



UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS

DEPARTAMENTO DE FÍSICA

**Sistemas eletrônicos em duas dimensões: desordem  
e resposta dinâmica**

Cláudio José da Silva

São Carlos

2009

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS

DEPARTAMENTO DE FÍSICA

**Sistemas eletrônicos em duas dimensões: desordem  
e resposta dinâmica**

**Cláudio José da Silva**

Tese submetida ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal de São Carlos, como parte dos requisitos para a obtenção do Título de Doutor em Física.

Orientador:

Prof. Dr. José Pedro Rino

São Carlos

2009

**Ficha catalográfica elaborada pelo DePT da  
Biblioteca Comunitária/UFSCar**

S586se

Silva, Cláudio José da.

Sistemas eletrônicos em duas dimensões : desordem e resposta dinâmica / Cláudio José da Silva. -- São Carlos : UFSCar, 2009.

107 f.

Tese (Doutorado) -- Universidade Federal de São Carlos, 2009.

1. Elétrons em filme de hélio. 2. Dinâmica molecular. 3. Desordem. 4. Sistema de dimensionalidade reduzida. 5. Condutividade elétrica. I. Título.

CDD: 530.4 (20<sup>a</sup>)

**Cláudio José da Silva**

Tese de Doutorado submetida à  
Coordenação do Programa de Pós-  
Graduação em Física, da Universidade  
Federal de São Carlos, como requisito  
parcial para a obtenção do título de  
Doutor em Ciências.

Aprovado em 28 de Janeiro de 2009.

**BANCA EXAMINADORA**

---

*Prof. Dr. José Pedro Rino*  
*Universidade Federal de São Carlos - DF*

---

*Prof. Dr. Alex Antonelli*  
*Universidade Estadual de Campinas - IFGW*

---

*Prof. Dr. Ronald Dickman*  
*Universidade Federal de Minas Gerais - DF*

---

*Prof. Dr. Paulo Eduardo Fornasari Farinas*  
*Universidade Federal do Rio de Janeiro - IF*  
*Universidade Federal de São Carlos - DF*

---

*Prof. Dr. Nelson Studart Filho*  
*Universidade Federal de São Carlos - DF*

Dedido este trabalho à minha inspiração, *Zulma Dilamar*.

“O que prometi há sete meses, produzir um trabalho que, de acôrdo com o julgamento dos eruditos, seja elegante, impressionante e muito superior a todos os calendários anuais, eu agora apresento à Vossa Graciosa Companhia, meus nobres Lordes, um trabalho que, conquanto pequeno em âmbito e apenas o fruto de meus próprios modestos esforços, trata de um assunto maravilhoso. Se desejais maturidade – Pitágoras já tratou dêle há uns 2000 anos. Se desejais novidade – é a primeira vez que êsse assunto é apresentado a tôda a humanidade por mim. Se desejais alcance – nada é maior ou mais amplo do que o Universo. Se desejais venerabilidade – nada é mais precioso, nada é mais bonito em nosso magnífico templo de Deus. Se desejais conhecer os mistérios – nada na Natureza é, ou foi, mais recôndito. Apenas por uma única razão o meu assunto não agradará a todos, pois a sua utilidade não será aparente aos destituídos de imaginação.”  
(Trecho do livro *Mysterium Cosmographicum* (1596), de Johannes Kepler)

# Sumário

Lista de Figuras	iii
Lista de Tabelas	vii
Resumo	viii
Abstract	ix
Introdução	1
<b>1 Estados Eletrônicos Superficiais (SEE) sobre hélio líquido</b>	<b>9</b>
1.1 Introdução . . . . .	9
1.2 Estados ligados . . . . .	10
1.3 Efeito da correlação elétron-elétron . . . . .	14
1.4 A instabilidade da superfície líquida . . . . .	15
1.5 Diagrama de fase . . . . .	17
1.6 SEE sobre filmes de hélio . . . . .	19
<b>2 Transporte coletivo em meios desordenados</b>	<b>22</b>
2.1 Introdução . . . . .	22
2.2 Sistemas de arrasto . . . . .	22
2.2.1 Efeito da temperatura . . . . .	27
2.2.2 Diagrama de fase . . . . .	28
2.3 Ondas de Densidade de Carga . . . . .	30
2.4 Vórtices em supercondutores . . . . .	31
<b>3 Comportamento metal-isolante na presença de uma constricção</b>	<b>33</b>

3.1	Introdução . . . . .	33
3.2	Potencial de constricção . . . . .	36
3.3	Procedimento da simulação . . . . .	37
3.4	Configurações do estado fundamental . . . . .	44
3.5	Propriedades dinâmicas . . . . .	45
3.5.1	Condutividade . . . . .	51
3.5.2	Reorganização dinâmica . . . . .	52
3.6	Conclusões . . . . .	54
<b>4</b>	<b>Efeito da temperatura e comportamento crítico</b>	<b>55</b>
4.1	Introdução . . . . .	55
4.2	Resultados . . . . .	60
4.2.1	Leis de escala . . . . .	62
4.2.2	Universalidade . . . . .	64
4.3	Conclusões . . . . .	65
<b>5</b>	<b>Considerações finais</b>	<b>67</b>
	<b>Apêndices</b>	<b>68</b>
<b>A</b>	<b>Potencial eletrostático de uma carga imersa num meio com três dielétricos planares</b>	<b>68</b>
<b>B</b>	<b>Dinâmica Molecular</b>	<b>76</b>
B.1	Algoritmos de integração . . . . .	78
B.1.1	Algoritmo de Verlet . . . . .	79
B.1.2	Velocity Verlet . . . . .	80
B.1.3	Leap-Frog . . . . .	80
B.2	Interações de longo alcance . . . . .	81
B.2.1	Soma de Ewald . . . . .	81
B.3	Dinâmica de Langevin . . . . .	85
<b>C</b>	<b>Otimização</b>	<b>88</b>
C.1	Método Monte Carlo . . . . .	88
C.2	Simulated Annealing . . . . .	90



# Lista de Figuras

1	Dois regimes extremos de um sistema com muitos elétrons: (a) uma gota com elétrons e buracos quasi-livres no germânio, vista através da radiação de recombinação elétron-buraco [129]; (b) arranjo cristalino de elétrons na superfície do superfluido $^4\text{He}$ , visualizado através da deformação da superfície ( <i>dimples</i> ). Há milhares de elétrons em cada dimple [7]. . . . .	2
2	Diagrama esquemático do transistor Metal-Óxido-Semicondutor de efeito campo (MOSFET). Um potencial elétrico aplicado ao <i>gate</i> altera a densidade de portadores na camada de inversão, controlando, dessa forma, a corrente que passa através da <i>fonte</i> e do <i>dreno</i> . Adaptado de [42]. . . . .	3
3	Transistor de Efeito Campo Eletrônico (EFET), mostrando micro canais de hélio líquido, elétrons e eletrodos. (i) seção transversal do canal, (ii) seção transversal dos eletrodos, (iii) fotografia. A estrutura <i>comb</i> abaixo dos eletrodos fonte e dreno aumenta a capacitância, aprisionando os elétrons [43]. . . . .	3
4	(esquerda) Estrutura cristalina do $\text{K}_{0.3}\text{MoO}_3$ , conhecido como bronze azul, um dos exemplos de materiais que apresentam as Ondas de Densidade de Carga (CDW). Apesar da grande variedade de morfologias cristalinas, os materiais CDW têm uma arquitetura em comum, consistindo de cadeias moleculares fracamente ligadas. Os elétrons se movem livremente ao longo das cadeias e o movimento perpendicular a elas é quase limitado. Isto produz o caráter quasi-unidimensional necessário para a formação das CDW [117]. (direita) Em supercondutores tipo II o fluxo magnético que o atravessa torna-se quantizado em uma escala macroscópica (vórtices de Abrikosov), que formam uma rede triangular de fluxos para campos muito intensos [78] . . . . .	6
1.1	Potencial de confinamento de um elétron se movendo na superfície do hélio líquido. Adaptado de [130] . . . . .	11
1.2	Representação esquemática de um aparato experimental para a obtenção de elétrons superficiais sobre $^4\text{He}$ líquido. Os elétrons livres são produzidos por emissão térmica a partir de um filamento aquecido eletricamente. Para estabilizar e controlar a densidade de carga superficial, um campo elétrico perpendicular é aplicado por um capacitor de placas paralelas. [83] . . . . .	12

1.3	Diagrama de fase de um sistema de elétrons 2D com campo magnético nulo. As curvas sólida e tracejadas são a fronteira do sólido de Wigner para SEE em ${}^4\text{He}$ líquido e elétrons em estruturas semicondutoras, respectivamente. As linhas sólida e tracejada correspondem a $E_{th} = E_F$ para SEE e elétrons em GaAs, respectivamente. A região de densidade acessível experimentalmente para SEE no regime volumétrico é indicada pelas linhas pontilhadas. . . . .	18
1.4	Representação esquemática dos SEE sobre um filme de hélio e suas cargas imagens.	21
2.1	Resultado numérico para a posição (pontos) e as trajetórias (linhas) de um sistema de colóides num regime de fluxo plástico (a) e elástico (b). Adaptado de [95]	24
2.2	Curvas velocidade <i>versus</i> força típicas para $T = 0$ (linha cheia) e para temperatura finita (linha tracejada). O deslizamento de uma rede perfeita (linha pontilhada) também é mostrado. Pode-se distinguir três regimes principais: o <i>regime de arrasto</i> para forças bem abaixo do limiar, o regime crítico em torno da transição, e o regime de alta velocidade bem acima do limiar. [19] . . . . .	25
2.3	(a) Diagrama de fase esquemático nas variáveis <i>temperatura</i> $T$ , <i>desordem</i> $\Delta$ e <i>força aplicada</i> $f$ para sistemas de arrasto 3D. As conexões entre as várias fases dentro da região indicada com um quadrado é esquemática; (b) o mesmo que em (a), porém para $T = 0$ ; (c) o mesmo que em (a), porém para sistemas de arrasto 2D. Adaptado de [32] . . . . .	28
2.4	Estrutura da banda de energia de partícula única para os casos com (a) e sem (b) acoplamento entre elétron e fônons [117]. . . . .	30
2.5	Curva corrente-campo para um condutor CDW. Para campos elétricos menores que $E_T$ , as CDW permanecem ancoradas por impurezas. Acima de $E_T$ as CDW desancoram e deslizam em relação a rede cristalina. Estes dados são para $\text{NbSe}_3$ à 120K [117]. . . . .	31
2.6	Um fino filme supercondutor em um campo magnético $H$ perpendicular. Um supercorrente fornece a força de arrasto fazendo os vórtices se moverem [39]. . .	32
3.1	Aparato experimental do He-FET. O elétrons superficiais são gerados continuamente por filamento de tungstênio localizado acima do eletrodo E1. Para evitar que os elétrons sejam compelidos diretamente para o eletrodo de coleta E4, usa-se um colimador (collimator). O eletrodo E2 funciona como uma porta espalhadora, separando a <i>fonte</i> (E1) do <i>dreno</i> (E3). O potencial aplicado ao eletrodo E4 deve ser grande o suficiente para coletar todos os elétrons acima do <i>dreno</i> . Dessa forma, a corrente DC é medida através de E4 usando-se um eletrômetro sensível. Um <i>anel de segurança</i> é usado para evitar fluxo de elétrons para fora da estrutura E4. Os eletrodos são feitos de ouro evaporados sobre um substrato vítreo. Diferentes voltagens aplicadas aos eletrodos produzem um gradiente ao longo do plano E1-E4, o que conduz os elétrons livres até o <i>dreno</i> via <i>fonte</i> e através do canal criado por E2. Os elétrons podem ficar ancorados ao longo do canal devido a impurezas ou a rugosidade do substrato [30]. . . . .	35
3.2	Visão esquemática da forma do potencial de constricção. . . . .	36

3.3	(esquerda) O sistema atinge o equilíbrio após 6000 passos de Monte Carlo na temperatura $T = 0.02\text{K}$ . (direita) Após ser aquecido bruscamente à temperatura $T = 0.45\text{K}$ , o sistema é resfriado lentamente usando SA para atingir o estado fundamental. . . . .	43
3.4	Triangulação de Delaunay para uma rede hexagonal com 400 elétrons. Neste caso, o valor máximo da constrição é $V_0^* = 60$ , com (a) $\alpha^* = 30$ , and $\beta^* = 2$ ; (b) $\alpha^* = \beta^* = 20$ . . . . .	44
3.5	Velocidade média dos elétrons <i>versus</i> força de arrasto para simulações com dois diferentes números de passos de integração. . . . .	46
3.6	Velocidade média dos elétrons <i>versus</i> força de arrasto para três diferentes valores de densidade $n_s$ . . . . .	48
3.7	Velocidade de arrasto dos elétrons como função da força externa para alguns valores do máximo da constrição. . . . .	49
3.8	Comportamento de escala perto da transição isolante-condutor para alguns valores do máximo da constrição. . . . .	49
3.9	(esquerda) Velocidade de arrasto do elétrons como função da força externa para diferentes valores de espessura do filme. (direita) Note que para valores fixos da força externa, a velocidade (corrente) possui valor constante para o regime do hélio volumétrico e cai bruscamente para filmes finos, resultado da blindagem da interação elétron-elétron. . . . .	50
3.10	(esquerda) Velocidade de arrasto do elétrons como função da força externa para diferentes valores da constante dielétrica do substrato. (direita) Note que para valores fixos da força externa, a velocidade (corrente) diminui monotonicamente, resultado da blindagem da interação elétron-elétron. . . . .	51
3.11	Razão entre velocidade e força de arrasto <i>versus</i> força externa para (esquerda) diferentes espessuras do filme e (direta) diferentes substratos. A condutividade é não-ôhmica em uma estreita região acima do desancoramento. Note que há uma tendência para um valor constante da condutividade para valores muito grande de $F^*$ , satisfazendo a lei de Ohm. . . . .	52
3.12	Trajetoórias dos elétrons quando a força de arrasto é aumentada para um sistema com $N = 256$ , $n_s = 1.3 \times 10^{10}\text{cm}^{-2}$ , $\delta = 0.5789$ , $V_0^* = 50$ , $\alpha^* = 20$ e $\beta^* = 2$ . $f_c^* =$ (a) 1.0, (b) 10.0, (c) 50.0 and (d) 100.0. . . . .	53
4.1	Um Transistor de Único Elétron (SET) usado para detecção de elétrons aprisionados sobre hélio. Os eletrodos do lado direito um reservatório de elétrons. Este é um dos micro-dispositivos produzidos para a criação do computador quântico [43].	57
4.2	Valor crítico da força de arrasto como função da altura da constrição $V_0^*$ para dois valores fixos de temperatura, a saber, $T = 0$ (círculos) e $T = 10\text{ mK}$ (quadrados). A linha pontilhada é um ajuste com uma lei de potência. O gráfico interno mostra a velocidade de arrasto dos elétrons como função da força de arrasto para os mesmos valores de temperatura e uma constrição $V_0^* = 60$ . . . . .	58

4.3	Dependência com a temperatura do valores críticos da força de arrasto $F_c^*$ , para um constricção com $V_0^* = 60$ . gráfico interno: dependência com a temperatura da corrente $v_x^*$ em diferentes <i>voltagens</i> $F^*$ para a mesma constricção. . . . .	59
4.4	(a) Dependência com a temperatura da <i>corrente</i> para alguns valores de <i>voltagem aplicada</i> com $V_0^* = 60$ . Trajetória dos elétrons para (b) $T = 10$ mK e $F^* = 3$ , (c) $T = 10$ mK e $F^* = 150$ , e (d) $T = 40$ mK e $F^* = 150$ . . . . .	61
4.5	Comportamento de escala $v_x^* = f^{*\xi}$ da <i>corrente</i> com a <i>voltagem</i> reduzida $f^* = (F^* - F_c^*)/F_c^*$ para diferentes temperaturas e uma constricção com $V_0^* = 60$ . O gráfico interno mostra a dependência com a temperatura do expoente $\xi$ . . . . .	63
4.6	Comportamento de escala $v_x^* = f^{*\xi}$ da <i>corrente</i> com a <i>voltagem</i> reduzida $f^* = (F^* - F_c^*)/F_c^*$ para vários valores do máximo da constricção e a uma temperatura $T = 10$ mK. O gráfico interno mostra a dependência com a altura da barreira do expoente $\xi$ . . . . .	64
4.7	Dependência do expoente crítico $\xi$ com o tipo de substrato (esquerda) e a espessura do filme (direita). . . . .	65
A.1	Carga $q$ localizada num meio com três dielétricos planares. . . . .	69
B.1	Condições de contorno periódicas aplicada a caixa de simulação (no centro: partículas indicadas por pontos escuros na posições $r_j$ ), mostrando a região de <i>mínima imagem</i> para a partícula indicada (seta) na posição $\vec{r}_i$ e que contém as imagens periódicas mais próximas (partículas indicadas por pontos claros nas posições $\vec{r}_j \pm \vec{n}$ ). . . . .	82
B.2	Construção de uma soma convergente de imagens periódicas [5]. . . . .	83
B.3	Divisão da soma de cargas pontuais em duas séries rapidamente convergente de cargas tipo gaussiana [40]. . . . .	84

# Lista de Tabelas

1.1	Valores típicos de alguns parâmetros físicos em sistemas de gás de elétrons em duas dimensões. . . . .	19
1.2	Parâmetro de plasma da fronteira sólido-líquido do cristal de Wigner sobre hélio volumétrico. . . . .	20

# Resumo

Em sistemas desordenados, a intensidade do ancoramento sobre os portadores devido às impurezas ou defeitos é um dos mecanismos principais no aparecimento do comportamento isolante. Uma transição para um estado metálico deve ocorrer se um campo de arrasto externo for aplicado ao sistema. Nas últimas três décadas, tal transição em sistemas bidimensionais (2D) tem despertado muito interesse diante de fascinantes observações experimentais. Entretanto, a Física por trás de tais observações não está, até o momento, completamente entendida. Experimentos relatando comportamento não linear da condutividade e a resposta dinâmica de tais sistemas na presença de desordem motivaram várias abordagens teóricas e cálculos numéricos na busca por uma melhor compreensão destes fenômenos. Neste trabalho, estudamos, usando simulação por Dinâmica Molecular de Langevin, um sistema clássico 2D de elétrons sobre filmes de hélio líquido adsorvidos sobre um substrato sólido e submetido a um campo elétrico externo paralelo à superfície do hélio, o qual produz uma força de arrasto. Este sistema é um protótipo ideal para o gás de elétrons 2D formado em heteroestruturas semicondutoras. Além disso, elétrons sobre a superfície de hélio líquido têm sido um dos candidatos mais promissores como base para o computador quântico. Para simular um centro de ancoramento, o sistema é colocado na presença de uma barreira de potencial na forma de uma lorentziana. Em primeiro lugar, analisamos a influência da espessura do filme e do tipo do substrato na velocidade de arrasto dos elétrons como função da força externa, que está diretamente relacionada com a condutividade dc. Em segundo lugar, a dependência do desancoramento com a temperatura e intensidade da desordem foi considerada no âmbito do comportamento de escala. Nossos resultados estão em excelente acordo com vários experimentos e podem esclarecer melhor o fenômeno da resposta dinâmica em sistemas eletrônicos 2D na presença de desordem de ancoramento.

# Abstract

In disordered systems the pinning strength on the carriers due to impurities or defects is one of the most important mechanisms that produce insulator behavior. A transition to a metal phase should occur if a driving field is applied to the system. In the last three decades, such transition in two-dimensional systems has attracted much attention in light of the fascinating experimental observations. However, the physics behind these observations is at the moment not entirely understood. Experiments relating nonlinear behavior of the conductivity and the dynamical response in such systems in the presence of disorder have motivated several theoretical proposals and numerical calculations in order to establish a better understanding of these phenomena. In this work we have studied, by means of Langevin molecular dynamics simulation, a classical two-dimensional system of electrons on liquid helium films adsorbed on a solid substrate subject to an external electric field parallel to the surface of the helium, which produces a driving force. This system is an ideal prototype for the two-dimensional electron gas formed on semiconductor heterostructures. Also, electrons floating on a liquid helium surface have been one of the most promising candidates as a base for quantum computing. To simulate a pinning center we constrain our system by imposing an in-plane potential with lorentzian shape. Firstly, we analyze the influence of the film thickness and the kind of substrate on the drift electron velocity as a function of the external driven force, which is directly related with the dc conductivity. Secondly, the dependence with temperature and disorder strength of the depinning was considered in the extent of the scaling behavior. Our results are in excellent agreement with several experiments and should elucidate better the dynamical response phenomena in 2D electronic systems in the presence of pinning disorder.

# Introdução

O século passado foi testemunha de algumas das maiores revoluções na história da ciência: particularmente em física, a *mecânica quântica* roubou a cena face a *mecânica clássica*; a *teoria da relatividade* mudou o senso comum sobre espaço e tempo; a *teoria microscópica da matéria* revelou um mundo jamais visto; a *eletrônica* do estado sólido deu início a *era da informação*. Em meio a todas estas revoluções, um personagem esteve sempre numa posição de destaque: o *elétron*. Desde sua descoberta por J. J. Thomsom em 1897 este constituinte da matéria revelou características impressionantes. Por exemplo, uma corrente elétrica em um fio metálico é nada além do que um fluxo de um conjunto muito grande de elétrons independentes. Tal afirmação é oriunda da teoria clássica de Drude para a condução eletrônica, de 1900. Em contrapartida, mesmo sendo possível descrever certos comportamentos (magnéticos e térmicos) dos metais usando a hipótese de elétrons independentes, a descoberta da *supercondutividade* por Kamerlingh Onnes (1911) confirmava o fato de que as propriedades de um sistema de muitos elétrons possuem mudanças drásticas quando consideram-se elétrons interagentes. O comportamento coletivo dos elétrons pode manifestar-se em estruturas ordenadas espacialmente (ver Figura (1)), em estruturas ordenadas magneticamente, etc. Além disso, as fases coletivas são caracterizadas por propriedades de condução elétrica anômala, como a já mencionada supercondutividade e a condutividade Hall quantizada fracionalmente.

Estas e outras descobertas deram origem a um importante ramo da Física, a *Física da Matéria Condensada*. Por sua vez, este é o estudo de um conjunto muito grande de

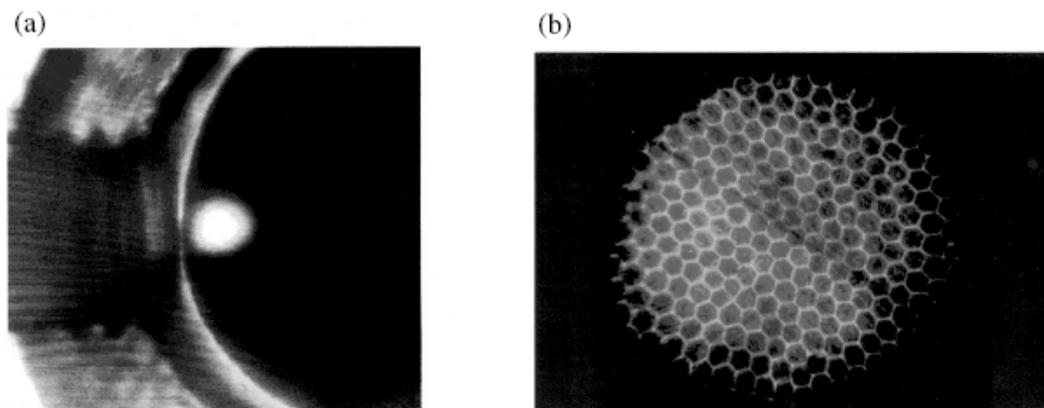


Figura 1: Dois regimes extremos de um sistema com muitos elétrons: (a) uma gota com elétrons e buracos quasi-livres no germânio, vista através da radiação de recombinação elétron-buraco [129]; (b) arranjo cristalino de elétrons na superfície do superfluido  $^4\text{He}$ , visualizado através da deformação da superfície (*dimples*). Há milhares de elétrons em cada dimple [7].

partículas aglomeradas de tal forma que o efeito que cada uma produz nas outras não pode ser desprezado. Este é um campo de estudo fascinante, pois mesmo que todas as partículas obedeçam leis físicas conhecidas, não há uma forma analítica para resolver as equações que descrevem todo o conjunto interagente. Dessa forma, nem sempre é possível saber o que haverá de novo neste campo, e há sempre questões novas que surpreendem os físicos.

Um exemplo interessante neste âmbito é o confinamento de elétrons em uma região do espaço tal que seja permitido que se movam apenas em duas direções, conhecido como *gás de elétrons bidimensional* (2DEG). De forma mais clara, suponhamos que  $10^{10}$  elétrons possam ser aglomerados em um centímetro quadrado de área e que todos se repelem mutuamente. Apesar de ser possível escrever uma equação que descreva todas as interações entre os elétrons, com  $10^{10}$  partículas torna-se muito difícil resolvê-las. Entretanto, a comunidade científica ficou surpresa quando foi verificado, sob certas condições, envolvendo a aplicação de um campo magnético perpendicular ao 2DEG, que os elétrons arranjavam-se de uma forma particular (de acordo com o quanta de fluxo magnético que passa através da camada de elétrons) tal que reduzia a energia total do sistema. Este fenômeno surpreendente foi chamado de *Efeito Hall Quântico* [103].

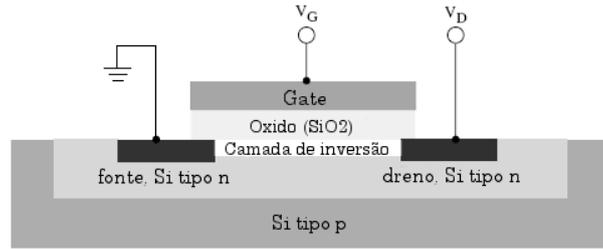


Figura 2: Diagrama esquemático do transistor Metal-Óxido-Semicondutor de efeito campo (MOSFET). Um potencial elétrico aplicado ao *gate* altera a densidade de portadores na camada de inversão, controlando, dessa forma, a corrente que passa através da *fonte* e do *dreno*. Adaptado de [42].

O estudo de sistemas de baixa dimensionalidade é um dos assuntos centrais da Física da Matéria Condensada moderna e tem crescido rapidamente. Sistemas eletrônicos em duas dimensões (2D) tornaram-se cruciais tanto para a tecnologia quanto para o desenvolvimento de pesquisa fundamental. Só para citar os mais proeminentes exemplos, têm-se o gás de elétrons 2D formado na camada de inversão (ver Figura (2)) entre estruturas semicondutoras (MOSFET) e elétrons sobre a superfície de substratos criogênicos [7, 83]. O primeiro é de extrema importância para a compreensão de fenômenos como efeito Hall quântico fracionário [119] e transições metal-isolante 2D (MIT) [1]. O segundo exemplo é um forte candidato no desenvolvimento de *bits* quânticos fortemente correlacionados para a construção do computador quântico (ver Figura (3)). Platzman e Dykman [93] propuseram que elétrons individuais localizados na superfície do hélio líquido poderiam ser usados

como *qubits* e após isso várias tentativas de desenvolver uma microeletrônica capaz de realizar tal proposta foram feitas [44, 45]. No mais, este sistema consiste um exemplo único e fornece um modelo idealizado para pesquisa teórica e experimental devido a sua

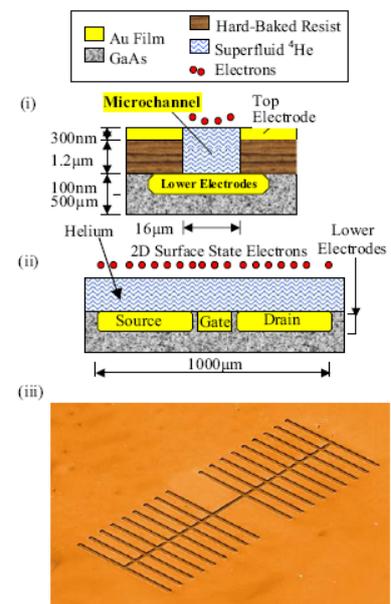


Figura 3: Transistor de Efeito Campo Eletrônico (EFET), mostrando micro canais de hélio líquido, elétrons e eletrodos. (i) seção transversal do canal, (ii) seção transversal dos eletrodos, (iii) fotografia. A estrutura *comb* abaixo dos eletrodos fonte e dreno aumenta a capacitância, aprisionando os elétrons [43].

---

excepcional uniformidade e pureza.

Em particular, *elétrons superficiais* (SE) ligados à superfície livre do hélio superfluido desperta interesse especial devido a uma combinação de propriedades um tanto não usuais. Este sistema foi pela primeira vez investigado teoricamente e realizado experimentalmente por volta do ano de 1970 [83]. Um potencial de confinamento surge devido ao fato de que um elétron localizado na fase gasosa, acima do hélio, é atraído pela superfície líquida por forças de polarização com fraca interação de longo alcance. Por outro lado, os elétrons são impedidos de entrar no líquido pela forte repulsão de longo alcance resultante das propriedades de gás nobre que possui o  $^4\text{He}$ .

Uma das mais interessantes diferenças entre SE e o 2DEG presente em MOSFETs ou em heteroestruturas semicondutoras é que os SE estão no regime *não-degenerado*. Isto pode ser entendido como segue: com uma massa efetiva igual à massa do elétron livre e uma baixa densidade por partícula os SE possuem uma temperatura de Fermi de alguns décimos de mK ou menos. Tal temperatura é muito pequena quando comparada com as temperaturas entre 0.1 e 1K, sendo este o intervalo onde normalmente são realizados experimentos neste sistema. Outra forma de ver isto é que a distância média entre os elétrons é muito maior do que o comprimento de onda térmico de um único elétron.

SE existem em um meio extremamente limpo, simples e bem definido. Todas as impurezas são excluídas, não há uma rede atômica que o envolve e o movimento 2D de um único elétron ao longo da superfície  $^4\text{He}$  é bem próximo de um elétron livre no vácuo. As únicas interações relevantes consistem em espalhamento pelas oscilações da superfície (em sua forma quantizada) do líquido, que é análogo ao espalhamento por fônons em sólidos, e o espalhamento por átomos de vapor de  $^4\text{He}$  na fase gasosa, que podem ser representados, quase de forma ideal, como centros de espalhamento pontuais e aleatórios. Este último é o mecanismo de espalhamento dominante a temperaturas acima de 1K.

Em um 2DEG de uma estrutura semicondutora, as propriedades dielétricas do subs-

---

trato que envolve o sistema reduzem fortemente o alcance da interação coulombiana. Além disso, a energia cinética é comparativamente alta, dadas as densidades tipicamente ordens de grandeza maiores, o que implica em energias de Fermi altas. Por sua vez, nos SE a interação coulombiana é quase pura e na maioria dos casos muito mais forte do que a energia cinética, que neste caso é apenas energia térmica. A razão entre a energia potencial média e a energia cinética pode alcançar valores muito altos nos SE, mais de cem vezes a temperaturas por volta de 1K, e isto afeta fortemente o comportamento do sistema.

Provavelmente o efeito mais famoso resultante da forte interação coulombiana é a solidificação de um 2DEG em um cristal com estrutura triangular, estrutura esta discutida pela primeira vez por Eugene Wigner em 1934 para sistemas eletrônicos 3D [125]. Em sua idéia original, isto ocorreria quando a energia cinética dos elétrons se tornasse desprezível comparada com a energia potencial. É de se surpreender que a previsão de Wigner foi feita quando a teoria de elétrons não interagentes para os metais fornecia resultados relativamente satisfatórios para algumas questões essenciais. Tal estrutura é conhecida como *sólido de Wigner* (WS). Elétrons superficiais sobre hélio líquido foi o primeiro sistema onde foi observada experimentalmente esta transição [47]. Neste caso, a fase cristalina é obtida aumentando a densidade por partícula (mantendo a temperatura fixa), isto resulta num aumento da interação coulombiana, que sobrepõe-se às flutuações térmicas. Por essa razão, a formação do WS na superfície do hélio é uma transição de fase clássica. Os efeitos quânticos são desprezíveis devido ao fato de a separação média entre os elétrons ser bem maior do que a comprimento de onda do elétron. Por outro lado, em estruturas semicondutoras, onde o 2DEG está no regime degenerado (alta densidade), a fase cristalina é formada reduzindo-se a densidade e a transição é puramente quântica. Aqui, a interação compete com as flutuações quânticas, ou seja, com a energia de Fermi, que por sua vez depende muito mais da densidade do que a energia coulombiana.

Uma das características marcantes de sistemas interagentes surge quando estes são

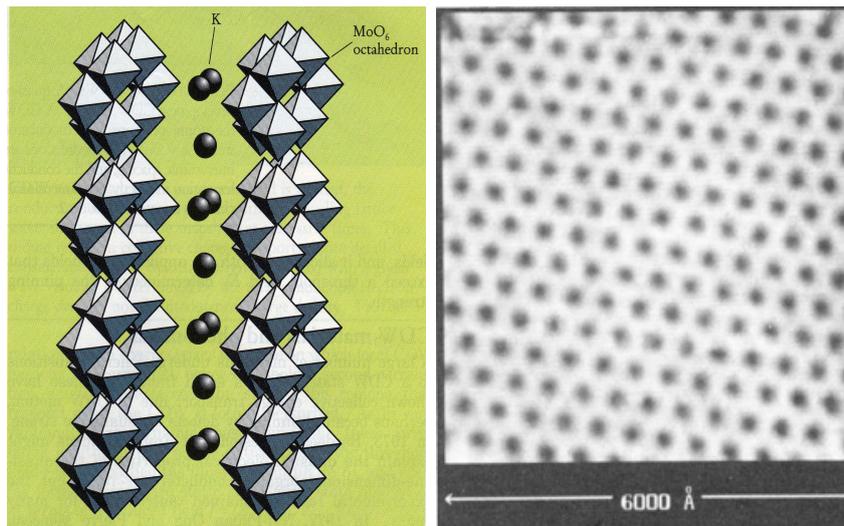


Figura 4: (esquerda) Estrutura cristalina do  $K_{0.3}MoO_3$ , conhecido como bronze azul, um dos exemplos de materiais que apresentam as Ondas de Densidade de Carga (CDW). Apesar da grande variedade de morfologias cristalinas, os materiais CDW têm uma arquitetura em comum, consistindo de cadeias moleculares fracamente ligadas. Os elétrons se movem livremente ao longo das cadeias e o movimento perpendicular a elas é quase limitado. Isto produz o caráter quasi-unidimensional necessário para a formação das CDW [117]. (direita) Em supercondutores tipo II o fluxo magnético que o atravessa torna-se quantizado em uma escala macroscópica (vórtices de Abrikosov), que formam uma rede triangular de fluxos para campos muito intensos [78]

compelidos por uma força externa, dando origem à uma variedade de fenômenos complexos. Estes fenômenos são resultados de uma complicada competição entre periodicidade, elasticidade, desordem, não linearidade e *arrasto*<sup>1</sup>. Obter uma descrição quantitativa da *dinâmica de arrasto* é um problema muito importante abordado em todo o contexto da Física da Matéria Condensada [51]. Possivelmente o único meio de se estudar este fenômeno é aplicando-se uma força externa ao sistema e analisando-se seus fenômenos de transporte característicos, podendo assim, obter-se uma conexão com resultados experimentais. Exemplos de sistemas que formam estruturas periódicas e que são de grande importância para o estudo dessa dinâmica são Ondas de Densidade de Carga (CDW) [50, 117], redes de vórtice em supercondutores tipo II [78] (veja Figura (4)), cristais de Wigner [60], bolhas magnéticas [56], propagação de chamas [94], fluxo de líquidos através de meios porosos [65], etc. Entretanto, para uma boa compreensão dos fenômenos de transporte neste sistemas é necessário entender a conexão entre seus graus

<sup>1</sup>Tradução livre para o termo em inglês *driving*.

