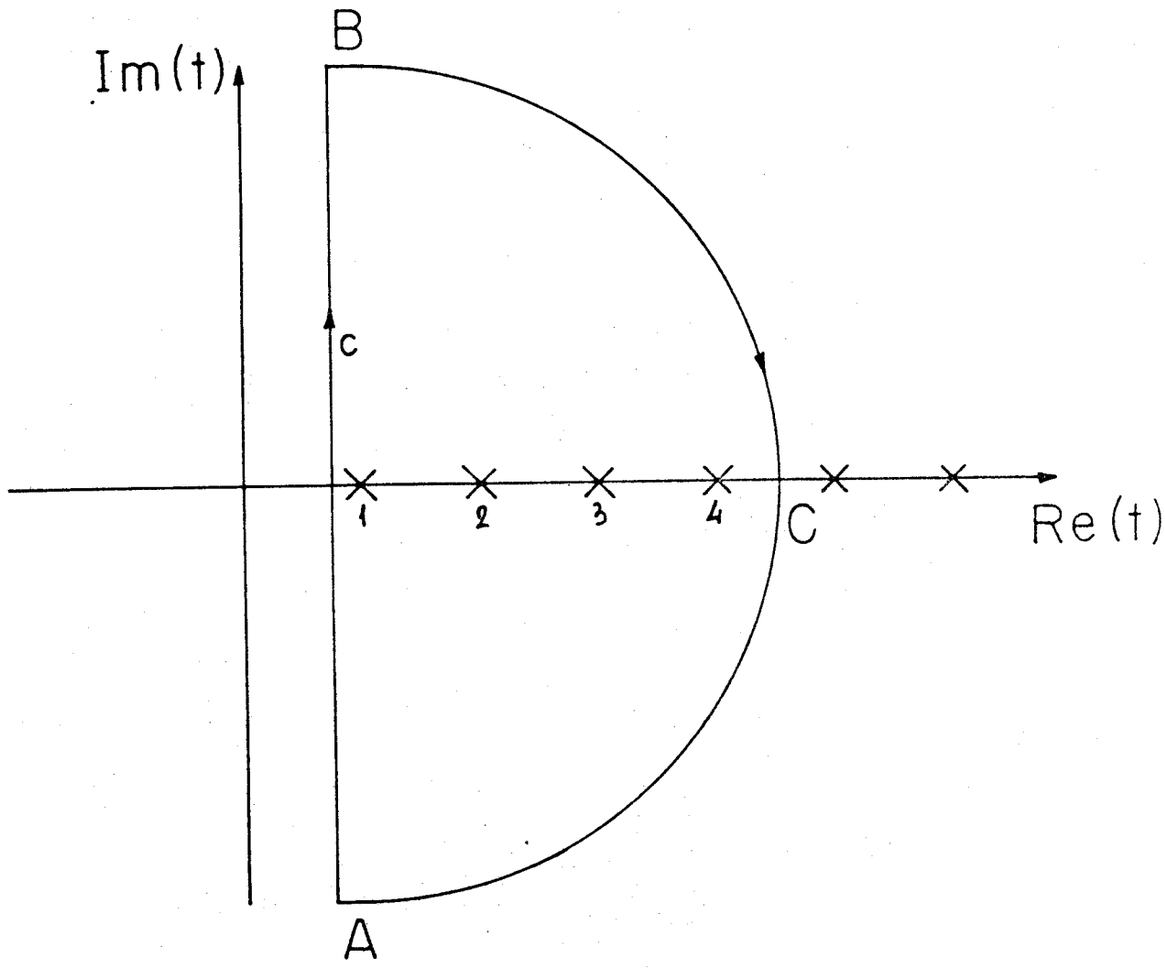

Figura IV.1- O caminho de integração para (IV.11)

2. Propriedades locais a temperaturas altas

O conhecimento do propagador $C(\vec{r}\vec{r}'\beta)$ definido como

$$C(\vec{r}\vec{r}'\beta) = \sum_i \psi_i^*(\vec{r})\, e^{-\beta E_i} \psi_i(\vec{r}') \qquad (IV.16)$$

permite encontrar a densidade num determinado ponto do sistema. Na estatística de Boltzman a densidade em $\vec{r}$ por partícula é dada por

$$n(\vec{r}) = \frac{C(\vec{r}\vec{r})}{Z(\beta)} \qquad (IV.17)$$

e a densidade de corrente de probabilidade fica

$$\vec{j}(\vec{r}) = \frac{1}{Z(\beta)} \left(\frac{\hbar}{2mi}\right) \left[\nabla C(\vec{r}\vec{r}'\beta) - \nabla' C(\vec{r}\vec{r}'\beta)\right]_{\vec{r}=\vec{r}'} +$$

$$+ \frac{e}{mc}\, n(\vec{r}) A(\vec{r}) \qquad (IV.18)$$

Escolhendo o gauge simétrico (cilíndrico), e portanto

$$\vec{A}(\vec{r}) = \frac{B}{2}\,(-y, x, 0) \qquad (IV.19)$$

resta apenas calcular o propagador, que deve satisfazer a equação de Bloch

$$HC(\vec{r}\vec{r}'\beta) = -\frac{\partial C}{\partial \beta}(\vec{r}\vec{r}'\beta) \qquad (IV.20)$$

com H dado por (IV.1).

Por analogia com Sondheimer e Wilson pode-se propor uma solução tentativa

$$C(\vec{r}\vec{r}'\beta) = f(\beta)\exp\{-ig(\beta)[xy'-yx'] + h(\beta)[xx'+yy'] - \frac{k(\beta)}{2}[x^2+y^2+x'^2+y'^2]$$

$$+ \ell(\beta)(z+z')^2 + m(\beta)(z-z')^2\} \qquad (IV.21)$$

e obrigá-la a satisfazer (IV.20), além de reproduzir o propagador de partícula livre (II.8) no limite de $\underline{k}$ e $\underline{B}$ nulos. Sendo assim um sistema de equações diferenciais é obtido cuja solução é mostrada abaixo:

$$f(\beta) = \left(\frac{m\omega_0}{2\pi\hbar \operatorname{senh}\beta\hbar\omega_0}\right)^{1/2} \frac{m}{2\pi\beta\hbar^2} \frac{\beta E}{\operatorname{senh}\beta E} \qquad (IV.22)$$

$$g(\beta) = \frac{mE}{\hbar^2} \frac{\operatorname{senh}\beta\varepsilon}{\operatorname{senh}\beta E} \qquad (IV.23)$$

$$h(\beta) = \frac{mE}{\hbar^2} \frac{\cos\beta\varepsilon}{\operatorname{senh}\beta E} \qquad (IV.24)$$

$$k(\beta) = \frac{mE}{\hbar^2} \operatorname{cotgh}\beta E \qquad (IV.25)$$

$$\ell(\beta) = -\frac{m\omega_0}{4\hbar} \tanh(\beta\hbar\omega_0/2) \qquad (IV.26)$$

$$m(\beta) = -\frac{m\omega_0}{4\hbar} \operatorname{cotgh}(\beta\hbar\omega_0/2) \qquad (IV.27)$$

