



UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS  
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DE TECNOLOGIA  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

***SIMULAÇÕES COMPUTACIONAIS DE  
SISTEMAS ELETRÔNICOS EM GEOMETRIAS  
CONFINADAS***

**Patricia Cristina Venturini**

São Carlos  
2008

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS  
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DE TECNOLOGIA  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

***SIMULAÇÕES COMPUTACIONAIS DE  
SISTEMAS ELETRÔNICOS EM GEOMETRIAS  
CONFINADAS***

**Patricia Cristina Venturini**

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

Orientador:

**Prof. Dr. José Pedro Rino**

Co-Orientador:

**Prof. Dr. Nelson Studart Filho**

São Carlos

2008

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

V469sc

Venturini, Patricia Cristina.

Simulações computacionais de sistemas eletrônicos em geometrias confinadas / Patricia Cristina Venturini. -- São Carlos : UFSCar, 2008.

76 f.

Tese (Doutorado) -- Universidade Federal de São Carlos, 2008.

1. Elétrons em filme de hélio. 2. Mobilidade elétrons superficiais. 3. Fator de estrutura dinâmico. 4. Sistema bidimensional de elétrons I. Título.

CDD: 532 (20<sup>a</sup>)

Aos meus grandes incentivadores,  
André e Alexandre.

Em memória de Victor Venturini,  
meu grande herói.

Este trabalho teve o apoio  
financeiro da FAPESP.

# *Resumo*

Neste trabalho, propriedades estruturais e dinâmicas de um sistema bidimensional de elétrons aprisionados sobre filme de hélio, depositado em substrato sólido, são determinadas via simulação por dinâmica molecular. A influência da espessura do filme e do tipo de substrato nestas propriedades são analisadas em experimentos numéricos.

Atenção especial é dada ao fator de estrutura dinâmico que é utilizado para a obtenção de importantes propriedades deste sistema, como dispersão e mobilidade dos elétrons.

Pela primeira vez, o fator de estrutura dinâmico de sistema de elétrons interagentes é aplicado no cálculo de mobilidade, introduzindo o efeito de muitos corpos.

# *Abstract*

In this work, structural and dynamic properties of a two-dimensional electron system trapped to helium film, deposited on a solid substrate, are determined through molecular dynamics simulation. The influence of the film thickness and type of substrate on those properties are analyzed in the numerical experiments.

A special attention is given to dynamical structure factor that is used to obtain some important properties of this system, like dispersion and mobility of electrons.

For the first time, the dynamic structure factor from interacting electron system is applied to the calculus of mobility, introducing a many body effect.

# *Lista de Figuras*

2.1	Representação esquemática da caixa de simulação e das caixas virtuais. . . . .	16
3.1	<i>Energia total como função da temperatura para um sistema de elétrons sobre hélio volumétrico.</i> . . . . .	30
3.2	<i>Função de correlação de pares para um sistema de elétrons sobre hélio volumétrico para <math>\Gamma = 144</math> e 103.</i> . . . . .	31
3.3	<i>Fator de estrutura estático para um sistema de elétrons sobre hélio volumétrico para <math>\Gamma = 144</math> e 103. As linhas verticais indicam os vetores de onda da rede recíproca do sistema cristalino.</i> . . . . .	31
3.4	<i>Mapeamento do fator estrutura dinâmico para um sistema de elétrons sobre hélio volumétrico para <math>\Gamma = 144</math>, e vetores de onda variando de <math>q_a = 0.12</math> a 1.98.</i>	32
3.5	<i>Mapeamento do fator estrutura dinâmico para um sistema de elétrons sobre hélio volumétrico para <math>\Gamma = 144</math>, e vetores de onda variando de <math>q_a = 1.98</math> a 2.94.</i>	32
3.6	<i>Mapeamento do fator estrutura dinâmico para um sistema de elétrons sobre hélio volumétrico para <math>\Gamma = 144</math>, e vetores de onda variando de <math>q_a = 2.94</math> a 3.69.</i>	33
3.7	<i>Fator estrutura dinâmico para um sistema de elétrons sobre hélio volumétrico para <math>\Gamma = 144</math>, e vetores de onda variando de <math>q_a = 0.12, 0.71, 1.41, 2.12, 2.83</math> e 3.53.</i> . . . . .	34
3.8	<i>Mapeamento do fator estrutura dinâmico para um sistema de elétrons sobre hélio volumétrico para <math>\Gamma = 103</math>, e vetores de onda variando de <math>q_a = 0.12</math> a 1.95.</i>	34
3.9	<i>Mapeamento do fator estrutura dinâmico para um sistema de elétrons sobre hélio volumétrico para <math>\Gamma = 103</math>, e vetores de onda variando de <math>q_a = 1.95</math> a 2.89.</i>	35
3.10	<i>Mapeamento do fator estrutura dinâmico para um sistema de elétrons sobre hélio volumétrico para <math>\Gamma = 103</math>, e vetores de onda variando de <math>q_a = 2.89</math> a 3.69.</i>	35