---

de liberdade internos e a desordem.

Normalmente, a desordem é classificada como *fixa* (“quenched”) ou *móvel* (“annealed”). *Desordem fixa* refere-se às imperfeições cujo movimento é muito pequeno comparado com qualquer escala de tempo relevante do problema em questão. Desordem móvel refere-se ao caso oposto. O efeito da desordem fixa tem sido objeto de intenso estudo durante as últimas décadas e é fácil entender porque: todos os materiais reais contém imperfeições, por exemplo, discordâncias, vacâncias, interstícios, etc. Isto produz um efeito drástico nas propriedades físicas de transporte e mecânicas. Normalmente, a desordem fixa destrói a ordem espacial de longo alcance, *ancorando*<sup>2</sup> o sistema. A aplicação de uma força externa suficientemente intensa *desancora-o* e este começa a se mover. Por sua vez, efeitos deste tipo de desordem são efetivamente reduzidos por ruído térmico.

Uma tarefa formidável da Física da Matéria Condensada é determinar os efeitos da desordem fixa em estruturas periódicas. Uma das questões importantes é: dependendo do grau e da intensidade da desordem, o ancoramento pode induzir distorções elásticas contínuas ou produzir efeitos topológicos, por exemplo, discordâncias e vórtices. Apesar do primeiro poder ser tratado com boa aproximação usando a teoria da elasticidade [32], o último necessita um tratamento diferente já que os defeitos topológicos não são distorções contínuas, como no caso elástico, e não podem ser tratados via teoria perturbativa. Mesmo usando os modelos mais simplificados [2, 76], as deformações plásticas produzem um comportamento inesperado, tornando o tratamento via Campo Médio inadequado.

Por fim, mesmo havendo uma enorme quantidade de resultados analíticos, experimentais e numéricos sobre a dinâmica de sistemas desordenados [99], existem muitas questões abertas sobre os efeitos da desordem no comportamento crítico quando o sistema é desancorado. Um ponto importante é: diante do fato de que estes efeitos são considerados *fenômenos críticos dinâmicos* e do grande número de resultados experimentais e numéri-

---

<sup>2</sup>Durante toda a tese, usaremos o verbo *ancorar* como tradução livre do termo em inglês *pinning*. Consequentemente, *desancorar* será usado como tradução de *depinning*.

---

cos para os expoentes críticos (que caracterizam tal transição quando o desancoramento é plástico), há a necessidade por uma busca da universalidade nos resultados, já que os valores encontrados para estes expoentes variam numa faixa considerável.

Diante de tudo isto, o objetivo principal deste trabalho é estudar em detalhes a *resposta dinâmica*, a uma força externa, de um cristal de elétrons localizado na superfície de um filme de hélio líquido de espessura  $d$  adsorvido num substrato sólido de constante dielétrica  $\epsilon_s$ . O cristal está sujeito a um potencial de constrição no formato de uma Lorentziana e que produz uma desordem local no sistema. O efeito da força de arrasto, o comportamento isolante-condutor, a influência da espessura do filme e do tipo do substrato são cuidadosamente examinados. Além disso, o efeito da temperatura e da intensidade da desordem são também analisados, revelando características muito interessantes da dinâmica. Todo o estudo é feito usando simulação computacional via Dinâmica Molecular de Langevin e os resultados obtidos são comparados com uma vasta literatura experimental e analítica.

Este trabalho está organizado como segue: No capítulo 1 é apresentada uma revisão das propriedades do sistema de elétrons sobre hélio líquido, revelando o porquê deste sistema ser tão interessante. No capítulo 2, é feita uma revisão das propriedades do fenômeno de transporte coletivo em meios desordenados, tema principal deste trabalho. No capítulo 3, os primeiros resultados para o comportamento isolante-condutor e influências da espessura do filme e do substrato, são mostrados para o caso da temperatura nula. Tais resultados foram publicados em [29]. No capítulo 4, é estudado o efeito da temperatura e da intensidade da desordem na resposta dinâmica do sistema. É feita também uma análise da influência dos parâmetros que definem o sistema nas *leis de escala*, que por sua vez, definem o comportamento crítico. Os resultados deste capítulo foram submetidos para publicação no *Physical Review Letters* [28]. Por fim, no capítulo 5 são apresentadas as conclusões gerais do trabalho.

# Capítulo 1

## Estados Eletrônicos Superficiais (SEE) sobre hélio líquido

### 1.1 Introdução

Quando deposita-se partículas carregadas positivamente sobre uma interface líquido-vapor de um meio dielétrico, estas serão atraídas para a superfície do líquido pela força resultante da interação com a carga imagem. Após atravessarem a interface as partículas serão repelidas ficando sempre na região volumétrica do líquido. No caso de partículas carregadas negativamente, e se o meio for hélio líquido, a situação é um tanto diferente. Para elétrons, o hélio é uma barreira de potencial e estes ficarão localizados sobre sua superfície, presos pelo potencial imagem [26]. Este é um dos exemplos mais interessantes dos conhecidos *Estados Eletrônicos Superficiais* (SEE).

Uma importante característica dos SEE sobre hélio líquido é que eles são fracamente ligados a superfície, os elétrons pairam ( $\sim 100\text{\AA}$  acima da superfície) sobre o *líquido volumétrico* sem interagir com o mesmo em uma escala atômica. Esta é a base para a peculiaridade deste sistema, possuindo comportamento do tipo elétron livre em duas dimensões.

## 1.2 Estados ligados

Além de possuir uma superfície microscopicamente plana e sem impurezas, o hélio líquido produz, de maneira única, um potencial de confinamento para o movimento normal dos elétrons sobre sua superfície. Como gás nobre mais leve, o hélio é o elemento químico com a polarização molecular mais baixa. Sendo assim, as forças de van der Waals intermoleculares são muito fracas, o que resulta em algumas características peculiares como *ponto de ebulição* mais baixo conhecido (4.2K para  $^4\text{He}$ ), solidificação somente sob pressão, etc. Isto também o torna um dielétrico com uma constante dielétrica muito pequena,  $\epsilon_{\text{He}} = 1.0572$  para o  $^4\text{He}$  abaixo de 1.4K [101]. Além disso, o elétron da última camada do átomo de hélio repele um elétron excedente a curtas distâncias devido ao *princípio de exclusão de Pauli*. Esta repulsão é muito forte ( $V_0 \sim 1\text{eV} \sim 104\text{K}$ ) comparada com a polarização do meio líquido, e supera consideravelmente a energia potencial de um elétron injetado dentro do líquido. Logo, a superfície líquida representa uma forte barreira de potencial para os elétrons. Tal barreira foi obtida por W. T. Sommer em 1964 [113]. De fato, uma vez injetado no líquido, um elétron entra em equilíbrio formando uma pequena “bolha” com raio de aproximadamente  $17\text{\AA}$  [48].

Sendo assim, um elétron pode ser aprisionado acima da superfície líquida entre esta barreira repulsiva e a atração devido às forças de polarização de longo alcance. Para uma superfície plana, com um perfil de densidade tipo degrau, a interação devido a polarização pode ser descrita por uma carga imagem  $Q = e(\epsilon_{\text{He}} - 1)/(\epsilon_{\text{He}} + 1)$  para o  $^4\text{He}$  (a constante dielétrica da fase gasosa é desprezível abaixo de 1.4K). O potencial unidimensional para os SEE pode ser aproximado pelo seguinte modelo,

$$V_{\perp} = V_0\Theta(-z) - \frac{\Lambda}{z + z_0}\Theta(z) + eE_{\perp}z, \quad \Lambda = \frac{e^2(\epsilon_{\text{He}} - 1)}{4\epsilon_0(\epsilon_{\text{He}} + 1)}. \quad (1.1)$$

Uma representação esquemática deste potencial é mostrada na Figura (1.1).  $\Theta(-z)$  é uma função degrau unitária (descreve a barreira repulsiva na superfície),  $E_{\perp}$  é um campo

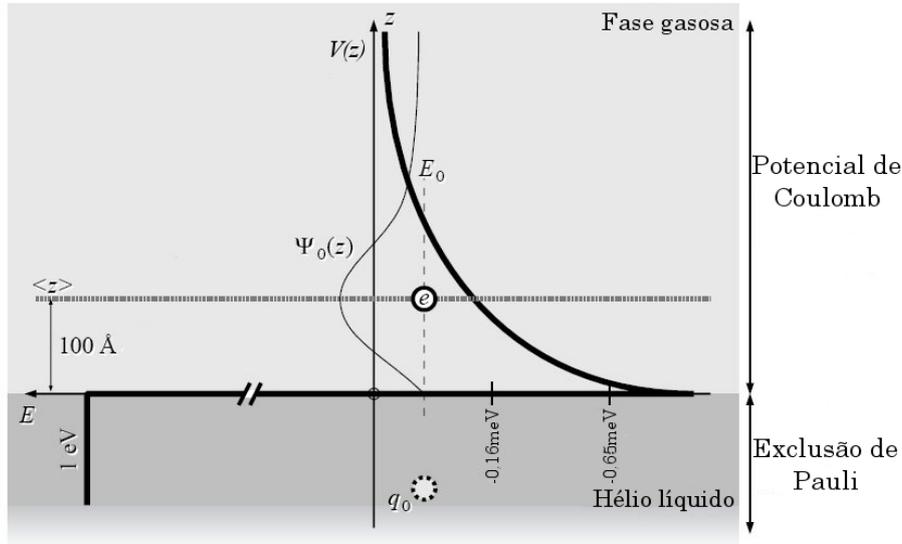


Figura 1.1: Potencial de confinamento de um elétron se movendo na superfície do hélio líquido. Adaptado de [130]

elétrico externo perpendicular ao plano dos SEE (veja Figura (1.2)). O campo elétrico vertical  $E_{\perp}$  é necessário para compensar o campo produzido pela camada de elétrons ( $-2\pi en_s$ ). No equilíbrio, a densidade eletrônica é proporcional ao campo elétrico externo, assim,  $n_s = E_{\perp}/2\pi e$ . Não é impossível criar um SEE sem o campo  $E_{\perp}$ , mas é necessário fazer  $E_{\perp} \geq 2\pi en_s$  para se obter uma densidade mensurável. O segundo termo da Equação (1.1) é a atração imagem e para evitar uma singularidade no potencial imagem devido ao perfil degrau da superfície, introduz-se o parâmetro  $z_0$ , que é da ordem da escala atômica [49], a saber,  $z_0 \sim 1\text{Å}$  que é muito menor do que a distância média  $\langle z \rangle$  que os SEE situam-se da superfície [83]. Geralmente, para o cálculo das propriedades de transporte paralelo à superfície é suficiente tratar a altura da barreira como sendo infinita e o campo elétrico como uma perturbação. Correções devido a finitude do campo elétrico (efeito Stark) e da densidade de elétrons devem ser feitas ao tratar com distâncias atômicas da superfície do hélio líquido. Cheng, Cole e Cohen obtiveram com precisão o potencial dos SEE levando em conta o perfil de densidade real da superfície do hélio líquido [21].

Para maioria dos casos, é suficiente considerar  $V_0 \rightarrow \infty$  e  $z_0 \rightarrow 0$  na Equação (1.1). Os movimentos paralelo e na direção  $z$  dos elétrons podem ser separados devido à simetria

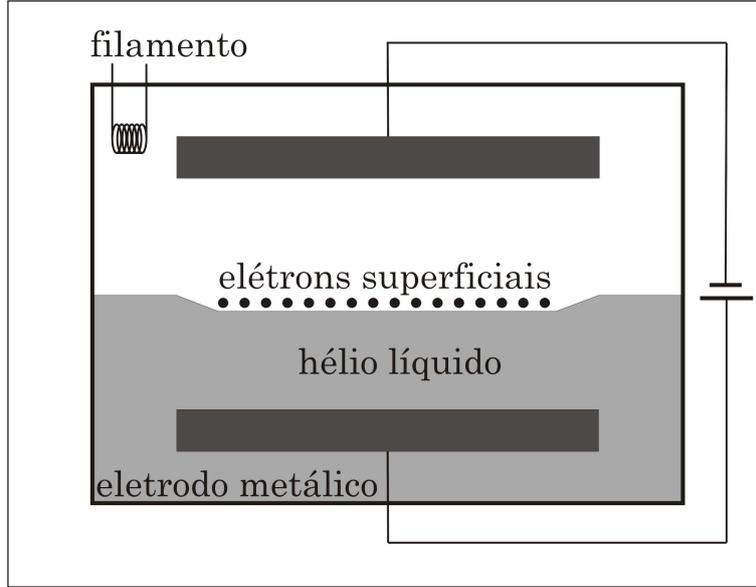


Figura 1.2: Representação esquemática de um aparato experimental para a obtenção de elétrons superficiais sobre  ${}^4\text{He}$  líquido. Os elétrons livres são produzidos por emissão térmica a partir de um filamento aquecido eletricamente. Para estabilizar e controlar a densidade de carga superficial, um campo elétrico perpendicular é aplicado por um capacitor de placas paralelas. [83]

do sistema, permitindo assim escrever a função de onda e o espectro de energia como

$$\Psi_l(\vec{r}, z) = \frac{1}{\sqrt{S_A}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} f_l(z), \quad \varepsilon_l(k) = \varepsilon_l^{(\perp)} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e}, \quad (1.2)$$

onde  $S_A$  é a área da superfície plana do hélio líquido e  $\vec{k}$  é o vetor de onda paralelo ao plano. A aproximação  $V_0 \rightarrow \infty$  e  $E_{\perp} = 0$  (com a condição de contorno  $f_l(0) = 0$ ) fornece resultados satisfatórios para o espectro de energia dos SEE. Logo, a equação de Schrödinger unidimensional para a parte vertical  $f_l(z)$  da função de onda do elétron torna-se a mesma que descreve o espectro do átomo de hidrogênio, isto é,  $f(z) = zR(z)$ . A equação resultante para  $R(z)$  será idêntica as funções radiais do átomo de hidrogênio e possuem solução conhecida para os autovalores da energia:

$$\varepsilon_l^{(\perp)} = -\frac{m_e \Lambda^2}{2\hbar^2 l^2}, \quad l = 1, 2, \dots \quad (1.3)$$

Para o caso do  ${}^4\text{He}$  líquido, as energias do estado fundamental e do primeiro estado excitado são  $\varepsilon_1^{(\perp)} = -7.6\text{K}$  e  $\varepsilon_2^{(\perp)} = -1.9\text{K}$ , que são suficientemente pequenas comparadas com a altura da barreira  $V_0$ , o que justifica a aproximação  $V_0 \rightarrow \infty$ . Medidas espectroscópicas

dos níveis de energia até o décimo nível [72] fornecem valores que são apenas 5% maiores do que o esperado pela Equação (1.3).

A função de onda do estado fundamental para  $E_{\perp} = 0$  é dada por

$$f_1(z) = 2\gamma^{3/2}e^{-\gamma z}, \quad \gamma \Big|_{E_{\perp} \equiv \gamma_0} = \frac{m_e \Lambda}{\hbar^2}. \quad (1.4)$$

O comprimento característico ou raio de Bohr efetivo é

$$\gamma_0^{-1} \simeq 76\text{\AA}, \quad (1.5)$$

que é relativamente grande, já que a baixa polarizabilidade do átomo de hélio faz com que  $\Lambda$  seja pequeno. A distância média entre o elétron e a superfície líquida é  $\langle 1|z|1 \rangle = \frac{3}{2}\gamma_0^{-1} = 114\text{\AA}$ , sendo esta muito grande quando comparada com a distância interatômica típica no hélio líquido.

Entretanto, esta distância é reduzida quando um campo elétrico não nulo  $E_{\perp} > 0$  é aplicado, dando origem a um efeito Stark linear nos níveis de energia e a uma compressão das funções de onda [114]. Usando a Equação (1.4) como função tentativa para um cálculo variacional, obtêm-se a correção [101]

$$\left( \frac{\gamma(E_{\perp})}{\gamma_0} \right)^{-1} = \frac{4}{3\beta} \sinh \left[ \frac{1}{3} \sinh^{-1} \left( \frac{9\beta}{4} \right) \right], \quad \beta = \sqrt{\frac{2m_e e E_{\perp}}{\hbar^2 \gamma_0^3}}. \quad (1.6)$$

Além disso, os valores do campo elétrico  $E_{\perp}$  para o hélio volumétrico não ultrapassa 100V/mm, com isso, o alcance da função de onda fica  $\gamma^{-1} = 53\text{\AA}$ .

Devido ao alto valor da barreira  $V_0$  e ao grande alcance da função de onda (nula na superfície), os elétrons superficiais praticamente não são afetados pela estrutura atômica do líquido. Mesmo quando quantizado completamente na direção  $z$ , estes possuem propriedades de elétrons livres [17]. Diferentemente de sistemas 2D em estruturas semicondutoras, os SEE não possuem estrutura de bandas e a massa efetiva é quase o mesmo valor da massa do elétron livre [35]. A mobilidade dos elétrons é limitada apenas por espalhamento via átomos de vapor do  $^4\text{He}$  e pelas ondas de capilaridade (em sua forma quantizada, são

chamadas de *riplons*) da superfície para temperaturas abaixo de 0.7K, alcançando assim, valores muito altos, a saber, mais de  $10^7 \text{cm}^2/\text{Vs}$ .

SEE similares também são encontrados em outros materiais com propriedades similares ao  $^4\text{He}$ , como afinidade eletrônica altamente negativa combinada com baixa polarizabilidade. Exemplos são, hidrogênio [74] e neônio [63] sólidos. Além disso, tais estados são possíveis em finos filmes de hélio adsorvido em um substrato sólido. No mais,  $^4\text{He}$  líquido aparece como um dos materiais mais simples e “limpos”, possuindo a mais baixa polarizabilidade e a superfície com melhor qualidade.

### 1.3 Efeito da correlação elétron-elétron

A medida que a densidade aumenta, a interação elétron-elétron torna-se cada vez mais importante. Nesta região, as correlações entre elétrons não podem ser desprezadas já que o potencial de confinamento depende de suas funções de onda verticais devido a interação coulombiana. Diferente dos sistemas eletrônicos 2D em semicondutores, os SEE formam um sistema 2D com uma densidade por unidade de área  $n_s$  muito baixa, a saber,  $n_s \lesssim 2 \times 10^9 \text{cm}^{-2}$  para o caso do líquido volumétrico. Neste caso, a interação elétron-elétron ocorre apenas a distâncias que são muito maiores do que o alcance típico da função de onda. A primeira tentativa de estudar as correlações no gás de elétrons 2D foi feita por Fetter [37].

Uma maneira de caracterizar a correlação entre os elétrons é usando uma constante conhecida como *parâmetro de plasma*  $\Gamma_p$ , que é definida como a razão entre a energia potencial média de um único elétron superficial e sua energia cinética média, que é essencialmente a energia térmica. Assim, este parâmetro pode ser escrito como

$$\Gamma_p = \frac{e^2 \sqrt{\pi n_s}}{4\pi \epsilon_0 k_B T}. \quad (1.7)$$

A interação coulombiana não é blindada para o caso de elétrons superficiais e é relativa-

mente forte. O valor de  $\Gamma_p$  define vários regimes. Quando  $\Gamma_p < 1$  a interação de Coulomb é fraca e o sistema é praticamente um gás de férmions ideal. Para  $1 < \Gamma_p < 100$  os elétrons possuem correlação e o sistema se comporta como um *líquido de Coulomb*. Para  $\Gamma_p > 100$  a energia potencial domina a cinética e os elétrons possuem uma forte correlação conduzindo o sistema a formar uma estrutura sólida periódica. Cálculos numéricos [118] da função de correlação de pares mostram que para  $\Gamma_p \gtrsim 10$  cada elétron está envolvido por uma área bem definida onde a probabilidade de encontrar outro elétron é nula. Esta área possui um raio que é da ordem da distância média entre partículas  $1/\sqrt{\pi n_s}$ , e normalmente é maior do que 100nm para elétrons superficiais. Este valor é muito maior do que o alcance da função de onda  $\gamma_0^{-1} = 76\text{\AA}$ .

Mesmo que um elétron mova-se para fora da superfície, espera-se que este mantenha sua correlação com os outros elétrons no estado fundamental numa distância  $z$  acima da superfície que é menor do que  $1/\sqrt{\pi n_s}$ . Este único elétron sentirá a presença dos outros como um campo elétrico médio cuja componente vertical  $E_s$  cresce gradualmente de zero quando  $z \ll 1/\sqrt{\pi n_s}$  até  $R_s = -en_s/2\epsilon_0$  quando  $z \gtrsim 1/\sqrt{\pi n_s}$ . Dessa forma, não há influência da interação elétron-elétron no estado fundamental vertical, apenas uma lenta e crescente influência de  $E_s$  nos elétrons localizados nos mais altos estados superficiais, e isto reduz o efeito Stark produzido pelo campo  $E_\perp$ .

## 1.4 A instabilidade da superfície líquida

Uma das principais limitações da investigação experimental de SEE na superfície do hélio líquido é o limite superior na densidade de elétrons devido a instabilidade eletrohidrodinâmica [109, 122]. Esta instabilidade leva a uma deformação macroscópica da superfície líquida. Isto pode ser entendido de forma mais quantitativa lembrando que para uma temperatura de  $T \simeq 1.3K$ , o  $^4\text{He}$  líquido possui uma densidade muito baixa  $\rho_{\text{He}} \simeq 145\text{kg/m}^{-3}$  e sua tensão superficial é  $\alpha_{\text{He}} \simeq 35.7 \times 10^{-6}\text{J m}^{-2}$ . Sabe-se também que

a densidade de vapor do  ${}^4\text{He}$  é desprezível abaixo de 1.4K. O líquido deforma facilmente pelas forças eletrostáticas que atuam na camada de elétrons.

Quando a superfície do hélio começa a ser populada pelos elétrons até que o campo elétrico total na direção  $z$  acima da superfície seja nulo, o nível da superfície na região carregada é comprimida para baixo, como mostrado Figura (1.2). O deslocamento  $\Delta h$  desta região em relação a região não carregada pode ser dado

$$\rho_{He}g\Delta h = \frac{\epsilon_0}{2}E_-^2, \quad (1.8)$$

onde  $g$  é a constante gravitacional e  $E_- = en_s/\epsilon_0$  é o campo elétrico abaixo da camada de elétrons. O região carregada reduz o efeito das oscilações das ondas de capilaridade-gravidade [123]. A deformação da superfície produz uma redistribuição da densidade de carga, e conseqüentemente, das forças eletrostáticas, que neutraliza as forças de restituição da gravidade e a tensão da superfície. Sob certas condições, uma superfície torna-se instável e desenvolve ondulações espontâneas; normalmente isto faz com que a superfície carregada avance para o regime de saturação ou para uma redistribuição não homogênea de carga devido a formação de *dimples* contendo uma grande quantidade de elétrons que estão bem abaixo do regime de saturação [109].

Em experimentos típicos de SEE sobre hélio volumétrico [22] a placa superior do capacitor (ver Figura (1.2)) é colocada bem distante da superfície. Isto faz com que a distância entre a superfície carregada e a placa inferior seja grande comparada com o comprimento de capilaridade do  ${}^4\text{He}$ ,  $a_{He} = \sqrt{\alpha_{He}/\rho_{He}g} \sim 0.5\text{mm}$ , e assim, a instabilidade ocorre com ondulações na superfície de vetor de onda característico  $a_{He}^{-1}$  e a densidade atinge o valor máximo

$$n_s^{max} = \frac{1}{e}\sqrt{2\epsilon_0\rho_{He}g\alpha_{He}} \simeq 2.2 \times 10^9\text{cm}^{-2}. \quad (1.9)$$

## 1.5 Diagrama de fase

Essencialmente, um sistema eletrônico 2D é caracterizado por três energias fundamentais (na ausência de campo magnético externo): a energia térmica  $E_{th} = k_B T$ , a energia de Fermi  $E_F = \hbar^2 \pi n_s / m^*$  e a energia potencial  $V_C = e^2 \sqrt{\pi n_s} / 4\pi \epsilon \epsilon_0$ .  $m^*$  e  $\epsilon$  são a massa efetiva do elétron e a constante dielétrica do meio, respectivamente. Para saber qual estatística de equilíbrio (clássica ou quântica) define um sistema, pode-se olhar para seu diagrama de fase temperatura  $T$  versus densidade eletrônica  $n_s$ . É conveniente comparar o diagrama de fase dos SEE com elétrons em estruturas semicondutoras, como na heteroestrutura GaAs/GaAlAs. Isto é mostrado em detalhes na Figura (1.3), onde foi considerado  $m^* = m_e$  e  $\epsilon = 1$  para os SEE e  $m^* = 0.1m_e$  e  $\epsilon = 10$  como valores típicos para 2DEG em heteroestruturas. Para efeito de comparação, a Tabela (1.1) mostra alguns parâmetros físicos de sistemas de gás de elétrons 2D. No caso de altas temperaturas e baixas densidades ( $E_{th} \gg E_F$ ) o sistema torna-se não degenerado e sua estatística é essencialmente clássica. Isto pode ser entendido melhor quando nota-se que neste regime a distância média entre elétrons é muito maior do que o comprimento de onda quântico de um único elétron ( $r_0 \gg \lambda_{th}$ , onde  $\lambda_{th} = 2\pi\hbar\sqrt{2m_e k_B T}$  é o comprimento de onda térmico de de Broglie). Na maioria dos casos, a realização experimental dos SEE é feita a temperaturas entre 0.1 e 2K tendo como limite máximo de  $n_s \lesssim 2 \times 10^9 \text{cm}^{-2}$  para a densidade de elétrons no regime volumétrico, e isto corresponde a uma energia de Fermi de  $E_F \lesssim 0.05\text{K}$ . Isto justifica o tratamento clássico dos SEE sobre hélio líquido. Já para o caso de um 2DEG em estruturas semicondutoras no mesmo regime de temperaturas há um limite mínimo da densidade  $n_s \gtrsim 5 \times 10^{10} \text{cm}^{-2}$ , resultando numa energia de Fermi de  $E \gtrsim 10\text{K}$ . Neste caso, é necessário aplicar estatística quântica para seu tratamento. Para densidades menores, os elétrons tornam-se localizados devido às impurezas dentro do semicondutor.

Como já mencionado, há uma competição entre a interação de Coulomb e as energias

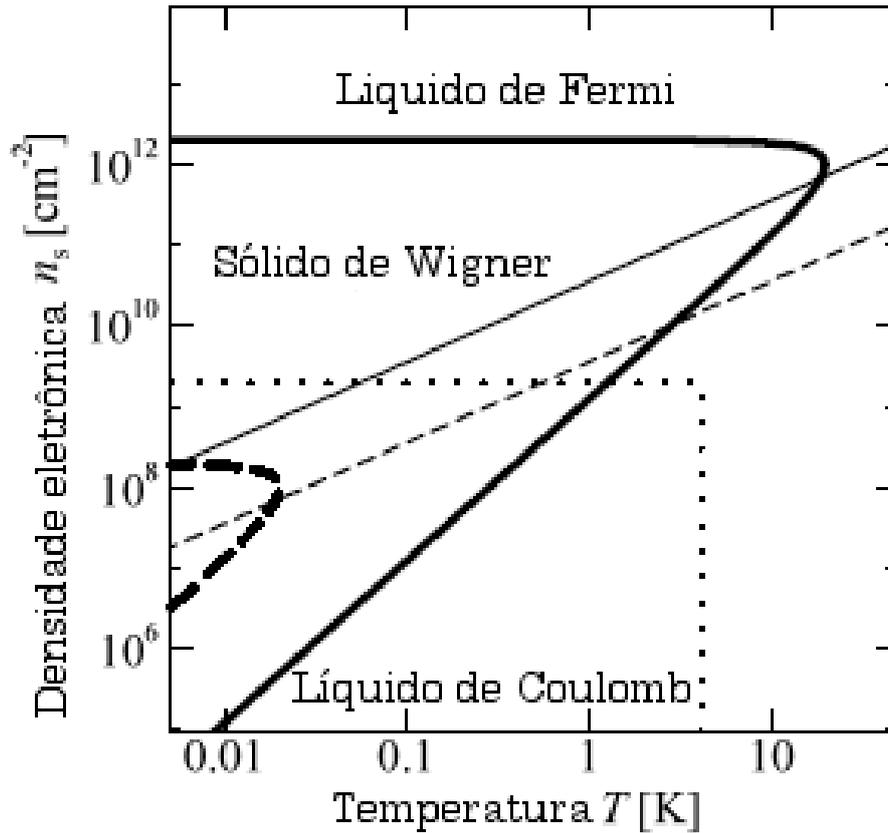


Figura 1.3: Diagrama de fase de um sistema de elétrons 2D com campo magnético nulo. As curvas sólida e tracejadas são a fronteira do sólido de Wigner para SEE em  ${}^4\text{He}$  líquido e elétrons em estruturas semicondutoras, respectivamente. As linhas sólida e tracejada correspondem a  $E_{th} = E_F$  para SEE e elétrons em GaAs, respectivamente. A região de densidade acessível experimentalmente para SEE no regime volumétrico é indicada pelas linhas pontilhadas.

térmica e de Fermi. A primeira favorece uma ordem espacial para os elétrons, enquanto as outras duas aumentam a desordem do sistema. Isto pode ser visto pela formação do sólido de Wigner no diagrama de fase, mostrado na Figura (1.3). Na idéia original de Wigner, a formação da fase sólida era para um sistema degenerado ( $E_{th} \ll E_F$ ) onde a razão entre a energia potencial e cinética é dada pelo parâmetro de plasma quântico  $r_p$ . Cálculos numéricos [116] fornecem  $r_p \simeq 37$  para a fronteira da fase sólida. Para valores menores de  $r_p$  (densidades maiores), as funções de ondas de diferentes elétrons sobrepõem-se e o sólido funde devido às flutuações térmicas. A fase sólida também pode ser induzida no regime de altas densidades aplicando-se um campo magnético muito forte, este campo reduz a extensão da função de onda de cada elétron, tornando-os localizados [105].

Sistema 2DEG →	<sup>4</sup> He	GaAs/GaAlAs	MOSFET
Massa efetiva	1.0	~ 0.07m <sub>e</sub>	0.19
Densidade por partícula[cm <sup>-2</sup> ]	10 <sup>6</sup> – 10 <sup>9</sup>	10 <sup>11</sup> – 10 <sup>12</sup>	10 <sup>11</sup> – 10 <sup>13</sup>
Energia de Fermi[K]	10 <sup>-5</sup> – 10 <sup>-2</sup>	200 – 1000	10 – 500
Energia de ligação [meV]	7	200 – 400	50 – 500
Alcance da função de onda [Å]	114	50-100	30
Tempo de espalhamento [ns]	≲ 6	≲ 0.32	-
Mobilidade [cm <sup>2</sup> /Vs]	10 <sup>7</sup>	10 <sup>5</sup> – 10 <sup>6</sup>	10 <sup>3</sup>
Energia potencial média/k <sub>B</sub> [K]	≲ 130	≳ 50	-
Constante dielétrica do substrato	1.0572	~ 13	~ 10

Tabela 1.1: Valores típicos de alguns parâmetros físicos em sistemas de gás de elétrons em duas dimensões.

Como os elétrons superficiais sobre hélio líquido podem ser tratados classicamente ( $E_{th} \gg E_F$ ) com o parâmetro de plasma clássico dado por

$$\Gamma_p = \frac{V_C}{E_{th}} = \frac{e^2 \sqrt{\pi n_s}}{4\pi \epsilon_{He} \epsilon_0 k_B T}, \quad (1.10)$$

espera-se, pela teoria de Kosterlitz-Thouless [52, 69, 86, 132], que a fase sólida ocorra para  $\Gamma_p \simeq 127$ . Elétrons superficiais possuem uma correlação muito forte com um alto grau de ordem de curto alcance, mesmo na fase líquida  $\Gamma_p \gtrsim 10$ . A Tabela (1.2) mostra alguns resultados para o parâmetro  $\Gamma_p$  na fronteira da fase sólida.

## 1.6 SEE sobre filmes de hélio

O <sup>4</sup>He líquido pode encobrir qualquer superfície sólida, acima do nível volumétrico, por uma fina camada, que é estável devido a interação de van der Waals com o substrato sólido. Isto é possível abaixo do ponto de transição fluido-superfluido (ponto Lâmbda).

O filme de hélio possui espessura  $d$  que varia com a altura  $z$  de acordo com [83]

$$d(z) = \left( -\frac{\alpha_{He}}{m_{He} g z} \right)^{1/3}, \quad (1.11)$$

e pode variar de 30nm a 1cm acima do nível volumétrico [36], podendo também sustentar elétrons superficiais quando colocado dentro de um capacitor de placas paralelas (ver Figura (1.4)).

Autores	$\Gamma_m$	Método
[27]	$121 \pm 4$	Simulação por MD
[82]	$117 \pm 15$	Experimental
[102]	$137(\pm 5)$	Teoria KTHNY ( $T \neq 0$ )
[61]	$140 \pm 21$	Experimental
[58]	120	Simulação por QMC
[64]	$124 \pm 6$	Simulação por MD
[47]	$137 \pm 15$	Experimental
[84]	$137 \pm 10$	Simulação por MD
[41]	$125 \pm 15$	Simulação por MC
[52]	$\approx 79$	Teoria KTHNY ( $T = 0$ )
[55]	$95 \pm 2$	Simulação por MD

Tabela 1.2: Parâmetro de plasma da fronteira sólido-líquido do cristal de Wigner sobre hélio volumétrico.

No caso de filmes de hélio, o potencial atrativo dos elétrons superficiais é dado, principalmente, pela interação imagem com o substrato sólido que é bastante forte, resultando por exemplo, numa energia de ligação de  $e^2/16\pi\epsilon_{He}\epsilon_0d \simeq 130\text{K}$  para um filme de 30nm de espessura acima de um substrato metálico (o alcance da função de onda neste caso é muito menor do que  $d$  [57]). SEE sobre filmes possuem uma mobilidade menor do que no caso volumétrico, já que há espalhamento dos elétrons também devido a rugosidade do substrato.