Fazendo os cálculos de (IV.18) obtém-se

$$\vec{\partial}(\vec{r}) = n(\vec{r}) \left\{\omega_L \left[1 - \frac{\operatorname{senh}\beta\varepsilon}{\gamma \operatorname{senh}\beta E}\right]\right\} (-y,x,0) \qquad (IV.28)$$

ou ainda

$$\vec{\partial}(\vec{r}) = n(\vec{r})\vec{V}(\vec{r}) \qquad (IV.29)$$

Esse resultado vem mostrar que o gas roda como um todo em torno do eixo $\underline{z}$, com a mesma velocidade que o fazia quando não existia confinamento na direção paralela ao campo magnético.

CAPÍTULO V

O POTENCIAL HARMÔNICO TRIDIMENSIONAL E AS PROPRIEDADES MAGNÉTICAS A BAIXAS TEMPERATURAS

O conhecimento da função de partição de uma partícula e o uso da expressão integral (II.17) permite o cálculo do potencial de Gibbs, que por sua vez contém todas as informações do sistema de elétrons que desejamos estudar. Assim

$$W = \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} \frac{\pi\, e^{\beta\zeta t} \cosh at \; dt}{4t \operatorname{sen}\pi t \; \operatorname{senh} t\theta_+ \operatorname{senh} t\theta_- \operatorname{senh} t\theta_0} \tag{V.1}$$

Supondo que ζ, B e k satisfaçam a relação

$$\zeta > \hbar\left[\omega_L - \Omega_L - \frac{\omega_0}{2}\right] \tag{V.2}$$

então o contorno c pode ser transformado no caminho fechado ABDA desde que a integral no arco BDA vai a zero quando R for a infinito. Isso permite que (V.1) seja substituida por

$$W = \Sigma \text{ RES } \left\{ \frac{\pi\, e^{\beta\zeta t} \cosh at}{4t \operatorname{sen}\pi t \operatorname{senh} t\theta_+ \operatorname{senh} t\theta_- \operatorname{senh} t\theta_0} \right\} \tag{V.3}$$

onde os resíduos devem ser calculados nos polos de t, $\operatorname{cosec}\pi t$, $\operatorname{cosech} t\theta_+$, $\operatorname{cosech} t\theta_-$, $\operatorname{cosech} t\theta_0$ que são

$$\text{i)} \quad t = \pm \frac{in\pi}{\theta_+} \tag{V.4}$$

$$\text{ii)} \quad t = \pm\, in\pi/\theta_- \tag{V.5}$$

$$\text{iii)} \quad t = \pm \frac{in\pi}{\theta_0} \tag{V.6}$$

$$\text{iv)} \quad t = \pm n \quad , \qquad n = 1, 2, 3, \ldots \tag{V.7}$$

v) $t=0$. Note que a origem é polo de quinta ordem. (V.8)

1. Susceptibilidade independente do campo

O comportamento estacionário do momento magnético será proveniente dos polos simples de $\operatorname{cosec}\pi t$ localizados no semi-eixo real (negativo), e do polo de quinta ordem na origem. Os resíduos em $t=-n$, com $n=1,2,3,\ldots$ são dados por

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n e^{-\beta\zeta n} \cosh an}{4n \operatorname{sen}h n\theta_+ \operatorname{sen}h n\theta_- \operatorname{sen}h n\theta_0} \qquad (V.9)$$

e o resíduo correspondente ao polo de quinta ordem na origem pode ser calculado por expandir o integrando em série de Laurent, nas proximidades de $t=0$. O resultado é:

$$\mathrm{RES}\left\{ \frac{\pi\, e^{\beta\zeta t} \cosh(at)}{t \operatorname{sen}\pi t \operatorname{sen}h t\theta_+ \operatorname{sen}h t\theta_- \operatorname{sen}h t\theta_0} \right\}_{t=0} = \frac{1}{96\theta_+\theta_-\theta_0} \{ (\beta\zeta)^4 +$$

$$+6a^2(\beta\zeta)^2 - 2(\beta\zeta)^2[\theta_+^2+\theta_-^2+\theta_0^2] + 2\pi^2(\beta\zeta)^2 + a^4 + 2a^2\pi^2 - 2a^2[\theta_+^2+\theta_0^2+\theta_-^2] +$$

$$+ \frac{7}{15}[\theta_0^4+\theta_+^4+\theta_-^4] - \frac{10\pi^2}{15}[\theta_+^2+\theta_0^2+\theta_-^2] + \frac{10}{15}[\theta_+^2+\theta_-^2]\theta_0^2 + \frac{10}{15}\theta_-^2\theta_+^2 + \frac{7\pi^4}{15} \}$$

(V.10)

É interessante notar que a expressão (V.10) é exata e portanto permite a análise dos casos em que o potencial é forte ou fraco com relação ao campo magnético. Isso não acontecia no caso do confinamento bidimensional pois naquele caso havia um corte no semi-eixo real negativo (devido a raiz quadrada que aparecia no integrando) e a expansão portanto só valia no limite de potencial de confinamento fraco.

Voltando ao caso em questão, se fizermos a hipótese de que ζ não seja negativo então a contribuição dos polos em $-n$ pode ser desprezada frente àquela proveniente da singularidade na origem, ficando o potencial termodinâmico como

$$W_{est} \simeq \frac{1}{12(\beta\hbar\omega_0)^3} \{(\beta\zeta)^4+6a^2(\beta\zeta)^2-2(\beta\zeta)^2[(\beta\mu B)^2+\frac{3}{4}(\beta\hbar\omega_0)^2] +$$

$$+ 2\pi^2(\beta\zeta)^2+a^4+2a^2\pi^2 - 2a^2[(\beta\mu B)^2+\frac{3}{4}(\beta\hbar\omega_0)^2] +$$

$$+ \frac{7}{15}[(\beta\mu B)^4+\frac{3}{16}(\beta\hbar\omega_0)^4] - \frac{2\pi^2}{3}[(\beta\mu B)^2+\frac{3}{4}(\beta\hbar\omega_0)^2] +$$

$$+ \frac{2}{3}\frac{(\beta\hbar\omega_0)^2}{4}[(\beta\mu B)^2+\frac{(\beta\hbar\omega_0)^2}{2}] + \frac{7\pi^4}{15} + \ldots\} \qquad (V.11)$$

expressão na qual já se fez o uso das relações entre $\theta_+, \theta_-, \theta_0$, e as variáveis originais B, β e ω_0 (lembrar que $a=\beta\mu Bg/2$).