3.11	<i>Fator estrutura dinâmico para um sistema de elétrons sobre hélio volumétrico para <math>\Gamma = 103</math>, e vetores de onda variando de <math>qa = 0.12, 0.71, 1.41, 2.12, 2.83</math> e <math>3.53</math>.</i>	36
3.12	<i>Curva de dispersão para um sistema de elétrons sobre hélio volumétrico para <math>\Gamma = 144</math> e <math>103</math>. Os quadrados abertos representam nossos resultados de simulação e a linha contínua foi obtida pelo método apresentado na referência <sup>1</sup>.</i>	37
3.13	<i>Representação esquemática de um sistema de elétrons sobre filme de hélio adsorvido em substrato.</i>	38
3.14	<i>Energia total como função da temperatura para um sistema de elétrons sobre filme de hélio, de espessura <math>d = 100\text{Å}</math>, adsorvido em substratos de vidro, pmma e neônio.</i>	40
3.15	<i>Função de correlação de pares para um sistema de elétrons sobre filme de hélio adsorvido em substrato de neônio para <math>d = 100\text{Å}</math> e <math>350\text{Å}</math> e temperatura <math>T = 0.260\text{K}</math>.</i>	41
3.16	<i>Função de correlação de pares para um sistema de elétrons sobre filme de hélio de espessura <math>d = 100\text{Å}</math> adsorvido em substratos de vidro, pmma e neônio a uma temperatura fixa de <math>T = 0.180\text{K}</math>.</i>	42
3.17	<i>Fator de estrutura estático para um sistema de elétrons sobre filme de hélio de espessura <math>d = 100\text{Å}</math> adsorvido em substratos de vidro, pmma e neônio a uma temperatura fixa de <math>T = 0.180\text{K}</math>.</i>	43
3.18	<i>Mapeamento do fator estrutura dinâmico para um sistema de elétrons sobre filme de hélio de espessura <math>d = 100\text{Å}</math> adsorvido em substrato de vidro, para <math>\Gamma = 41</math> e vetores de onda variando de <math>qa = 0.12</math> a <math>1.74</math>.</i>	44
3.19	<i>Mapeamento do fator estrutura dinâmico para um sistema de elétrons sobre filme de hélio de espessura <math>d = 100\text{Å}</math> adsorvido em substrato de vidro, para <math>\Gamma = 41</math> e vetores de onda variando de <math>qa = 1.74</math> a <math>2.83</math>.</i>	45
3.20	<i>Mapeamento do fator estrutura dinâmico para um sistema de elétrons sobre filme de hélio de espessura <math>d = 100\text{Å}</math> adsorvido em substrato de vidro, para <math>\Gamma = 41</math> e vetores de onda variando de <math>qa = 2.83</math> a <math>3.69</math>.</i>	45

3.21	<i>Fator estrutura dinâmico para um sistema de elétrons sobre filme de hélio de espessura <math>d = 100\text{Å}</math> adsorvido em substrato de vidro, para <math>\Gamma = 41</math> e vetores de onda variando de <math>q_a = 0.12, 0.71, 1.41, 2.12, 2.83</math> e <math>3.53</math>.</i>	46
3.22	<i>Mapeamento do fator estrutura dinâmico para um sistema de elétrons sobre filme de hélio de espessura <math>d = 100\text{Å}</math> adsorvido em substrato de pmma, para <math>\Gamma = 123</math> e vetores de onda variando de <math>q_a = 0.12</math> a <math>2.12</math>.</i>	47
3.23	<i>Mapeamento do fator estrutura dinâmico para um sistema de elétrons sobre filme de hélio de espessura <math>d = 100\text{Å}</math> adsorvido em substrato de pmma, para <math>\Gamma = 123</math> e vetores de onda variando de <math>q_a = 2.12</math> a <math>3.24</math>.</i>	48
3.24	<i>Mapeamento do fator estrutura dinâmico para um sistema de elétrons sobre filme de hélio de espessura <math>d = 100\text{Å}</math> adsorvido em substrato de pmma, para <math>\Gamma = 123</math> e vetores de onda variando de <math>q_a = 3.24</math> a <math>3.69</math>.</i>	48
3.25	<i>Fator estrutura dinâmico para um sistema de elétrons sobre filme de hélio de espessura <math>d = 100\text{Å}</math> adsorvido em substrato de pmma, para <math>\Gamma = 123</math> e vetores de onda variando de <math>q_a = 0.12, 0.71, 1.41, 2.12, 2.83</math> e <math>3.53</math>.</i>	49
3.26	<i>Mapeamento do fator estrutura dinâmico para um sistema de elétrons sobre filme de hélio de espessura <math>d = 100\text{Å}</math> adsorvido em substrato de neônio, para <math>\Gamma = 183</math> e vetores de onda variando de <math>q_a = 0.12</math> a <math>1.96</math>.</i>	50
3.27	<i>Mapeamento do fator estrutura dinâmico para um sistema de elétrons sobre filme de hélio de espessura <math>d = 100\text{Å}</math> adsorvido em substrato de neônio, para <math>\Gamma = 183</math> e vetores de onda variando de <math>q_a = 1.96</math> a <math>3.33</math>.</i>	51
3.28	<i>Mapeamento do fator estrutura dinâmico para um sistema de elétrons sobre filme de hélio de espessura <math>d = 100\text{Å}</math> adsorvido em substrato de neônio, para <math>\Gamma = 183</math> e vetores de onda variando de <math>q_a = 3.33</math> a <math>3.69</math>.</i>	51
3.29	<i>Fator estrutura dinâmico para um sistema de elétrons sobre filme de hélio de espessura <math>d = 100\text{Å}</math> adsorvido em substrato de neônio, para <math>\Gamma = 183</math> e vetores de onda variando de <math>q_a = 0.12, 0.71, 1.41, 2.12, 2.83</math> e <math>3.53</math>.</i>	52
3.30	<i>Curva de dispersão para um sistema de elétrons sobre filme de hélio de espessura <math>d = 100\text{Å}</math> adsorvido em substrato de vidro para <math>\Gamma = 41</math> (quadrados abertos), de pmma para <math>\Gamma = 123</math> (círculos abertos) e neônio para <math>\Gamma = 183</math> (triângulos abertos).</i>	52