A forte interação de van der Waals faz com que um filme seja muito estável com relação as forças eletrostáticas oriundas da camada carregada. Além disso, se o aumento da pressão eletrônica reduz a espessura do filme, isto aumenta mais ainda a interação de van der Waals, fazendo com que a instabilidade encontrada no regime volumétrico nunca ocorra neste caso. Se o substrato for um condutor, a densidade de elétrons superficiais que pode ser adquirida é limitada, já que há perda de carga que tunelam através do filme [36]. Porém, se o substrato for um dielétrico, é possível alcançar altas densidades eletrônicas, a saber,  $10^{11}\text{cm}^{-2}$  [57]. Isto pode ser entendido pelo fato de que o tunelamento de cargas através da superfície do filme ocorre próximo de irregularidades na superfície do substrato, porém, se este for um isolante, estas irregularidade são rapidamente bloqueadas

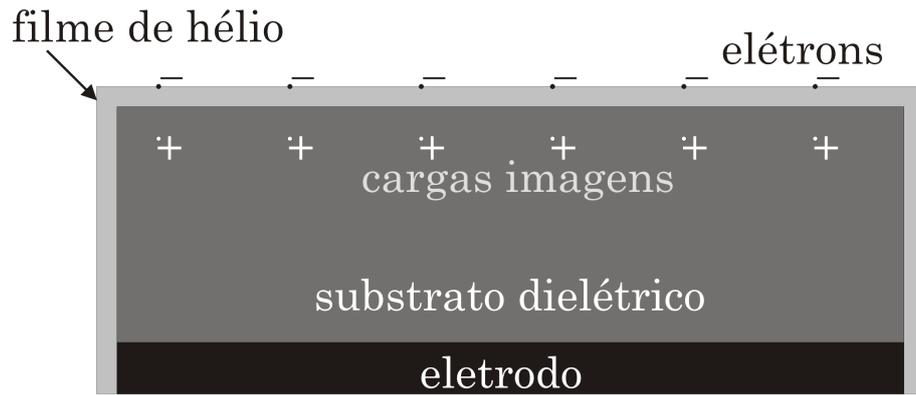


Figura 1.4: Representação esquemática dos SEE sobre um filme de hélio e suas cargas imagens.

pelo acúmulo de carga.

Por fim, a energia potencial de um elétron sobre um filme de hélio pode ser obtida pelo método das cargas imagens [62, 108], resultando em

$$V(z) = -\frac{\Lambda}{z} - \Lambda_s \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-\lambda)^{n-1}}{z + nd}, \quad (1.12)$$

onde

$$\Lambda_s = \frac{e^2 \epsilon_{He} (\epsilon_s - \epsilon_{He})}{(1 + \epsilon_{He})^2 (\epsilon_s + \epsilon_{He})}, \quad \lambda = \frac{(\epsilon_{He} - 1)(\epsilon_s - \epsilon_{He})}{(\epsilon_{He} + 1)(\epsilon_s + \epsilon_{He})}, \quad (1.13)$$

e  $\epsilon_s$  é a constante dielétrica do substrato.

# Capítulo 2

## Transporte coletivo em meios desordenados

### 2.1 Introdução

Sistemas fortemente interagentes que tendem a formar estruturas periódicas espontaneamente, podem exibir uma variedade notável de fenômenos complexos quando estes são *compelidos* por uma força externa na presença de algum tipo de desordem. A maioria destes fenômenos surge da competição entre elasticidade, periodicidade, desordem fixa, não-linearidade e arrasto. Uma maneira conveniente (e as vezes a única) para analisar a Física destes fenômenos é através de medidas de transporte, o que é feito na maioria dos experimentos. Cristais de Wigner, Ondas de Densidade de Carga (CDW) e redes de vórtices em supercondutores tipo II são exemplos proeminentes de sistemas que formam estruturas periódicas. Neste capítulo será mostrado um pouco da teoria geral sobre a resposta dinâmica destes sistemas a uma força externa.

### 2.2 Sistemas de arrasto

Sabe-se que a aplicação de uma força externa numa rede perfeita resulta no deslizamento do sistema como um todo, já que não há nada que quebre sua simetria enquanto se move. Entretanto, periodicidade em cristais é uma exceção, não uma regra. Materiais reais

possuem impurezas, discordâncias ou vacâncias que quebram sua ordem translacional e que podem influenciar drasticamente as propriedades estáticas e dinâmicas do sistema. Na presença de algum tipo de desordem, uma propriedade intrigante, apresentada por sistemas que estejam sofrendo a ação de uma força externa  $f$ , é o *ancoramento*, ou seja, para baixas temperaturas, não há movimento macroscópico a menos que a força aplicada seja maior do que um valor crítico  $f_c$ . Após a força ultrapassar o valor limite, o sistema começa a fluir. Se a desordem for fraca, o *desancoramento* ocorre através do conhecido *fluxo elástico*, onde o sistema move-se preservando um certo grau de ordem translacional. Em outras palavras, as partículas (elétrons, íons e colóides no caso de cristais de Wigner e vórtices no caso dos supercondutores) preservam seus vizinhos mais próximos durante o movimento. Por outro lado, se a desordem for forte, o desancoramento ocorre através do *fluxo plástico* com um comportamento totalmente diferente, onde parte do sistema se move e outra parte permanece ancorada (veja Figura (2.1)). Apesar do grande esforço teórico dedicado à compreensão das propriedades estáticas destes sistemas na presença de desordem, existem várias características da dinâmica de *sistemas de arrasto*<sup>1</sup> que ainda são questões a serem investigadas com mais clareza. Existem evidências experimentais, numéricas e argumentos qualitativos indicando que o fluxo plástico é esperado tanto nos casos de forte desordem em sistemas 3D quanto próximo ao limiar do desancoramento para dimensões menores.

Um ponto crucial a ser estudado é, como o sistema perde simetria devido à desordem, qual grau de ordem translacional de um *sistema de arrasto*. Le Doussal e Giamarchi fizeram a previsão sobre a existência de uma nova fase termodinâmica, o *vidro de Bragg*, quando considerado uma estrutura periódica estática na presença de algum tipo de desordem [31]. O vidro de Bragg é caracterizado pelo fato de que a ordem translacional decai algebricamente para larga escala e há *picos de Bragg* divergentes na estrutura, o que significa que a ordem de curto alcance sobrevive. Eles também investigaram o

---

<sup>1</sup>Tradução livre para *driven systems*.

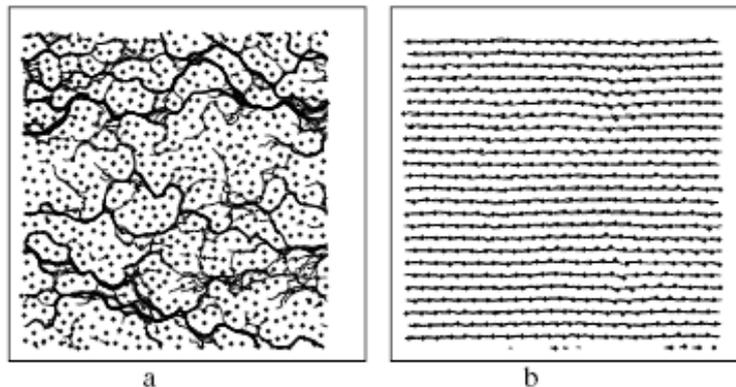


Figura 2.1: Resultado numérico para a posição (pontos) e as trajetórias (linhas) de um sistema de colóides num regime de fluxo plástico (a) e elástico (b). Adaptado de [95]

efeito da periodicidade na direção transversa ao movimento da rede [32] e verificaram que algumas características da *desordem fixa* não são afetadas pelo movimento, mostrando que o sistema se movendo não é uma rede perfeita, mas um vidro de Bragg. Verificaram também que os graus de liberdade transversais à força de arrasto têm uma forte influência na *dinâmica de arrasto*.

O problema do *desancoramento* e do *fluxo elástico* tem sido tratado teoricamente via técnicas de grupo de renormalização [32] ou por aproximações perturbativas [73], isso tudo no âmbito da teoria da elasticidade. Entretanto, não existe uma descrição teórica completa para o fluxo plástico [38]. A maioria do tratamento teórico concentra-se no comportamento dos sistemas na vizinhança do desancoramento, especialmente para CDW e redes de vórtices [85, 112]. Experimentalmente, muita atenção é dada apenas às propriedades de transporte, deixando de lado o comportamento crítico.

Para entender a resposta de um sistema a uma força externa, é importante determinar a curva de velocidade  $v$  versus força aplicada  $f$ . Usando esta curva, é possível distinguir três regimes predominantes, como mostrado na Figura (2.2). Bem abaixo da força crítica  $f_c$ , o sistema permanece ancorado e não se observa movimento para  $T = 0$  (para  $T > 0$  o sistema se move através da ativação térmica no conhecido *regime de arrasto*). O segundo regime, próximo ao desancoramento ( $f \sim f_c$ ), tem sido investigado intensivamente como

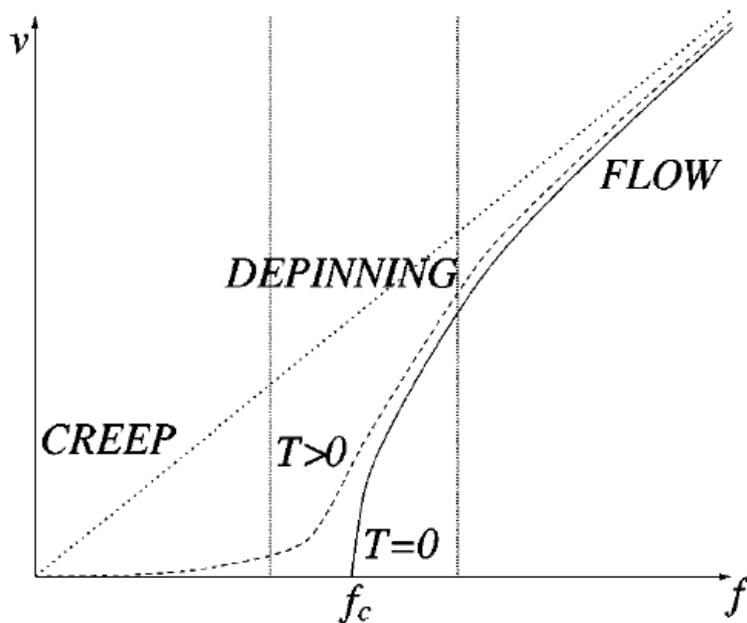


Figura 2.2: Curvas velocidade *versus* força típicas para  $T = 0$  (linha cheia) e para temperatura finita (linha tracejada). O deslizamento de uma rede perfeita (linha pontilhada) também é mostrado. Pode-se distinguir três regimes principais: o *regime de arrasto* para forças bem abaixo do limiar, o regime crítico em torno da transição, e o regime de alta velocidade bem acima do limiar. [19]

*fenômeno crítico dinâmico* onde a velocidade tem papel de *parâmetro de ordem* [38]. Uma questão particular e importante neste regime é determinar se o desancoramento é plástico ou elástico. Além disso, demonstra-se que a velocidade perto da região crítica pode ser escalada como

$$v \sim (f - f_c)^\xi. \quad (2.1)$$

Esta relação de escala foi prevista teoricamente por D. S. Fisher [38] e confirmada em vários experimentos. O expoente crítico  $\xi$  revela o tipo de fluxo após o desancoramento. Resultados numéricos em sistemas 2D revelam que  $\xi = 2/3$  [95] quando o desancoramento é elástico. Para o caso do desancoramento plástico, é impossível determinar  $\xi$  a partir da teoria. No entanto, todos os resultados experimentais parecem indicar que, em duas dimensões,  $\xi > 1$  [20,95]. O terceiro regime ocorre bem acima do desancoramento  $f > f_c$ . Um fenômeno interessante que pode ser visto neste regime é da *reorganização dinâmica*. De fato, tal fenômeno foi observado experimentalmente [131] e caracteriza-se por uma

maior ordem translacional do sistema para altas velocidades do que para baixas. Intuitivamente, a idéia é que para altas velocidades, a desordem deva produzir menos efeito. Esta tendência para reorganização dinâmica também é observada numericamente [96].

Para o caso do fluxo plástico, a curva  $v - f$  possui histerese, isto é, ela depende da história do sistema [24]. Como pode ser visto na Figura (2.2), a resposta do sistema a uma força externa é fortemente não linear além de que um comportamento assintótico linear só pode ser obtido para uma força externa muito grande.

Um outro critério que pode ser usado para diferenciar os regimes plástico e elástico é usar a idéia contida nos trabalhos de Koshelev e Vinokur [68]. Eles associaram o efeito da desordem e do confinamento no movimento da estrutura periódica ao aquecimento do sistema a uma temperatura efetiva  $T' = T + T_{sh}$ , com  $T_{sh}$  sendo inversamente proporcional à velocidade. A razão por trás dessa temperatura adicional é que para grande velocidades, deve-se observar o decaimento dos picos de Bragg algebricamente ou por uma função delta, que são características de um cristal ou de um quasi-cristal para temperatura finita. Caso ocorra um fluxo plástico, o fator de estrutura deve indicar alguma desestruturação da rede e outro comportamento deve aparecer, ao invés dos picos de Bragg. Entretanto, devido ao fato do movimento do sistema ser anisotrópico na presença de desordem (fraca), vários efeitos surgem e o decaimento do fator de estrutura não é isotrópico como no caso estático, mesmo no caso do fluxo elástico. Logo, este critério é apenas qualitativo.

Existem duas vertentes teóricas que caracterizam o regime de alta velocidade. Na primeira delas, as características do movimento são analisadas ao longo da direção da força de arrasto e o movimento na direção transversal é incorporado como um vínculo extra. A segunda baseia-se no fato de que a física de estruturas periódicas sendo compelidas ao longo de uma de suas direções internas é radicalmente diferente de todas as outras descrições. A periodicidade na direção transversal produz uma força de ancoramento não linear e estática  $f_{stat}$ , que persiste mesmo para o sistema se movendo muito

rápido produzindo barreiras transversais ao movimento [32]. Isto resulta num padrão de canais acoplados elasticamente na direção transversal. No segundo tratamento, o fluxo é descrito em termos de canais estáticos onde as partículas seguem uma após outra, percorrendo o menor caminho. Uma diferença crucial entre o que se espera de um padrão formado por uma rede perfeita em movimento e os tais canais é que estes são tortuosos. Sua existência resulta em vários regimes para o acoplamento entre partículas de diferentes canais. O primeiro deles é uma estrutura se movendo que possui ordem topológica com total acoplamento entre as partículas de canais diferentes. Um segundo seria uma estrutura se movendo com canais desacoplados devido ao aparecimento de *discordâncias* na rede. A transição entre o primeiro e o segundo caso depende, obviamente, da intensidade de desordem. Uma primeira transição que ocorreria com o aumento da desordem é o desacoplamento dos canais, porém a periodicidade ao longo da direção transversal pode ser mantida. Mas um aumento maior da desordem deve destruir a estrutura de canais e o fluxo elástico deve se tornar completamente plástico.

### 2.2.1 Efeito da temperatura

O efeito das flutuações térmicas é um ponto muito importante na compreensão de sistemas de arrasto [97]. De fato, em tais sistemas ocorre a geração de temperatura devido ao movimento. Geralmente, uma estrutura em movimento à temperatura finita exibe o mesmo tipo de estrutura de canais para  $T = 0$ . Os canais são levemente alargados devido aos deslocamentos em torno de suas posições médias. Para temperaturas longe da temperatura de fusão do sistema, o efeito da temperatura nos deslocamentos e no fator de estrutura é parecido com os mesmo em  $T = 0$ . O efeito principal da temperatura é modificar as características  $v - f$ , como mostrado na Figura (2.2). A mobilidade das partículas é diferente de zero mesmo no regime ancorado para baixas temperaturas, entretanto, as curvas  $v - f$  permanecem com um forte caráter não linear.

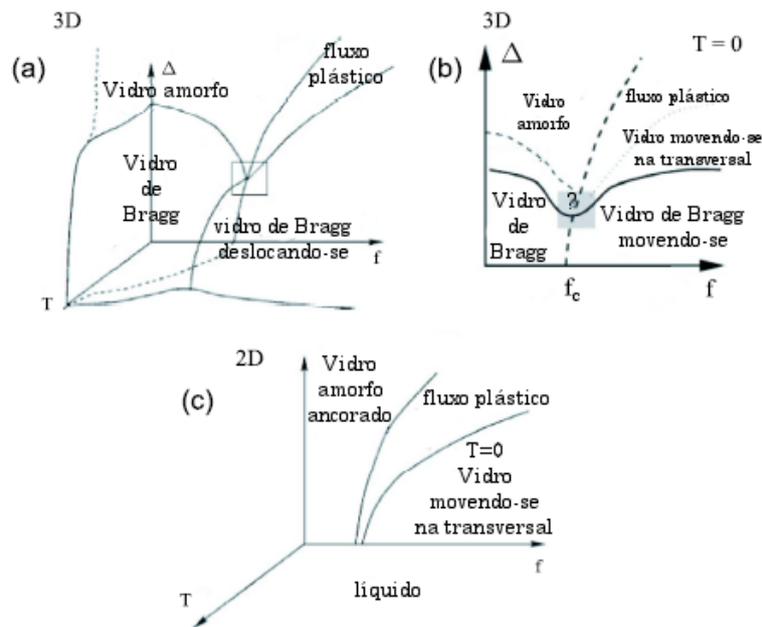


Figura 2.3: (a) Diagrama de fase esquemático nas variáveis *temperatura*  $T$ , *desordem*  $\Delta$  e *força aplicada*  $f$  para sistemas de arrasto 3D. As conexões entre as várias fases dentro da região indicada com um quadrado é esquemática; (b) o mesmo que em (a), porém para  $T = 0$ ; (c) o mesmo que em (a), porém para sistemas de arrasto 2D. Adaptado de [32]

## 2.2.2 Diagrama de fase

Le Doussal e Giamarchi também propuseram um diagrama de fase como função da desordem  $\Delta$ , da temperatura  $T$  e da força aplicada  $f$  para redes de arrasto em duas e três dimensões. Uma representação esquemática deste diagrama é mostrada na Figura (2.3).

O diagrama de fase estático é recobrado na ausência de força externa. Como pode-se observar, no caso 3D, há uma transição entre o *vidro de Bragg* e um *amorfo*, onde não é possível manter a ordem de longo alcance. Com a aplicação de uma força externa, a fase *vidro de Bragg* move-se dentro do *regime de arrasto* e passa continuamente para a fase *vidro de Bragg deslizante* com o subsequente aumento da força. Para uma desordem relativamente fraca, a continuidade entre as duas fases sugere que o desancoramento deve ser elástico, sem um regime plástico intermediário. Com o aumento da temperatura, o *vidro de Bragg deslizante* funde. Acredita-se que esta fusão seja uma transição de primeira ordem dinâmica. O plano  $T = 0$  contém um região ancorada para  $f < f_c$  e espera-se

que o *vidro de Bragg* persista até o desancoramento. Para desordem muito forte, há o aparecimento de discordâncias e o vidro de Bragg é substituído por um *amorfo*. Dessa forma, o desancoramento da fase *amorfo* ocorre através de um fluxo plástico com canais desordenados. Aumentando-se mais ainda a força e, conseqüentemente a velocidade, o sistema deve retornar ao *vidro de Bragg deslizante*, devido ao efeito da *reorganização dinâmica*. Uma das principais características destes diagramas é o fato de que o vidro de Bragg é capaz de sobreviver movendo-se para a fase *vidro de Bragg deslizante*. Por outro lado, fases mais desordenadas, como o *amorfo*, são facilmente destruídas para valores finitos da força (ou temperatura) e estão diretamente relacionadas com a fase líquida.

Quanto ao diagrama de fase 2D ainda não há uma completeza sobre seus fundamentos. A não existência de ordem topológica de longo alcance é, de acordo com o teorema de Mermin-Wagner [79], um argumento plausível [13, 31]. Para  $f = 0$  e desordem finita, espera-se o surgimento de discordâncias. Portanto, a fase resultante deve ser continuamente conectada à líquida, apesar de preservar certa ordem translacional de curto alcance. Há uma *fase ancorada* para  $T = 0$  até  $f_c$ , depois disso esta pode desancorar via fluxo plástico ou elástico. Para forças muito altas, o efeito da desordem torna-se menor e espera-se que o sistema volte para a fase de *vidro deslizante*.

No capítulo 4 desta tese, mostraremos o efeito da temperatura e da intensidade da desordem no desancoramento de um cristal de Wigner 2D sobre filmes de hélio líquido relacionando a teoria acima com os nossos resultados para o regime plástico. Antes disso, no capítulo 3, também será mostrado o fenômeno da reorganização dinâmica com a obtenção da estrutura de canais.

Para finalizar este capítulo, apresentamos resumidamente algumas propriedades dos dois sistemas mais interessantes e de maior interesse teórico e experimental no estudo de transporte coletivo em meios desordenados.

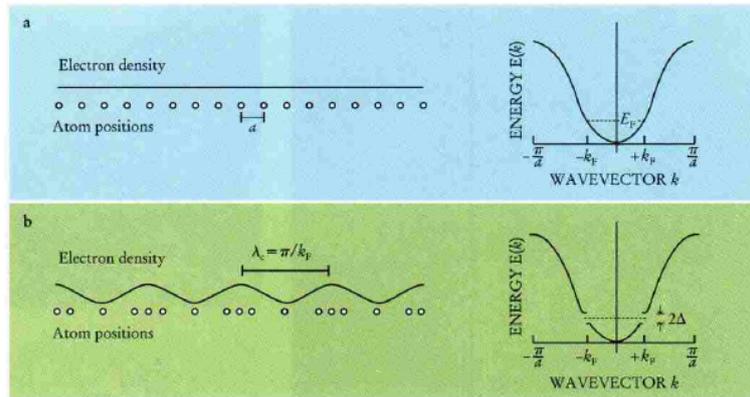


Figura 2.4: Estrutura da banda de energia de partícula única para os casos com (a) e sem (b) acoplamento entre elétron e fônons [117].

## 2.3 Ondas de Densidade de Carga

Um dos melhores exemplos para se estudar o comportamento crítico durante o desancoramento é o sistema conhecido como *Ondas de Densidade de Carga* quando submetido a um campo elétrico externo. Este efeito ocorre em alguns metais quasi-unidimensionais (Q1D) [117]. A densidade dos elétrons de condução no metal, sob certas condições, sofre uma modulação em relação às posições dos átomos e o material passa a apresentar propriedades elétricas anisotrópicas. Na indústria, estes materiais são usados para construir capacitores, detectores, interruptores, etc.

Quando se considera a interação dos elétrons com os fônons da rede cristalina, a competição entre as energias elástica e eletrônica produz uma deformação estática da rede e isto modula, periodicamente, a densidade eletrônica, como mostrado na Figura (2.4). Isto resulta num “gap” na banda de condução, o que não ocorre na banda de energia quando não se considera a interação do elétron com o fônon. Para materiais reais, esta transição ocorre a uma temperatura finita conhecida como temperatura Peierls  $T_P$ . Para temperaturas altas, a energia ganha pelo sistema é reduzida pela agitação térmica dos elétrons através do “gap”, tornando o estado metálico estável. Esta transição metal-CDW é conhecida com *transição Peierls*.

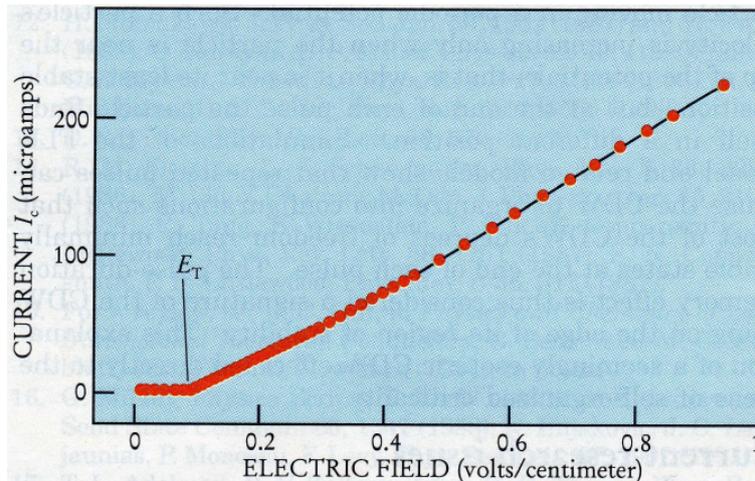


Figura 2.5: Curva corrente-campo para um condutor CDW. Para campos elétricos menores que  $E_T$ , as CDW permanecem ancoradas por impurezas. Acima de  $E_T$  as CDW desancoram e deslizam em relação a rede cristalina. Estes dados são para  $\text{NbSe}_3$  à 120K [117].

A característica mais interessante deste sistema é quando um campo elétrico externo é aplicado, fazendo a CDW “deslizar” em relação a rede. Os átomos oscilam produzindo um potencial que move os elétrons de condução, e assim, resultando numa corrente elétrica. Isto mostra que as CDW se encaixa dentre os sistemas que apresentam *transporte coletivo de carga*. Entretanto, impurezas posicionadas aleatoriamente e defeitos da rede ancoram as CDW. Assim, o sistema só desliza quando o campo aplicado excede um valor crítico  $E_c$  (ver Figura (2.5)), cujo valor depende da intensidade da desordem. CDW também são encontradas em compostos orgânicos Q1D. Para uma revisão geral sobre o assunto, veja [50].

## 2.4 Vórtices em supercondutores

Outro sistema essencialmente parecido com CDW é uma *rede de vórtices* em supercondutores tipo II. Sabe-se que um campo magnético pode atravessar tal sistema na forma de vórtices de Abrikosov, e para um regime de baixa temperatura e na ausência de centros de ancoramento formam uma rede triangular ideal [78]. Vórtices em supercondutores mesoscópicos podem ser vistos como pseudo-partículas interagindo magneticamente.

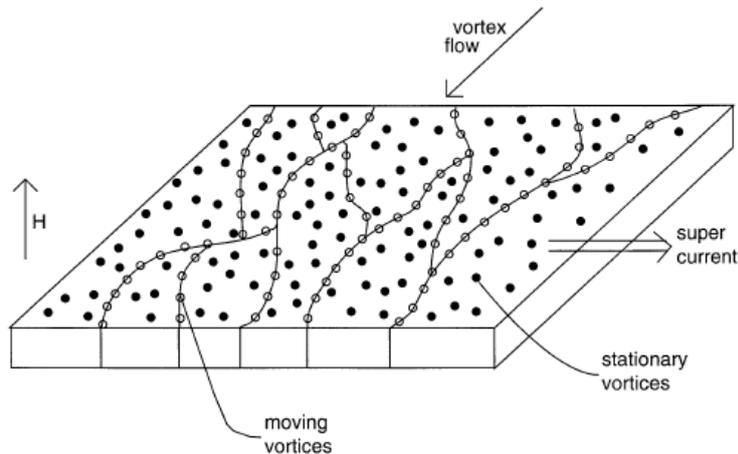


Figura 2.6: Um fino filme supercondutor em um campo magnético  $H$  perpendicular. Um supercorrente fornece a força de arrasto fazendo os vórtices se moverem [39].

Quando estes são confinados em uma ou duas dimensões eles podem formar padrões de canais de alguma forma parecidos com os sistemas citados anteriormente, exceto pelo fato de que a interação vórtice-vórtice não é eletrostática. Neste caso, a força de ancoramento pode ser variada facilmente. Os vórtices são ancorados por impurezas que impedem seus movimentos quando estão sob a ação de uma corrente [13]. Como a voltagem é proporcional a velocidade média dos vórtices, as curvas corrente-voltagem são, simplesmente, dadas por  $v(f)$ . A força crítica  $f_c$  é proporcional a densidade de corrente crítica. Se o ancoramento for muito forte, a rede de vórtice será destruída.

No caso de filmes supercondutores em um campo magnético perpendicular, o fluxo produzido pela corrente ocorrerá em canais interconectados e irregulares atravessando o sistema (veja Figura (2.6)). Logo após a corrente crítica necessária para o movimento do sistema ser atingida, a maioria dos vórtices do filme podem ficar parados com o fluxo restrito a uma rede de canais esparsa. Apesar o esforço teórico [106, 124] e experimental [78], o comportamento crítico desta dinâmica de vórtices com desordem forte ainda está longe de ser entendido.

# Capítulo 3

## Comportamento metal-isolante na presença de uma constricção

Neste capítulo, analisamos o comportamento de um cristal de elétrons 2D sobre um filme de hélio líquido quando este sofre a ação de uma força externa paralela à sua superfície. A presença de um potencial de constricção na forma de uma Lorentziana e centrada na origem do sistema cria uma barreira que ancora o cristal no plano. Usando Dinâmica Molecular de Langevin (ver Apêndice B) a *velocidade de arrasto* dos elétrons foi obtida como função da *força de arrasto* para diferentes valores da espessura do filme e da constante dielétrica do substrato no regime de temperatura muito baixa ( $T \rightarrow 0$ ). O sistema sofre uma transição isolante-condutor quando a força externa atinge um valor limite ( $F_c$ ). Observou-se também o efeito da reorganização dinâmica para o regime de altas velocidades.

### 3.1 Introdução

Como abordado no capítulo 1, o sistema de elétrons sobre hélio líquido oferece muitas e interessantes possibilidades para a compreensão da mobilidade eletrônica e propriedades de condução em duas dimensões. A propriedade de condução de um cristal de elétrons tornou-se ideal para testar várias observações experimentais do comportamento não linear da característica *corrente-voltagem*  $I(V)$  num gás de elétrons 2D em heterojunções semicondutoras [46]. A vantagem de se estudar este sistema análogo de elétrons sobre a

superfície de um filme de hélio de espessura  $d$  adsorvido em um substrato sólido é que a interação elétron-elétron pode ser cuidadosamente controlada apenas variando a espessura do filme ou a constante dielétrica do substrato. A mobilidade eletrônica sobre a superfície, em várias situações, é afetada por impurezas ou pelo perfil da superfície do substrato abaixo do filme. Resultados experimentais sobre a *dinâmica de deslizamento* em sólidos de Wigner induzidos por campo magnético [126], e magnetocondutividade [70], mostram a importância da desordem e do ancoramento na resposta não linear do sistema quando este é submetido a uma força de arrasto. Há também cálculos numéricos para modelos de ancoramento no estudo da dinâmica de um cristal de Wigner sobre um substrato contendo impurezas carregadas [96] e desancoramento de sistemas quasi-unidimensionais [92]. Tudo isso fornece uma boa descrição qualitativa do fenômeno de transporte coletivo 2D.

Experimentalmente, as imperfeições do substrato ou impurezas localizadas sobre este, podem ancorar os elétrons (criar estados localizados) sobre a superfície do hélio, dependendo da espessura do filme. Entretanto, numa simulação, se um campo elétrico for aplicado paralelo à superfície, obtêm-se um cristal perfeito deslizando sobre ela. Isto ocorre porque a energia de interação da deformação da superfície do hélio (*dimples*) é muito pequena quando comparada com a energia devido a interação coulombiana. Dessa forma, o surgimento da rede de *dimples* devido a atração dos elétrons pelas cargas imagem praticamente não produz nenhum efeito de ancoramento. A deformação estática da superfície do hélio apenas acompanha o cristal de Wigner quando este é impulsionado por uma força externa. Há também, o fato de que o substrato é considerado ser perfeitamente plano, já que uma boa descrição das irregularidades de sua superfície requer o conhecimento da interação de elétrons ligados com uma superfície rugosa, e isso não é simples de ser realizado [83]. As cargas imagens dos elétrons que aparecem dentro do hélio não ancoram o cristal, já que são fictícias. Sendo assim, para simular um cristal de elétrons ancorado, consideramos um potencial de constrição situado no plano dos elétrons e que

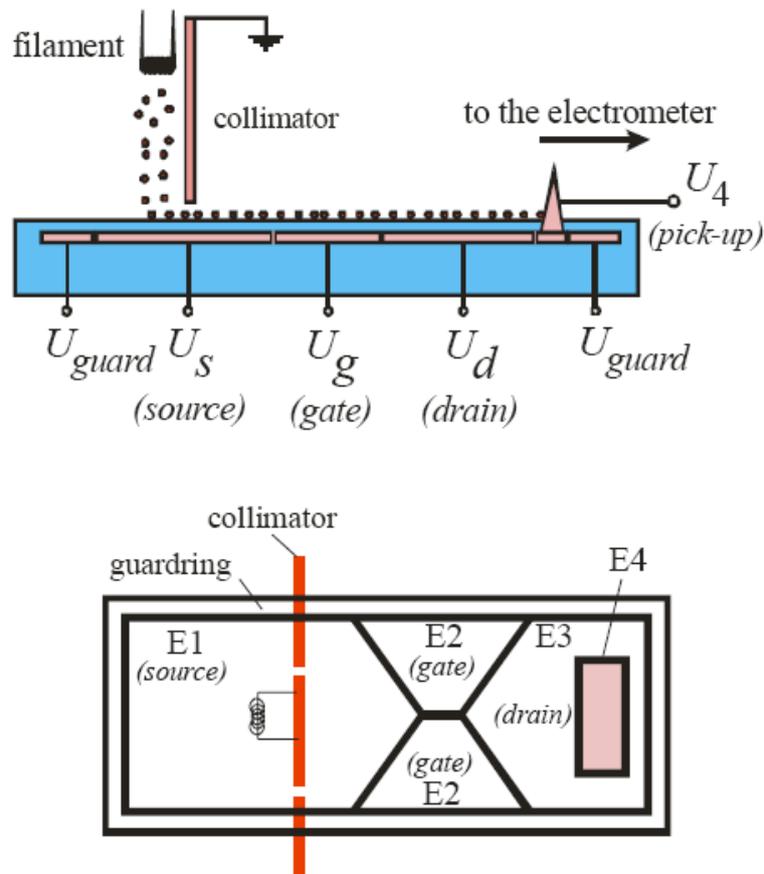


Figura 3.1: Aparato experimental do He-FET. Os elétrons superficiais são gerados continuamente por filamento de tungstênio localizado acima do eletrodo E1. Para evitar que os elétrons sejam compelidos diretamente para o eletrodo de coleta E4, usa-se um colimador (collimator). O eletrodo E2 funciona como uma porta espalhadora, separando a fonte (E1) do dreno (E3). O potencial aplicado ao eletrodo E4 deve ser grande o suficiente para coletar todos os elétrons acima do dreno. Dessa forma, a corrente DC é medida através de E4 usando-se um eletrômetro sensível. Um anel de segurança é usado para evitar fluxo de elétrons para fora da estrutura E4. Os eletrodos são feitos de ouro evaporados sobre um substrato vítreo. Diferentes voltagens aplicadas aos eletrodos produzem um gradiente ao longo do plano E1-E4, o que conduz os elétrons livres até o dreno via fonte e através do canal criado por E2. Os elétrons podem ficar ancorados ao longo do canal devido a impurezas ou a rugosidade do substrato [30].

possui a forma de uma lorentziana centrada na origem do sistema de coordenadas. Esta, por sua vez, comporta-se como uma barreira para o movimento planar dos elétrons.