Usando a hipótese de $\beta\zeta >> 1$, obtém-se o número de partículas

$$N = \frac{1}{\beta}\frac{\partial W}{\partial \zeta} \simeq \frac{(\beta\zeta)^3}{3(\beta\hbar\omega_0)^3} \qquad (V.12)$$

Finalmente derivando (V.11) em relação ao campo magnético obtém-se

$$m_{est} \simeq 3(1-\frac{1}{3})\frac{N\mu^2 B}{\zeta} + \frac{\pi^2}{(\beta\zeta)^2}(1-\frac{1}{3})\frac{N\mu^2 B}{\zeta} - \frac{3}{4}(\frac{\beta\hbar\omega_0}{\beta\zeta})^2(1 -$$

$$-\frac{1}{9})\frac{N\mu^2 B}{\zeta} \qquad (V.13)$$

É claro que na aproximação em que se está trabalhando o segundo termo é desprezível frente ao primeiro (observe que ele tem dependência na temperatura). Entretanto, o mesmo não se pode dizer com relação ao terceiro pois ele só pode ser desprezado se $(\hbar\omega_0/\zeta)$ for muito menor do que um. Pode-se dizer ainda que se isso não se verifica a relação de 1 para 1/3 entre a contribuição de spin e a de movimento orbital também não mais acontece.

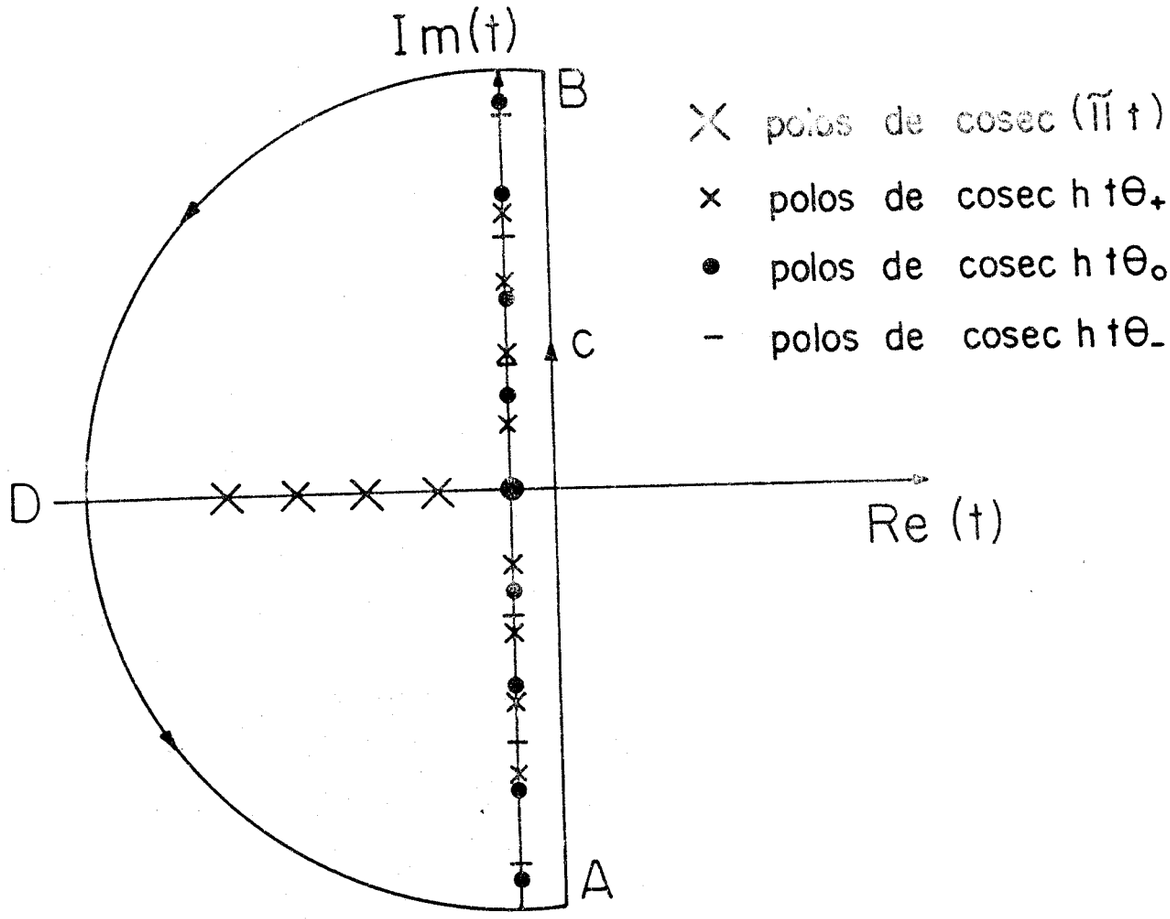
Im(t)
B
C
D
A
Re (t)
polos de cosec (π t)
polos de cosec h tθ+
polos de cosec h tθ0
polos de cosec h tθ-

Figura V.1

2. Comportamento oscilatório da susceptibilidade

Conforme mostra a figura V.1 existem agora três carreiras de polos no eixo imaginário, provenientes das funções cosech $t\theta_+$, cosechtθ_- e cosechtθ_0. Em razão disso a análise do comportamento oscilatório do momento magnético fica muito difícil. Para complicar um pouco mais existe a possibilidade de coincidência dos polos dando origem a polos duplos e eventualmente triplos, que precisam ser considerados separadamente.

Polos simples

Recorrendo-se ao resíduo para forma fracional não é difícil obter para esse caso

$$W_{osc} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n \cos[n\pi a/\theta_+] \cos[\beta\zeta n\pi/\theta_+]}{2n \operatorname{senh}[\frac{n\pi^2}{\theta_+}] \operatorname{sen}[\frac{n\pi\theta_-}{\theta_+}] \operatorname{sen}[\frac{n\pi\theta_0}{\theta_+}]} +$$

$$+ \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n \cos[n\pi a/\theta_-] \cos[\beta\zeta n\pi/\theta_-]}{2n \operatorname{senh}[\frac{n\pi^2}{\theta_-}] \operatorname{sen}[\frac{n\pi\theta_+}{\theta_-}] \operatorname{sen}[\frac{n\pi\theta_0}{\theta_-}]} +$$

$$+ \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n \cos[n\pi a/\theta_0] \cos[\beta\zeta n\pi/\theta_0]}{2n \operatorname{senh}[\frac{n\pi^2}{\theta_0}] \operatorname{sen}[\frac{n\pi\theta_-}{\theta_0}] \operatorname{sen}[\frac{n\pi\theta_+}{\theta_0}]}$$

A seguir podem ser examinados os limites de ω_0 grande ou pequeno comparado com a frequência de Larmor (correspondendo aos casos de um confinamento forte ou fraco).