3.31	<i>Curvas de dispersão para um sistema de elétrons sobre filme de hélio de espessura <math>d = 100\text{Å}</math> (quadrados abertos), <math>d = 500\text{Å}</math> (círculos abertos), <math>d = 2500\text{Å}</math> (triângulos abertos) e <math>d = 12500\text{Å}</math> (triângulos invertidos abertos), adsorvido em substrato de vidro, pmma e neônio a uma temperatura de <math>T = 0.3\text{K}</math>.</i> . . . . .	53
3.32	<i>Curvas de mobilidade para um sistema de elétrons de densidade <math>\rho = 2.5 \times 10^9\text{cm}^{-2}</math> sobre filme de hélio de espessura <math>d = 350\text{Å}</math>. Os quadrados são resultados experimentais extraídos de <sup>2</sup>, a linha contínua é a curva teórica extraída de <sup>3</sup> e os triângulos representam nossos resultados.</i> . . . . .	54
3.33	<i>Curvas de mobilidade devida à interação elétron-átomos de vapor de hélio para um sistema de elétrons de densidade <math>\rho = 2.5 \times 10^9\text{cm}^{-2}</math> sobre filme de hélio de espessura <math>d = 350\text{Å}</math>. A linha contínua é a curva teórica extraída de <sup>3</sup> e os quadrados representam nossos resultados.</i> . . . . .	55
3.34	<i>Curvas de mobilidade devida à interação elétron-defeitos da interface para um sistema de elétrons de densidade <math>\rho = 2.5 \times 10^9\text{cm}^{-2}</math> sobre filme de hélio de espessura <math>d = 350\text{Å}</math>. A linha contínua é a curva teórica extraída de <sup>3</sup> e os quadrados representam nossos resultados.</i> . . . . .	56
3.35	<i>Curvas de mobilidade como função de espessura de filme hélio para um sistema de elétrons de densidade <math>\rho = 3 \times 10^9\text{cm}^{-2}</math> a uma temperatura de <math>T = 1.2\text{K}</math>. Os quadrados são resultados experimentais extraídos de <sup>4</sup> e os círculos representam nossos resultados.</i> . . . . .	56

# *Sumário*

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>12</b>
<b>2</b>	<b>Dinâmica Molecular e Propriedades Físicas</b>	<b>15</b>
2.1	Médias Temporais . . . . .	17
2.2	Função de Correlação de Pares $g(\vec{r})$ . . . . .	18
2.3	Fator de Estrutura Estático $S(\vec{q})$ . . . . .	19
2.4	Fator de Estrutura Dinâmico $S(\vec{q}, \omega)$ . . . . .	21
2.5	Mobilidade $\mu$ . . . . .	23
<b>3</b>	<b>Sistemas Eletrônicos de Baixa Dimensionalidade</b>	<b>27</b>
3.1	Introdução . . . . .	27
3.2	Elétrons sobre Hélio Volumétrico . . . . .	28
3.2.1	Resultados e Discussões . . . . .	29
3.3	Elétrons sobre Filme de Hélio Adsorvido em Substrato . . . . .	38
3.3.1	Resultados e Discussões . . . . .	39
<b>4</b>	<b>Conclusão e Considerações Finais</b>	<b>57</b>
	<b>Apêndice A – Soma de Ewald</b>	<b>59</b>
A.1	Soma de Ewald para um Sistema de Elétrons sobre Hélio Volumétrico . . . . .	59
A.2	Soma de Ewald para um Sistema Elétrons sobre Filme de Hélio Adsorvido em Substrato . . . . .	64
	<b>Referências Bibliográficas</b>	<b>73</b>