O estudo realizado neste capítulo foi, a priori, inspirado pelas primeiras medidas experimentais de corrente DC num sistema de elétrons sobre filme de hélio líquido [30]. O grupo do Professor Paul Leiderer [30, 67, 107] foi o primeiro a realizar medidas de corrente DC num transistor de efeito campo sobre a superfície do hélio (He-FET, em analogia ao

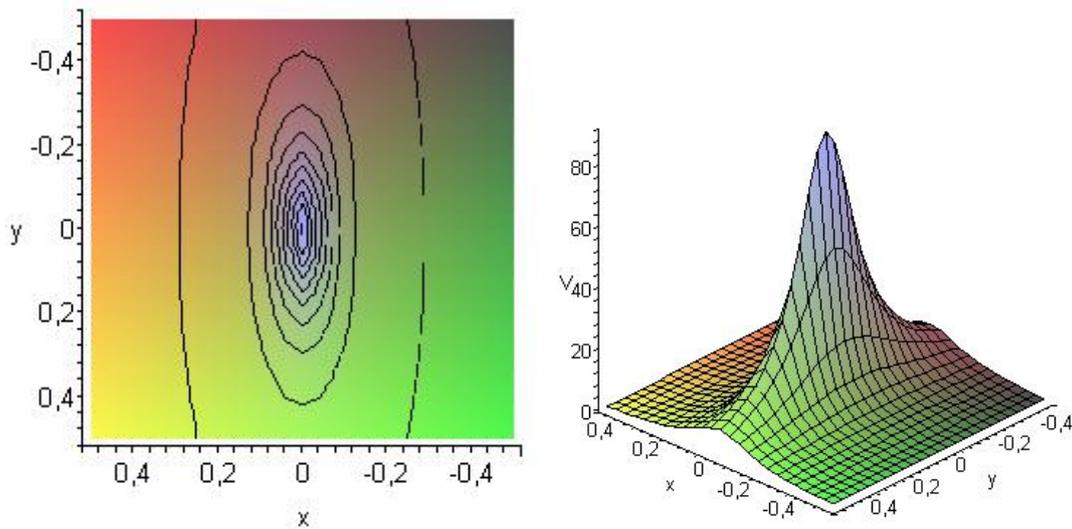


Figura 3.2: Visão esquemática da forma do potencial de constrição.

nome MOSFET) usando um arranjo de eletrodos metálicos, como mostrado na Figura (3.1). Está fora dos nossos objetivos entrar em detalhes sobre este experimento, mas ele pode ser “simulado” usando um potencial de constrição para reproduzir o efeito das *portas* E2 na Figura (3.1). Ao aplicar uma diferença de potencial no sistema, os elétrons precisam vencer a constrição para começar a conduzir através do *canal*, dando origem à uma transição *isolante-condutor*.

## 3.2 Potencial de constrição

O potencial de interação de pares entre dois elétrons acima de um filme de hélio líquido de espessura  $d$  é dado considerando um dos casos particulares calculados no Apêndice A. Para simular um cristal de Wigner ancorado sobre a superfície do filme, considere um potencial de constrição, atuando no plano dos elétrons, tendo a forma de uma Lorentziana e que esteja centrada na origem do sistema de coordenadas. Este atuará como uma barreira ao movimento paralelo dos elétrons. Assim, a energia potencial do sistema com  $N$  elétrons pode ser dada por

$$U = \frac{e^*2}{2} \sum_{i \neq j}^N \left( \frac{1}{r_{ij}} - \frac{\delta}{\sqrt{r_{ij}^2 + (2d)^2}} \right) + U_{pin}, \quad (3.1)$$

onde  $e^* = e/\sqrt{(1+\epsilon)/2}$  é a carga do elétron renormalizada devido à blindagem da interação elétron-elétron pelo substrato, e  $\delta = (\epsilon_s - \epsilon)/(\epsilon_s + \epsilon)$ . Um filme de hélio adsorvido num substrato metálico ( $\epsilon_s \rightarrow \infty$ ) representa um exemplo extremo de tal blindagem. Neste caso, a interação torna-se dipolar  $V_{ee}(r) \rightarrow 2e^2d^2/r^3$  se  $d \ll r$  e a interação é entre dipolos de intensidade  $p = 2ed$  compostos de elétrons e suas cargas imagens.  $U_{pin}$  é a contribuição do potencial de constrição e pode ser dada por

$$U_{pin} = \sum_{i=1}^N \frac{V_0}{1 + \alpha^2 x_i^2 + \beta^2 y_i^2}. \quad (3.2)$$

Nas Equações (3.1) e (3.2) temos  $r_{ij} = |r_i - r_j|$ .  $\epsilon_H$  e  $\epsilon_S$  são as constantes dielétricas do hélio e do substrato, respectivamente.  $(x, y) \equiv r$  é a posição do elétron e  $V_0$  é o máximo da constrição. Um valor positivo (negativo) de  $V_0$  produzirá uma barreira (poço) no centro do sistema, cuja intensidade resultará numa desordem local no cristal de elétrons. A Figura (3.2) mostra a forma esquemática da constrição.

### 3.3 Procedimento da simulação

Na simulação o sistema consiste de  $N$  partículas clássicas idênticas com carga  $e$  e massa  $m$  que se movem num plano com coordenadas  $\vec{r} = (x, y)$ . Toda a simulação é feita dentro de uma caixa retangular de área  $A = L_x L_y$ , com a condição de que  $L_x = L_y \sqrt{3}/2$ . Isto é feito para se obter uma rede triangular com  $4I^2$  ( $I$  é um inteiro) partículas. Condições periódicas de contorno foram usadas para eliminar efeitos de superfície (ver Apêndice B). Os cálculos foram concentrados em três valores de densidade, a saber,  $1.477 \times 10^8 \text{cm}^{-2}$ ,  $2.2 \times 10^9 \text{cm}^{-2}$ , and  $1.3 \times 10^{10} \text{cm}^{-2}$  que correspondem a valores típicos realizados experimentalmente [61]. Quando não for mencionado o contrário, os resultados que serão mostrados neste trabalho, em sua maioria, serão restritos a sistemas com filmes de espessura  $d = 100\text{\AA}$ , e a constante dielétrica do substrato tal que  $\delta = 0.5789$  (correspondente ao quartzo fundido).

Um critério muito importante da simulação é escrever um conjunto adequado de unidades para reescrever todas as variáveis em questão. Isto foi feito usando-se  $\sigma$  como unidade de comprimento e  $E_0$  como unidade de energia. Fazendo isso, pode-se escrever a energia potencial total como

$$\begin{aligned} U &= \frac{e^2}{2} \sum_{i \neq j} \left( \frac{1}{\sigma r_{ij}^*} - \frac{\delta}{\sigma \sqrt{r_{ij}^* + D}} \right) + \sum_{i=1}^N \frac{E_0 V_0^*}{1 + \alpha^{*2} x_i^{*2} + \beta^{*2} y_i^{*2}} \\ &= \frac{e^2}{2\sigma} \sum_{i \neq j} \left( \frac{1}{r_{ij}^*} - \frac{\delta}{\sqrt{r_{ij}^* + D}} \right) + E_0 \sum_{i=1}^N \frac{V_0^*}{1 + \alpha^{*2} x_i^{*2} + \beta^{*2} y_i^{*2}}, \end{aligned} \quad (3.3)$$

na qual definimos  $D = (2d/\sigma)^2$  (com  $d$  sendo a espessura do filme),  $r^* = r/\sigma$ ,  $\alpha^* = \alpha\sigma$  e  $\beta^* = \beta\sigma$ . Fatorando a Equação (3.3), obtêm-se

$$E_0 = \frac{e^2}{2\sigma}.$$

Assim, podemos escrever,

$$U^* = \sum_{i \neq j} \left( \frac{1}{r_{ij}^*} - \frac{1}{\sqrt{r_{ij}^{*2} + D}} \right) + \sum_{i=1}^N \frac{V_0^*}{1 + \alpha^{*2} x_i^{*2} + \beta^{*2} y_i^{*2}}. \quad (3.4)$$

Podemos, também, tornar adimensional a expressão para a energia cinética, ou seja,

$$\begin{aligned} K &= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N m \left( \frac{d\vec{r}_i}{dt} \right)^2 \\ &= \frac{m}{2} \sum_{i=1}^N \frac{\sigma^2}{\tau^2} \left( \frac{d\vec{r}_i^*}{dt^*} \right)^2 = \frac{m\sigma^2}{2\tau^2} \sum_{i=1}^N \left( \frac{d\vec{r}_i^*}{dt^*} \right)^2. \end{aligned} \quad (3.5)$$

Fatorando, resulta

$$\frac{m\sigma^2}{2\tau^2} = E_0 \Rightarrow K^* = \frac{K}{E_0} = \sum_{i=1}^N \left( \frac{d\vec{r}_i^*}{dt^*} \right)^2.$$

Dessa forma, a unidade de tempo toma a forma

$$\tau = \sqrt{\frac{m\sigma^2}{2E_0}}.$$

Com a Equação (3.5), pode-se obter a unidade de temperatura da seguinte forma:

$$\begin{aligned} 2 \langle K \rangle &= 2Nk_B T \\ T &= \frac{\langle K \rangle}{Nk_B} = \frac{E_0 \langle K^* \rangle}{k_B N} = \frac{E_0}{k_B} T^* \Rightarrow T_0 = \frac{E_0}{k_B}. \end{aligned} \quad (3.6)$$

Para garantir a neutralidade de carga do sistema, adiciona-se a contribuição de um fundo positivo à energia total [15], ou seja,

$$U = U_{ee} + U_{pin} + U_b, \quad (3.7)$$

e para tratar o caráter de longo alcance do potencial de Coulomb, foi usado o método da soma de Ewald (ver Apêndice B). Isto leva a energia de interação entre os elétrons em

$$\begin{aligned} U_{ee} = & E_0 \left\{ \sum_{\vec{M}} \frac{\mathcal{L}(0) - \delta \mathcal{L}(4D^2)}{|\vec{M}|} \sum_{ij} \exp(2\pi i \vec{M} \cdot \vec{r}_{ij}) \right. \\ & + \left( \sum_{ij} \right)' \left[ \frac{\text{erfc}(\alpha |\vec{r}_{ij}|)}{|\vec{r}_{ij}|} - \delta \frac{\text{erfc}(\alpha \sqrt{|\vec{r}_{ij}|^2 + 4D^2})}{\sqrt{|\vec{r}_{ij}|^2 + 4D^2}} \right] \\ & \left. + N \left( \sum_{\vec{m}} \right)' \left[ \frac{\text{erfc}(\alpha |\vec{\xi}|)}{|\vec{\xi}|} - \delta \frac{\text{erfc}(\alpha \sqrt{|\vec{\xi}|^2 + 4D^2})}{\sqrt{|\vec{\xi}|^2 + 4D^2}} \right] + C_{ee} \right\}. \quad (3.8) \end{aligned}$$

onde  $U_0 = e^{*2}/2\sigma$ ,  $\vec{M} = \frac{m_x}{f_x} \hat{i} + \frac{m_y}{f_y} \hat{j}$ ,  $f_x = L_x/\sigma$ ,  $f_y = L_y/\sigma$ ,  $\vec{\xi} = m_x L_x \hat{i} + m_y L_y \hat{j}$ ,

$$\mathcal{L}(x) = \frac{1}{2} \left[ e^{2\pi |\vec{M}| \sqrt{x}} \text{erfc} \left( \frac{\pi |\vec{M}|}{\alpha} + \alpha \sqrt{x} \right) + e^{-2\pi |\vec{M}| \sqrt{x}} \text{erfc} \left( \frac{\pi |\vec{M}|}{\alpha} - \alpha \sqrt{x} \right) \right], \quad (3.9)$$

e

$$C_{ee} = -\frac{2\sqrt{\pi}N^2}{\alpha} [1 - \delta e^{-4\alpha^2 D^2}] - \frac{2N\alpha}{\sqrt{\pi}} - 4\pi N^2 \delta \text{erfc}(2\alpha D) + N\delta \frac{2\alpha D}{2D}. \quad (3.10)$$

A linha nos somatórios significa a exclusão do termo  $m_x = m_y = 0$  ou do termo  $i = j$ .  $\text{erfc}(x)$  é a função erro complementar.

Além disso, a força sobre uma partícula  $k$  pode ser escrita como

$$\vec{F}_k = -\nabla_{\vec{r}_k} U = -\nabla_{\vec{r}_k} U_{ee} - \nabla_{\vec{r}_k} U_{pin} = \vec{F}_{1k} + \vec{F}_{2k}. \quad (3.11)$$

Considerando o tratamento pelo método da soma de Ewald, o primeiro termo da força pode ser dado por,

$$\begin{aligned} \vec{F}_{1k} = & 2U_0 \left\{ 2\pi \left( \sum_{\vec{M}} \right)' \frac{\mathcal{L}(0) - \delta \mathcal{L}(4D^2)}{|\vec{M}|} \left[ \sum_{i=1}^N \sin(2\pi \vec{M} \cdot \vec{r}_{ki}) \right] \vec{M} \right. \\ & + \sum_{i=1}^N \left[ \frac{\text{erfc}(\alpha |\vec{r}_{ki}|)}{|\vec{r}_{ki}|^3} - \delta \frac{\text{erfc}(\alpha \sqrt{|\vec{r}_{ki}|^2 + 4D^2})}{\sqrt{|\vec{r}_{ki}|^2 + 4D^2}} \right] \\ & \left. + \frac{2\alpha}{\sqrt{\pi}} \left( \frac{e^{-\alpha^2 |\vec{r}_{ki}|^2}}{|\vec{r}_{ki}|^2} - \delta \frac{e^{-\alpha^2 (|\vec{r}_{ki}|^2 + 4D^2)}}{|\vec{r}_{ki}|^2 + 4D^2} \right) \vec{r}_{ki} \right\}. \quad (3.12) \end{aligned}$$

Já o segundo termo da força fica com a seguinte forma:

$$F_{2k}^x = \frac{2V_0\alpha^2 x_k}{(1 + \alpha^2 x_k^2 + \beta^2 y_k^2)^2},$$

$$F_{2k}^y = \frac{2V_0\beta^2 y_k}{(1 + \alpha^2 x_k^2 + \beta^2 y_k^2)^2}.$$

Na prática, foram usados os parâmetros  $\sqrt{A}$  e  $E_0 = e^2/2\sqrt{A}$  como unidade de comprimento e energia, respectivamente. Com isso, os parâmetros do potencial de constrição devem ser reescritos como  $V_0^* = E_0 V_0$ ,  $\alpha^* = \sqrt{A}\alpha$ , e  $\beta^* = \sqrt{A}\beta$ . Além disso, as unidades de tempo e temperatura são  $\tau = \sqrt{mA/2E_0}$  e  $T_0 = E_0/k_B$ , respectivamente. Onde  $k_B$  é a constante de Boltzmann. Pode-se usar também, como unidade de comprimento, a separação média entre os elétrons  $r_0$ , que é proporcional a densidade superficial  $n_s = 1/\pi r_0^2$ .

Para considerar o efeito de uma força externa o sistema é, convenientemente, acoplado a um reservatório térmico que é descrito pela equação de movimento de Langevin (ver Apêndice B)

$$m \frac{d^2 \vec{r}}{dt^2} = -\nabla U(r) - \varrho m \frac{d\vec{r}}{dt} + \vec{\zeta}(t), \quad (3.13)$$

onde  $\varrho$  (que é um parâmetro externo) controla o amortecimento do movimento das partículas devido à viscosidade do meio, e  $\vec{\zeta}(t)$  é o vetor força randômica (que reproduz o ruído térmico devido as colisões aleatórias) e possui valor médio

$$\langle \vec{\zeta}_i(t) \rangle = 0,$$

e seu desvio padrão pode ser escrito como

$$\langle \vec{\zeta}_i(t) \vec{\zeta}_j(t') \rangle = 2m\varrho k_B T \delta_{ij} \delta(t - t'). \quad (3.14)$$

Introduzindo um campo elétrico paralelo a direção  $x$ , as componentes  $x$  e  $y$  da Equação (3.13) podem ser escritas como

$$m \frac{d^2 x_i}{dt^2} = -\varrho m \frac{dx_i}{dt} - \frac{\partial U}{\partial x_i} + \zeta_{ix}(t) + F, \quad (3.15)$$

$$m \frac{d^2 y_i}{dt^2} = -\varrho m \frac{dy_i}{dt} - \frac{\partial U}{\partial y_i} + \zeta_{iy}(t). \quad (3.16)$$

Para satisfazer o critério de adimensionalidade, pode-se fazer

$$\frac{m\sigma}{\tau^2} \frac{d^2 x_i^*}{dt^{*2}} = -\frac{\rho m\sigma}{\tau} \frac{dx_i^*}{dt^*} - \frac{E_0}{\sigma} \frac{\partial U^*}{\partial x_i^*} + \zeta_0 \zeta_{ix}^*(t) + f_0 F^*. \quad (3.17)$$

Fatorando a equação anterior, obtêm-se  $\zeta_0 = f_0 = m\sqrt{A}\tau^2$  como unidade das forças randômicas e externa, respectivamente. O coeficiente de atrito é dado em unidades de  $1/\tau$ .

Dessa forma, as Equações (3.15) e (3.16) podem ser escritas numa forma adimensional

$$\frac{d^2 x_i^*}{dt^{*2}} = -\varrho^* \frac{dx_i^*}{dt^*} - \frac{\partial U^*}{\partial x_i^*} + \zeta_{ix}^*(t) + F^*, \quad (3.18)$$

$$\frac{d^2 y_i^*}{dt^{*2}} = -\varrho^* \frac{dy_i^*}{dt^*} - \frac{\partial U^*}{\partial y_i^*} + \zeta_{iy}^*(t). \quad (3.19)$$

Além disso,

$$\langle \vec{\zeta}_i^*(t) \vec{\zeta}_j^*(t') \rangle = 2T^* \varrho^* \delta_{ij} \delta(t - t'). \quad (3.20)$$

É sabido que o valor de  $\varrho$  obtido em experimentos com “dusty plasma” varia entre 0.1 e 1.0 para o limite de interação coulombiana fraca (Yukawa, por exemplo) [127, 128]. Entretanto, já que o caso considerado aqui é do potencial de Coulomb puro com um forte potencial de constrição comparado com o tamanho do sistema, é necessário considerar um valor grande para o coeficiente de atrito com o objetivo de assegurar a estabilidade do sistema e para manter a sua temperatura constante [9]. O valor de  $\varrho$  estimado aqui está entre 5.0 e 20.0, e usando o critério de adimensionalidade tem-se  $\varrho^* \sim 1.107 \times 10^3 - 1.243 \times 10^4$ . Em particular, todos os resultados mostrados neste trabalho foram obtidos para um único valor deste coeficiente, a saber,  $\varrho^* = 1.0 \times 10^4$ .

Para integrar as equações de movimento de Langevin foram testados dois algoritmos de integração. Um deles é o *integrador BBK* [18], que tem a seguinte forma:

$$\begin{aligned} v(t + \frac{1}{2}\Delta t) &= (1 - \frac{1}{2}\varrho\Delta t)v(t) + \frac{1}{2}\Delta t[-\nabla U(r(t)) + R(t)], \\ r(t + \Delta t) &= r(t) + \Delta t v(t + \frac{1}{2}\Delta t), \\ v(t + \Delta t) &= \frac{1}{1 + \frac{1}{2}\varrho\Delta t} \left\{ v(t + \frac{1}{2}\Delta t) + \frac{1}{2}\Delta t[-\nabla U(r(t + \Delta t)) + R(t + \Delta t)] \right\}, \end{aligned}$$

onde

$$R(t) = \sqrt{\frac{2\rho k_B T}{\Delta t}} Z(t), \quad (3.21)$$

e  $Z(t)$  representa um vetor de números aleatórios independentes com distribuição gaussiana com valor médio nulo e variância unitária.

O segundo é uma versão do algoritmo de “leap frog” [75] discutido no Apêndice B. Sua forma é:

$$\begin{aligned} \tilde{r}_i &= r_i(t) + \frac{\Delta t}{2} v_i(t), \\ v_i(t + \Delta t) &= c_2 \left[ c_1 v_i(t) + \Delta t \frac{\partial U}{\partial r_i}(\tilde{r}_i) + d_1 \eta_i \right] \\ r_i(t + \Delta t) &= \tilde{r}_i + \frac{\Delta t}{2} v_i(t + \Delta t), \end{aligned}$$

onde  $\Delta t$  é o passo de integração e  $\eta_i$  são as variáveis com distribuição gaussiana que possuem desvio padrão igual a 1 e valor médio 0. Para gerar valores com distribuição gaussiana que satisfaçam estas condições, pode-se usar as *transformações de Box-Muller*, que são definidas como: se  $\zeta$  e  $\varphi$  são números aleatórios com distribuição uniforme e independente entre 0 e 1, têm-se  $\nu$  e  $\vartheta$ , dados por,

$$\begin{aligned} \nu &= \sqrt{2 \ln \zeta} \cos(2\pi\varphi); \\ \vartheta &= \sqrt{2 \ln \zeta} \sin(2\pi\varphi), \end{aligned} \quad (3.22)$$

com uma distribuição normal com valor médio nulo e variância unitária.

As constantes  $c_1$ ,  $c_2$  e  $d_1$  são dadas por:

$$\begin{aligned} c_1 &= 1 - \rho \frac{\Delta t}{2}, \\ c_2 &= \frac{1}{1 + \rho \Delta t / 2}, \\ d_1 &= \sqrt{\rho T \Delta t}. \end{aligned}$$

Estes dois algoritmos possuem boa estabilidade e são relativamente rápidos.

Devido a presença da constrição, surgem vários estados metaestáveis, e isto pode prejudicar o cálculo numérico. Sendo assim, antes de considerar o efeito da força externa

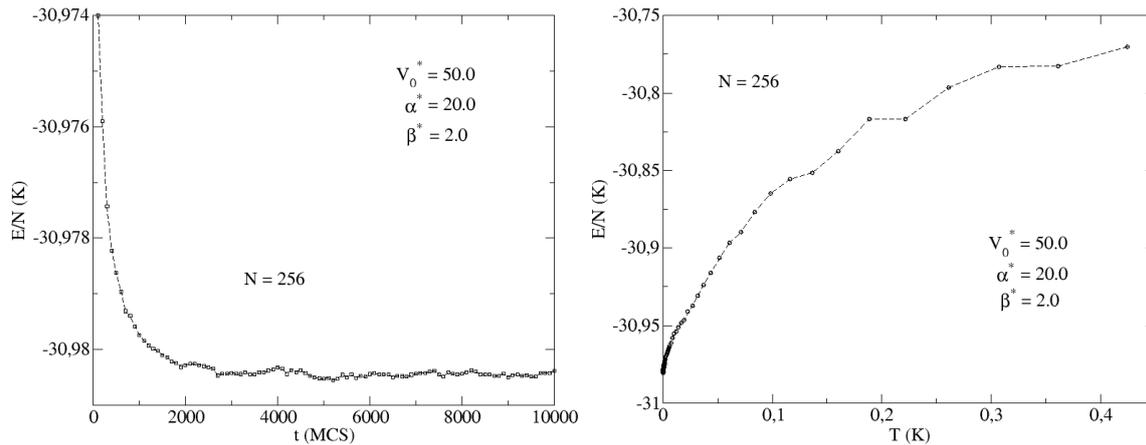


Figura 3.3: (esquerda) O sistema atinge o equilíbrio após 6000 passos de Monte Carlo na temperatura  $T = 0.02\text{K}$ . (direita) Após ser aquecido bruscamente à temperatura  $T = 0.45\text{K}$ , o sistema é resfriado lentamente usando SA para atingir o estado fundamental.

no sistema, é necessário obter as configurações de mais baixa energia resultantes da competição entre a interação coulombiana e o potencial de constrição lorentziano que limita o movimento dos elétrons no plano. As configurações com temperatura zero para diferentes densidades (ou números de partículas), e diferentes valores dos parâmetros que definem o sistema são obtidas através da técnica de Monte Carlo, usando o algoritmo de Metropolis (ver Apêndice C). Primeiro, o sistema é condicionado a um estado de equilíbrio a uma temperatura  $T$  durante  $10^4$  passos de MC. A técnica do Simulated Annealing (Apêndice C) foi usada para obter uma configuração de equilíbrio para  $T = 0$ . Na Figura (3.3) é mostrado os resultados para o procedimento de MC e SA num sistema com  $N = 256$  elétrons,  $V_0^* = 50$ ,  $\alpha^* = 20$  e  $\beta^* = 2$ . Após encontrada as configurações iniciais dos elétrons em  $T = 0$ , a força externa é aplicada lentamente na direção  $x$  e as propriedades de transporte são, enfim, calculadas.

Em todos os cálculos foi usado como passo de integração  $\Delta t^* = 1.34 \times 10^{-3}$ . As médias foram calculadas após  $5 \times 10^5$  passos. Para cada incremento da força externa, o sistema é termalizado até o equilíbrio usando-se a mesma quantidade de passos.

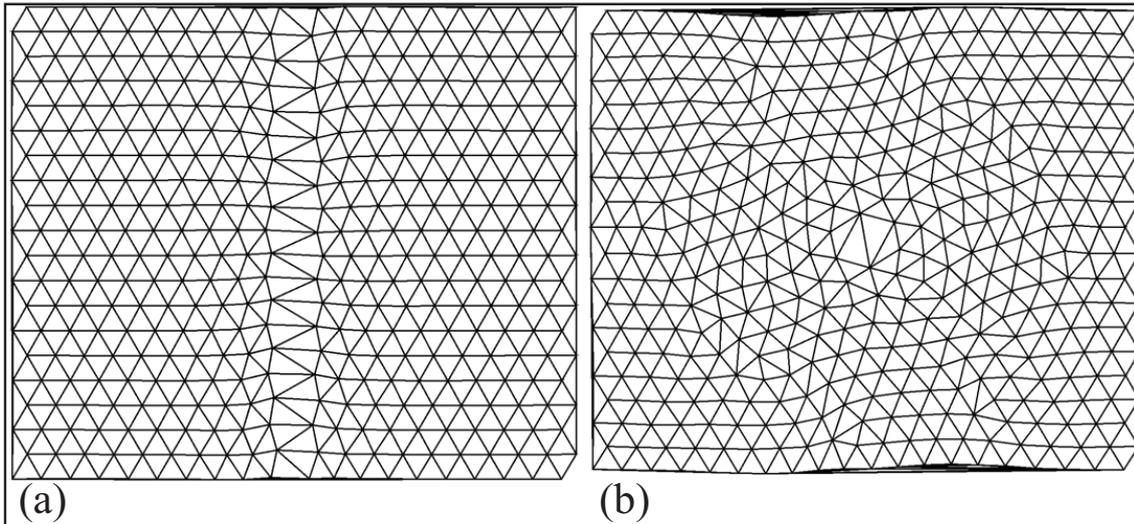


Figura 3.4: Triangulação de Delaunay para uma rede hexagonal com 400 elétrons. Neste caso, o valor máximo da constrição é  $V_0^* = 60$ , com (a)  $\alpha^* = 30$ , and  $\beta^* = 2$ ; (b)  $\alpha^* = \beta^* = 20$ .

### 3.4 Configurações do estado fundamental

As configurações de equilíbrio são um resultado de dois efeitos competitivos, a saber, a repulsão coulombiana e o potencial de constrição. Na ausência da constrição e com  $T = 0$ , o elétrons se cristalizam formando o cristal de Wigner. Entretanto, com o potencial de constrição a rede triangular não será mais perfeita e uma desordem local surgirá próximo à barreira, mas o elétrons ainda se organizarão numa rede triangular longe desta constrição. O elétrons próximos a constrição contribuem para o aumento do número de estados metaestáveis. Conseqüentemente, o procedimento SA deve ser mais preciso, ou seja, um número grande de intervalos de temperatura deve ser considerado. A desordem local criada pela constrição é mostrada na Figura (3.4) por meio da triangulação de Delaunay<sup>1</sup>.

A forma da barreira criada pela constrição depende dos parâmetros  $\alpha^*$  and  $\beta^*$ . Para  $\beta^* = 0$  há a formação de uma “parede” ao longo da direção  $y$  e o movimento dos elétrons na direção  $x$  é possível apenas passando por sobre ela. Sendo assim, há uma forte dependência

<sup>1</sup>A visualização da triangulação de Delaunay mostrada na Figura (3.4)(b) foi escolhida, dentre outras onze, para ser capa da Physical Review B (em maio de 2008) na seção Kaleidoscope.

da força de desancoramento com o valor de  $V_0^*$ . Na Figura (3.4)(a), é mostrado o efeito de uma constrição com  $\alpha^* > \beta^*$ , a saber,  $\alpha^* = 30$  e  $\beta^* = 2$ . Pode-se observar uma pequena desordem na rede cristalina apenas próximo à constrição, e se uma força externa for aplicada na direção  $x$ , os elétrons poderão fluir preferencialmente pelas bordas do sistema. Entretanto, quando a força de arrasto for grande, estes conseguem transpor a barreira. Na Figura (3.4)(b) vê-se a triangulação de Delaunay para  $\alpha^* = \beta^*$ ; esta condição produz uma desordem local fraca e o desancoramento do sistema ocorre mais facilmente, já que os elétrons movem-se inicialmente em volta da constrição. Na maioria dos cálculos realizados neste capítulo, foi usado apenas o caso mostrado na Figura (3.4)(a), com os seguintes parâmetros para  $N = 400$  elétrons:  $V_0^* = 60$ ,  $\alpha^* = 30$  and  $\beta^* = 2$ .

### 3.5 Propriedades dinâmicas

Um força de arrasto longitudinal  $F$  pode ser produzida quando um campo elétrico constante  $E$  é aplicado ao sistema na direção  $x$ . Dessa forma, os elétrons são compelidos na direção da força de arrasto. O resultado principal deste capítulo é a velocidade de arrasto dos elétrons, que é análoga a uma corrente elétrica. Na ausência de flutuações térmicas ( $T = 0$ ) e na ausência do potencial de constrição, as Equações (3.18) e (3.19) tornam-se:

$$\frac{d^2 x_i^*}{dt^{*2}} = -\varrho^* \frac{dx_i^*}{dt^*} - \frac{\partial}{\partial x_i^*} \sum_j \left( \frac{1}{r_{ij}^*} - \frac{1}{\sqrt{r_{ij}^{*2} + D}} \right) + F^*, \quad (3.23)$$

$$\frac{d^2 y_i^*}{dt^{*2}} = -\varrho^* \frac{dy_i^*}{dt^*} - \frac{\partial}{\partial y_i^*} \sum_j \left( \frac{1}{r_{ij}^*} - \frac{1}{\sqrt{r_{ij}^{*2} + D}} \right). \quad (3.24)$$

Além disso, no estado fundamental a força líquida que atua em cada partícula, devido a repulsão eletrostática, é nula, ou seja

$$\sum_j \frac{\partial}{\partial x_i^*} \left( \frac{1}{r_{ij}^*} - \frac{1}{\sqrt{r_{ij}^{*2} + D}} \right) = \sum_j \frac{\partial}{\partial y_i^*} \left( \frac{1}{r_{ij}^*} - \frac{1}{\sqrt{r_{ij}^{*2} + D}} \right) = 0. \quad (3.25)$$

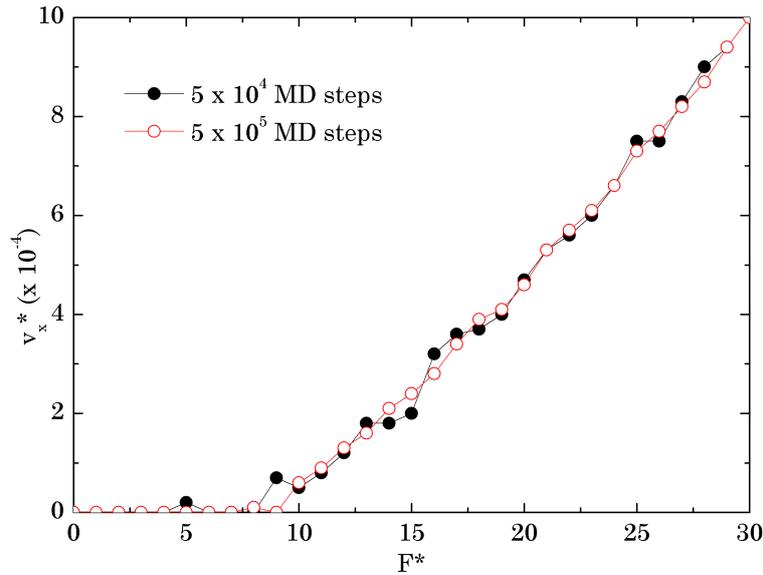


Figura 3.5: Velocidade média dos elétrons *versus* força de arrasto para simulações com dois diferentes números de passos de integração.

Assim, é possível alterar convenientemente as Equações (3.18) e (3.19) e obter duas equações desacopladas,

$$\frac{d^2 x^*}{dt^{*2}} = -\varrho^* \frac{dx^*}{dt^*} + F^*, \quad (3.26)$$

$$\frac{d^2 y^*}{dt^{*2}} = -\varrho^* \frac{dy^*}{dt^*}, \quad (3.27)$$

cujas soluções são,

$$v_x^* = \frac{dx^*}{dt^*} = \frac{F^*}{\varrho^*}, \quad (3.28)$$

$$v_y^* = \frac{dy^*}{dt^*} = 0. \quad (3.29)$$

Com isso, vê-se que na ausência de ruído térmico e da constrição, o efeito total da força de arrasto é o deslocamento de toda a estrutura cristalina com uma velocidade de arrasto diretamente proporcional à força externa e inversamente proporcional ao coeficiente de atrito. De maneira mais geral, quando o termo predominante na equação de movimento for a força de arrasto, espera-se que a velocidade de arrasto seja  $v_x^* = F^*/\varrho^*$ . Este comportamento é típico de um condutor de Drude [33] em duas dimensões e já observado em experimentos [44] e em cálculos numéricos [20].

Na prática, a velocidade de arrasto dos elétrons na direção  $x$  é medida como

$$v_x^* = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \vec{v}_i^* \cdot \hat{x}, \quad (3.30)$$

onde a média é tomada a cada incremento da força externa e sobre todo o intervalo de integração das equações de movimento. A Figura (3.5) mostra o resultado simulado da relação  $v_x^*$  versus  $F^*$  para um filme de hélio com  $d = 100\text{\AA}$  adsorvido em um substrato vítreo ( $\delta = 0.5789$ ). Note que há uma força crítica para o desancoramento  $F_c^*$  ( $\approx 9$ ), neste caso. Para valores de  $F^*$  abaixo do valor crítico, a rede é ancorada pela constrição e não há movimento líquido dos elétrons. Este tipo de *resposta dinâmica* indica claramente um *estado isolante* da rede de elétrons para valores da força de arrasto abaixo do desancoramento. Após  $F_c^*$ , há uma mudança brusca na velocidade do elétrons indicando que o cristal eletrônico torna-se condutor.

É importante deixar claro que o número de passos de integração é crucial para que o valor médio da velocidade de arrasto seja confiável. Isto fica claro na Figura (3.5), onde foi considerado duas simulações com tempos de integração diferentes, a saber,  $5 \times 10^4$  e  $5 \times 10^5$ . Um tempo de integração longo torna-se necessário para permitir que as partículas “viagem” por todo o sistema. De outra forma, alguns elétrons podem fazer uma trajetória muito pequena e acabar não ultrapassando a constrição. Como resultado, suas trajetórias poderiam fornecer um estatística pobre para o valor médio da velocidade de arrasto no limite da transição isolante-condutor. Note que quanto maior for o valor de  $F^*$ , maior é a semelhança entre as duas curvas, já que o movimento dos elétrons torna-se mais ordenado e estes são induzidos a se moverem de forma mais coerente na direção  $x$ . Outro ponto importante verificado é que valor da força crítica  $F_c^*$  e a inclinação da curva  $v_x^*-F_c^*$  independem da densidade  $n_s$  de elétrons. Isto é confirmado pela Figura (3.6).