2.a) <u>Potencial fraco</u>

$$\frac{\omega_o}{\omega_L} << 1 \quad e \quad \beta\hbar\omega_o \simeq 1$$

Recorrendo às fórmulas (III.19),...,(III.22), obtém-se para o potencial de Gibbs, nessa aproximação

$$W^{p.f.}_{osc.} \simeq \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n \cos\left[\frac{n\pi\mu gB}{2\hbar\omega_L}\left(1+\frac{\omega_o^2}{4\omega_L^2}\right)\right]\cos\left[\frac{n\pi\zeta}{\hbar\omega_L}\left(1+\frac{\omega_o^2}{4\omega_L^2}\right)\right]}{2n\,\mathrm{senh}\left[\frac{n\pi^2}{\beta\hbar\omega_L}\right]\mathrm{sen}\left[\frac{n\pi\omega_o^2}{4\omega_L^2}\right]\mathrm{sen}\left[\frac{n\pi\omega_o}{2\omega_L}\right]} +$$

$$+ \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n \cos\left[\frac{n\pi\mu Bg}{2\hbar\omega_L}\,\frac{4\omega_L^2}{\omega_o^2}\right]\cos\left[\frac{n\pi\zeta}{\hbar\omega_L}\left(\frac{4\omega_L^2}{\omega_o^2}\right)\right]}{2n\,\mathrm{senh}\left[\frac{n\pi^2}{\beta\hbar\omega_L}\,\frac{4\omega_L^2}{\omega_o^2}\right]\mathrm{sen}\left[n\pi\left(1+\frac{4\omega_L^2}{\omega_o^2}\right)\right]\mathrm{sen}\left[\frac{n\pi 2\omega_L}{\omega_o}\right]} +$$

$$+ \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n \cos\left[\frac{n\pi\mu Bg}{\hbar\omega_o}\right]\cos\left[\frac{n\pi\zeta 2}{\hbar\omega_o}\right]}{2n\,\mathrm{senh}\left[\frac{2n\pi^2}{\hbar\omega_o}\right]\mathrm{sen}\left[\frac{n\pi\omega_o}{2\omega_L}\right]\mathrm{sen}\left[\frac{n\pi 2\omega_L}{\omega_o}\right]} \qquad (V.15)$$

Derivando em relação ao campo magnético, encontra-se o momento magnético total

$$m^{p.f.}_{osc.} \simeq -\pi\mu \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\mathrm{cotg}\left[\frac{n\pi\omega_o^2}{4\omega_L^2}\right](\zeta/\hbar\omega_L)(\beta\hbar\omega_L)^{-1}\,\mathrm{sen}\left(\frac{n\pi\zeta}{\hbar\omega_L}\right)}{2\mathrm{senh}\left[\frac{n\pi^2}{\beta\hbar\omega_L}\right]\mathrm{sen}\left[\frac{n\pi\omega_o}{2\omega_L}\right]} +$$

$$-2\pi\mu \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\cot g\left[\frac{n\pi 4\omega_L^2}{\omega_0^2}\right] (\zeta/\hbar\omega_0)(\beta\hbar\omega_0)^{-1} \operatorname{sen}\left[\frac{n\pi\zeta}{\hbar\omega_0}\left(\frac{4\omega_L}{\omega_0}\right)\right]}{\operatorname{senh}\left[\frac{4n\pi^2}{\beta\hbar\omega_0}\left(\frac{\omega_L}{\omega_0}\right)\right] \operatorname{sen}\left[n\pi \frac{2\omega_L}{\omega_0}\right]}$$

$$-\pi\mu \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n \cos\left[\frac{n\pi 2\zeta}{\hbar\omega_0}\right] (\beta\hbar\omega_0)^{-1} \{1+ \frac{\omega_0}{2n\pi\omega_L} \cot g\left[\frac{2n\pi\omega_L}{\omega_0}\right]}{\operatorname{senh}\left[2n\pi^2/\beta\hbar\omega_0\right| \operatorname{sen}\left|n\pi\omega_0/2\omega_L\right|}$$

$$\frac{-\cot g^2 \left[\frac{2n\pi\omega_L}{\omega_0}\right]\}}{\operatorname{senh}\left[2n\pi^2/\beta\hbar\omega_0\right] \operatorname{sen}\left[n\pi\omega_0/2\omega_L\right]} \qquad (V.16)$$

2.b) <u>Potencial forte</u>

$$\frac{\omega_0}{\omega_L} >> 1 \quad e \quad \beta\hbar\omega_L \simeq 1$$

A substituição das fórmulas (III.26),...,(III.31), dá para o potencial de Gibbs

$$W^{p.f}_{osc.} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n \cos\left[n\pi\mu Bg\cancel{\zeta}/\cancel{\zeta}\hbar\omega_0\left(1- \frac{\omega_L}{\omega_0}\right)\right] \cos\left[2n\pi\zeta/\hbar\omega_0\left(1- \frac{\omega_L}{\omega_0}\right)\right]}{2n \operatorname{senh}\left[\frac{2n\pi^2}{\beta\hbar\omega_0}\left(1- \frac{\omega_L}{\omega_0}\right)\right] \operatorname{sen}\left[n\pi\left(1- \frac{2\omega_L}{\omega_0} + \frac{2\omega_L^2}{\omega_0^2}\right)\right]} \times$$

$$\frac{1}{\operatorname{sen}\left[n\pi(1- \omega_L/\omega_0+\omega_L^2/2\omega_0^2)\right]} +$$

$$+\sum_{n=1}^{\infty}\frac{(-1)^n\cos\left[\frac{n\pi\mu Bg}{\hbar\omega_0}\left(1+\frac{\omega_L}{\omega_0}\right)\right]\cos\left[\frac{2n\pi\zeta}{\hbar\omega_0}\left(1+\frac{\omega_L}{\omega_0}\right)\right]}{2n\ \mathrm{senh}\left[\frac{2n\pi^2}{\hbar\omega_0}\left(1+\frac{\omega_L}{\omega_0}\right)\right]\mathrm{sen}\left[n\pi\left(1+\frac{2\omega_L}{\omega_0}+\frac{2\omega_L^2}{\omega_0^2}\right)\right]}\times$$

$$\frac{1}{\mathrm{sen}\left[n\pi\left(1+\frac{\omega_L}{\omega_0}+\frac{\omega_L^2}{2\omega_0^2}\right)\right]}$$

$$+\sum_{n=1}^{\infty}\frac{(-1)^n\cos\left[\frac{n\pi\mu Bg}{\hbar\omega_0}\right]\cos\left[\frac{2n\pi\zeta}{\hbar\omega_0}\right]}{2n\ \mathrm{senh}\left[\frac{2n\pi^2}{\beta\hbar\omega_0}\right]\mathrm{sen}\left[n\pi\left(1-\frac{\omega_L}{\omega_0}+\frac{\omega_L^2}{2\omega_0^2}\right)\right]}$$

$$\times\frac{1}{\mathrm{sen}\left[n\pi\left(1+\frac{\omega_L}{\omega_0}+\frac{\omega_L^2}{2\omega_0^2}\right)\right]} \qquad (V.17)$$