# 1 *Introdução*

A partir da década de 60, sistemas eletrônicos bidimensionais têm sido extensamente estudados tanto teórica quanto experimentalmente. O entendimento de tais sistemas levou a uma revolução na microeletrônica e contribuiu para a descoberta de fenômenos quânticos notáveis, como os efeitos Hall inteiro e fracionário. Exemplos típicos de sistemas eletrônicos bidimensionais são elétrons na superfície de hélio líquido e elétrons na camada de inversão de semicondutores em estruturas MOS (metal-óxido-semicondutor). Experimentalmente, o intervalo de densidade eletrônica ( $\rho$ ) acessível para o sistema de elétrons sobre filme de hélio é da ordem de  $10^5$  a  $10^9 \text{cm}^{-2}$ , chegando até  $10^{10} \text{cm}^{-2}$  para o caso de filmes finos de hélio, enquanto que para sistemas MOS, o intervalo de densidade eletrônica acessível é da ordem de  $10^{11}$  a  $10^{13} \text{cm}^{-2}$ . Por esta razão, sistemas MOS devem ser tratados quanticamente, tendo em vista que sua energia de Fermi ( $E_F = \frac{\pi \hbar^2 \rho}{m}$ ) é muito maior que sua energia térmica ( $k_B T$ ), ao passo que sistemas eletrônicos bidimensionais sobre filme de hélio comportam-se como gás clássico, apresentando energia de Fermi menor que sua energia térmica.

Tendo em vista que sistemas bidimensionais de elétrons na superfície de hélio líquido podem receber um tratamento clássico e ainda propiciar um vasto campo de estudos, pois é sensível à variação de parâmetros físicos como espessura de filme, densidade eletrônica, temperatura e tipo de substrato, este foi o sistema escolhido como laboratório para o desenvolvimento deste projeto de doutorado.

Desde o trabalho pioneiro de Sommer (1964)<sup>5</sup>, que propôs que elétrons depositados na superfície de hélio líquido poderiam ser encontrados em estados superficiais formando um sistema bidimensional devido a combinação de um potencial imagem atrativo de longo alcance e uma barreira de potencial repulsiva (devido ao princípio de exclusão de Pauli) de curto alcance, sistemas de elétrons sobre filme de hélio têm sido alvo de estudos de muitos trabalhos científicos<sup>6</sup>. Alguns anos depois, trabalhos independentes de Cole e Cohen (1969 – 1970)<sup>7,8</sup> e de Shikin (1970)<sup>9</sup>, estabeleceram teoricamente as condições para a existência de elétrons sobre hélio líquido. A comprovação experimental da existência de estados superficiais de elétrons sobre filme de hélio foi finalmente realizada por Brown e Grimes em 1972<sup>10</sup>. Para uma

revisão detalhada de propriedades de elétrons na superfície de hélio citamos os trabalhos de Cole (1974)<sup>11</sup>, Crandall (1976)<sup>12</sup>, Gann *et al.* (1979)<sup>13</sup>, Peeters (1987)<sup>14</sup>, Andrei (1997)<sup>15</sup> e Cunha e Ladir (2005)<sup>16</sup>.

Do ponto de vista de simulação computacional, vários métodos têm sido utilizados para estudar propriedades físicas de sistemas eletrônicos na superfície de hélio, em especial, podemos citar as propriedades coletivas obtidas a partir dos modos de vibração do sistema. Os modos de vibração coletiva de um sistema estão diretamente relacionados a seu espectro de flutuações de densidade. A este espectro damos o nome de *fator de estrutura dinâmico*  $S(\vec{q}, \omega)$ , que pode ser obtido por Dinâmica Molecular (*DM*) através de uma transformada de Fourier temporal da função de correlação do operador densidade<sup>17</sup>

$$\rho(\vec{q}, t) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k=1}^N e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}_k(t)}. \quad (1.1)$$

O primeiro cálculo deste tipo foi feito por Levesque *et al.* (1973) para um sistema interagindo através de um potencial de Lennard-Jones próximo a seu ponto triplo<sup>18</sup>. Desde então, o cálculo do fator de estrutura dinâmico utilizando simulação computacional tem sido realizado para uma variedade de sistemas, como o sistema de elétrons tridimensional na fase líquida<sup>19,20</sup>, sistema super-iônico<sup>21</sup> e em sistema bidimensional de elétrons na fase líquida (equivalendo ao regime de hélio volumétrico)<sup>22-25</sup>.

Neste trabalho, aplicamos pela primeira vez este método de cálculo do fator de estrutura dinâmico via simulação computacional por dinâmica molecular para um sistema bidimensional de elétrons sobre filme de hélio de espessura variável adsorvido em substrato. Curvas de dispersão são obtidas a partir das posições do pico de plasma nas curvas de  $S(\vec{q}, \omega)$ .