A influência da altura da constrição no desancoramento é mostrada na Figura (3.7). Para o caso de um ancoramento fraco ( $V_0^*$  pequeno), a resposta da rede de elétrons à uma força externa é praticamente linear e os elétrons começam a fluir em canais para forças

maiores que  $f_c^*$ , produzindo um fluxo não-plástico, já que todas as partículas movem-se juntas, mantendo seus vizinhos. O gráfico interno da Figura (3.7) mostra que, quando o ancoramento começa a aumentar, a curva  $v^* - F^*$  começa a perder seu comportamento linear, mas logo o retoma quando a força de arrasto aumenta. Este comportamento é encontrado quando se estuda a resposta dinâmica das CDW no regime de fraco ancoramento [38]. Para um ancoramento forte (valores grandes de  $V_0^*$ ), alguns elétrons são refletidos pela constrição e ficam presos próximo a barreira. Neste caso, o desancoramento é, essencialmente, plástico. Este comportamento pode ser melhor entendido analisando-se o comportamento crítico perto da transição, que é feito utilizando a relação de escala dada por

$$v^* = \left( \frac{F^* - F_c^*}{F_c^*} \right)^\xi, \quad (3.31)$$

com  $\xi$  sendo o expoente crítico.

Na Figura (3.8) é mostrado o ajuste linear para tal relação de escala com alguns valores do máximo da constrição. Pode-se observar uma transição entre dois regimes de desancoramento. Para ambos os regimes, não-plástico e plástico, os valores dos expoentes

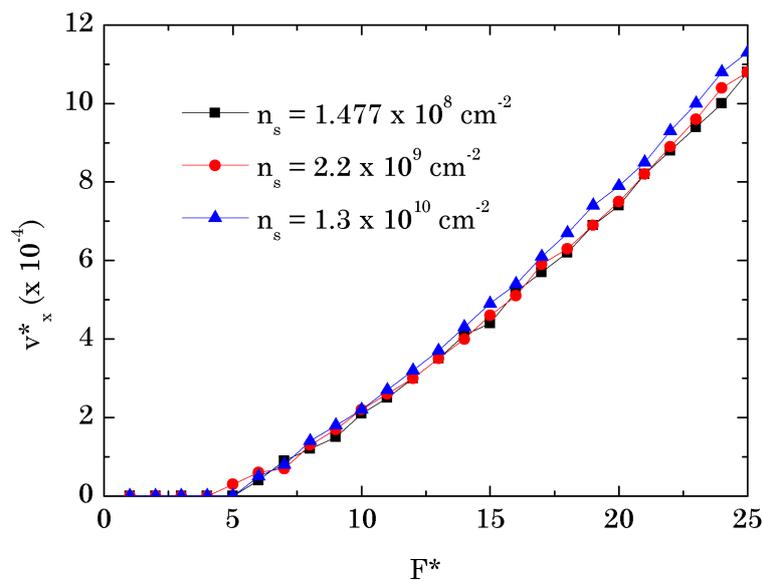


Figura 3.6: Velocidade média dos elétrons *versus* força de arrasto para três diferentes valores de densidade  $n_s$ .

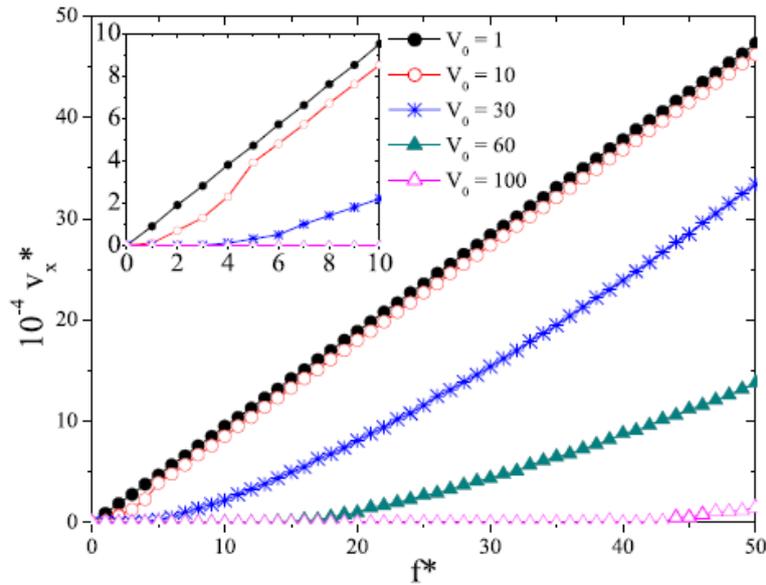


Figura 3.7: Velocidade de arrasto dos elétrons como função da força externa para alguns valores do máximo da constrição.

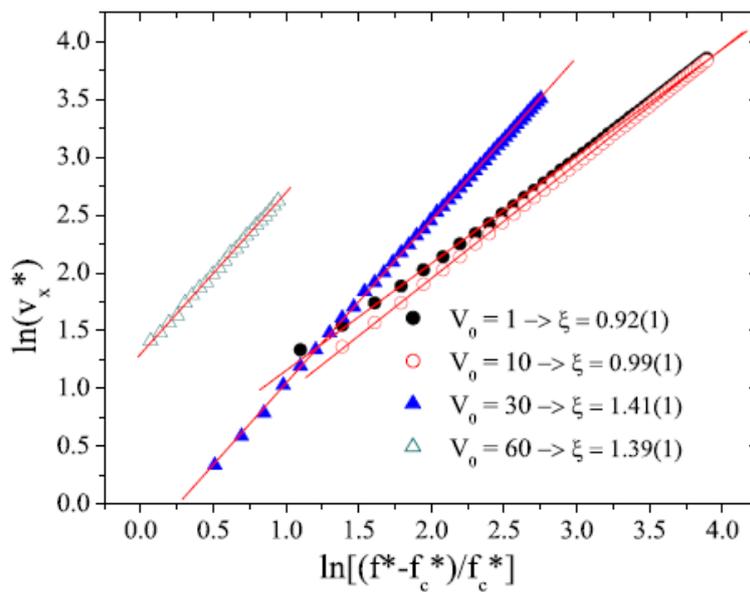


Figura 3.8: Comportamento de escala perto da transição isolante-condutor para alguns valores do máximo da constrição.

críticos estão em acordo com valores previstos analítica e numericamente [81]. Um estudo detalhado sobre as leis de escala e a dependência do expoente crítico com vários parâmetros do meio em questão será feito no próximo capítulo.

É bem conhecido que, quando a distância entre a camada de elétrons e o substrato é

menor que a distância média entre partículas  $r_0$ , a interação de Coulomb torna-se

$$V_{ee}(r) = \frac{e^2(1 - \delta)}{r} + \frac{2\delta e^2 d^2}{r^3}. \quad (3.32)$$

Isto implica que para um substrato metálico ( $\delta = 1$ ) têm-se uma interação dipolar. Por outro lado, se  $d \gg r_0$ , a blindagem devido ao substrato é desprezível e a interação é essencialmente coulombiana:

$$V_{ee}(r) = \frac{e^2}{r}. \quad (3.33)$$

Dessa forma, pode-se analisar a influência da espessura do filme e do tipo de substrato na

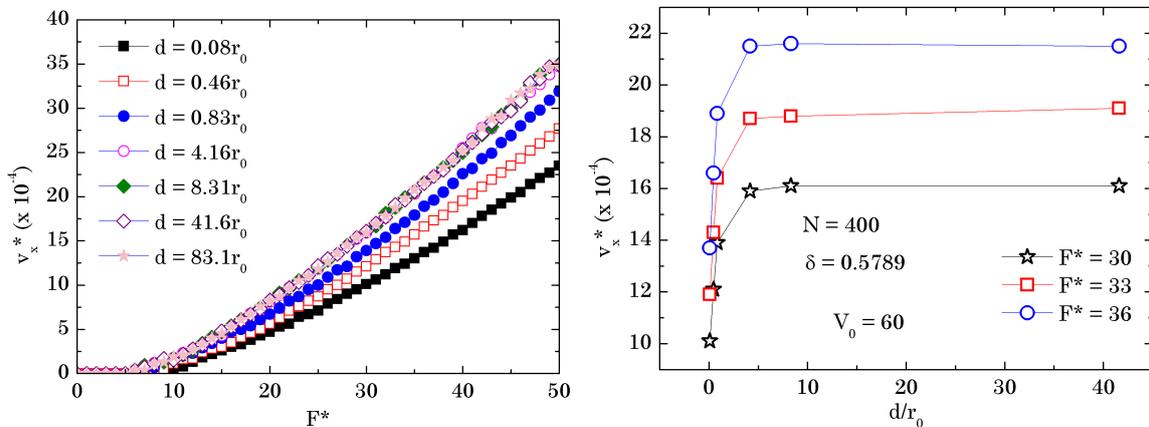


Figura 3.9: (esquerda) Velocidade de arrasto do elétrons como função da força externa para diferentes valores de espessura do filme. (direita) Note que para valores fixos da força externa, a velocidade (corrente) possui valor constante para o regime do hélio volumétrico e cai bruscamente para filmes finos, resultado da blindagem da interação elétron-elétron.

velocidade de arrasto dos elétrons. Na Figura (3.9), é mostrado as curvas  $v_x^*-F^*$  para vários valores de  $d$ . Note que o valor crítico de  $F^*$  decresce quando  $d$  aumenta e, assim, o sistema passa a conduzir mais rapidamente. Este é um resultado coerente já que a interação elétron-elétron torna-se predominante em comparação a interação elétron-construção. É interessante notar que quando  $d$  atinge o limite do hélio volumétrico ( $d \gg r_0$ ) o valor da força crítica não mais se altera e todas as curvas permanecem com a mesma inclinação.

Outro resultado importante relacionado com a blindagem da interação elétron-elétron é mostrado na Figura (3.10), onde é observado a dependência das curvas *velocidade-força externa* com alguns valores de  $\delta$  para um filme com espessura de  $100\text{\AA}$ . Nota-se que

quando a blindagem aumenta ( $\delta \rightarrow 1$ ) o valor crítico da força externa também aumenta, mostrando que a interação coulombiana torna-se menos importante comparada com o potencial de constricção. O expoente crítico da transição para  $\delta = 0.7$  foi estimado como  $\xi = 1.57(2)$ . Isto confirma o fluxo plástico para forças de ancoramento fortes. Estes resultados para o expoente crítico no regime plástico estão em excelente acordo com observações experimentais e predições teóricas em fenômenos de transporte em pontos quânticos metálicos [71].

### 3.5.1 Condutividade

De acordo com a lei de Ohm [111] a densidade de corrente de um sistema de partículas carregadas é proporcional ao campo elétrico aplicado, ou seja,

$$\vec{j} = \sigma \cdot \vec{E}, \quad (3.34)$$

onde  $\sigma$  é a condutividade específica. Geralmente, a condutividade pode ser expressa como um tensor de ordem dois, porém, devido a geometria do sistema investigado e já que o arrasto é apenas na direção  $x$ , pode-se calcular apenas  $\sigma_{xx}$ . Usando a definição de  $j = nqv$

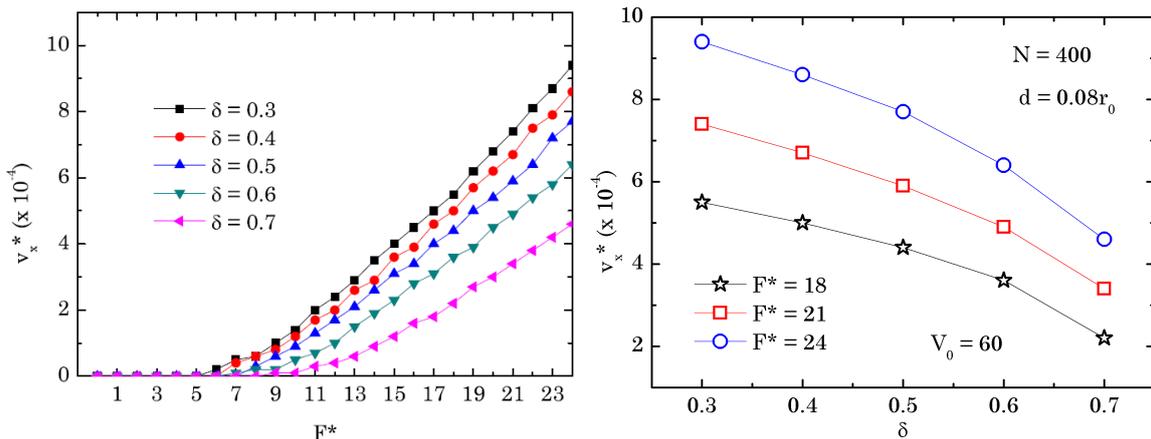


Figura 3.10: (esquerda) Velocidade de arrasto do elétrons como função da força externa para diferentes valores da constante dielétrica do substrato. (direita) Note que para valores fixos da força externa, a velocidade (corrente) diminui monotonicamente, resultado da blindagem da interação elétron-elétron.

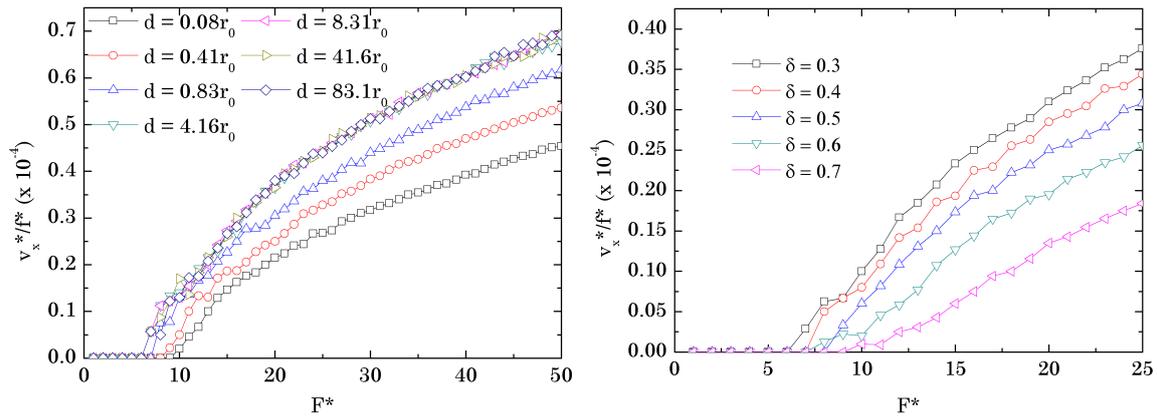


Figura 3.11: Razão entre velocidade e força de arrasto *versus* força externa para (esquerda) diferentes espessuras do filme e (direita) diferentes substratos. A condutividade é não-ôhmica em uma estreita região acima do desancoramento. Note que há uma tendência para um valor constante da condutividade para valores muito grande de  $F^*$ , satisfazendo a lei de Ohm.

juntamente com a Equação (3.28)

$$\sigma^* = n_s \frac{v_x^*}{F^*} = \frac{n_s}{\rho^*}. \quad (3.35)$$

Nota-se que a razão  $v_x^*/F^*$  é diretamente proporcional a  $\sigma^* = \sigma/(e^2\tau/m)$ . Na Figura (3.11) é mostrado alguns cálculos da quantidade  $v_x^*/F^*$  para diferentes valores da espessura do filme e da constante dielétrica do substrato. Obviamente, a condutividade é zero quando as partículas estão ancoradas pela constrição. Uma interessante característica é a existência de uma estreita região, após o desancoramento, onde a condutividade mostra um comportamento não-ôhmico, indo de zero até um possível valor de saturação  $1/\rho^*$ . Quando o valor da força de arrasto cresce muito e passa a ser o termo dominante na equação de movimento, as partículas passam a se comportar como um condutor tipo Drude. Vale notar que este comportamento é independente da densidade de partículas e da altura da constrição. Para grandes valores de  $V_0^*$  a região não-ôhmica é aumentada já que o valor da força crítica  $F_c^*$  aumenta também.

### 3.5.2 Reorganização dinâmica

O fenômeno conhecido como *reorganização dinâmica* foi observado para altos valores da força de arrasto. Mesmo para um valor alto da constrição, o sistema consegue fluir em

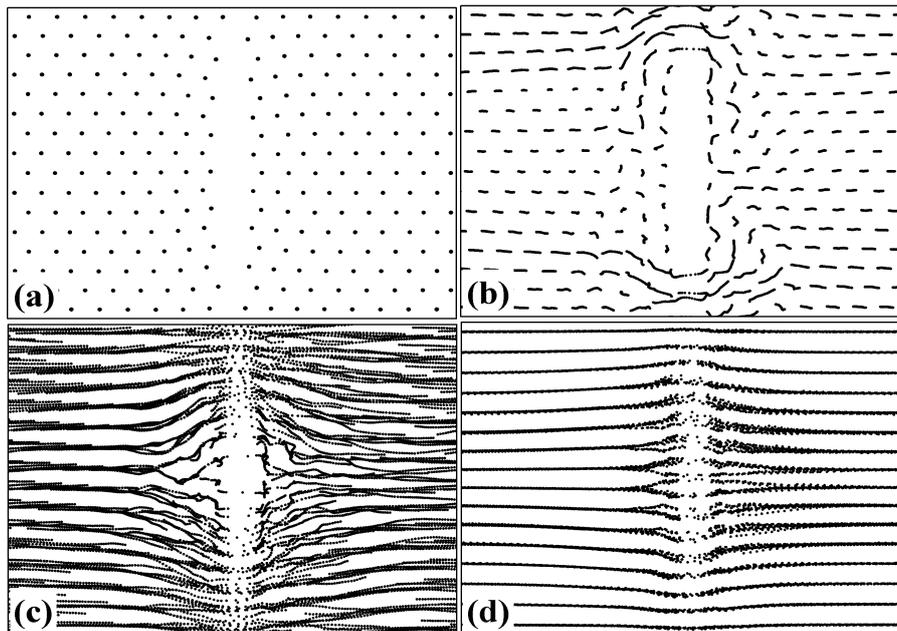


Figura 3.12: Trajetórias dos elétrons quando a força de arrasto é aumentada para um sistema com  $N = 256$ ,  $n_s = 1.3 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$ ,  $\delta = 0.5789$ ,  $V_0^* = 50$ ,  $\alpha^* = 20$  e  $\beta^* = 2$ .  $f_c^* =$  (a) 1.0, (b) 10.0, (c) 50.0 and (d) 100.0.

uma estrutura de canais ordenados. Isto pode ser visto na Figura (3.12), onde é mostrado as trajetórias dos elétrons para um sistema que contém  $N = 256$  partículas e para um potencial de constrição com  $V_0^* = 50$ ,  $\alpha^* = 20$  e  $\beta^* = 2$ . Neste caso, o sistema evoluiu por apenas  $5 \times 10^4$  passos de integração para cada valor de  $F^*$ . Isto é feito porque se as trajetórias forem tomadas após um longo tempo de integração, o fluxo dos elétrons ocorrerá por todo o sistema mesmo que a maioria deles tenham trajetórias específicas.

Enquanto a força de arrasto é aumentada, a rede de elétrons permanece ancorada, como na Figura 3.12(a), até que um certo valor limiar  $F_c^*$  seja alcançado, fazendo com que os elétrons comecem a se mover tentando transpor a constrição. A Figura 3.12(b) mostra que, inicialmente, os elétrons fluem em canais que se cruzam principalmente nas bordas do sistema. As Figuras 3.12(c) e 3.12(d) indicam que, para valores grandes da força externa, os canais, que antes se interconectavam, sofrem uma reorganização gradual e o sistema começa a se mover em uma estrutura de canais ordenados. Este tipo de fluxo indica que o sistema estudado aqui também mostra um caráter universal da *reorganização dinâmica*,

um assunto intensivamente estudado em uma grande variedade de sistemas, como por exemplo, em redes de vórtices em supercondutores tipo II [131], em colóides [53] e em sistemas CDW [11].

## 3.6 Conclusões

Em suma, neste capítulo foi estudado, usando simulação numérica por Dinâmica Molecular de Langevin, um sistema 2D de elétrons depositados sobre um filme de hélio adsorvido em um substrato sólido e submetidos a um campo elétrico externo. Foi examinada a influência da espessura do filme e o tipo de substrato na velocidade de arrasto dos elétrons. O sistema é ancorado por um potencial, no plano do elétrons, que possui a forma de uma Lorentziana. Foi observado que o cristal de Wigner sofre uma transição isolante-condutor para um certo valor crítico da força externa. Além disso, quando a espessura do filme é aumentada, o valor crítico da força decresce até um valor constante no regime de hélio volumétrico. Quando a constante dielétrica do substrato aumenta, o sistema torna-se menos susceptível a esta transição. Estes resultados são motivadores para uma melhor compreensão da influência do meio na transição metal-isolante em duas dimensões.

# Capítulo 4

## Efeito da temperatura e comportamento crítico

Neste capítulo, como no anterior, a Dinâmica Molecular de Langevin foi usada para investigar a resposta dinâmica de um cristal de elétrons clássico 2D, localizado sobre a superfície de um filme de hélio líquido, a um força de arrasto. Porém, neste caso, o sistema é tratado no regime de temperatura finita. O mesmo potencial de ancoramento foi considerado aqui. As características *corrente-voltagem*, que podem ser dadas por uma lei de escala do tipo  $I = f^\xi$ , foram analisadas para diferentes valores de temperatura e intensidade do potencial de ancoramento. Além disso, o caráter universal do *desancoramento* foi verificado para os vários parâmetros que definem o sistema. Os resultados que serão apresentados neste capítulo fornecem uma base numérica sobre a dinâmica de *desancoramento* e transporte coletivo em sistemas eletrônicos 2D e podem ser bastante úteis para a compreensão do grande intervalo de expoentes críticos encontrado em uma grande variedade de experimentos [12, 59, 91, 100].

### 4.1 Introdução

Sabe-se que a transição metal-isolante 2D apresenta comportamento não linear das características *corrente-voltagem* ( $I-V$ ), e um grande esforço teórico e experimental tem sido despendido para entender a dinâmica de estruturas periódicas deslocando-se sob a

ação de potenciais de ancoramento [16, 23, 32]. Exemplos interessantes de sistemas que exibem tais características são, além dos já citados rede de vórtices [13] e condutores CDW [50], transporte de carga em dots metálicos [81], bloqueio de Coulomb em nanomateriais condutores [4, 6, 90], magnetocondutividade não linear de cristais de Wigner 2D no superfluido  $^4\text{He}$  [70], e muitos outros. Em particular, para o caso de elétrons superficiais sobre hélio líquido, Shirahama e Kono encontraram uma transição dinâmica de um sólido de Wigner para um estado deslizante [110]. Neste caso, os elétrons são ancorados por deformações periódicas da superfície na presença de um campo magnético perpendicular às mesmas.

Como visto no capítulo 2, em todos estes sistemas, cuja resposta dinâmica é considerada um fenômeno crítico, é possível escrever uma lei de escala para as características  $I$ - $V$  usando a relação

$$I = f^\xi, \quad (4.1)$$

onde  $f = (V - V_t)/V_t$  é a voltagem reduzida [38]. O expoente  $\xi$  possui um grande intervalo de valores em ambos, teoria e experimento. Resultados analíticos em transporte de carga mostram que  $\xi = 1.0$  para o caso unidimensional (1D),  $\xi = 5/3$  para o caso 2D,  $\xi = 2.0$  para cálculos numéricos [81] e em experimentos [71, 91], este varia de  $\xi = 1.3$  até 2.5. Nestes casos, o transporte de elétrons foi analisado num sistema 2D de pontos quânticos metálicos fabricados com diferentes graus de desordem. Sendo assim, esta grande variedade de valores para o expoente crítico revela que teoria e experimento não possuem consenso. Logo, torna-se necessário entender como a intensidade da desordem afeta a característica não linear da curva ( $I$ - $V$ ). Além disso, não há uma boa compreensão sobre qual tipo de efeito é responsável pela *dinâmica de ancoramento* nestes sistemas.

Diante disto, neste capítulo, foram realizadas simulações por Dinâmica Molecular de Langevin (Apêndice B) visando o estudo do efeito da temperatura na resposta dinâmica de um sistema clássico de elétrons 2D sobre um filme de hélio, a uma força de arrasto

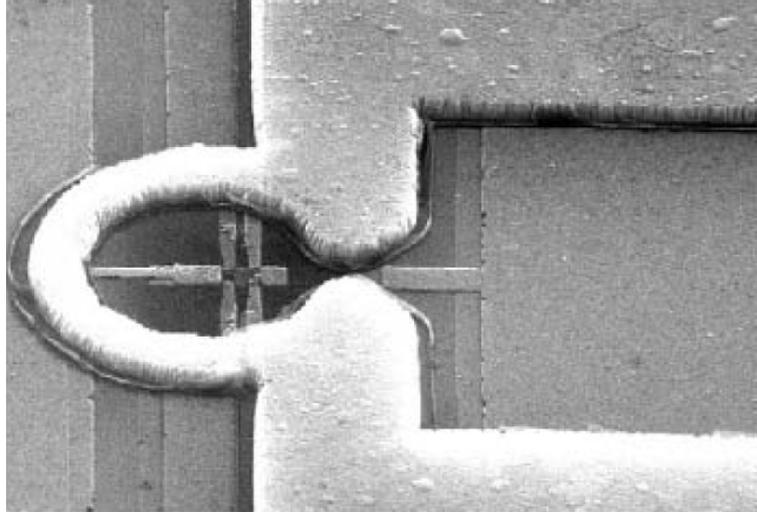


Figura 4.1: Um Transistor de Único Elétron (SET) usado para detecção de elétrons aprisionados sobre hélio. Os eletrodos do lado direito um reservatório de elétrons. Este é um dos microdispositivos produzidos para a criação do computador quântico [43].

externa. Como mostrado no capítulo 1, este sistema tem se mostrado muito importante durante quase três décadas. Teoria e experimento [83], juntamente com cálculos numéricos [25], têm mostrado sua extrema importância para o entendimento de sistemas de baixa dimensionalidade. No mais, vale lembrar que o modelo estudado aqui é um protótipo de um sistema eletrônico 2D no qual  $N$  partículas clássicas com carga  $e$  são depositadas sobre um filme de hélio líquido de constante dielétrica  $\epsilon_{He}$  adsorvido em um substrato com constante dielétrica  $\epsilon_s$ . Apenas recordando do capítulo 3, as partículas possuem coordenadas  $r = (x, y)$  e interagem via potencial de Coulomb blindado

$$V(r) = e^2 \left( \frac{1}{r} - \frac{\delta}{\sqrt{r^2 + 4d^2}} \right), \quad (4.2)$$

cuja blindagem é controlada pela espessura do filme  $d$  e o parâmetro  $\delta = (\epsilon_s - \epsilon_{He})/(\epsilon_s + \epsilon_{He})$ . Além disso, as características de transporte coletivo e a dinâmica não linear foram analisadas condicionando à presença de um potencial de constrição, o mesmo usado no capítulo anterior, isto é,

$$V_c(x, y) = \frac{V_0}{1 + \alpha^2 x^2 + \beta^2 y^2} \quad (4.3)$$

É válido lembrar que este tipo de constrição pode ser realizada experimentalmente pela adição de um (central) ou vários microeletrodos submergidos dentro do hélio e sobre a

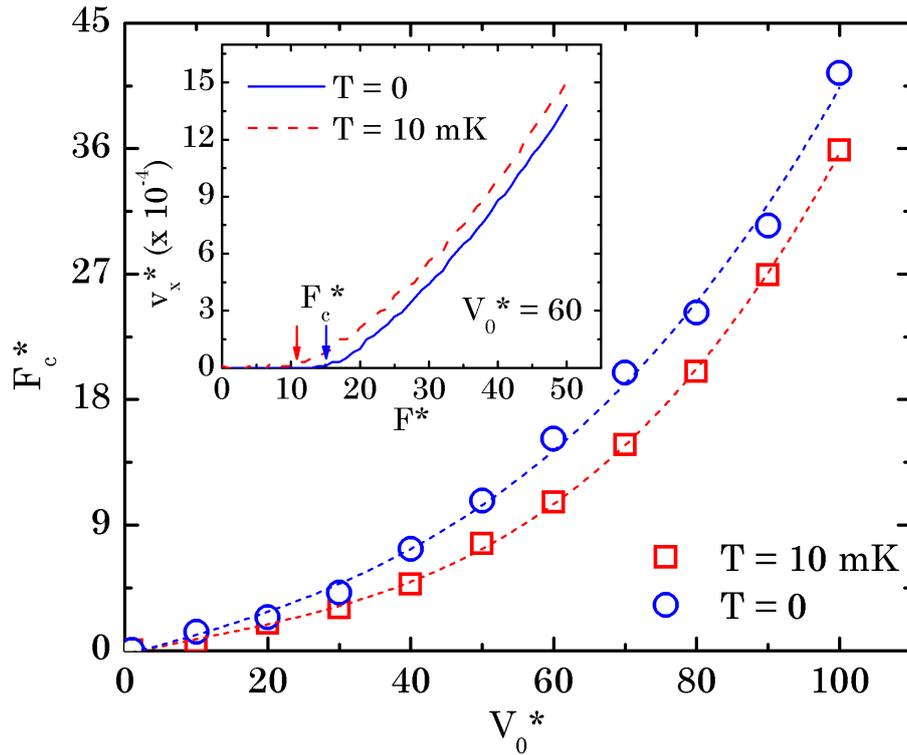


Figura 4.2: Valor crítico da força de arrasto como função da altura da constrição  $V_0^*$  para dois valores fixos de temperatura, a saber,  $T = 0$  (círculos) e  $T = 10$  mK (quadrados). A linha pontilhada é um ajuste com uma lei de potência. O gráfico interno mostra a velocidade de arrasto dos elétrons como função da força de arrasto para os mesmos valores de temperatura e uma constrição  $V_0^* = 60$ .

superfície do substrato. Isto cria uma armadilha eletrônica com uma alta capacitância (ver Figura (4.1)). Tal arranjo de armadilhas tem sido proposto para a geração de qubits [43, 45, 89]. Usando o mesmo procedimento do capítulo anterior, uma força de arrasto  $F$  é aplicada à direção  $x$  para simular o efeito de um campo elétrico externo.

Como no capítulo anterior, foi usada a dinâmica de Langevin para integrar numericamente as equações de movimento dadas por

$$m\ddot{r} = -\nabla U(r) - \rho m\dot{r} + \zeta(t), \quad (4.4)$$

onde  $U = V + V_c$ ,  $\rho$  é o coeficiente de atrito e  $\zeta(t)$  é o vetor de força aleatória que simula um ruído térmico com valor médio  $\langle \zeta_i(t) \rangle = 0$  e desvio padrão  $\langle \zeta_i(t)\zeta_j(t') \rangle = 2m\rho k_B T \delta_{ij} \delta(t-t')$ . As simulações foram realizadas em uma caixa retangular com área  $A$  para uma densidade fixa  $n_s = 2.2 \times 10^9 \text{ cm}^{-2}$ . Os lados da caixa de simulação possuem

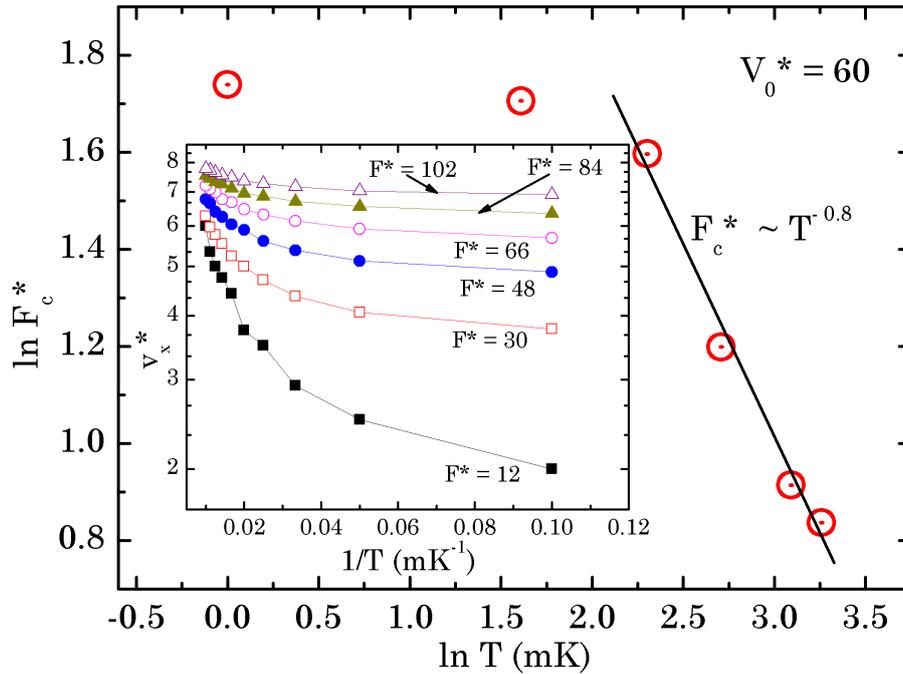


Figura 4.3: Dependência com a temperatura dos valores críticos da força de arrasto  $F_c^*$ , para um constrição com  $V_0^* = 60$ . gráfico interno: dependência com a temperatura da corrente  $v_x^*$  em diferentes voltagens  $F^*$  para a mesma constrição.

a razão  $\sqrt{3}/2$  para permitir que  $4M^2$  elétrons auto se organizem numa rede triangular perfeita no caso de temperatura e campo externo nulo. Além disso, foram usadas condições periódicas de contorno e a interação elétron-elétron foi tratada com o método da soma de Ewald. Como antes, as quantidades reduzidas são todas identificadas por \*. O efeito da temperatura na resposta dinâmica dos elétrons à uma força de arrasto no sistema é determinada cuidadosamente selecionando parâmetros do sistema de forma a observar a física essencial com temperaturas variando de 1 até 100 mK,  $d = 100\text{\AA}$ ,  $\delta = 0.5789$  (substrato vítreo),  $\alpha^* = 2$ ,  $\beta^* = 30$  e  $N = 400$  elétrons. Os valores de  $\alpha^*$  e  $\beta^*$  afetam apenas o valor da força crítica e não estão relacionados com o tipo de fluxo dos elétrons. A força de arrasto foi acrescida de pequenos incrementos a partir de zero e para cada valor de  $F^*$  mede-se  $v_x^* = 1/N \sum_i \vec{v}_i^* \cdot \hat{x}$  após  $10^6$  passos de simulação. A velocidade média dos elétrons  $v_x^*$  e a força externa  $F^*$  podem ser diretamente relacionadas com a corrente ( $I$ ) e a voltagem ( $V$ ) em experimentos de medidas DC, respectivamente. Esta é a razão pela qual a relação  $v_x^*-F^*$  será chamada de curvas *corrente-voltagem*.