O momento magnético nessa aproximação pode ser escrito em termos de dois somatórios, uma vez que os dois primeiros se contraem pelo uso de

$$\cos(a+b)+\cos(a-b)=2\cos a\cos b \qquad (V.18)$$

Sendo assim

$$m_{osc.}^{p.f.}\simeq-\mu\sum_{n=1}^{\infty}\frac{(-1)^n 2\pi(\zeta/\hbar\omega_0)(\beta\hbar\omega_0)^{-1}\mathrm{cotg}\left[\frac{2n\pi\omega_L}{\omega_0}\right]\cos\left[\frac{2n\pi\zeta}{\hbar\omega_0}\right]}{\mathrm{senh}\left[2n\pi^2/\beta\hbar\omega_0\right]\ \mathrm{sen}\left[n\pi\omega_L/\omega_0\right]}\times$$

$$\operatorname{sen}\left[\frac{2n\pi\zeta}{\hbar\omega_0}\left(\frac{\omega_L}{\omega_0}\right)\right] + \mu \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n \pi(\beta\hbar\omega_0)^{-1}\cos\left[\frac{2n\pi\zeta}{\hbar\omega_0}\right]}{\operatorname{senh}\left[\frac{2n\pi^2}{\beta\hbar\omega_0}\right]\operatorname{sen}^3\left[\frac{n\pi\omega_L}{\omega_0}\right]} \cos\left[\frac{n\pi\omega_L}{\omega_0}\right] \tag{V.19}$$

Novamente a oscilação com o inverso do campo não existe mais. Esse resultado não se aplica aos casos de polos coincidentes, e disso trata o próximo ítem.

3. Polos coincidentes

Neste ponto já supor-se-á a coincidência dos três tipos de singularidades, pois assim a coincidência de apenas dois polos surge naturalmente, como sub-produto da imposição inicial. Supõe-se então que θ_+, θ_- e θ_0 obedeçam a relação

$$\frac{1}{\theta_-} = \frac{\ell}{\theta_+} = \frac{m}{\theta_0} \tag{V.20}$$

Com isso o primeiro polo de $\operatorname{cosecht}\theta_-$ coincide com o ℓ-ésimo polo de $\operatorname{cosecht}\theta_+$ e com o m-ésimo polo de $\operatorname{cosecht}\theta_0$ e assim sucessivamente, dando origem a uma carreira de polos de terceira ordem.

Para calcular o resíduo correspondente recorre-se às expansões de (III.36) a (III.41) e ao método de Laurent. O resultado imediatamente é incorporado ao potencial de Gibbs que agora passou a ser

$$W_{osc} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n \cos[n\pi a/\theta_+]\cos[n\pi\beta\zeta/\theta_+]}{2n\operatorname{senh}\left[\frac{n\pi^2}{\theta_+}\right]\operatorname{sen}\left[\frac{n\pi\theta_-}{\theta_+}\right]\operatorname{sen}\left[\frac{n\pi\theta_0}{\theta_+}\right]} +$$

$$+\sum_{n=1}^{\infty}\frac{(-1)^n\cos[n\pi a/\theta_0]\cos[n\pi\beta\zeta/\theta_0]}{2n\ \mathrm{senh}[n\pi^2/\theta_0]\,\mathrm{sen}[n\pi\theta_-/\theta_0]\,\mathrm{sen}[n\pi\theta_+/\theta_0]}\ +$$

$$+\sum_{n=1}^{\infty}\frac{(-1)^{n+\ell+m}\cos[n\pi a/\theta_-]}{2n\ell m\theta_-^2\ \mathrm{senh}(n\pi^2/\theta_-)}\ \{-\cos(n\pi\beta\zeta/\theta_-)\Big[\frac{a^2+(\beta\zeta)^2}{2}\ -\ \frac{\theta_-^2}{6}\ (1+$$

$$+\ell^2+m^2)-\frac{\theta_-^2}{(n\pi)^2}+\frac{\pi^2}{2}\ -\ \pi^2\mathrm{cotgh}(\frac{n\pi^2}{\theta_-})-a\pi\,\mathrm{tg}(\frac{n\pi a}{\theta_-})\mathrm{cotgh}(\frac{n\pi^2}{\theta_-})\ +$$

$$-\frac{a\theta_-}{n\pi}\ \mathrm{tg}(\frac{n\pi a}{\theta_-})-\frac{\theta_-}{\pi}\ \mathrm{cotgh}(\frac{n\pi^2}{\theta_-})\Big]+\beta\zeta\ \mathrm{sen}(\frac{\beta\zeta n\pi}{\theta_-})\Big[a\,\mathrm{tg}(\frac{n\pi a}{\theta_-})+\frac{\theta_-}{n\pi}\ +$$

$$+\ \pi\mathrm{cotgh}(\frac{n\pi^2}{\theta_-})\Big]\} \qquad (V.21)$$

A relação (V.20) obriga o quociente θ_0/θ_+ ser razão de inteiros (m/ℓ). Se essa fração for redutível, existirão também polos duplos (coincidência de polos de $\mathrm{cosecht}\theta_+$ e $\mathrm{cosecht}\theta_0$) cujo resíduo pode ser calculado por analogia com o caso anterior. A contribuição dos resíduos dos polos duplos resulta

$$\sum_{p=1}^{\infty}\frac{(-1)^{\frac{p\ell}{m}+p+1}\cos[p\pi a/m\theta_-]}{2p\ell\theta_-\ \mathrm{senh}\ (\frac{p\pi^2}{m\theta_-})\mathrm{sen}(\frac{p\pi}{m})}\ \{\cos(\frac{p\pi\beta\zeta}{m\theta_-})\,[\theta_-\mathrm{cotg}(\frac{p\pi}{m})\ +$$

$$+\ \pi\mathrm{cotgh}(\frac{p\pi^2}{m\theta_-})+\frac{m\theta_-}{p\pi}\ +\ a\ \mathrm{tg}(\frac{p\pi a}{m\theta_-})\Big]\ +\ \mathrm{sen}(p\pi\beta\zeta/m\theta_-)\,[\beta\zeta]\}(V.22)$$

onde a restrição se refere aos valores de p tais que $p/m=n/\ell=$ inteiro. A razão para essa exclusão é que quando isso acontecer o polo será de terceira ordem e já estará contado em (V.21).