O cálculo de mobilidade, que nos fornece informação dos mecanismos de espalhamento de elétrons na superfície de hélio, pode ser obtido através do cálculo de  $S(\vec{q}, \omega)$ <sup>3</sup>. Analiticamente,  $S(\vec{q}, \omega)$  pode apenas ser calculado exatamente para o caso de sistema de elétrons não interagente (gás ideal). Neste trabalho, aplicamos também, pela primeira vez, o cálculo de  $S(\vec{q}, \omega)$ , obtido por dinâmica molecular, no cálculo de mobilidade para um sistema de elétrons sobre filme de hélio, introduzindo, assim, o efeito de muitos corpos no cálculo de mobilidade.

A disposição dos capítulos desta tese foi elaborada de modo a permitir que o leitor tivesse uma visão sequencial do que foi estudado e desenvolvido durante o período em que este trabalho foi realizado. No Capítulo 2, apresentamos de forma sucinta o método de Dinâmica Molecular e a teoria relacionada ao cálculo de algumas propriedades físicas dos sistemas simulados neste trabalho. No Capítulo 3, apresentamos o sistema de elétrons sobre hélio volumétrico e os

---

nossos resultados e discussões dos cálculos de algumas propriedades físicas relacionados a este sistema. Ainda no Capítulo 3, o mesmo procedimento é seguido para o sistema de elétrons sobre filme de hélio adsorvido em substrato. No Capítulo 4 estão nossas conclusões e considerações finais e no Apêndice, o método de *Soma de Ewald* é detalhado para o cálculo das interações de um sistema de elétrons sobre hélio volumétrico, bem como sobre filme de hélio.

## 2 *Dinâmica Molecular e Propriedades Físicas*

Dinâmica Molecular (*DM*) clássica é uma técnica de simulação computacional que obedece as leis da mecânica clássica em que  $N$  partículas interagentes são governadas pelas equações de movimento de Newton:

$$\frac{\vec{F}_i}{m_i} = \frac{d^2\vec{r}_i(t)}{dt^2} = -\frac{\partial U(\vec{r}^N)}{\partial \vec{r}_i}, \quad i = 1, 2, \dots, N, \quad (2.1)$$

onde  $\vec{F}_i$  é a força atuando na partícula  $i$  pelas  $N - 1$  partículas restantes,  $m_i$  e  $\vec{r}_i$  são a massa e a posição da partícula  $i$ , respectivamente,  $U(\vec{r}^N)$  é a energia potencial entre as partículas e  $\vec{r}^N$  é o conjunto das  $N$  posições vetoriais. Podemos, assim, dizer que a *DM* é uma técnica determinística, visto que, dadas posição e velocidade em um tempo inicial  $t_0$ , as mesmas podem ser calculadas para um instante posterior  $t$ , isto é, podemos calcular a trajetória do sistema em um espaço de fase  $6N$ -dimensional ( $3N$  posições e  $3N$  momentos). A trajetória no espaço de fase nos fornece um conjunto de configurações sobre as quais médias podem ser calculadas para a obtenção das propriedades estatísticas do sistema.

A limitação do número  $N$  de partículas relativamente pequeno ( $\simeq 10^3 - 10^9$ ) quando comparado a um sistema macroscópico, onde o número de partículas em um mol é de  $10^{23}$ , faz com que tenhamos que lidar com um problema de bordas, isto é, a razão entre o número de partículas nas bordas e o número total de partículas do sistema é muito maior que em um sistema real.

Para resolver este problema, introduzimos a chamada *condição periódica de contorno* (*PBC*). Nela, um conjunto  $N$  de partículas é introduzido na caixa de simulação do sistema e caixas virtuais idênticas à caixa de simulação rodeiam esta última em todas as 3 direções cartesianas, preenchendo todo o espaço até o infinito, como representado na Figura 2.1. A disposição das partículas dentro das caixas virtuais é idêntica àquela da caixa de simulação, assim, quando uma partícula sai das caixas, outra sempre entra, de modo a permanecer fixo o número total de partículas na caixa de simulação e em todas as caixas virtuais.

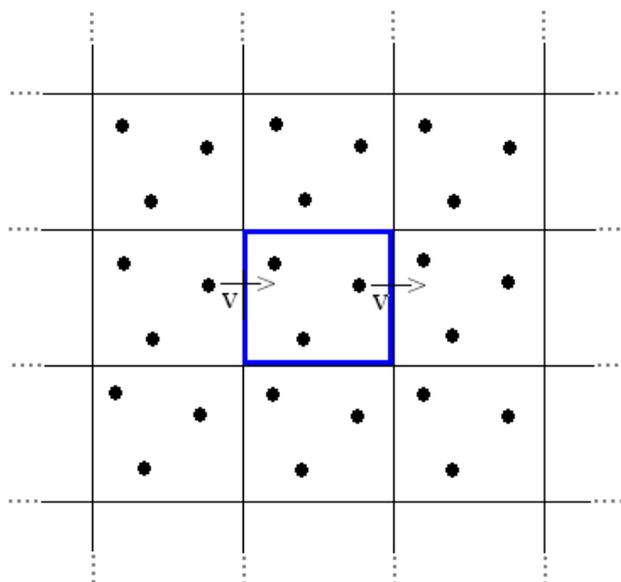


Figura 2.1: Representação esquemática da caixa de simulação e das caixas virtuais.