## 4.2 Resultados

Na Figura (4.2) pode-se ver a força crítica  $F_c^*$  como função do máximo da constrição  $V_0^*$  para dois valores fixos de temperatura,  $T = 0$  (círculos) e  $T = 10$  mK (quadrados). O fato do valor crítico da força aumentar como um todo é consistente com o aumento da força necessária para que os elétrons vençam a constrição. Fica claro que os valores críticos de  $F_c^*$  são deslocados para valores menores quando  $T$  aumenta, indicando que uma temperatura finita reduz o efeito da constrição, e como já mencionado, está diretamente associada com a intensidade de desordem no sistema. A energia térmica adquirida pelos elétrons favorece o seu fluxo através da barreira e assim, a força crítica diminui. O gráfico interno mostra  $v_x^*$  vs  $F^*$  (curvas *corrente-voltagem*) para os mesmo dois valores de temperatura e  $V_0^* = 60$  (as setas indicam o local da transição, isto é, da força crítica). É válido notar que estas curvas não mudam suas inclinações quando a temperatura aumenta. Tal comportamento é um indício de que o expoente crítico da transição não deve depender da temperatura para este valor específico de desordem ( $V_0^* = 60$ ).

A dependência com a temperatura da força crítica  $F_c^*(T)$ , para um valor fixo do máximo da constrição  $V_0^* = 60$ , é mostrada na Figura (4.3). Observou-se que para  $T \gtrsim 10$  mK a força crítica diminui com o aumento da temperatura e obedece uma lei de potência  $F_c^* \sim T^{-\gamma}$  com o expoente  $\gamma = 0.8$ . Este tipo de decaimento linear da força crítica é um resultado coerente com medidas experimentais em sistemas não lineares, porém, o expoente  $\gamma$  parece depender dos detalhes do sistema e do tipo de desordem envolvida. Particularmente, os resultados de  $F_c^*(T)$  encontrados aqui fornecem um expoente cujo valor é próximo ao encontrado em medidas de transporte coletivo em nanofibras de polímeros no limite Q1D [4, 90]. O gráfico interno mostra *corrente* ( $v_x^*$ ) como função da temperatura para alguns valores de *voltagem* ( $F^*$ ). Como pode-se notar, para altas temperaturas e baixa voltagem há uma forte dependência da *corrente* com a temperatura, enquanto que no regime de baixa temperatura e altas *voltagens* a curva *corrente-voltagem* é prati-

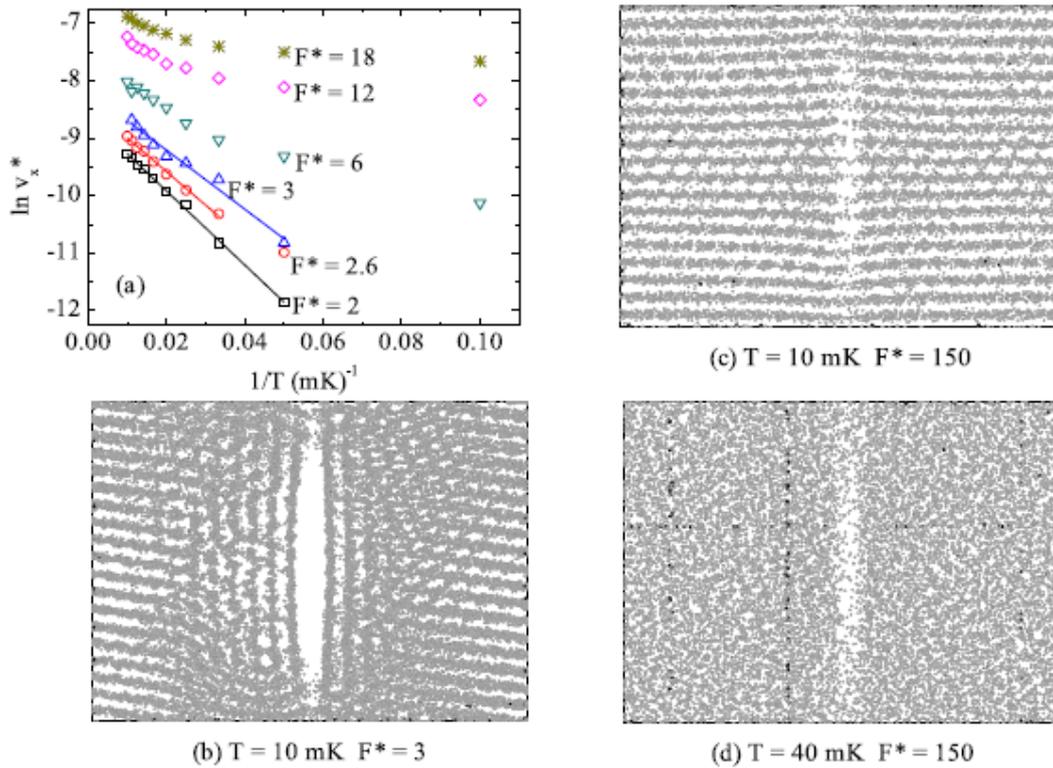


Figura 4.4: (a) Dependência com a temperatura da *corrente* para alguns valores de *voltagem aplicada* com  $V_0^* = 60$ . Trajetória dos elétrons para (b)  $T = 10 \text{ mK}$  e  $F^* = 3$ , (c)  $T = 10 \text{ mK}$  e  $F^* = 150$ , e (d)  $T = 40 \text{ mK}$  e  $F^* = 150$ .

camente independente da temperatura. De maneira geral, o comportamento observado aqui está em excelente acordo com alguns experimentos em sistemas que apresentam o fenômeno de bloqueio de Coulomb [4] no transporte de carga e condução não ôhmica [3]. As curvas no gráfico interno da Figura (4.3) exibem um comportamento que qualitativamente semelhante ao observado na transição metal-isolante em sistemas 2D em estudos numéricos [98] e experimentais [14].

Na Figura (4.4) é mostrado um resultado que fornece um esclarecimento a mais a respeito da *corrente* como função da temperatura. Para sistemas no nível de baixas voltagens, ou seja,  $F^* \leq 3$ , os resultados obtidos aqui são fitados muito bem usando a *relação de Arrhenius* dada por

$$I \propto \exp(-E_a^*/k_B T), \quad (4.5)$$

onde  $E_a^*$  é a *energia de ativação* necessária para ativar a corrente, veja Figura (4.4)(a).

Observou-se que a energia de ativação deve ser da ordem de  $\sim 51 - 64$  no intervalo de *voltagem* variando entre 2 até 3. Tal intervalo é bem próximo da energia de ancoramento  $V_0^* = 60$ . Esta concordância entre as energias de ancoramento e ativação mostra que o transporte é determinado pelo mecanismo de ativação térmica neste intervalo de temperatura e *voltagem*. Aumentando-se ainda mais a *voltagem*, isto é, para  $F^* \geq 6$ , a energia de ativação decresce e aproxima-se de  $k_B T$ , fazendo com que a corrente desvie da relação de Arrhenius. Este comportamento pode ser entendido pelo mecanismo dos canais de condução que surgem com o fluxo do elétrons. O aumento da temperatura dá origem a novos canais de condução e a corrente torna-se termicamente ativada mesmo para valores pequenos da força externa (veja Figura (4.4)(b)), já que a temperatura reduz a barreira ao movimento dos elétrons, criada pela constrição, em alguns dos canais. Para altas *voltagens* e baixas temperaturas o padrão de canais permanece (Figura (4.4)(c)) indicando que a *corrente* total torna-se quase independente da temperatura. Entretanto, para altas temperaturas a estrutura de canais é completamente destruída (Figura (4.4)(d)) mesmo para altas *voltagens*.

### 4.2.1 Leis de escala

O efeito da temperatura e da desordem no comportamento de escala do desancoramento é mostrado nas Figuras (4.5) e (4.6). O expoente de crítico  $\xi$  é dado por

$$\xi = \ln v_x / \ln f^*, \quad (4.6)$$

onde  $f^* = (F^* - F_c^*)/F_c^*$  é uma variável reduzida. Foi encontrado um expoente crítico  $\xi \sim 1.36 \pm 0.03$  no intervalo de temperatura variando de  $T = 0$  a 25 mK para um valor fixo da altura da constrição  $V_0^* = 60$ , como mostrado no gráfico interno da Figura (4.5). Para uma desordem relativamente fraca, o expoente crítico é praticamente independente da temperatura. Os valores de  $\xi$  obtidos neste intervalo de temperatura e para tal constrição estão em acordo com as predições da teoria de campo médio [38] e com resultados

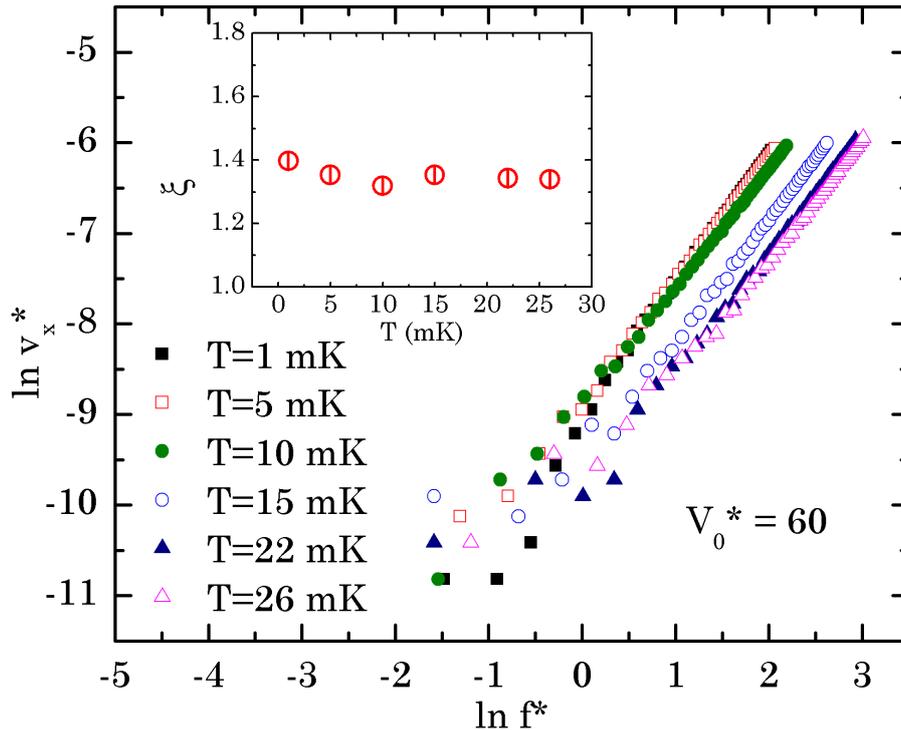


Figura 4.5: Comportamento de escala  $v_x^* = f^{*\xi}$  da corrente com a voltagem reduzida  $f^* = (F^* - F_c^*)/F_c^*$  para diferentes temperaturas e uma constricção com  $V_0^* = 60$ . O gráfico interno mostra a dependência com a temperatura do expoente  $\xi$ .

experimentais para transporte de cargas em pontos quânticos metálicos [34].

Por outro lado, quando a altura da constricção é variada mantendo-se a temperatura constante em  $T = 10$  mK, veja o gráfico interno da Figura (4.6), o expoente crítico  $\xi$  varia de  $\sim 1.0$  até  $\sim 1.7$ . Este comportamento tipo degrau é uma indicação clara da transição de um regime fluxo *quasi-elástico* para plástico. Tal transição também foi observada em sistemas coloidais quando a intensidade da desordem é aumentada [95]. O regime *quasi-elástico* ( $\xi$  próximo da unidade) é um regime intermediário entre o elástico ( $\xi = 2/3$ ) e o plástico ( $\xi = 3/2$ ). O valores grandes de  $V_0^*$  resultam num arranjo complexo dos canais de condução, nos quais o número de vizinho mais próximos de cada partícula muda. Isto é conhecido como *fluxo plástico*. Para grandes valores da altura da constricção, o expoente crítico está em excelente acordo com resultados experimentais [3] e analíticos [81]. Esta é uma forte evidência de que a barreira ao movimento dos portadores é uma das razões principais para o grande número de valores diferentes de  $\xi$  em vários experimentos

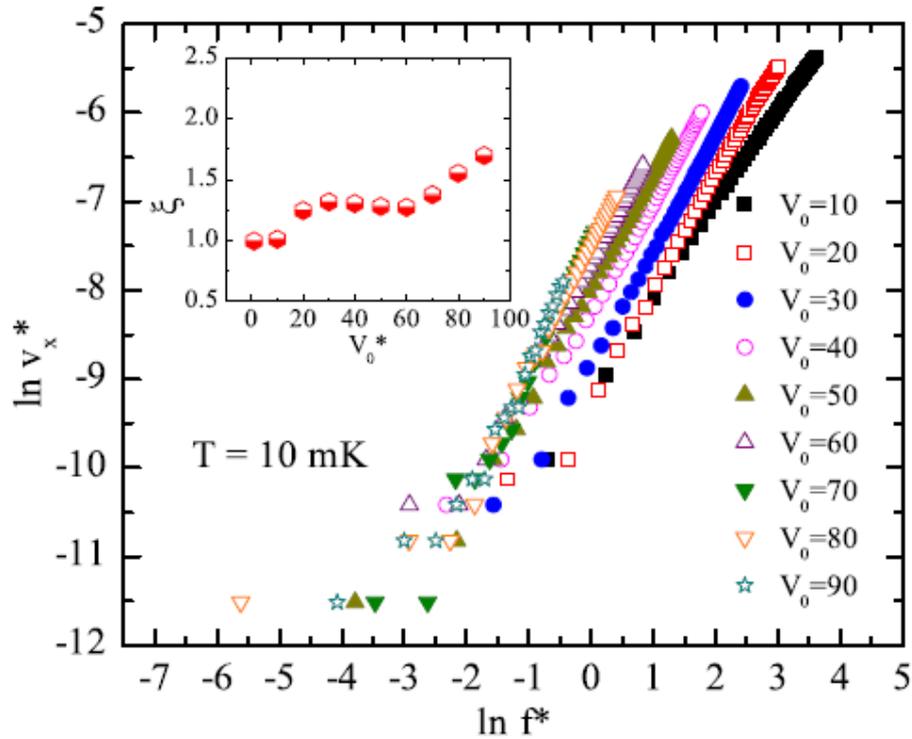


Figura 4.6: Comportamento de escala  $v_x^* = f^{*\xi}$  da corrente com a voltagem reduzida  $f^* = (F^* - F_c^*)/F_c^*$  para vários valores do máximo da constrição e a uma temperatura  $T = 10\text{mK}$ . O gráfico interno mostra a dependência com a altura da barreira do expoente  $\xi$ .

## 4.2.2 Universalidade

A altura da barreira está diretamente relacionada com a intensidade da desordem criada no sistema, apesar de ser apenas uma desordem local. Diferentes formas da constrição (Lorentziana, Gaussiana, etc.) produzem a mesma desordem local e não têm influência nos diferentes valores do expoente crítico. A influência do alcance da constrição foi testada e verificamos que a mudança dos parâmetros  $\alpha$  e  $\beta$  (seja para lorentziana ou gaussiana) altera apenas o valor da força de desancoramento. Como já era esperado, o mesmo comportamento nas leis de escala foi observado.

Surge então um ponto importante quanto a universalidade do expoente crítico. Segundo Fisher [39], este expoente no regime elástico será universal dentro de uma determinada classe de problemas, podendo depender dos detalhes do sistema em outra classe. De fato, sabe-se que uma propriedade fundamental da *universalidade* é a não dependência do

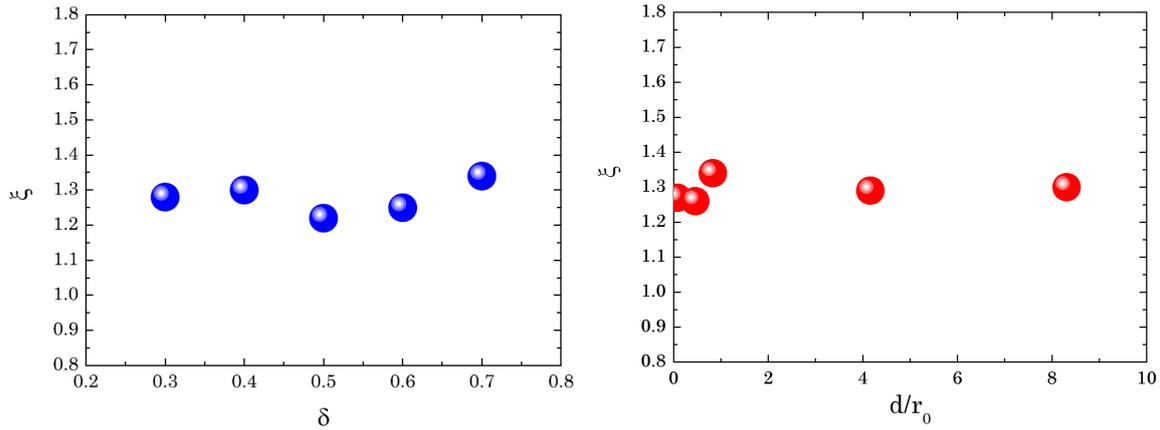


Figura 4.7: Dependência do expoente crítico  $\xi$  com o tipo de substrato (esquerda) e a espessura do filme (direita).

expoente com os detalhes do sistema. Por outro lado, a força crítica geralmente depende destes detalhes e não possui caráter universal. É claro, pela teoria, que o expoente crítico dependa apenas da dimensão e do tipo do potencial de desordem, da lei de decaimento das interações (se são de longo alcance) e do tipo de dinâmica.

Na Figura (4.7), mostramos a dependência do expoente crítico com o tipo de substrato e a espessura do filme e notamos que ele não depende destes detalhes. Juntamente com a não dependência com a temperatura (gráfico interno da Figura(4.5)), vemos que o comportamento do nosso sistema satisfaz a condição de *universalidade* esperada. Com relação ao caráter não-universal do expoente em função da intensidade de desordem, o mesmo comportamento é obtido numa variedade de experimentos [91] e cálculos numéricos [99]. Nossos resultados mostram que, mesmo sendo escalado por uma mesma lei, a variação no expoente está inerentemente relacionada com a intensidade da desordem que ancora o sistema.

## 4.3 Conclusões

Em suma, neste capítulo foi analisado o fenômeno de transporte coletivo em um sistema 2D de elétrons sobre um filme de hélio líquido adsorvido em um substrato sólido. O

sistema é submetido a um campo elétrico externo paralelo ao plano dos elétrons. Toda a análise foi baseada na influência da temperatura nas características *corrente vs voltagem* e nas leis de escala durante a transição isolante-condutor. Observou-se que o expoente crítico  $\xi$  é praticamente independente da temperatura para os valores fixados do máximo da constrição  $V_0^*$ . Entretanto, há uma forte dependência do expoente crítico com a intensidade do potencial de ancoramento. Os valores encontrados variam de  $\sim 1.00$  a  $\sim 1.70$  para diferentes valores de temperatura e altura da barreira. Acredita-se que esta dependência seja uma das razões principais da grande variedade de expoentes encontrada em vários experimentos e cálculos numéricos.

# Capítulo 5

## Considerações finais

Neste trabalho estudamos propriedades dinâmicas de um cristal de Wigner 2D formado sobre a superfície de um filme de hélio adsorvido em um substrato, interagindo com um potencial de constrição na forma de uma lorentziana. A resposta do sistema a uma força de arrasto externa foi analisada usando simulação computacional por meio da Dinâmica Molecular de Langevin. Este estudo foi feito para várias condições de temperatura, espessura do filme, tipo de substrato e intensidade da desordem. O potencial de constrição cria uma fase *isolante* para o cristal, ancorando-o à superfície e com a aplicação da força externa, os elétrons são acumulados em suas proximidades organizando-se de tal forma a contrabalancear a força de arrasto. Quando esta força atinge um valor crítico, os elétrons conseguem transpor a barreira e o sistema desancora dando origem a um fluxo, ou melhor, começa a conduzir. Nós analisamos em detalhes o fenômeno do desancoramento e verificamos que o sistema apresenta um comportamento de dinâmica crítica (com fluxo plástico ou não-plástico) após a força crítica ser alcançada. Além disso, verificamos a universalidade do sistema quanto aos detalhes que o definem e os nossos resultados para o expoente crítico são motivadores (além de estarem de acordo com uma vasta gama de resultados experimentais e numéricos) para entender a influência do tipo de desordem e de sua intensidade no desancoramento de sistemas eletrônicos 2D quando submetidos a uma força de arrasto.

# Apêndice A

## Potencial eletrostático de uma carga imersa num meio com três dielétricos planares

Barrera et al. [8] obtiveram o potencial eletrostático produzido por uma carga  $q$  imersa num meio não homogêneo com três dielétricos planares perpendiculares ao eixo  $z$  e caracterizado pelas seguintes constantes dielétricas:

$$\epsilon_1, z < -a; \quad \epsilon_2, -a < z < a; \quad \epsilon_3, z > a.$$

A carga está localizada no eixo  $z$  em  $z = z'$ . A geometria do problema é mostrada na Figura (A.1), sendo  $\vec{r}$ ,  $z$  e  $\phi$  coordenadas cilíndricas. Como o problema tem simetria azimutal, o potencial em coordenadas cilíndricas não depende de  $\phi$ . Portanto, introduz-se a notação  $V(\vec{r}, z; z')$  como sendo o potencial em  $(\vec{r}, z)$  devido a uma carga em  $z = z'$ .

Para ver a solução de um caso particular deste problema, recomenda-se ler [111]. Seguem as expressões das transformadas de Fourier em duas dimensões do potencial eletrostático em todas as regiões do espaço obtidas por Barrera et al.

Região 1:  $-a < z' < a$

$$V(k, z > a; z') = \left( \frac{2q}{\epsilon_2 + \epsilon_3} \right) \frac{2\pi}{k} \Delta(k, d) \left[ e^{-k|z-z'|} - \delta_1 e^{-k(d+|z+z'|)} \right] \quad (\text{A.1})$$

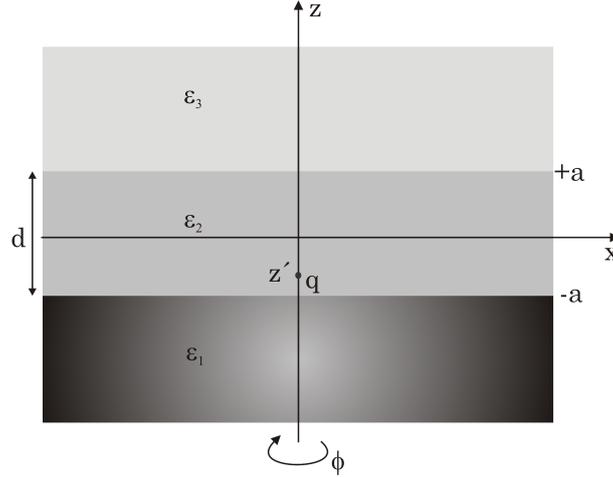


Figura A.1: Carga  $q$  localizada num meio com três dielétricos planares.

$$\begin{aligned}
 V(k, -a < z < a; z') &= \frac{q}{\epsilon_2} \frac{2\pi}{k} \left\{ e^{-k|z-z'|} \right. \\
 &\quad - \Delta(k, d) \left[ \delta_1 e^{-k|z+z'+d|} + \delta_2 e^{-k|z+z'-d|} \right. \\
 &\quad \left. \left. - \delta_1 \delta_2 e^{-2kd} \left( e^{-k|z-z'|} + e^{k|z-z'|} \right) \right] \right\} \quad (A.2)
 \end{aligned}$$

$$V(k, z < -a; z') = \left( \frac{2q}{\epsilon_2 + \epsilon_1} \right) \frac{2\pi}{k} \Delta(k, d) \left[ e^{-k|z+z'|} - L_{32} e^{-k|d-z+z'|} \right] \quad (A.3)$$

Região 2:  $z' > a$

$$\begin{aligned}
 V(k, z > a; z') &= \frac{q}{\epsilon_3} \frac{2\pi}{k} \left[ e^{-k|z-z'|} + L_{32} e^{-k|z+z'-d|} \right. \\
 &\quad \left. - \left( \frac{2\epsilon_3}{\epsilon_3 + \epsilon_2} \right) \left( \frac{2\epsilon_2}{\epsilon_2 + \epsilon_3} \right) L_{12} \Delta(k, d) e^{-k(d+|z|+|z'|)} \right] \quad (A.4)
 \end{aligned}$$

$$V(k, -a < z < a; z') = \left( \frac{2q}{\epsilon_3 + \epsilon_2} \right) \frac{2\pi}{k} \Delta(k, d) \left[ e^{-k|z-z'|} - L_{12} e^{-k(d+|z+z'|)} \right] \quad (A.5)$$

$$\begin{aligned}
 V(k, z < -a; z') &= q \left( \frac{2}{\epsilon_2 + \epsilon_1} \right) \left( \frac{2\epsilon_2}{\epsilon_2 + \epsilon_3} \right) \left[ e^{-k|z-z'|} - e^{-k(|z|+|z'|)} \right. \\
 &\quad \left. + \Delta(k, d) e^{-k(|z|+|z'|)} \right] \quad (A.6)
 \end{aligned}$$

O caso  $z' < -a$  é obtido diretamente do primeiro trocando-se  $\epsilon_1$  por  $\epsilon_3$  e  $z$  por  $-z$ .

Nas expressões acima foram usadas as seguintes definições:

$$L_{i2} \equiv \frac{\epsilon_i - \epsilon_2}{\epsilon_i + \epsilon_2}; \quad i = 1, 3,$$

e

$$\Delta(k, d) \equiv \frac{1}{[1 - L_{12}L_{32}e^{-2kd}]}$$

Define-se a transformada de Fourier em duas dimensões  $F(\vec{k}, z)$  da função  $f(\vec{r}, z)$ , como

$$F(k, z) = \int d^2r f(\vec{r}, z) e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}}, \quad (\text{A.7})$$

onde  $\vec{k}$  e  $\vec{r} = (r, \phi)$  são vetores bidimensionais paralelos às interfaces. A transformada inversa é dada por

$$f(\vec{r}, z) = \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} F(\vec{k}, z) e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}. \quad (\text{A.8})$$

Como o problema tem simetria cilíndrica, podemos escrever

$$V(\vec{r}, z; z') = \int_0^\infty \frac{kdk}{(2\pi)^2} V(k, z; z') \int_0^{2\pi} d\phi e^{ikr \cos \phi},$$

sendo irrelevante o eixo pelo qual  $\phi$  é definido. Porém, a integral em  $\phi$  é uma representação da função de Bessel de ordem zero

$$J_0(x) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\phi e^{ix \cos \phi}, \quad (\text{A.9})$$

logo, o potencial eletrostático no espaço real pode ser escrito como uma integral definida de  $V(\vec{k}, z; z')$

$$V(\vec{r}, z; z') = \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty kdk J_0(kr) V(\vec{k}, z; z'). \quad (\text{A.10})$$

Para obter o potencial eletrostático no espaço real para cada um dos casos anteriores é necessário usar a Equação (A.10). Antes disso, é conveniente mudar um pouco a geometria da Figura (A.1) fazendo a seguinte mudança de variáveis:

$$z' \rightarrow z' - d/2 \quad z \rightarrow z - d/2$$

além disso,

$$\epsilon_3 \rightarrow \epsilon_1 = 1; \quad \epsilon_2 \rightarrow \epsilon_2 = \epsilon_H; \quad \epsilon_1 \rightarrow \epsilon_3 = \epsilon_{\epsilon_S}.$$

Isto é conveniente para tratar um problema de elétrons sobre a superfície de um filme de hélio líquido de constante dielétrica  $\epsilon_H$  adsorvido em um substrato sólido de constante dielétrica  $\epsilon_S$ . Com tal mudança, obtêm-se

Região 1:  $-d < z' < 0$

$$V(k, z > 0; z') = \left( \frac{2q}{\epsilon_H + 1} \right) \frac{2\pi}{k} \Delta(k, d) \left[ e^{-k|z-z'|} - \delta_1 e^{-k(d+|z+z'-d|)} \right]. \quad (\text{A.11})$$

$$V(k, -d < z < 0; z') = \frac{q}{\epsilon_H} \frac{2\pi}{k} \left\{ e^{-k|z-z'|} - \Delta(k, d) \left[ \delta_1 e^{-k|z+z'|} + \delta_2 e^{-k(|z+z'-2d|)} - \delta_1 \delta_2 e^{-2kd} (e^{-k|z-z'|} + e^{k|z-z'|}) \right] \right\}. \quad (\text{A.12})$$

$$V(k, z < -d; z') = \left( \frac{2q}{\epsilon_H + \epsilon_S} \right) \frac{2\pi}{k} \Delta(k, d) \left[ e^{-k|z+z'-d|} - \delta_2 e^{-k(|d-z+z'-d|)} \right]. \quad (\text{A.13})$$

Região 2:  $z' > 0$

$$V(k, z > 0; z') = q \frac{2\pi}{k} \left[ e^{-k|z-z'|} + \delta_2 e^{-k|z+z'|} - \left( \frac{2}{1 + \epsilon_H} \right) \left( \frac{2\epsilon_H}{1 + \epsilon_h} \right) \delta_1 \Delta(k, d) e^{-k(d+|z-d/2|+|z'-d/2|)} \right]. \quad (\text{A.14})$$

$$V(k, -d < z < 0; z') = \left( \frac{2q}{\epsilon_H + 1} \right) \frac{2\pi}{k} \Delta(k, d) \left[ e^{-k|z-z'|} - \delta_1 e^{-k(d+|z+z'-d|)} \right]. \quad (\text{A.15})$$

$$V(k, z < -d; z') = q \frac{2\pi}{k} \left( \frac{2}{\epsilon_H + \epsilon_S} \right) \left( \frac{2\epsilon_H}{\epsilon_H + 1} \right) \left[ e^{-k|z-z'|} - e^{-k(|z-d/2|+|z'-d/2|)} + \Delta(k, d) e^{-k(|z-d/2|+|z'-d/2|)} \right]. \quad (\text{A.16})$$

Agora é possível escrever as expressões para o potencial no espaço real utilizando a Equação (A.8).

Região 1:  $-d < z' < 0$

$$V(\rho, z > 0; z') = \frac{2q}{1 + \epsilon_H} \left\{ \int_0^\infty \frac{dk J_0(k\rho) e^{-k|z-z'|}}{1 - \delta_1 \delta_2 e^{-2kd}} - \delta_1 \int_0^\infty \frac{dk J_0(k\rho) e^{-k(d+|z+z'-d|)}}{1 - \delta_1 \delta_2 e^{-2kd}} \right\}. \quad (\text{A.17})$$

Expandindo o denominador

$$(1 - \delta_1 \delta_2 e^{-2kd})^{-1} = 1 + \delta_1 \delta_2 e^{-2kd} + (\delta_1 \delta_2)^2 e^{-4kd} + \dots$$

e usando a integral tabelada

$$\frac{1}{\sqrt{\rho^2 + z^2}} = \int_0^\infty dk J_0(k\rho) e^{-kz}, \quad (\text{A.18})$$

resulta em,

$$V(\rho, z > 0; z') = \frac{2q}{1 + \epsilon_H} \left\{ \frac{1}{\sqrt{\rho^2 + (z - z')^2}} + \delta_1 \sum_{n=1}^{\infty} (\delta_1 \delta_2)^{n-1} \left[ \frac{\delta_2}{\sqrt{\rho^2 + (|z - z'| + 2nd)^2}} - \frac{1}{\sqrt{\rho^2 + [ |z + z' - d| + (2n - 1)d ]^2}} \right] \right\}. \quad (\text{A.19})$$

Usando o mesmo procedimento para as outras regiões, obtêm-se

$$V(\rho, -d < z < 0; z') = \frac{q}{\epsilon_H} \left\{ \frac{1}{\sqrt{\rho^2 + (z - z')^2}} - \sum_{n=0}^{\infty} (\delta_1 \delta_2)^n \left[ \frac{\delta_1}{\sqrt{\rho^2 + (|z + z'| + 2nd)^2}} + \frac{\delta_2}{\sqrt{\rho^2 + (|z + z' - 2d| + 2nd)^2}} \right] + \sum_{n=1}^{\infty} \left[ \frac{1}{\sqrt{\rho^2 + (|z - z'| + 2nd)^2}} + \frac{1}{\sqrt{\rho^2 + (-|z - z'| + 2nd)^2}} \right] \right\}. \quad (\text{A.20})$$

$$V(\rho, z < -d; z') = \frac{2q}{\epsilon_h + \epsilon_s} \sum_{n=1}^{\infty} (\delta_1 \delta_2) \left[ \frac{1}{\sqrt{\rho^2 + (|z + z' - d| + 2nd)^2}} - \frac{\delta_1}{\sqrt{\rho^2 + (|d - z + z' - d| + 2nd)^2}} \right]. \quad (\text{A.21})$$

Região 2:  $z' > 0$

$$V(\rho, z > 0; z') = q \left[ \frac{1}{\sqrt{\rho^2 + (z - z')^2}} + \frac{\delta_2}{\sqrt{\rho^2 + (z + z')^2}} - \xi \delta_1 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(\delta_1 \delta_2)^{n-1}}{\sqrt{\rho^2 + [(2n - 1)d + |z - d/2| + |z' - d/2|]^2}} \right] \quad (\text{A.22})$$

$$V(\rho, -d < z < 0; z') = \frac{2q}{1 + \epsilon_H} \left\{ \frac{1}{\sqrt{\rho^2 + (z - z')^2}} + \delta_1 \sum_1^{\infty} (\delta_1 \delta_2)^{n-1} \left[ \frac{\delta_2}{\sqrt{\rho^2 + (|z - z'| + 2nd)^2}} - \frac{1}{\sqrt{\rho^2 + [ |z + z' - d| + (2n - 1)d ]^2}} \right] \right\}. \quad (\text{A.23})$$

$$V(\rho, z < -d; z') = q \left( \frac{2}{\epsilon_H + \epsilon_s} \right) \left( \frac{2\epsilon_H}{1 + \epsilon_H} \right) \left[ \frac{1}{\sqrt{\rho^2 + (z - z')^2}} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(\delta_1 \delta_2)^n}{\sqrt{\rho^2 + (|z - d/2| + |z' - d/2| + 2nd)^2}} \right]. \quad (\text{A.24})$$

Nas equações acima,  $\delta_2 = \frac{1-\epsilon_H}{1+\epsilon_H}$ ,  $\delta_1 = \frac{\epsilon_s - \epsilon_H}{\epsilon_s + \epsilon_H}$  e  $\xi = \frac{4\epsilon_H}{(1+\epsilon_H)^2}$ .