Uma vez mais os termos que oscilam mais rápido são os que contêm o potencial químico e só eles é que precisam ser derivados. Nas expressões (V.22) e (V.21) haveria necessidade de fazer o limite de confinamento fraco ou forte e tudo se repete.

CAPÍTULO VI

CONCLUSÕES E SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

Em recente publicação Felderhof e Raval[22] calcularam o momento magnético de um gás de elétrons livres em campo magnético uniforme, a partir da corrente local. Para isso foi introduzido artificialmente o potencial harmônico bidimensional $V(x,y)=k/2(x^2+y^2)$ — sugerido originalmente por Darwin — que permitiu obter no limite de k indo a zero o mesmo momento magnético encontrado por Sondheimer e Wilson[17] para um gas sujeito apenas a ação do campo magnético.

Esse fato somente se verifica a temperaturas altas, quando o sistema pode ser tratado classicamente. No regime quântico entretanto, as propriedades termodinâmicas do gas são fortemente afetadas pela presença do potencial, não sendo possível reproduzir os resultados de Sondheimer e Wilson através do processo limite em que k vai a zero. Aliás, no caso da energia essa impossibilidade existe, mesmo a temperaturas altas.

As várias modificações introduzidas pelo potencial dão ao problema uma aparência nova, tornando-se assim imprescindível o seu estudo independente e completo. Desse modo o potencial de Darwin, antes um artifício, passou a ser visto como maneira simples e eficiente de tratar sistemas confinados. É claro que complicações foram acrescentadas (a simetria de translação foi quebrada) mas no final uma situação nova — e que pode eventualmente ser de interesse para físicos de plasmas ou astrofísicos — foi resolvida.

A modificação da susceptibilidade estacionária sem perda da relação 3:1 entre as partes para e diamagnética, e o aparecimento de termos na susceptibilidade oscilatória periódicos com o campo são características marcantes da presença do confinamento bidimensional.

Quando o sistema foi confinado igualmente nas três

direções verificou-se uma acentuada semelhança (a temperaturas altas) com o caso anteriormente estudado, indicando que no regime clássico o gas não deve ser muito sensível ao tipo de confinamento. Por exemplo chegou-se a conclusão que o gas, nesse regime, roda como um todo em torno do eixo paralelo ao campo, nas duas situações.

Uma extensão interessante desse trabalho será verificar se esse fato é independente do regime de degenerescência. Uma boa medida será calcular o propagador degenerado[31] a T=0 conforme a transformada abaixo indicada

$$\rho(\vec{r}'\vec{r}\varepsilon_F) = \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} e^{\beta\varepsilon_F}\, C(\vec{r}'\vec{r}\beta)\, d\beta \qquad (VI.1)$$

onde ε_F é a energia de Fermi e $C(\vec{r}'\vec{r}\beta)$ é o propagador canônico calculado no capítulo II. Calculado $\rho(\vec{r}'\vec{r}\beta)$ torna-se possível encontrar a corrente bem como incluir efeitos de interação coulombiana.

Outra questão interessante deve ser o estudo da influência do potencial de Darwin nas propriedades termodinâmicas do gas de Bose em campo magnético uniforme. Sabe-se que o campo destroe a condensação, mas por outro lado o potencial harmônico atribue a um ponto do sistema (a origem) propriedades inteiramente novas, e se por ventura a densidade nesse ponto divergir tem-se uma forte indicação da existência de condensação, conforme Rehr e Mermin[32] afirmam.

APÊNDICE - A
FUNÇÃO DE PARTIÇÃO COM SPIN

Quando as partículas, sob a ação do campo magnético, tiverem spin, então os níveis de energia (sobre os quais é feita a soma para encontrar a função de partição) dependerão de mais um número quântico designado por n. Assim a nova função de partição será

$$Z(\beta) = \sum_i e^{-\beta E_i} = Z_0 \sum_{n=-s}^{s} e^{\beta\mu Bgn} \qquad (A.1)$$

onde Z_0 é a parte orbital e o restante leva em conta efeitos de spin. Essa última contribuição está sendo calculada agora por

$$Z_{spin} = \sum_{n=-s}^{s} e^{\beta\mu Bgn} = e^{-\beta\mu Bgs} \sum_{n=0}^{2s} e^{\beta\mu Bgn} \qquad (A.2)$$

Com essa mudança no domínio de valores de n o somatório torna-se

$$S=1+x+x^2+\ldots+x^n \qquad (A.3)$$

onde $x=e^{\beta\mu Bg}$. Um artifício simples para encontrar S consiste de multiplicar (A.3) por x. $xS=x+x^2+\ldots+x^{n+1}$. É óbvio que

$$xS-S=x+x^2+\ldots+x^n+x^{\ +1}-1-x-x^2-\ldots-x^n \qquad (A.4)$$

e daí

$$(x-1)S=x^{n+1}-1 \qquad (A.5)$$

ou ainda

$$S=\frac{(x^{n+1}-1)}{(x-1)} \qquad (A.6)$$

Voltando às variáveis originais, tem-se

$$Z_{spin} = e^{-\beta\mu Bgs} \left\{ \frac{e^{\beta\mu Bg(2s+1)} - 1}{e^{\beta\mu Bg} - 1} \right\} \qquad (A.7)$$

Multiplicando numerador e denominador por $e^{-\beta\mu Bg/2}$

$$Z_{spin} = \frac{e^{-\frac{\beta\mu Bg}{2}(2s+1)} \left[e^{\beta\mu Bg(2s+1)} - 1 \right]}{e^{\beta\mu Bg/2} - e^{-\beta\mu Bg/2}} \qquad (A.8)$$

e lembrando que

$$\frac{e^{-y}(e^{2y}-1)}{2} = \frac{e^{y}-e^{-y}}{2} = \text{senh } y \qquad (A.9)$$

chega-se a

$$Z_{spin} = \frac{\text{senh}\left[(2s+1)\beta\mu Bg/2\right]}{\text{senh}\left[\beta\mu Bg/2\right]} \qquad (A.10)$$