Assim, uma partícula dentro da caixa de simulação interage não somente com as demais partículas dentro da sua caixa, mas também com as partículas imagem dentro das caixas virtuais, eliminando os efeitos de borda.

Podemos considerar que a *alma* da *DM* é seu algoritmo de integração das equações de movimento das partículas do sistema em questão. É este algoritmo que viabiliza a construção da trajetória no espaço de fase e, por conseguinte, o cálculo das propriedades estatísticas do sistema.

Neste trabalho, o algoritmo de integração utilizado é conhecido como *velocity Verlet*<sup>26</sup>

$$\vec{r}_i(t + \Delta t) = \vec{r}_i(t) + \vec{v}_i(t)\Delta t + \frac{\vec{a}_i(t)}{2}\Delta t^2, \quad (2.2a)$$

$$\vec{v}_i\left(t + \frac{\Delta t}{2}\right) = \vec{v}_i(t) + \frac{\vec{a}_i(t)}{2}\Delta t, \quad (2.2b)$$

$$\vec{a}_i(t + \Delta t) = -\frac{\partial U(\vec{r}^N(t + \Delta t))}{m_i \partial \vec{r}_i}, \quad (2.2c)$$

$$\vec{v}_i(t + \Delta t) = \vec{v}_i\left(t + \frac{\Delta t}{2}\right) + \frac{\vec{a}_i(t + \Delta t)}{2}\Delta t, \quad (2.2d)$$

onde  $\vec{v}_i(t)$  e  $\vec{a}_i(t)$  representam a velocidade e a aceleração da partícula  $i$  no tempo  $t$ .

A trajetória no espaço de fase é, então, discreta, com pontos separados por um intervalo de tempo  $\Delta t$  constante, sendo este o passo de integração numérica. Este passo de integração deve ser pequeno o suficiente de modo a garantir a estabilidade da integração das equações de movimento mantendo a energia total do sistema constante, mas deve também ser grande o

suficiente de modo a permitir o maior número de pontos no espaço de fase.

No início da simulação, as partículas são distribuídas em uma rede cristalina. Convenientemente, a estrutura cristalina escolhida para cada sistema é a estrutura tipicamente mais estável à temperatura nula para cada tipo de potencial. As velocidades iniciais das partículas podem ser geradas a partir de uma distribuição de Maxwell para uma certa temperatura. A geração dessas velocidades iniciais é o único momento em que a aleatoriedade está presente na *DM*. À partir desse ponto a *DM* torna-se completamente determinística.

O sistema é, então, aquecido/resfriado e termalizado (alcança equilíbrio) sistematicamente até atingir a temperatura de interesse em que propriedades estatísticas são calculadas. O aquecimento/resfriamento é simulado multiplicando-se a velocidade por um fator que eleve a energia cinética e, conseqüentemente, a temperatura do sistema até a temperatura desejada. É importante ressaltar que o equilíbrio deve ser alcançado novamente para que as propriedades estatísticas possam ser calculadas.

## 2.1 Médias Temporais

Em dinâmica molecular, usualmente calculamos propriedades físicas através de médias temporais sobre a trajetória do espaço de fase do sistema. A média temporal de qualquer quantidade  $A[\vec{r}^N(t_k), \vec{v}^N(t_k)]$  pode ser estimada por <sup>27</sup>

$$\langle A \rangle = \frac{1}{M} \sum_{k=1}^M A[\vec{r}^N(t_k), \vec{v}^N(t_k)], \quad (2.3)$$

onde  $M$  é o maior passo de simulação sob o qual deseja-se calcular a média temporal,  $\vec{r}^N(t_k)$  e  $\vec{v}^N(t_k)$  são os conjuntos de posições e velocidades das  $N$  partículas no tempo  $t_k$ . A partir da equação (2.3), fica fácil calcular propriedades termodinâmicas, tais como médias da energia total  $\langle E_{total} \rangle$ , energia cinética  $\langle E_c \rangle$ , energia potencial  $\langle E_p \rangle$  e temperatura absoluta  $T$  do sistema. Desta forma, a energia cinética média pode ser obtida a partir de informações da velocidade, de modo que

$$\langle E_c \rangle = \frac{1}{2M} \sum_{k=1}^M \sum_{i=1}^N m_i \vec{v}_i(t_k) \cdot \vec{v}_i(t_k). \quad (2.4)$$

A temperatura absoluta  $T$ , que por sua vez se relaciona à energia cinética média, é facilmente obtida pela relação  $\langle E_c \rangle = 3Nk_B T / 2$  para um sistema tridimensional. A energia potencial

média é obtida através da função potencial  $u(\vec{r}_{ij})$ ,

$$\langle E_p \rangle = \frac{1}{M} \sum_{k=1}^M \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N u(\vec{r}_{ij}(t_k)), \quad (2.5)$$

sendo que, neste caso,  $u(\vec{r}_{ij})$  é um potencial de dois corpos. A energia total média nada mais é do que a soma das médias das energias cinética e potencial,

$$\langle E_{total} \rangle = \langle E_c \rangle + \langle E_p \rangle. \quad (2.6)$$