Considere agora o problema de  $N_e$  elétrons ( $q = -e$ ) localizados sobre a superfície de um filme de hélio líquido com espessura  $d$  adsorvido sobre um substrato sólido. Considere também que  $N_p$  partículas carregadas positivamente ( $q = +e$ ) são fixas à superfície do substrato. Para se obter a energia potencial total deste sistema é necessário considerar as interações elétron-elétron, elétron-íon (íon-elétron) e íon-íon. As Equações (A.19), (A.20), (A.22) e (A.23) podem ser utilizadas para tal fim. Assim, a energia total pode ser escrita como

$$U = U_{e-e} + U_{e-i} + U_{i-i}, \quad (\text{A.25})$$

onde

$$\begin{aligned} U_{e-e} &= -\frac{e}{2} \sum_{i=1}^{N_e} \sum_{j \neq i}^{N_e} V_j^{ee}(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|), \\ U_{e-i} &= -e \sum_{i=1}^{N_e} \sum_{l=1}^{N_i} V_l^{ei}(|\vec{r}_i - \vec{r}_l|), \\ U_{i-i} &= \frac{e}{2} \sum_{l=1}^{N_i} \sum_{m \neq l}^{N_i} V_m^{ii}(|\vec{r}_l - \vec{r}_m|). \end{aligned}$$

Os potenciais  $V^{ee}$ ,  $V^{ei}$  e  $V^{ii}$  podem ser obtidos através das Equações (A.22), (A.23) e (A.20), respectivamente. Além disso, é necessário fazer as seguintes considerações:

- **Interação elétron-elétron:** deve-se fazer  $z = z' = 0$  e  $q = -e$  na Equação (A.22) para obter o potencial produzido por um elétron (localizado em  $z' = 0$ ) em um ponto sobre a superfície ( $z = 0$ ). Por conveniência, faz-se  $\rho \equiv r_{ij} = |\vec{r}_i - \vec{r}_j|$ . Com isso, pode-se escrever a energia potencial entre dois elétrons sobre a superfície do hélio líquido.

$$U_{e-e}(r_{ij}) = \frac{2e^2}{1 + \epsilon_H} \left[ \frac{1}{r_{ij}} - \frac{2\epsilon_H}{1 + \epsilon_H} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\delta_1^n \left( \frac{1-\epsilon_H}{1+\epsilon_H} \right)^{n-1}}{\sqrt{r_{ij}^2 + (2nd)^2}} \right]. \quad (\text{A.26})$$

- **Interação elétron-íon:** fazendo  $z' = 0$ ,  $z = -d$ ,  $q = -e$  e  $\rho \equiv r_{il} = |\vec{r}_i - \vec{r}_l|$  na Equação (A.23) resulta em,

$$U_{e-i}(r_{il}) = -\frac{2e^2}{1 + \epsilon_H} \left\{ \frac{1}{\sqrt{r_{il}^2 + d^2}} - \delta_1 \sum_{n=1}^{\infty} (\delta_1 \delta_2)^{n-1} \left[ \frac{1}{\sqrt{r_{il}^2 + [(2n-3)d]^2}} - \frac{\delta_2}{\sqrt{r_{il}^2 + [(2n+1)d]^2}} \right] \right\}. \quad (\text{A.27})$$

- **Interação íon-íon:** fazendo  $z = z' = -d$ ,  $q = +e$  e  $\rho \equiv r_{lm} = |\vec{r}_l - \vec{r}_m|$ , têm-se

$$U_{i-i}(r_{lm}) = \frac{e^2}{\epsilon_H} \left\{ \frac{1}{r_{lm}} + \sum_{n=1}^{\infty} (\delta_1 \delta_2)^{n-1} \left[ \frac{2\delta_1 \delta_2 - \delta_1}{\sqrt{r_{lm}^2 + (2nd)^2}} - \frac{\delta_2}{\sqrt{r_{lm}^2 + (2nd + 2d)^2}} \right] \right\} \quad (\text{A.28})$$

Neste caso em particular, podemos considerar o seguinte: sendo a constante dielétrica do hélio igual a  $\epsilon_H = 1.057$ , resultando em,  $\delta_2 = (1 - \epsilon_H)/(1 + \epsilon_H) \approx 0.028$ . Assim, pode-se desprezar os termos com  $n > 1$  nas Equações (A.26) e (A.27). Fazendo isso, e usando  $e^* = e/\sqrt{(1 + \epsilon_H)/2}$ , obtêm-se

$$U_{e-e} = e^{*2} \left[ \frac{1}{r_{ij}} - \frac{2\epsilon_H}{1 + \epsilon_H} \frac{\delta_1}{\sqrt{r_{ij}^2 + (2d)^2}} \right]. \quad (\text{A.29})$$

$$U_{e-i} = -e^{*2} \left[ \frac{2\epsilon}{\epsilon_s + \epsilon_H} \frac{1}{\sqrt{r_{il}^2 + d^2} + \frac{\delta_1 \delta_2}{\sqrt{r_{il}^2 + (3d)^2}}} \right]. \quad (\text{A.30})$$

Para o caso específico da Equação (A.28), pode-se escrever

$$U_{i-i} = \frac{e^2}{\epsilon_H} \left[ \frac{1}{r_{lm}} + \frac{2\delta_1 \delta_2 - \delta_1}{\sqrt{r_{lm}^2 + (2d)^2}} - \frac{\delta_2}{\sqrt{r_{lm}^2 + (4d)^2}} \right]. \quad (\text{A.31})$$

Finalmente, a energia total para o sistema com  $N_e$  elétrons e  $N_i$  íons pode ser escrita

como

$$\begin{aligned}
 U_T = & \frac{e_m^{*2}}{2} \sum_{i=1}^{N_e} \sum_{j \neq i}^{N_e} \left[ \frac{1}{r_{ij}} - \frac{\eta_1 \delta_1}{\sqrt{r_{ij}^2 + (2d)^2}} \right] \\
 & - e_m^{*2} \sum_{i=1}^{N_e} \sum_{l=1}^{N_i} \left[ \frac{\eta_2}{\sqrt{r_{il}^2 + d^2}} + \frac{\delta_1 \delta_2}{\sqrt{r_{il}^2 + (3d)^2}} \right] \\
 & + \frac{e_p^{*2}}{2} \sum_{l=1}^{N_i} \sum_{m \neq l}^{N_i} \left[ \frac{1}{r_{lm}} + \frac{\eta_3 \delta_1}{\sqrt{r_{lm}^2 + (2d)^2}} - \frac{\delta_2}{\sqrt{r_{lm}^2 + (4d)^2}} \right]. \quad (\text{A.32})
 \end{aligned}$$

Na Equação (A.32) há as seguintes definições:  $\eta_1 = 2\epsilon_H/(1 + \epsilon_H)$ ,  $\eta_2 = 2\epsilon_H/(\epsilon_S + \epsilon_H)$ ,  $\eta_3 = 2\delta_2 - 1$  e  $e_p^* = e/\sqrt{\epsilon_H}$ .

# Apêndice B

## Dinâmica Molecular

A técnica Dinâmica Molecular (MD) clássica é usada para simular computacionalmente a evolução temporal de um conjunto de partículas interagentes integrando suas equações de movimento e utilizando condições de contorno periódicas para garantir a integridade geométrica ou simétrica do sistema (já que os sistemas são finitos, é preciso evitar efeitos de superfície). A dinâmica é estudada através das leis da Mecânica Clássica, muito frequentemente na forma das leis de Newton. O tempo de integração é baseado em métodos de diferenciação finita, onde o tempo é discretizado em intervalos finitos, com o *passo de tempo*  $\Delta t$  sendo a distância entre dois intervalos consecutivos. Conhecendo-se as posições e suas derivadas temporais no tempo  $t'$ , o esquema de integração fornece as mesmas quantidades em um tempo subsequente  $t' + \Delta t$ . Repetindo esse procedimento, a evolução temporal do sistema pode ser obtida durante longos períodos de tempo. Dessa forma, ao contrário do método Monte Carlo (MC), a MD é uma técnica determinística. Ou seja, dado um conjunto de posições e velocidades iniciais, a evolução temporal subsequente é, a princípio, completamente determinada [104].

A essência da simulação MD está em gerar informações em nível microscópico utilizando um *potencial de interação* (cuja exatidão produz a precisão da simulação) adequado para as partículas, através do qual as forças são calculadas. Da mesma forma que os métodos MC, MD fornece um conjunto de configurações amostradas de acordo com

alguma distribuição estatística, ou algum ensemble estatístico, dependendo das equações de movimento que descrevem o sistema. Assim, a medida de uma quantidade física  $A$  numa simulação MD é obtida, simplesmente, como uma média aritmética de vários valores instantâneos adquiridos por tal quantidade durante a simulação. Ou seja,

$$\langle A(\vec{r}, \vec{p}) \rangle = \frac{1}{T} \sum_{m=1}^T A[(\vec{p}(t_0 + m\Delta t)), (t_0 + m\Delta t)], \quad (\text{B.1})$$

onde  $t_0$  é o instante inicial e  $T$  é o número total de passos. No limite de um tempo de simulação muito grande, para sistemas em equilíbrio, espera-se que o espaço de fase seja amostrado completamente, e que neste limite o processo de média forneça resultados “corretos”.

De maneira geral, uma simulação MD integra as equações de movimento

$$m_i \frac{d^2 \vec{r}_i}{dt^2} = \vec{F}_i(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N, \frac{d\vec{r}_1}{dt}, \dots, \frac{d\vec{r}_N}{dt}), \quad (\text{B.2})$$

para cada partícula  $i$  do sistema, constituído por  $N$  partículas, com  $m_i$  sendo a massa da  $i$ -ésima partícula e  $\vec{F}_i$  a força que atua sobre ela. Quando a força independe da velocidade, o que é o caso de uma grande variedade de sistemas de interesse, e também quando estas podem ser obtidas através do gradiente do potencial, isto é,

$$\vec{F}_i = \nabla_{\vec{r}_i} V(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N), \quad (\text{B.3})$$

a energia total é conservada desde de que o sistema seja condicionado a evoluir no ensemble microcanônico. Duas importantes características das equações de movimento devem ser preservadas. Uma delas é a reversibilidade temporal, isto é, obtêm-se o mesmo resultado quando é feito  $t \rightarrow -t$ . Isto garante que a Física microscópica é independente da direção do fluxo do tempo. A outra característica é que as equações de movimento conservam a Hamiltoniana do sistema:

$$\frac{dH}{dt} = \sum_{i=1}^N \left[ \frac{\partial H}{\partial \vec{r}_i} \dot{\vec{r}}_i + \frac{\partial H}{\partial \vec{p}_i} \dot{\vec{p}}_i \right] = \sum_{i=1}^N \left[ \frac{\partial H}{\partial \vec{r}_i} \frac{\partial H}{\partial \vec{p}_i} + \frac{\partial H}{\partial \vec{p}_i} \frac{\partial H}{\partial \vec{r}_i} \right] = 0. \quad (\text{B.4})$$

A conservação da Hamiltoniana é equivalente à conservação da energia total do sistema, o que fornece a conexão entre Dinâmica Molecular e Mecânica Estatística.

Quando as forças que atuam nas partículas não podem ser simplesmente deduzidas através do potencial ou quando a evolução é realizada em um ensemble termodinâmico diferente, deve-se alterar as equações de movimento ou o algoritmo de integração com a adição de alguns passos intermediários com o objetivo de reescalar apropriadamente os observáveis e produzir a dinâmica correta [87]. Nestes casos, algumas forças são calculadas via potencial de interação e outros efeitos adicionais são incluídos. Como já mencionado, a escolha do potencial é a peça central de toda simulação MD. Ao lado do algoritmo de integração, estes são o coração de toda técnica MD.

## B.1 Algoritmos de integração

Não há solução analítica para as equações de movimento de um sistema cuja energia potencial é uma função das  $3N$  posições de todas as partículas, logo, estas equações devem ser resolvidas numericamente. Dentre vários algoritmos desenvolvidos para integrar tais equações, podemos citar o Algoritmo de Verlet [121], Leap-frog [54], Velocity Verlet [115], Algoritmo de Beeman [10] e integradores reversíveis simpléticos [77, 120].

O critério para se usar um dado algoritmo de integração é: (i) Ele deve conservar energia e momento totais e deve ser reversível, ou seja, quando  $\delta t \rightarrow -\delta t$  o sistema deve voltar ao seu estado original. (ii) Deve ser eficiente computacionalmente. (iii) Deve permitir um longo passo de integração. (iv) O cálculo da força deve ser feito apenas uma vez em cada passo de integração.

## B.1.1 Algoritmo de Verlet

Este foi usado pela primeira vez por L. Verlet [121] e sua idéia básica é escrever duas expansões em série de Taylor de terceira-ordem para as posições  $\vec{r}(t)$ , uma delas um passo de tempo à frente e a outra um passo atrás e depois somá-las, isto cancela os termos de potência ímpar:

$$\vec{r}(t + \Delta t) = \vec{r}(t) + \Delta t \vec{v}(t) + \frac{1}{2} \Delta t^2 \vec{a}(t) + \frac{1}{3!} \Delta t^3 \dot{\vec{a}}(t) + O(\Delta t^4), \quad (\text{B.5})$$

$$\vec{r}(t - \Delta t) = \vec{r}(t) - \Delta t \vec{v}(t) + \frac{1}{2} \Delta t^2 \vec{a}(t) - \frac{1}{3!} \Delta t^3 \dot{\vec{a}}(t) + O(\Delta t^4), \quad (\text{B.6})$$

onde  $\vec{v}$ ,  $\vec{a}$  e  $\dot{\vec{a}}$  são a velocidade, aceleração e a terceira derivada temporal da posição. Somando as duas equações acima, obtêm-se

$$\vec{r}(t + \Delta t) + \vec{r}(t - \Delta t) = 2\vec{r}(t) + \Delta t^2 \vec{a}(t), \quad (\text{B.7})$$

$$\vec{r}(t + \Delta t) = 2\vec{r}(t) - \vec{r}(t - \Delta t) + \Delta t^2 \vec{a}(t) + O(\Delta t^4). \quad (\text{B.8})$$

Como é possível perceber pelas equações acima, o vetor  $\vec{r}$  no tempo  $t + \Delta t$  é calculado através do vetor posição nos tempos  $t$  e  $t - \Delta t$ , as posições  $\vec{r}(0)$  e velocidades  $\vec{v}(0)$  iniciais não são suficientes para iniciar a simulação. Pela regra acima, as velocidades são dadas por

$$\vec{v}(t) = \frac{\vec{r}(t + \Delta t) - \vec{r}(t - \Delta t)}{2\Delta t}. \quad (\text{B.9})$$

A versão original deste algoritmo entra em conflito com o teorema ergódico por considerar as velocidades menos importantes do que as posições. Dessa forma, este algoritmo não é adequado para determinar observáveis que dependam explicitamente das velocidades. Para contornar este problema, o algoritmo pode ser melhorado e a sua variação mais comum é o esquema conhecido como "velocity Verlet" [115].

## B.1.2 Velocity Verlet

Inicialmente, resolvem-se as equações

$$\vec{r}(t + \Delta t) = \vec{r}(t) + \Delta t \vec{v}(t) + \frac{1}{2} \Delta t^2 \vec{a}(t) + \dots, \quad (\text{B.10})$$

$$\vec{v}(t + \Delta t) = \vec{v}(t) + \frac{1}{2} \Delta t [\vec{a}(t) + \vec{a}(t + \Delta t)]. \quad (\text{B.11})$$

Cada ciclo de integração deve ser feito da seguinte forma:

- Calculam-se as velocidades para um meio passo de tempo

$$\vec{v}\left(t + \frac{\Delta t}{2}\right) = \vec{v}(t) + \frac{1}{2} \Delta t \vec{a}(t). \quad (\text{B.12})$$

- Calcula-se  $\vec{r}(t + \Delta t)$

$$\vec{r}(t + \Delta t) = \vec{r}(t) + \vec{v}\left(t + \frac{1}{2} \Delta t\right) \Delta t. \quad (\text{B.13})$$

- Calcula-se  $\vec{a}(t + \delta t)$  a partir do potencial de interação.

- Atualiza-se a velocidade usando

$$\vec{v}(t + \Delta t) = \vec{v}\left(t + \frac{1}{2} \Delta t\right) + \frac{1}{2} \Delta t \vec{a}(t + \Delta t). \quad (\text{B.14})$$

## B.1.3 Leap-Frog

Neste algoritmo, as velocidades são calculadas primeiro no tempo  $t + 1/2\Delta t$ . Estas são usadas para calcular as posições  $\vec{r}$  no tempo  $t + \Delta t$ . E assim, as velocidades saltam sobre as posições, e as posições saltam sobre as velocidades. As velocidades no tempo  $t$  podem ser aproximadas por

$$\vec{v}(t) = \frac{1}{2} \left[ \vec{v}\left(t - \frac{1}{2} \Delta t\right) + \vec{v}\left(t + \frac{1}{2} \Delta t\right) \right]. \quad (\text{B.15})$$

Logo,

$$\vec{r}(t + \Delta t) = \vec{r}(t) + \vec{v}\left(t + \frac{1}{2} \Delta t\right) \Delta t, \quad (\text{B.16})$$

$$\vec{v}\left(t + \frac{1}{2}\Delta t\right) = \vec{v}\left(t - \frac{1}{2}\Delta t\right) + \vec{a}(t)\Delta t. \quad (\text{B.17})$$

A vantagem deste algoritmo é que as velocidades são calculadas explicitamente, entretanto, a desvantagem é que elas não são calculadas no mesmo instante em que as posições.

## B.2 Interações de longo alcance

O tempo de simulação exigido para que um sistema avance um passo de tempo  $\Delta t$  é proporcional ao número de cálculos da força, a saber,  $NN_c/2$ . Aqui,  $N$  é o número de partículas e  $N_c \propto \rho R_c^3$  é o número de partículas dentro de um dado raio de corte  $R_c$ ;  $\rho$  é a densidade do sistema. Vemos claramente que o tempo de simulação cresce com o cubo do raio de corte. Um problema essencial que surge frente a dinâmica molecular é tratar problemas que necessitam de um tempo longo de simulação e em cujo sistema as partículas interajam através de forças de longo alcance. Os métodos convencionais necessitam do cálculo das forças a cada passo de tempo. Como cada partícula interage com todas as outras dentro do alcance do potencial de interação, quanto maior for esse alcance maior será o número de forças as serem calculadas a cada passo.

### B.2.1 Soma de Ewald

A soma de Ewald [5] é um método usado no cálculo de interações eletrostáticas em sistemas com condições periódicas de contorno. Ele contorna todos os problemas associados com o uso de um raio de corte e não necessita de truncamento de funções. A soma consiste de um termo de curto alcance que é calculado no espaço real (*soma r*) e um segundo termo, *soma k*, que é calculada no espaço de Fourier (espaço *k*). Um parâmetro  $\eta$  controla a relação entre as duas partes. Seu valor deve ser escolhido de tal forma que a *soma r* da interação entre duas partículas deve ser zero na distância de corte. Quanto maior for o amortecimento da *soma r* (e assim, menor o tempo computacional necessário para seu cálculo), maior o custo do cálculo da *soma k*. Se não houver erro na escolha

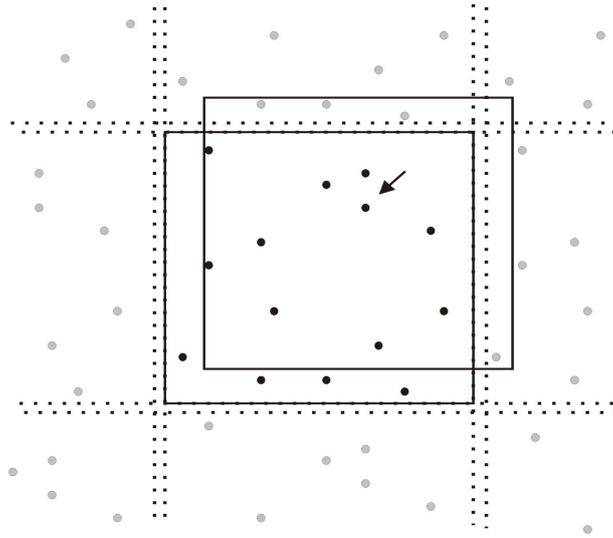


Figura B.1: Condições de contorno periódicas aplicada a caixa de simulação (no centro: partículas indicadas por pontos escuros na posições  $r_j$ ), mostrando a região de *mínima imagem* para a partícula indicada (seta) na posição  $\vec{r}_i$  e que contém as imagens periódicas mais próximas (partículas indicadas por pontos claros nas posições  $\vec{r}_j \pm \vec{n}$ ).

do parâmetro  $\eta$  (comparado à distância de corte) e do número de termos da *soma*  $k$ , o cálculo da energia eletrostática usando a soma de Ewald é exato.

Na prática, a caixa de simulação é replicada em todas as direções espaciais, de tal forma que as partículas que deixam a caixa reaparecem no lado oposto. Para sistemas governados por potenciais de curto alcance, é suficiente considerar o volume da caixas de simulação vizinhas, resultando na conhecida configuração de *Mínima Imagem* (ver Figura B.1). O potencial sentido pela partícula em  $\vec{r}_i$  é somado sobre todas as partículas  $\vec{r}_j$ , ou suas imagens periódicas ( $\vec{r}_j \pm \vec{n}$ ), onde  $\vec{n} = (m_x L_x, m_y L_y, m_z L_z)$ , com  $m_\alpha = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots, \pm \infty$ .  $L$  é o comprimento da caixa de simulação. Normalmente, esta lista é restrita a partículas que se encontram dentro uma esfera centrada em  $r_i^6$ . Entretanto, para potenciais de longo alcance, este arranjo é inadequado porque as contribuições de imagens mais distantes em  $2L$ ,  $3L$ , etc. não são mais desprezíveis.

Na soma de Ewald, o desafio é arranjar os termos na equação da energia potencial de tal forma que a contribuição devido a pares de cargas opostas seja cancelada e que haja convergência da série o mais rápido possível. Uma forma de se alcançar isso é adicionar

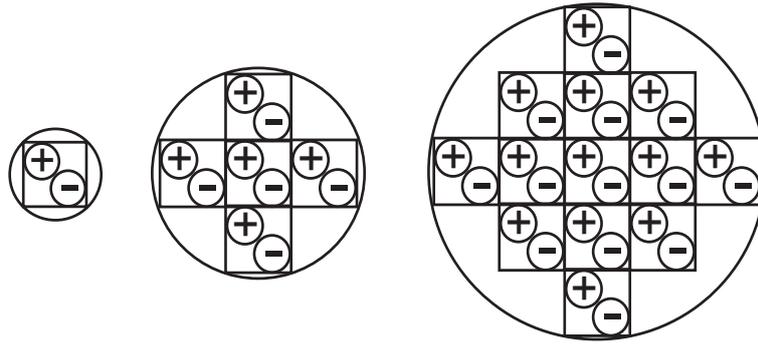


Figura B.2: Construção de uma soma convergente de imagens periódicas [5].

radialmente células imagens a partir da origem (veja Fig. B.2).

Usando este ultimo argumento, o potencial sobre uma partícula em  $\vec{r}_i$  devido a todas outras em  $\vec{r}_j$  e às caixas imagens fica dado por

$$V(r_i) = \left( \sum_{\vec{n}}^i \right)' \sum_{j=1}^N \frac{q_j}{|\vec{r}_{ij} + \vec{n}|}. \quad (\text{B.18})$$

O sinal *prima* na soma em  $\vec{n}$  indica que o termo  $j = i$  não é considerado para  $n = 0$ . A idéia básica da soma de Ewald é reescrever a equação acima em uma soma de duas séries rapidamente convergentes, uma no espaço real e outra no espaço recíproco. Originalmente, Ewald considerou uma distribuição de cargas do tipo gaussiana para substituir cada carga puntual, isto é,

$$\sigma(r) = \frac{\alpha^3}{\pi^{3/2}} e^{-\alpha^2 r^2}. \quad (\text{B.19})$$

O termo do espaço real é obtido subtraindo-se da soma das cargas puntuais a soma das cargas blindadas pela distribuição acima (ver Figura B.3). Isto resulta em

$$\begin{aligned} V_r(r_i) &= \left( \sum_{\vec{n}}^i \right)' \sum_{j=1}^N \frac{q_j}{|\vec{r}_{ij} + \vec{n}|} \left[ 1 - \int_0^\infty \sigma(r - r_{ij}) d^3 r \right] \\ &= \left( \sum_{\vec{n}}^i \right)' \sum_{j=1}^N q_j \left[ \frac{1}{|\vec{r}_{ij} + \vec{n}|} - \frac{4\alpha^3}{\pi^{1/2} |\vec{r}_{ij} + \vec{n}|} \int_0^{|\vec{r}_{ij} + \vec{n}|} r^2 e^{-\alpha^2 r^2} dr \right. \\ &\quad \left. - \frac{4\alpha^3}{\pi^{1/2}} \int_{|\vec{r}_{ij} + \vec{n}|}^\infty r e^{-\alpha^2 r^2} dr \right]. \end{aligned} \quad (\text{B.20})$$

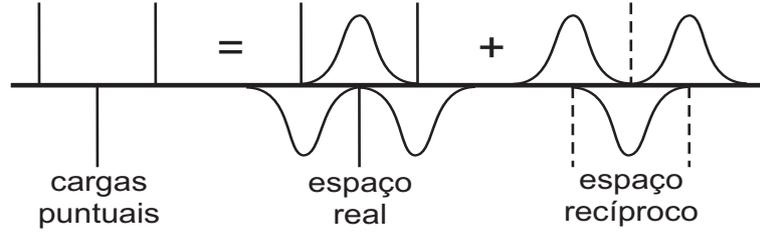


Figura B.3: Divisão da soma de cargas puntuais em duas séries rapidamente convergente de cargas tipo gaussiana [40].

Resolvendo a integral do segundo termo da equação acima, obtém-se a seguinte expressão para a soma no espaço real

$$V_s(r_i) = \left( \sum_{\vec{n}} \right)' \sum_{j=1}^N q_j \frac{\operatorname{erfc}(\alpha |\vec{r}_{ij} + \vec{n}|)}{|\vec{r}_{ij} + \vec{n}|}. \quad (\text{B.21})$$

Para a soma no espaço recíproco, considera-se a densidade de carga de toda a rede como

$$\rho(r) = L^{-3} \sum_j \sum_{\vec{k}} f(\vec{k}) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}}, \quad (\text{B.22})$$

onde  $f(\vec{k}) = \sum_j q_j e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_j}$ .

A distribuição de carga blindada pode ser escrita como

$$\rho'(r) = \frac{1}{L^3} \left( \sum_{\vec{k}} \right)' f(\vec{k}) \phi(\vec{k}, \alpha) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}}, \quad (\text{B.23})$$

onde  $\phi(\vec{k}, \alpha) = e^{-|\vec{k}|^2/(4\alpha^2)}$ . Assim, o potencial devido as cargas blindadas no espaço recíproco na posição de referência  $r_i$  fica

$$V_k(r_i) = \frac{4\pi}{L^3} \left( \sum_{\vec{k}} \right)' \sum_j q_j e^{i\vec{k} \cdot (\vec{r}_j - \vec{r}_i)} \frac{e^{-|\vec{k}|^2/(4\alpha^2)}}{|\vec{k}|^2}. \quad (\text{B.24})$$

Este potencial inclui um termo de auto-interação sem razão física, correspondente a uma carga blindada centrada em  $r_i$ , que precisa ser subtraído. Este termo é dado por

$$V_s(r_i) = q_i \int_0^\infty \sigma(t) d^3r = \frac{4\pi q_i \alpha^3}{\pi^{3/2}} i \int_0^\infty r e^{-\alpha^2 r^2} d^3r = \frac{2\alpha}{\pi^{1/2}} q_i. \quad (\text{B.25})$$

Combinando as Equações (B.21), (B.24) e (B.25), obtém-se a soma de Ewald

$$\begin{aligned}
V_E(r_i) &= \left( \sum_{\vec{n}}^i \right)' \sum_{j=1}^N q_j \frac{\operatorname{erfc}(\alpha|\vec{r}_{ij} + \vec{n}|)}{|\vec{r}_{ij} + \vec{n}|} \\
&+ \frac{4\pi}{L^3} \left( \sum_{\vec{k}} \right)' \sum_j q_j e^{i\vec{k}\cdot(\vec{r}_j - \vec{r}_i)} \frac{e^{-|\vec{k}|^2/(4\alpha^2)}}{|\vec{k}|^2} - \frac{2\alpha}{\pi^{1/2}} q_i.
\end{aligned} \tag{B.26}$$

Por fim, a força sobre uma carga  $i$  pode ser escrita como

$$\begin{aligned}
\vec{f}_i &= -V_{r_i} U \\
&= \frac{q_i}{4\pi\epsilon_0} \sum_{\vec{n}} \sum_{j=1, j \neq i} q_j \left[ \frac{\operatorname{erfc}(\alpha|\vec{r}_{ij} + \vec{n}|)}{|\vec{r}_{ij} + \vec{n}|} + \frac{2\alpha}{\sqrt{\pi}} e^{-\alpha^2|\vec{r}_{ij} + \vec{n}|^2} \right] \frac{|\vec{r}_{ij} + \vec{n}|}{|\vec{r}_{ij} + \vec{n}|} \\
&+ \frac{2}{\epsilon_0 L^3} \sum_{\vec{k} > 0} q_i \frac{\vec{k}}{k^2} e^{-k^2/(4\alpha^2)} \left[ \sin(\vec{k} \cdot \vec{r}_i) \sum_{j=1}^N q_j \cos(\vec{k} \cdot \vec{r}_j) \right. \\
&- \left. \cos(\vec{k} \cdot \vec{r}_i) \sum_{j=1}^N q_j \sin(\vec{k} \cdot \vec{r}_j) \right] - \frac{q_i}{6\epsilon_0 L^3} \sum_{j=1}^N q_j \vec{r}_j.
\end{aligned} \tag{B.27}$$

## B.3 Dinâmica de Langevin

Como visto anteriormente, as equações de movimento no formalismo hamiltoniano resulta na conservação da energia mecânica. Assim, é possível descrever corretamente a evolução do sistema quando o este não troca energia com o meio. Entretanto, quando o sistema pode trocar energia com o meio ou há vários graus de liberdade presentes, as equações de movimento devem ser modificadas para garantir a dinâmica correta. Uma maneira apropriada de descrever o movimento das partículas em um sistema representado pela distribuição canônica de probabilidade (está em equilíbrio com um reservatório térmico) é usando as *equações de Langevin*.

A equação de Langevin é uma equação diferencial estocástica na qual dois termos de força são adicionados à segunda lei de Newton com o objetivo de levar em conta os efeitos dos vários graus de liberdade: um termo representa um força de atrito, proporcional a velocidade, e o outro é uma força randômica. O atrito remove a energia cinética das

partículas, enquanto que a força randômica adiciona energia cinética ao sistema. Para produzir o ensemble canônico, as forças de atrito e randômica devem obedecer o teorema da flutuação-dissipação.

Um exemplo típico de um sistema clássico que pode ser representado pela dinâmica de Langevin é uma partícula coloidal em um solvente. Para isto, apenas os graus de liberdade da partícula são considerados. As forças de atrito e randômicas aparecem devido as colisões das moléculas do solvente com a partícula coloidal.

Formalmente, estas equações são dadas por

$$m d\dot{\vec{r}} = -m\varrho\dot{\vec{r}}dt + f(\vec{r}) + d\vec{W}, \quad \dot{\vec{r}} = \frac{d\vec{r}}{dt}, \quad (\text{B.28})$$

onde  $\varrho$  é o coeficiente de atrito e  $W$  é um processo estocástico, conhecido como *processo de Wiener*. Este possui as seguintes propriedades:

1.  $W(t)$  possui distribuição normal para  $t \geq 0$ ;
2.  $\langle W(t) \rangle = 0$  para  $t \geq 0$ ;
3.  $W(0) = 0$ .

Dada a extensão da distribuição de  $W(t)$ , o ensemble canônico na temperatura  $T$  pode ser obtido fazendo-se

$$\langle W(t)W(t + \tau) \rangle = 2m\varrho k_B T \tau. \quad (\text{B.29})$$

Esta expressão é, apenas, a formulação do teorema da flutuação-dissipação no ensemble canônico.

A forma diferencial das equações de Langevin em coordenadas cartesianas é

$$m_i \frac{d^2 \vec{r}_i}{dt^2} = -m_i \sum_j \Pi_{ij} \frac{d\vec{r}_j}{dt} + \vec{f}_i(\vec{r}_i) + \zeta_i, \quad (\text{B.30})$$

onde o índice  $i$  indica o número da partícula,  $\Pi_{ij}$  é a matrix de fricção  $3 \times 3$  representando o atrito,  $\vec{f}(\vec{r}) = -\nabla V(\vec{r})$  e  $\zeta_i$  é a força randômica, comumente chamada de ruído. Na maioria dos casos, a matriz de fricção é diagonal e isotrópica, o que resulta numa simplificação da Equação (B.30), ou seja,

$$m_i \frac{d^2 \vec{r}_i}{dt^2} = -m_i \varrho_i \frac{d\vec{r}_i}{dt} + \vec{f}_i(\vec{r}_i) + \zeta_i, \quad (\text{B.31})$$

onde  $\varrho_i$  é o coeficiente de atrito da  $i$ -ésima partícula.

Na ausência de memória da história do sistema, o ruído não possui correlação temporal e pode ser dado por uma distribuição gaussiana. A correlação é, portanto,

$$\langle \zeta_{ik}(t) \zeta_{il}(t + \tau) \rangle = 2m_i \varrho_i k_B T \delta_{ij} \delta_{kl} \delta(\tau), \quad (\text{B.32})$$

onde  $k$  e  $l$  indicam as componentes do vetor cartesiano,  $\delta_{ij}$  é a delta de Kronecker e  $\delta(\tau)$  é função delta de Dirac.

A densidade de probabilidade  $\rho(\vec{r}, \vec{p}, t)$  das trajetórias geradas pela Equação (B.31), também conhecida como *densidade do espaço de fase*, obedece a equação de Fokker-Planck:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \rho(\vec{r}, \vec{p}, t) &+ \sum_i \left( \frac{\vec{p}_i}{m_i} \cdot \nabla_{\vec{r}_i} \rho(\vec{r}, \vec{p}, t) + \vec{f}_i \cdot \nabla_{\vec{p}_i} \rho(\vec{r}, \vec{p}, t) \right) \\ &= \sum_i \varrho_i \nabla_{\vec{p}_i} \cdot (\vec{p}_i \rho(\vec{r}, \vec{p}, t) + m_i k_B T \nabla_{\vec{p}_i} \rho(\vec{r}, \vec{p}, t)). \end{aligned} \quad (\text{B.33})$$

É possível mostrar a equivalência completa entre as equações de Langevin e Fokker-Planck [88].

# Apêndice C

## Otimização

Um dos pontos principais da análise numérica é a *otimização de funções*. Geralmente, a função a ser otimizada (minimizada) é a energia total de um sistema, visando obter o seu estado fundamental. O espaço de macroestados de um sistema com um número muito grande de graus de liberdade possui um número elevado de mínimos. O objetivo de qualquer técnica de otimização é encontrar o mínimo global.

Uma das dificuldades encontrada em todo algoritmo de otimização é evitar que o procedimento termine num mínimo local. A energia de um mínimo local pode ser muito maior do que a energia do mínimo global e dessa forma o sistema estaria em um estado metaestável. Nesta tese, foram usadas duas técnicas poderosas para encontrar o estado fundamental do sistema em questão e que serão resumidas a seguir.