Aplicando ao caso do eletron (s=1/2) imediatamente se obtém

$$Z_{spin}(s=1/2) = 2 \cosh\left[\beta\mu Bg/2\right] \qquad (A.11)$$

APÊNDICE -B

FUNÇÃO DE PARTIÇÃO DO GAS DE ELETRONS CONFINADO POR POTENCIAL HARMÔNICO BIDIMENSIONAL

A hamiltoniana para o problema em estudo é

$$H=\frac{p^2}{2m}+\omega_L(xp_y-yp_x)+\frac{m\Omega_L^2}{2}(x^2+y^2) \qquad (B.1)$$

e pode ser diagonalizada com a introdução de operadores

$$a_1=\frac{1}{2}\left(\frac{m\Omega_L}{\hbar}\right)^{1/2}(x-iy)+\frac{i}{2(m\hbar\Omega_L)^{1/2}}(p_x-ip_y) \qquad (B.2)$$

e

$$a_2=\frac{1}{2}\left(\frac{m\Omega_L}{\hbar}\right)^{1/2}(x+iy)+\frac{i}{2(m\hbar\Omega_L)^{1/2}}(p_x+ip_y) \qquad (B.3)$$

que permitem escrever

$$x+iy=\left(\frac{\hbar}{m\Omega_L}\right)^{1/2}(a_1^\dagger+a_2) \qquad (B.4)$$

$$p_x+ip_y=i(m\hbar\Omega_L)^{1/2}(a_1^\dagger-a_2) \qquad (B.5)$$

levando a

$$H=\hbar\omega_+(a_1^\dagger a_1+\frac{1}{2})+\hbar\omega_-(a_2^\dagger a_2+\frac{1}{2})+\frac{p_z^2}{2m} \qquad (B.6)$$

Os auto-valores de (B.1) são facilmente encontrados

$$E(n_+,n_-,k_z)=\hbar\omega_+(n_++\frac{1}{2})+\hbar\omega_-(n_-+\frac{1}{2})+\frac{\hbar^2k_z^2}{2m} \qquad (B.7)$$

onde

$$\omega_{\pm} = (\Omega_L \pm \omega_L). \qquad (B.8)$$

Em consequência disso a função de partição pode ser calculada como soma dos fatores de Boltzmann ($e^{-\beta E_n}$), com E_n dados por (B.7)

$$Z(\beta) = \frac{L}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk_z \sum_{n_+,n_-=0}^{\infty} e^{-\beta[\hbar\omega_+(n_+ + \frac{1}{2}) + \hbar\omega_-(n_- + \frac{1}{2}) + \frac{h^2k_z^2}{2m}]} =$$

$$= (\frac{L}{\lambda})(\frac{e^{-\beta\hbar\omega_+/2}}{1-e^{-\beta\hbar\omega_+}})(\frac{e^{-\beta\hbar\omega_-/2}}{1-e^{-\beta\hbar\omega_-}}) = (\frac{L}{2\lambda}) \frac{1}{2\text{senh}(\beta\hbar\omega_+/2)\text{senh}(\beta\hbar\omega_-/2)}$$

(B.9)

O uso da identidade trigonométrica

$$2\text{senh}[\frac{\beta\hbar\omega_+}{2}]\text{senh}[\frac{\beta\hbar\omega_-}{2}] = \cosh\beta E - \cosh\beta\varepsilon \qquad (B.10)$$

onde $E=\hbar\Omega_L$ e $\varepsilon=\hbar\omega_L$, deixa escrever a função de partição como

$$Z(\beta) = (\frac{L}{2\lambda}) \frac{1}{\cosh\beta E - \cosh\beta\varepsilon} \qquad (B.11)$$

APÊNDICE- C
CONDIÇÃO SOBRE O POTENCIAL QUÍMICO PARA UTILIZAÇÃO DO MÉTODO

O que se pretende aqui é encontrar a relação a ser satisfeita pelo potencial químico, campo magnético e intensidade do confinamento para que se possa fechar o contorno de Bronwich pela direita (ou esquerda). Para isso é preciso estudar o comportamento do módulo da integral

$$\frac{1}{2\pi i}\int \frac{L\pi}{2\lambda}\frac{e^{\beta\zeta t}\cosh(at)\,dt}{t^{3/2}\,\mathrm{sen}\pi t\,\mathrm{senh}t\theta_+\,\mathrm{senh}t\theta_-} \qquad (C.1)$$

ao longo do arco BCA (ou BD-CA) conforme figuras, extraindo assim a condição para que ele vá a zero à medida em que $\underline{R}$ se tornar arbitrariamente grande.

Denotando o número complexo $\underline{t}$, pelo seu módulo (o próprio $\underline{R}$) e seu argumento (ϕ)

$$t=Re^{i\phi}= R(\cos\phi+i\,\mathrm{sen}\phi) \qquad (C.2)$$

e majorando cada termo do integrando conforme abaixo

$$\text{a)}\quad |\mathrm{cosec}\pi t|\leq C_1\, e^{-\pi R|\mathrm{sen}\phi|} \qquad (C.3)$$

$$\text{b)}\quad |t^{-3/2}| = R^{-3/2} \qquad (C.4)$$

$$\text{c)}\quad |e^{\beta\zeta t}|\leq C_2\, e^{\beta\zeta R\cos\phi} \qquad (C.5)$$

$$\text{d)}\quad |\mathrm{cosech}t\theta_+|<C_3\, e^{-\theta_+ R|\cos\phi|} \qquad (C.6)$$

$$\text{e)}\quad |\mathrm{cosech}t\theta_-|<C_4\, e^{-\theta_- R|\cos\phi|} \qquad (C.7)$$

$$\text{f)}\quad |\cosh at|<C_5\, e^{aR|\cos\phi|} \qquad (C.8)$$

ficamos com

$$\frac{L}{4\lambda}\int_{-\pi/2}^{\pi/2}\frac{C_1C_2C_3C_4C_5}{R^{1/2}}\exp\{[a-\theta_+-\theta_-]R|\cos\phi|+\beta\zeta R\cos\phi-\pi R|\operatorname{sen}\phi|\}d\phi \tag{C.9}$$

Como o seno aparece em módulo e o cosseno é positivo no intervalo de integração, a exponencial é reescrita como

$$e^{AR\left\{\frac{(\beta\zeta-\theta_+-\theta_-+a)}{A}\cos\phi-\frac{\pi}{A}\operatorname{sen}\phi\right\}} \tag{C.10}$$

onde $A=\sqrt{(\beta\zeta-\theta_+-\theta_-+a)^2+\pi^2}$, é um fator de normalização que permite chamar

$$\begin{cases}\dfrac{\beta\zeta-\theta_+-\theta_-+a}{A}=\operatorname{sen}\alpha\\[2ex] -\dfrac{\pi}{A}=\cos\alpha\end{cases} \tag{C.11}$$