## 2.2 Função de Correlação de Pares $g(\vec{r})$

A DM também nos permite obter informações sobre as propriedades estruturais do sistema. O conhecimento das trajetórias das partículas permite que calculemos a *função de correlação de pares* ou *função de distribuição radial*  $g(\vec{r})$ . Esta função nos dá informação de como as partículas se organizam ao redor das outras e é proporcional à probabilidade de, estando uma partícula na posição  $\vec{r}$ , encontrar outra na posição  $\vec{r} + \delta\vec{r}$ . Sua definição é dada por<sup>27</sup>

$$g(\vec{r}) = \frac{2}{N\rho} \left\langle \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N \delta(\vec{r} + \vec{r}_{ij}) \right\rangle, \quad (2.7)$$

onde  $\rho$  é a densidade do sistema homogêneo. Devido ainda à uniformidade do sistema homogêneo, esta função depende somente da distância  $r$  entre as partículas e não mais da orientação das posições entre as mesmas. Nestas condições, podemos reescrever a equação (2.7) como

$$g(r) = \frac{2}{N\rho} \left\langle \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N \delta(r - r_{ij}) \right\rangle. \quad (2.8)$$

Como estamos interessados em sistemas bidimensionais,  $g(r)$  pode ser calculada dentro de cascas circulares de raio  $r$  e largura  $\Delta r$ , de modo que

$$\sum_{\Delta r} g(r) A(r, \Delta r) = \frac{2}{N\rho} \sum_{\Delta r} \left\langle \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N \delta(r - r_{ij}) \Delta\vec{r} \right\rangle, \quad (2.9)$$

onde  $A(r, \Delta r) = \Delta\vec{r}$  é a área da casca circular e  $\sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N \delta(r - r_{ij}) \Delta\vec{r}$  é o número de partículas encontradas na casca circular de raio  $r$  e largura  $\Delta r$ . A contagem deste número de partículas nas cascas circulares pode ser facilmente realizada através do cálculo de um histograma como função da distância entre as partículas.

Considerando, explicitamente, a média no tempo,  $g(r)$  passa a ser dada por

$$g(r) = \frac{2}{MN\rho A(r, \Delta r)} \sum_{k=1}^M \left\{ \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N \delta [r - r_{ij}(t_k)] \Delta \vec{r} \right\}, \quad (2.10)$$

sendo  $M$  o máximo passo no tempo simulado. Para distâncias menores do que o diâmetro médio da partícula,  $g(r) = 0$ , e se o sistema for cristalino,  $g(r)$  será uma soma de funções delta centradas nos sítios da rede cristalina, enquanto que, para distâncias suficientemente grandes,  $g(r)$  tende a um valor constante.

### 2.3 Fator de Estrutura Estático $S(\vec{q})$

A transformada de Fourier da função de correlação de pares nos fornece o *fator de estrutura estático*  $S(\vec{q})$ . Esta é uma quantidade obtida experimentalmente por medidas da intensidade de radiação de neutrons ou raios-X espalhados como função do ângulo de espalhamento. A definição do fator de estrutura estático é dada por <sup>28</sup>

$$S(\vec{q}) = \frac{1}{N} \langle \rho(\vec{q}) \rho(-\vec{q}) \rangle, \quad (2.11)$$

sendo  $\vec{q}$  o vetor de onda e  $\rho(\vec{q})$  a transformada de Fourier da densidade local

$$\rho(\vec{r}) = \sum_{i=1}^N \delta(\vec{r} - \vec{r}_i), \quad (2.12)$$

tal que,

$$\begin{aligned} \rho(\vec{q}) &= \int e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} \rho(\vec{r}) d\vec{r} \\ &= \int e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} \sum_{j=1}^N \delta(\vec{r} - \vec{r}_j) d\vec{r} \\ &= \sum_{j=1}^N e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}_j}. \end{aligned} \quad (2.13)$$