### C.1 Método Monte Carlo

No entendimento de fenômenos físicos, o método Monte Carlo é uma solução numérica para um problema de modelagem de objetos que interagem com outros objetos ou com o seu meio. Ele representa uma tentativa de modelar a natureza através de uma simulação direta da dinâmica essencial do sistema em questão. Neste sentido, o método MC é essencialmente simples em sua idéia - uma solução para um sistema macroscópico através da

simulação de suas interações microscópicas. Uma solução é determinada pela amostragem aleatória das interações microscópicas até que o resultado convirja. Esta técnica se tornou uma poderosa ferramenta numérica para tratar as mais diversas e complexas aplicações em vários ramos da ciência.

A amostragem de um sistema através de uma função de densidade de probabilidade  $p(s)$  usando MC requer uma maneira rápida e efetiva de gerar números aleatórios uniformemente distribuídos no intervalo  $[0,1]$ . Isto é, considere que o observável  $A$  seja função de  $s$  pontos no espaço com dimensão  $N$  e caracterizado por  $p(s)$ , o seu valor médio via MC é dado por,

$$\langle A \rangle = \int ds p(s) A(s). \quad (\text{C.1})$$

A amostragem do espaço de fase é feita através de inúmeras técnicas, mas a mais conhecida delas é o *algoritmo de Metropolis* [80]. Apesar de sua aplicação original ser restrita a um sistema clássico de esferas duras, este tornou-se indispensável em várias aplicações. Este algoritmo pode ser definido como: suponha que  $s$  esteja num estado do espaço de fase e que o objetivo seja amostrar a distribuição  $p(s)$ . Em sua forma mais simples, há uma única probabilidade de transição:  $\Pi(s \rightarrow s')$  entre dois estados no espaço de fase. Um movimento é escolhido com probabilidade  $\Sigma(s \rightarrow s')$  e aceito ou rejeitado com probabilidade  $\Omega(s \rightarrow s')$ . O teorema do *balanço detalhado*, dado por,

$$p(s)\Sigma(s \rightarrow s')\Omega(s \rightarrow s') = p(s')\Sigma(s' \rightarrow s)\Omega(s' \rightarrow s) \quad (\text{C.2})$$

e a ergodicidade (há uma probabilidade não nula de se fazer um movimento de um estado para outro em um número finito de movimentos) são suficientes para garantir que o passeio aleatório, após um número suficiente de iterações, convergirá para  $p(s)$ . A cadeia de movimentos que obedecem esta classe de algoritmos é conhecida como *cadeia de Markov*.

No caso de um sistema de  $N$  partículas, o espaço de fase é o espaço vetorial com  $3N$  dimensões e a distribuição a ser amostrada é a distribuição de Boltzmann  $\exp(-E(s))/k_B T$ ,

onde  $E$  é a energia e  $T$  a temperatura. Neste caso, o sistema é mantido em equilíbrio térmico com um reservatório a temperatura  $T$ , ou seja, o ensemble canônico está associado com a distribuição de probabilidade. Os movimentos são, simplesmente, deslocamentos aleatórios de uma partícula, ou um conjunto delas. Estes movimentos são escolhidos uniformemente em um hipercubo centrado na posição corrente da partícula e são aceitos ou rejeitados com probabilidade dada por

$$\min[1, \exp(-(E(s) - E(s'))/k_B T)]. \quad (\text{C.3})$$

A eficiência do algoritmo depende do gerador de números aleatórios e da escolha dos deslocamentos randômicos. Quando o deslocamento é muito pequeno, quase todos os movimentos serão aceitos, entretanto será necessário um número muito grande de movimentos para visitar todo o espaço de fase acessível. Por outro lado, quando o deslocamento for muito grande, a taxa de aceitação será muito pequena.

O método de Metropolis tem por grande vantagem o cálculo de apenas uma quantidade, a energia. Assim não é necessário considerar a evolução temporal real do sistema. A desvantagem disso é que os observáveis que podem ser obtidos só podem ser aqueles que dependam das configurações do sistema, ou seja, das posições das partículas. Entretanto, quando o interesse é apenas encontrar as configurações de equilíbrio do sistema e, por fim, seu estado fundamental, essa técnica torna-se poderosa.

## C.2 Simulated Annealing

Em muitos problemas de otimização, especialmente no caso multidimensional, a função objetivo deve possuir muitos extremos locais e não deve ser suave. O algoritmo *Simulated Annealing* (SA) é adequado para *Otimização Global*, ou seja, é possível passar por extremos locais e reconhecer quando um ótimo local é encontrado. Este método teve origem com o método de Metropolis, descrito na seção anterior. O SA é um método pro-

stocástico para otimização e pertence a classe de métodos de otimização estocásticos. Em sua implementação não é necessário o cálculo de nenhum tipo de derivação.

O nome do algoritmo vem do processo de recozimento (*annealing*) de metais, ou seja, o aquecimento a altas temperaturas e o subsequente esfriamento lento, permitindo assim que a estrutura cristalina do material seja obtida no estado mais baixo de energia. Isto não aconteceria se o esfriamento fosse rápido. A descrição original do algoritmo [66] era dada em termos de um problema de minimização de uma função objetivo  $\phi()$ . Originalmente, o algoritmo possuía a forma:

1. Escolha um ponto inicial. Se não puder ser especificado, escolha aleatoriamente.
2. Calcule  $\phi_0$ , o valor inicial da função.
3. A partir deste ponto, escolha um ponto aleatório no espaço  $n$ -dimensional, onde  $n$  é a dimensionalidade do problema. Isto especifica uma direção aleatória.
4. Escolha um passo  $\Delta r$  (depende da função objetivo e da precisão desejada)
5. No final de cada passo, calcule o novo valor da função  $\phi_1$  e aceite com probabilidade 1 se  $\Delta\phi = \phi_1 - \phi_0 \leq 0$ . Se  $\Delta\phi > 0$  aceite o passo com probabilidade

$$p = \exp(-\beta\Delta\phi) \tag{C.4}$$

onde  $\beta$  é um parâmetro positivo.

6. Se o passo não for aceito, retorne para 3. Se for aceito, comece de um novo ponto e vá para 3.

Há de se notar os seguintes pontos:

- O chamado “passo benéfico” ( $\phi_1 \leq \phi_0$ ) é aceito incondicionalmente, por outro lado o “passo prejudicial” é aceito com uma certa condição:

1. Gere um número aleatório  $u$  no intervalo  $[0, 1]$ .
  2. Se  $u < p$  onde  $p = \exp(-\beta\Delta\phi)$ , o passo é aceito.
  3. De outra forma, tente uma nova solução.
- A probabilidade de aceitar um passo depende do tamanho de  $\Delta\phi$ : quanto maior for este número, menor será a aceitação.
  - Entretanto, a probabilidade de aceitar um “passo prejudicial” é positiva. Permitindo assim a fuga de mínimos locais (e globais).
  - O parâmetro  $\beta$  determina o número de passos necessários e depende da função objetivo. Normalmente, escolha  $\beta$  tal que  $0.5 < \exp(-\beta\Delta\phi) < 0.9$  para evitar um alto número de aceitações (se for próximo de 1) e o cálculo excessivo da função (se for  $< 0.5$ ).
  - $\Delta r$  deve ser tal que a saída de mínimos locais ocorra com poucos passos (2 – 3).
  - Um estudo cuidadoso desse algoritmo mostra que se  $\beta$  for constante e igual a 1, retoma-se o caso do algoritmo de Metropolis discutido anteriormente.

Usando a mesma notação do algoritmo de Metropolis descrito anteriormente, pode-se definir a probabilidade de aceitação  $\Omega(s \rightarrow s')$  como

$$\Omega(s \rightarrow s') = \exp \left\{ \frac{\log [\phi(s')] - \log [\phi(s)]}{T_t} \right\} = \left( \frac{\phi(s')}{\phi(s)} \right)^{\frac{1}{T_t}}. \quad (\text{C.5})$$

Define-se também a distribuição  $\Sigma(s \rightarrow s')$ .

### Algoritmo Simulated Annealing

**Passo 0** Faça  $t = 0$  e escolha o valor inicial  $s_0$

**Passo 1** Gere  $s'$  com  $\Sigma(s \rightarrow s')$

**Passo 2** Se  $\phi(s') \leq \phi(s_t)$ ,  $s_{t+1} = s'$

Se não, gere  $u$  entre  $[0, 1]$ . Se  $u \leq \Omega(s_t \rightarrow s')$ ,  $s_{t+1} = s'$

Se não,  $s_{t+1} = s_t$

**Passo 3** Faça  $t = t + 1$  e volte ao Passo 1

**Passo 4** Retorne até  $\{s_0, s_1, \dots, s_N\}$

Fica claro que para  $T_t = 1$  a probabilidade de aceitação é a mesma do algoritmo de Metropolis e, neste caso, SA e o método de Metropolis são idênticos.

Considere que o espaço de parâmetros tenha dimensão  $p$  e que seja tratado um problema de minimização. Assim, a forma geral do algoritmo SA pode ser sumarizada como:

**Passo 0** Comece com uma temperatura inicial  $T_0$ , um parâmetro inicial valendo  $\theta_0$  e calcule o valor da função  $\theta_0, \phi_{old}$ .

**Passo 1** Selecione aleatoriamente uma direção no espaço  $p$ -dimensional e faça um passo nesta direção para obter um novo valor  $\theta_1$ . Calcule o valor da função em  $\theta_1, \phi_{new}$ .

**Passo 2** Se  $\Delta = \phi_{new} - \phi_{old} < 0$  o movimento para  $\theta_1$  é aceito; se não, gere  $u$  entre  $[0, 1]$  e aceite  $\theta_1$  apenas se  $u < \exp(-\Delta/T)$ .

**Passo 3** Repita os passos 1 – 2  $N$  vezes até que o sistema alcance o equilíbrio. Isto produzirá  $l$  passos aceitos.

**Passo 4** Se  $s > 0$ , a temperatura é reduzida, normalmente, fazendo  $T \rightarrow \rho T$ , onde  $0 \leq \rho \leq 1$ . Se  $s = 0$ , o sistema alcançou o equilíbrio para a temperatura desejada.

Os valores de  $N$ ,  $\rho$  e  $T_0$  controla a velocidade de convergência e pode ser, normalmente, escolhido por algum tipo de experimentação. Eles dependem muito do problema em questão. Um valor grande para  $N$  fornece uma solução mais precisa, porém, requer mais

---

esforço computacional. Aumentando o valor de  $\rho$  aumenta-se a confiabilidade do algoritmo para alcançar o equilíbrio e corresponde a uma baixa taxa de resfriamento. Comumente, usa-se  $\rho = 0.95$ .  $T_0$  é escolhido de tal forma que seja grande o suficiente para que cada ponto no espaço de parâmetros tenha chance de ser visitado.

# Referências Bibliográficas

- [1] E. Abrahams, S. V. Kravchenko, and M. P. Sarachik. Colloquium: Metallic behavior and related phenomena in two dimensions. *Rev. Mod. Phys.*, **73**, 251, 2001.
- [2] M. Alava, M. E. J. Karttunen, and K. J. Niskanen. Residual stresses in plastic random systems. *Europhys. Lett.*, **32**, 143, 1995.
- [3] A. N. Aleshin, S. W. Chu, V. I. Kozub, S. W. Lee, J. Y. Lee, S. H. Lee D. W. Kim, and Y. W. Park. Non-Ohmic conduction in polydiacetylene thin films. *Curr. Appl. Phys.*, **5**, 85, 2005.
- [4] A. N. Aleshin, H. J. Lee, S. H. Jhang, H. S. Kim, K. Akagi, and Y. W. Park. Coulomb-blockade transport in quasi-one-dimensional polymer nanofibers. *Phys. Rev. E*, **72**, 153202, 2005.
- [5] M. Allen and D. Tildesley. *Computer simulation of liquids*. Clarendon Press, 1987.
- [6] M. G. Ancona, W. Kruppa, R. W. Rendell, A. W. Snow, D. Park, and J. B. Boos. Coulomb blockade in single-layer Au nanocluster films. *Phys. Rev. B*, **64**, 033408, 2001.
- [7] Eva Y. Andrei, editor. *Two-Dimensional electron systems on helium and other cryogenic substrates*. Kluwer Academic Publishers, 1997.
- [8] R. G. Barrera, O. Guzman, and B. Balaguer. Point charge in a three-dielectric medium with planar interface. *Am. J. Phys.*, **46**(11), 1172, November 1978.

- [9] E. Barth and T. Schlick. Overcoming stability limitations in biomolecular dynamics. I. Combining force splitting via extrapolation with Langevin dynamics in LN. *J. Chem. Phys.*, **109**(5), 1617–1632, August 1998.
- [10] D. Beeman. Some multistep methods for use in molecular dynamics calculations. *J. Comp. Phys.*, **20**, 130, 1976.
- [11] R. Besseling, N. Kokubo, and P. H. Kes. Dynamic Melting of Confined Vortex Matter. *Phys. Rev. Lett.*, **91**, 177002, 2003.
- [12] S. Bhattacharya and M. J. Higgins. Dynamics of a disordered line lattice. *Phys. Rev. Lett.*, **70**, 2617, 1993.
- [13] G. Blatter, M. V. Feigel'man, V. B. Geshkenbein, A. I. Larkin, and V. M. Vinokur. Vortices in high-temperature superconductors. *Rev. Mod. Phys.*, **66**, 1125, 1994.
- [14] S. Bogdanovich and D. Popovic. Onset of Glassy Dynamics in a Two-Dimensional Electron System in Silicon. *Phys. Rev. Lett.*, **88**, 236401, 2002.
- [15] L. Bonsall and A. A. Maradudin. Some static and dynamical properties of a two-dimensional Wigner crystal. *Phys. Rev. B*, **15**(4), 1959, March 1977.
- [16] A. Brass, H. J. Jensen, and A. J. Berlinsky. Models of flux pinning in the quasistatic limit. *Phys. Rev. B*, **39**, 102, 1989.
- [17] T. R. Brown and C. C. Grimes. Observation of cyclotron resonance in surface-bound electrons on liquid helium. *Phys. Rev. Lett.*, **29**, 1233, 1972.
- [18] A. Bunger, C. L. Brooks III, and Karplus M. Stochastic boundary conditions for molecular dynamics simulations of ST2 water. *Chem. Phys. Lett.*, **105**, 495, 1984.
- [19] P. Chauve, T. Giamarchi, and P. Le Doussal. Creep and depinning in disordered media. *Phys. Rev. B*, **62**, 6241, 2000.

- 
- [20] J. Chen, Y. Cao, and Z. Jiao. Dynamics of two-dimensional colloids on a disordered substrate. *Phys. Rev. E*, **69**, 041403, 2004.
- [21] E. Cheng, M. W. Cole, and M. H. Cohen. Binding of electrons to the surface of liquid helium. *Phys. Rev. B*, **50**, 1136, 1994.
- [22] D. M. Chernikova. Charged helium surface in a capacitor. *Sov. J. Low Temp. Phys.*, **2**, 669, 1976.
- [23] R. Chitra, T. Giamarchi, and P. Le Doussal. Dynamical Properties of the Pinned Wigner Crystal. *Phys. Rev. Lett.*, **80**, 3827, 1998.
- [24] J. H. Chu and L. I. Direct observation of Coulomb crystals and liquids in strongly coupled rf dusty plasmas. *Phys. Rev. Lett.*, **72**, 4009, 1994.
- [25] L. Cândido, J. P. Rino, and N. Studart. Melting of classical two-dimensional electrons on a helium film: A molecular-dynamics study. *Physica B*, **54**(10), 7046, September 1996.
- [26] M. W. Cole and M. H. Cohen. Image-potential-induced surface bands in insulators. *Phys. Rev. Lett.*, **23**, 1238, 1969.
- [27] J. A. R. daCunha and L. Cândido. Melting temperature of screened Wigner crystal on helium films by molecular dynamics. *Phys. Rev. B*, **71**, 073403, 2005.
- [28] C. J. daSilva, P. Damasceno, J. P. Rino, and L. Cândido. Temperature effect on the dynamical response of electrons on helium film. *Submitted to Phys. Rev. Lett.*, 2008.
- [29] C. J. daSilva, J. P. Rino, and L. Cândido. Insulator-conductor behavior of a two-dimensional electron system on a helium film. *Phys. Rev. B*, **77**, 165407, 2008.

- [30] Irena Doicescu. *dc-Messungen am zweidimensionalen Elektronensystemen auf flüssigen  $4\text{He}$  in eingeschränkter Geometrie*. PhD thesis, Fachbereich Physik der Universität Konstanz, 2006.
- [31] P. Le Doussal and T. Giamarchi. Elastic theory of flux lattices in the presence of weak disorder. *Phys. Rev. B*, **52**, 1242, 1995.
- [32] P. Le Doussal and T. Giamarchi. Moving glass theory of driven lattices with disorder. *Phys. Rev. B*, **57**, 11356, 1998.
- [33] P. Drude. Zur Electronentheorie der Metalle. *Ann. Phys.*, **1**, 566, 1900.
- [34] C. I. Duruöz, R. M. Clarke, C. M. Marcus, and J. S. Harris. Conduction Threshold, Switching, and Hysteresis in Quantum Dot Arrays. *Phys. Rev. Lett.*, **74**, 3237, 1995.
- [35] V. S. Edel'man. Effective mass of electrons localized over the surface of liquid helium. *JETP Lett.*, **24**, 469, 1976.
- [36] H. Etz, W. Gombert, W. Idstein, and P. Leiderer. Stability of charged  $4\text{He}$  films. *Phys. Rev. Lett.*, **53**, 2567, 1984.
- [37] A. L. Fetter. Electrodynamics and thermodynamics of a classical electron surface layer. *Phys. Rev. B*, **10**, 3739, 1974.
- [38] D. S. Fisher. Sliding charge-density waves as a dynamical critical phenomenon. *Phys. Rev. B*, **31**, 1396, 1985.
- [39] D. S. Fisher. Collective transport in random media: from superconductors to earthquakes. *Phys. Rep.*, **301**, 113, 1998.
- [40] D. Frenkel and B. Smit. *Understanding Molecular Simulation: From Algorithms to Applications*. Academic Press, 1996.

- [41] R. C. Gann, S. Shakravarty, and G. V. Chester. Monte Carlo simulation of the classical two-dimensional one-component plasma. *Phys. Rev. B*, **20**, 326, 1979.
- [42] G. F. Giuliani and G. Vignale. *Quantum Theory of the Electron Liquid*. Cambridge University Press, 2005.
- [43] P. Glasson, E. Collin, P. Fozooni, P. G. Frayne, K. Harrabi, W. Bailey, G. Papageorgiu, Y. Mukharsky, and M. J. Lea. Confined electron crystals and Rydberg states on liquid helium. *Physica E*, **22**, 761, 2004.
- [44] P. Glasson, V. Dotsenko, P. Fozooni, M. J. Lea, W. Bailey, G. Papageorgiu, S. E. Andresen, and A. Kristensen. Observation of Dynamical Ordering in a Confined Wigner Crystal. *Phys. Rev. Lett.*, **87**, 176802, 2001.
- [45] P. Glasson, G. Papageorgiu, K. Harrabi, D. G. Rees, V. Antonov, E. Collin, P. Fozooni, P. G. Frayne, Y. Mukharsky, and M. J. Lea. Trapping single electrons on liquid helium. *J. Phys. Chem. Sol.*, **66**, 1539, 2005.
- [46] V. J. Goldman, M. Santos, M. Shayegan, and J. E. Cunningham. Evidence for two-dimensional quantum Wigner crystal. *Phys. Rev. Lett.*, **65**, 2189, 1990.
- [47] C. C. Grimes and G. Adams. Evidence for a liquid-to-crystal phase transition in a classical two-dimensional sheet of electrons. *Phys. Rev. Lett.*, **42**, 795, 1979.
- [48] C. C. Grimes and G. Adams. Infrared-absorption spectrum of the electrical bubble in liquid helium. *Phys. Rev. B*, **45**, 2305, 1992.
- [49] C. C. Grimes, T. R. Brown, M. L. Burnes, and C. L. Zipfel. Spectroscopy of electrons in image-potential-induced surface states outside liquid helium. *Phys. Rev. B*, **13**, 140, 1976.
- [50] G. Grüner. The dynamics of charge-density waves. *Rev. Mod. Phys.*, **60**, 1129, 1988.

- [51] G. Grüner. *Density waves in solids*. Addison-Wesley, 1994.
- [52] B. I. Halperin and D. R. Nelson. Theory of Two-Dimensional Melting. *Phys. Rev. Lett.*, **41**, 121, 1978.
- [53] M. C. Hellerqvist, D. Ephron, W. R. White, M. R. Beasley, and A. Kapitulnik. Vortex Dynamics in Two-Dimensional Amorphous Mo<sub>77</sub>Ge<sub>23</sub> Films. *Phys. Rev. Lett.*, **76**, 4022, 2003.
- [54] R. Hockney and J. Eastwood. *Computer Simulation Using Particles*. McGraw-Hill, 1981.
- [55] R. W. Hockney and T. R. Brown. A lambda transition in a classical electron film. *J. Phys. C*, **8**, 1813, 1975.
- [56] J. Hu and R. M. Westervelt. Collective transport in two-dimensional magnetic bubble arrays. *Phys. Rev. B*, **51**, 17279, 1995.
- [57] X. L. Hu and A. J. Dahm. Stability of charged thin helium films. *Phys. Rev. B*, **42**, 2010, 1990.
- [58] M. Imada and M. Takahashi. Quantum Monte Carlo Simulation of a Two-Dimensional Electron System - Melting of Wigner Crystal. *J. Phys. Soc. Jpn*, **53**, 3770, 1984.
- [59] H. J. Jensen, A. Brass, Y. Brechet, and A. J. Berlinsky. Current-voltage characteristics in a two-dimensional model for flux flow in type-II superconductors. *Phys. Rev. B*, **38**, 9235, 1988.
- [60] H. W. Jiang and A. J. Dahm. Conduction Properties of a New Two-Dimensional Sliding Charge-Density Wave. *Phys. Rev. Lett.*, **62**, 1396, 1989.
- [61] H. W. Jiang, M. A. Stan, and A. J. Dahm. *Surf. Sci.*, **196**, 1, 1988.

- [62] K. Kajita. Stability of Electrons on Thin Helium Film-Solid Neon System - Surface Electrons and Bubble Electrons. *J. Phys. Soc. Jpn.*, **52**, 372, 1983.
- [63] K. Kajita. Nonlinear transport phenomena of crystallized electrons formed on liquid helium film. *Surf. Sci.*, **196**, 29, 1988.
- [64] R. K. Kalia, P. Vashishta, and S. W. de Leeuw. Melting of a two-dimensional electron lattice. *Phys. Rev. B*, **23**, 4794, 1981.
- [65] D. A. Kessler, H. Levine, and Y. Tu. Interface fluctuations in random media. *Phys. Rev. B*, **43**, 4551, 1991.
- [66] S. Kirkpatrick, C. D. Gelatt, and M. P. Vecchi. Optimization by Simulated Annealing. *Science*, **220**, 671, 1983.
- [67] J. Klier, I. Doicescu, and P. Leiderer. First dc Measurements of Electrons on Liquid Helium: the Helium-FET. *J. Low Temp. Phys.*, **121**(5/6), 603, 2000.
- [68] A. E. Koshelev and V. M. Vinokur. Dynamic Melting of the Vortex Lattice. *Phys. Rev. Lett.*, **73**, 3580, 1994.
- [69] J. M. Kosterlitz and D. J. Thouless. Long range order and metastability in two dimensional solids and superfluids. *J. Phys. C*, **5**, L124, 1972.
- [70] A. Kristensen, K. Djerfi, P. Fozooni, M. J. Lea, P. J. Richardson, A. Santrich-Badal, A. Blackburn, and R. W. van der Heijden. Hall-Velocity Limited Magnetoconductivity in a Classical Two-Dimensional Wigner Crystal. *Phys. Rev. Lett.*, **77**, 1350, 1996.
- [71] Ç. Kurdak, A. J. Rimberg, T. R. Ho, and J. Clarke. Activated transport and scaling behavior in the current-voltage characteristics and Coulomb-blockade oscillations of two-dimensional arrays of metallic islands. *Phys. Rev. B*, **57**, R6842, 1998.

- [72] D. K. Lambert and P. L. Richards. Far-infrared and capacitance measurements of electrons on liquid helium. *Physical Review B*, **23**, 3282, 1981.
- [73] A. I. Larkin and Y. N. Ovchinnikov. *Sov. Phys. JETP*, **38**, 854, 1974.
- [74] P. Leiderer. Electrons at the surface of quantum systems. *J. Low Temp. Phys.*, **87**, 247, 1992.
- [75] R. Mannella. Quasisymplectic integrators for stochastic differential equations. *Phys. Rev. E*, **69**, 041107, 2004.
- [76] M. C. Marchetti. Models of plastic depinning of driven disordered systems. *Pramana J. Phys.*, **64**, 1097, 2005.
- [77] G. Martyna and M. Tuckerman. Symplectic reversible integrators: Predictor-corrector methods. *J. Chem. Phys.*, **102**, 8071, 1995.
- [78] Teruo Matsushita. *Flux pinning in superconductors*. Springer-Verlag, 2007.
- [79] N. D. Mermin. Crystalline Order in Two Dimensions. *Phys. Rev.*, **176**(1), 250, July 1968.
- [80] N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. M. Teller, and E. Teller. Equation of State Calculations by Fast Computing Machines. *J. Chem. Phys.*, **21**, 1087, 1953.
- [81] A. A. Middleton and N. S. Wingreen. Collective Transport in Arrays of Small Metallic Dots. *Phys. Rev. Lett.*, **71**, 3198, 1993.
- [82] G. Mistura, T. Günzler, S. Nesper, and P. Leiderer. Microwave study of screened two-dimensional electron crystals on helium films. *Phys. Rev. B*, **56**, 8360, 1997.
- [83] Yu. P. Monarkha and K. Kono. *Two-Dimensional Coulomb Liquids and Solids*. Springer Series, 2004.

- [84] R. H. Morf. Temperature Dependence of the Shear Modulus and Melting of the Two-Dimensional Electron Solid. *Phys. Rev. Lett.*, **43**, 931, 1979.
- [85] O. Narayan and D. S. Fisher. Critical behavior of sliding charge-density waves in 4-e dimensions. *Phys. Rev. B*, **46**, 11520, 1992.
- [86] D. R. Nelson and B. I. Halperin. Dislocation-mediated melting in two dimensions. *Phys. Rev. B*, **19**, 2457, 1979.
- [87] S. Nose. *Prog. Theor. Phys. Supp.*, **103**, 1, 1991.
- [88] J. L. G. Palacios and F. J. Lzaro. Langevin-dynamics study of the dynamical properties of small magnetic particles. *Phys. Rev. B*, **58**, 14937, 1998.
- [89] G. Papageorgiu, Yu. Mukharsky, K. Harrabi, P. Glasson, P. Fozooni, P. G. Frayne, E. Collin, and M. J. Lea. Detecting electrons on helium with a single-electron transistor (SET). *Physica E*, **18**, 179, 2003.
- [90] R. Parthasarathy, X. M. Lin and K. Elteto, T. F. Rosenbaum, and H. M. Jaeger. Percolating through Networks of Random Thresholds: Finite Temperature Electron Tunneling in Metal Nanocrystal Arrays. *Phys. Rev. Lett.*, **92**, 076801, 2004.
- [91] R. Parthasarathy, X. M. Lin, and H. M. Jaeger. Electronic Transport in Metal Nanocrystal Arrays: The Effect of Structural Disorder of Scaling Behavior. *Phys. Rev. Lett.*, **87**, 18687, 2001.
- [92] G. Piacente and F. M. Peeters. Pinning and depinning of a classic quasi-one-dimensional Wigner crystal in the presence of a constriction. *Phys. Rev. B*, **72**, 205208, November 2005.
- [93] P. M. Platzman and M. I. Dykman. Quantum Computing with Electrons Floating on Liquid Helium. *Science*, **284**, 1967, 1999.

- [94] N. Provatas, T. Ala-Nissila, M. Grant, K. R. Elder, and L. Piché. Scaling propagation and kinetic roughening of flame fronts in random media. *J. Stat. Phys.*, **81**, 737, 1995.
- [95] C. Reichhardt and C. J. Olson. Colloidal Dynamics on Disordered Substrates. *Phys. Rev. Lett.*, **89**, 078301, 2002.
- [96] C. Reichhardt, C. J. Olson, N. Gronbech-Jensen, and F. Nori. Moving Wigner Glasses and Smectics: Dynamics of Disordered Wigner Crystals. *Phys. Rev. Lett.*, **86**(19), 4354, May 2001.
- [97] C. Reichhardt and C. J. O. Reichhardt. Temperature and ac effects on charge transport in arrays of metallic dots. *Phys. Rev. B*, **68**, 165305, 2003.
- [98] C. Reichhardt and C. J. O. Reichhardt. Noise at the Crossover from Wigner Liquid to Wigner Glass. *Phys. Rev. Lett.*, **93**, 176405, 2004.
- [99] C. Reichhardt and C.J. Olson Reichhardt. Charge Transport Transitions and Scaling in Disordered Arrays of Metallic Dots. *Phys. Rev. Lett.*, **90**(4), 046802, January 2003.
- [100] A. J. Rimberg, T. R. Ho, and J. Clarke. Scaling Behavior in the Current-Voltage Characteristic of One- and Two-Dimensional Arrays of Small Metallic Islands. *Phys. Rev. Lett.*, **74**, 4714, 1995.
- [101] M. Saitoh. Warm electrons on the liquid 4He surface. *J. Phys. Soc. Japan*, **42**, 201, 1977.
- [102] M. Saitoh. Melting temperature of two-dimensional electron crystals trapped on thin-film liquid He. *Phys. Rev. B*, **40**(1), 810, July 1989.
- [103] S. Das Sarma and A. Pinczuk, editors. *Perspectives in Quantum Hall effects*. Wiley-VCH, 2004.

- [104] R. Schneider, A. R. Sharma, and A. Rai. *Lecture Notes in Physics*, chapter Introduction to Molecular Dynamics, pages 3–40. Springer-Verlag, 2008.
- [105] M. Shayegan. *Electrons in a flatland*. EDP Sciences & Springer-Verlag, 1999.
- [106] A. C. Shi and A. J. Berlinsky. Pinning and I-V characteristics of a two-dimensional defective flux-line lattice. *Phys. Rev. Lett.*, **67**, 1926, 1991.
- [107] V. Shikin, J. Klier, I. Doicescu, A. Würfl, and P. Leiderer. Dip problem of the electron mobility on a thin helium film. *Phys. Rev. B*, **64**, 073401, 2001.
- [108] V. B. Shikin and Yu. P. Monarkha. *J. Low Temp. Phys.*, **16**, 193, 1974.
- [109] V. S. Shikin and P. Leiderer. Oscillations and stability of a charged helium surface. *Sov. Phys. JETP*, **54**, 92, 1981.
- [110] K. Shirahama, Yu. P. Monarkha, and K. Kono. Nonlinear Wigner Solid Transport on the Free Surface of Normal and Superfluid  $^3\text{He}$ . *Phys. Rev. Lett.*, **93**, 176805, 2004.
- [111] W. R. Smythe. *Static and Dynamic Electricity*. McGraw-Hill, 1950.
- [112] L. Sneddon, M. C. Cross, and D. S. Fisher. Sliding Conductivity of Charge-Density Waves. *Phys. Rev. Lett.*, **49**, 292, 1982.
- [113] W. T. Sommer. Liquid helium as a potential barrier to electrons. *Phys. Rev. Lett.*, **12**, 271, 1964.
- [114] N. Studart. *Propriedades eletrônicas de um sistema clássico bidimensional*. PhD thesis, Universidade de São Paulo, 1979.
- [115] W. Swope, H. Andersen, P. Berens, and K. Wilson. A computer simulation method for the calculation of equilibrium constants for the formation of physical clusters of molecules: Application to small water clusters. *J. Chem. Phys.*, **76**, 637, 1982.

- [116] B. Tanatar and D. M. Ceperley. Ground state of the two-dimensional electron gas. *Phys. Rev. B*, **39**, 5005, 1989.
- [117] R. E. Thorne. Charge-Density-Wave Conductors. *Phys. Today*, **5**, 42, 1996.
- [118] H. Totsuji. Numerical experiment on two-dimensional electron liquids: Thermodynamic properties and onset of short-range order. *Phys. Rev. A*, **17**(1), 399, January 1978.
- [119] D. C. Tsui, H. L. Stormer, and A. C. Gossard. Two-Dimensional Magnetotransport in the Extreme Quantum Limit. *Phys. Rev. Lett.*, **48**, 1559, 1982.
- [120] M. Tuckerman, B. Berne, and G. Martyna. Reversible multiple time scale molecular dynamics. *J. Chem. Phys.*, **97**, 1990, 1992.
- [121] L. Verlet. Computer "Experiments" on Classical Fluids. I. Thermodynamical Properties of Lennard-Jones Molecules. *Phys. Rev.*, **159**, 98, 1967.
- [122] A. P. Volodin, M. S. Khaikin, and V. S. Edel'man. Development of instability and bubblon production on a charged surface of liquid helium. *JETP Lett.*, **26**, 543, 1977.
- [123] M. Wanner and P. Leiderer. Charge induced ripplon softening and dimple crystallization at the interface of  $^3\text{He}$ - $^4\text{He}$  mixtures. *Phys. Rev. Lett.*, **42**, 315, 1979.
- [124] J. Watson and D. S. Fisher. Collective particle flow through random media. *Phys. Rev. B*, **54**, 938, 1996.
- [125] E. Wigner. On the Interaction of Electrons in Metals. *Phys. Rev.*, **46**, 1002, 1934.
- [126] F. I. B. Williams, P. A. Wright, R. G. Clark, E. Y. Andrei, G. Deville, D. C. Glattli, O. Probst, B. Etienne, C. Dorin, C. T. Foxon, and J. J. Harris. Conduction Threshold and Pinning Frequency of Magnetically Induced Wigner Solid. *Phys. Rev. Lett.*, **66**, 3285, 1991.

- [127] D. Winske, M. S. Murillo, and M. Rosenberg. Numerical simulation of dust-acoustic waves. *Phys. Rev. B*, **59**(2), 2263–2272, February 1999.
- [128] D. Winske and M. Rosenberg. Nonlinear Development of the Dusty Acoustic Instability in a Collisional Dusty Plasma. *IEEE Trans. Plasma Sci.*, **26**(1), 92–99, February 1998.
- [129] J. P. Wolfe. Photograph of an electron-hole drop in Germanium. *Phys. Rev. Lett.*, **34**, 1292, 1975.
- [130] Andreas Würfl. *Hochfrequenzuntersuchungen an zweidimensionalen Elektronensystemen auf dünnen Heliumfilmen*. PhD thesis, Universität Konstanz, Fachbereich für Physik, 2006.
- [131] U. Yaron, P. L. Gammel, D. A. Huse, R. N. Kleiman, C. S. Oglesby, E. Bucher, B. Batlogg, D. J. Bishop, K. Mortensen, K. Clausen, C. A. Bolle, and F. DeLaCruz. Neutron Diffraction Studies of Flowing and Pinned Magnetic Flux Lattices in 2H-NbSe<sub>2</sub>. *Phys. Rev. Lett.*, **73**, 2748, 1994.
- [132] A. P. Young. Melting and the vector Coulomb gas in two dimensions. *Phys. Rev. B*, **19**, 1855, 1979.