A integral (C.9) passou a ser

$$\frac{2L}{4\lambda}C_1C_2C_3C_4\int_0^{\pi/2}\exp\{AR[\operatorname{sen}(\alpha+\phi)]\}\frac{d\phi}{R^{1/2}} \tag{C.12}$$

e para que ela vá a zero há necessidade de

$$\operatorname{sen}(\alpha+\phi)\leqslant 0 \tag{C.13}$$

ou seja

$$-\pi-\phi\leqslant\alpha\leqslant-\phi \tag{C.14}$$

Como ϕ varia de 0 a $\pi/2$ conclui-se que α deve obedecer

$$-\pi \leqslant \alpha \leqslant -\pi/2 \qquad (C.15)$$

isto é,

$$\operatorname{sen}\alpha \leqslant 0 \qquad \text{e} \qquad \cos\alpha \leqslant 0 \qquad (C.16)$$

A última condição obviamente se verifica, mas a primeira exige que

$$\beta\zeta - \theta_+ - \theta_- + a \leqslant 0 \qquad (C.17)$$

que após a substituição de θ_+, θ_- e a pelos seus respectivos valores leva a

$$\zeta \leqslant \hbar(\Omega_L - \omega_L) \qquad (C.18)$$

O mesmo procedimento permite concluir que para fechar o contorno pela esquerda é necessário que o potencial químico satisfaça

$$\zeta \geqslant \hbar(\omega_L - \Omega_L) \qquad (C.19)$$

Essas condições reproduzem aquelas já determinadas no caso de haver unicamente o campo magnético (quando se faz o limite de $\omega_0 \to 0$) atuando sobre os eletrons.

APÊNDICE-D
ENERGIA NO REGIME CLÁSSICO

Neste secção calcula-se a energia média por partícula para o caso livre (k=0) e confinado no limite em que k→0. Não se leva em conta efeitos de spin. Para o caso de elétrons em campo magnético uniforme a função de partição é (veja Sondheimer e Wilson)

$$Z(\beta) = \frac{V}{\lambda^3} \frac{\beta\hbar\omega_L}{\operatorname{senh}\beta\hbar\omega_L} \tag{D.1}$$

A energia média será

$$\langle H\rangle_W = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} = \frac{1}{2\beta} + \hbar\omega_L \operatorname{cotgh}\beta\hbar\omega_L \tag{D.2}$$

Para o caso de eletrons confinados pelo potencial harmônico a energia média de acordo com Felderhof e Raval é

$$\langle H\rangle_F = \frac{1}{2\beta} + \frac{E\operatorname{senh}\beta E - \operatorname{senh}\beta\varepsilon}{\cosh\beta E - \cosh\beta\varepsilon} \tag{D.3}$$

para k≠0. Basta fazer o limite dessa expressão para notar que

$$\lim_{k\to 0} \langle H\rangle_F = \frac{1}{2\beta} + \frac{1}{\beta} + \hbar\omega_L \operatorname{cotgh}\beta\hbar\omega_L = \frac{3}{2\beta} + \hbar\omega_L \operatorname{cotgh}\beta\hbar\omega_L \tag{D.4}$$

a energia não assume, pelo processo de limite o valor conhecido para o caso em que desde o início k=0.

Aliás o resultado (D.4) pode ser atingido partindo da função de partição já aproximada e calculando

$$\langle H\rangle_{k\to 0} = -\frac{\partial \ln}{\partial \beta} Z_{k\to 0} = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln\left\{\frac{L\ \beta\hbar\omega_L}{\lambda \operatorname{senh}\beta\hbar\omega_L (\beta\hbar\omega_o)^2}\right\}$$

$$\langle H\rangle_{k\to 0} = \frac{3}{2\beta} + \hbar\omega_L \operatorname{cotgh}\beta\hbar\omega_L \tag{D.5}$$

BIBLIOGRAFIA

(1) Bohr,N. (1911) Dissertação, Copenhagen.

(2) Leeuwen,J.H.van (1919) Dissertação, Leiden.(1921) J.de Phys. 2,361.

(3) Wagner,D.(1974) "Introduction to the theory of magnetism" . Cap.I, pag.3.

(4) Pauli,W.(1928), Z.Physik.41,87.

(5) Frenkel,J.(1928). Z.Physik.49,31.

(6) Bloch,F.(1929). Z.Physik.53,215.

(7) Landau,L.(1930).Z.Physik.64,629.

(8) Landau,L.(1961). "Mecanique Quantique", HIR, pag.496.

(9) Messiah,A.(1958). "Quantum Mechanics",(John Wiley & Sons , Inc.),pag.432.

(10) de Haas,W.J. e Alphen, P.M.van (1930). Leiden Comm.208d,212a.

(11) de Haas,W.J. e Alphen,P.M.van (1932). Leiden Comm.220d.

(12) Peierls,R.(1933). Z.Physik.81,186.

(13) Shoenberg,D.(1939), Proc.Royal Soc.A 170, 341 (apêndice).

(14) Wagner,D.(1974), "Introduction to the theory of magnetism", Cap.I, pag.25.

(15) Kittel,C.(1971), "Introduction to Solid State Physics", pag. 727.

(16) Akhiezer,A.(1939), Dakl Akad.Nauk SSSR 23, 874.

(17) Sondheimer,E.H. e Wilson,A.H.(1951), Proc.Roy.Soc., A210, 173.

(18) Rummer,Y.B.(1948),J.Exp.Theor.Phys.USSR 18,1081.

(19) Rummer,Y,B.(1948),J.Exp.Theor.Phys.USSR 19,757.

(20) Dingle,R.B.(1951),Proc.Roy.Soc.A 211, 500 e 517.

(21) Vleck,J.H.van(1957), Nuovo Cim.Supp.6, 857.

(22) Felderhof,B.U. e Raval,S.P.(1975) Physica 82A ,151.

(23) Darwin,C.G.(1930).Proc.Camb.Phil.Soc.27,86.

(24) Grandy,W.T. e Rosa,S.G.(1973),Rev.Bras.de Física,3, 537.

(25) May,R.M.(1965) J.Math.Phys.6,1462.

(26) Schafroth,M.R.(1955) Phys.Review 100,463.

(27) Isihara,A.;Tsai,J. e Wadati,M.(1971) Physical Review A3,990.

(28) Gradshteyn,I.S. e Ryzhik,I.M.(1965), Table of Integral, Series and Products (Academic Press, New York).

(29) Hebborn,J.E. e March,N.H.(1970) Adv.Phys.19,175.

(30) Titchmarsh,E.C.- The Theory of functions . New York, 1950.

(31) March,N.H. e Murray,A.M.(1960) Physical Review 120,830.

(32) Rehr,J.J. e Mermin,N.D.(1970) Physical Review B,1,3160.