Temos, então, que o fator de estrutura estático pode ser escrito como

$$\begin{aligned}
S(\vec{q}) &= \frac{1}{N} \left\langle \sum_{j=1}^N \sum_{l=1}^N \int e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} \delta(\vec{r}-\vec{r}_j) d\vec{r} \int e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}'} \delta(\vec{r}'-\vec{r}_l) d\vec{r}' \right\rangle \\
&= \frac{1}{N} \left\langle \sum_{j=1}^N \int \int e^{-i\vec{q}\cdot(\vec{r}-\vec{r}')} \delta(\vec{r}-\vec{r}_j) \delta(\vec{r}'-\vec{r}_j) d\vec{r} d\vec{r}' \right\rangle \\
&\quad + \frac{2}{N} \left\langle \sum_{j=1}^{N-1} \sum_{l=j+1}^N \int \int e^{-i\vec{q}\cdot(\vec{r}-\vec{r}')} \delta(\vec{r}-\vec{r}_j) \delta(\vec{r}'-\vec{r}_l) d\vec{r} d\vec{r}' \right\rangle \\
&= 1 + \frac{2}{N} \left\langle \sum_{j=1}^{N-1} \sum_{l=j+1}^N \int e^{-i\vec{q}\cdot(\vec{r}-\vec{r}_l)} \delta(\vec{r}-\vec{r}_j) d\vec{r} \right\rangle \\
&= 1 + \frac{2}{N} \left\langle \sum_{j=1}^{N-1} \sum_{l=j+1}^N \int e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} \delta(\vec{r}-\vec{r}_{jl}) d\vec{r} \right\rangle \\
&= 1 + \int e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} \left\langle \frac{2}{N} \sum_{j=1}^{N-1} \sum_{l=j+1}^N \delta(\vec{r}-\vec{r}_{jl}) \right\rangle d\vec{r} \\
&= 1 + \rho \int e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} g(\vec{r}) d\vec{r}. \tag{2.14}
\end{aligned}$$

Esta integral, entretanto, diverge para  $\vec{q} = 0$ . Para corrigir este problema, inserimos uma correção de  $\rho \delta(\vec{q})$  na definição de  $S(\vec{q})$ , cuja contribuição ocorre apenas quando  $\vec{q} = 0$ <sup>29</sup>. Esta correção permite que a equação (2.14) seja reescrita como

$$S(\vec{q}) = 1 + \rho \int e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} [g(\vec{r}) - 1] d\vec{r}. \tag{2.15}$$

Outra forma interessante de se calcular o fator de estrutura estático é a partir do cálculo do fator de estrutura dinâmico (apresentado na seção 2.4), de modo que

$$S(\vec{q}) = \int_{-\infty}^{\infty} S(\vec{q}, \omega) d\omega. \tag{2.16}$$

O fator de estrutura dinâmico é definido como:

$$S(\vec{q}, \omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \langle \rho(\vec{q}, t) \rho(-\vec{q}, 0) \rangle e^{-i\omega t} dt, \tag{2.17}$$

onde

$$\rho(\vec{q}, t) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k=1}^N e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}_k(t)}, \tag{2.18}$$

o que nos permite escrever

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} S(\vec{q}, \omega) d\omega &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \langle \rho(\vec{q}, t) \rho(-\vec{q}, 0) \rangle e^{-i\omega t} dt d\omega \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \langle \rho(\vec{q}, t) \rho(-\vec{q}, 0) \rangle \delta(t) dt \\ &= \langle \rho(\vec{q}, 0) \rho(-\vec{q}, 0) \rangle. \end{aligned} \quad (2.19)$$

Temos, assim, que

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} S(\vec{q}, \omega) d\omega &= \frac{1}{N} \left\langle \sum_{k=1}^N e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}_k} \sum_{l=1}^N e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}_l} \right\rangle \\ &= \frac{1}{N} \langle \rho(\vec{q}) \rho(-\vec{q}) \rangle \\ &= S(\vec{q}). \end{aligned} \quad (2.20)$$

## 2.4 Fator de Estrutura Dinâmico $S(\vec{q}, \omega)$

Propriedades coletivas de um sistema podem ser entendidas ao estudarmos seus modos de vibração. Ao espectro de flutuação de densidade, relacionado aos modos de vibração coletiva do sistema, dá-se o nome de *Fator de Estrutura Dinâmico* ( $S(\vec{q}, \omega)$ ). Podemos, então, calcular  $S(\vec{q}, \omega)$  diretamente das flutuações de densidade, definidas como:

$$\rho(\vec{q}, t) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k=1}^N e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}_k(t)}, \quad (2.21)$$

tal que,

$$S(\vec{q}, \omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \langle \rho(\vec{q}, t) \rho(-\vec{q}, 0) \rangle e^{-i\omega t} dt. \quad (2.22)$$

Explicitando  $\langle \dots \rangle$  como uma média no tempo, sendo  $t_{max}$  o tempo total de simulação,

$$\langle \rho(\vec{q}, t) \rho(-\vec{q}, 0) \rangle = \frac{1}{t_{max}} \int_0^{t_{max}} \rho(\vec{q}, t + t') \rho(-\vec{q}, t') dt', \quad (2.23)$$

e reescrevendo  $\rho(\vec{q}, t)$  em termos de uma série de Fourier:

$$\rho(\vec{q}, t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n e^{i\omega_n t}, \quad (2.24)$$

onde

$$\begin{aligned} c_n &= \frac{1}{t_{max}} \int_0^{t_{max}} \rho(\vec{q}, t) e^{-i\omega_n t} dt \\ &= \frac{1}{t_{max}} \rho(\vec{q}, \omega_n), \end{aligned} \quad (2.25)$$

de modo que

$$\rho(\vec{q}, t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{1}{t_{max}} \rho(\vec{q}, \omega_n) e^{i\omega_n t}. \quad (2.26)$$

Assim,

$$\begin{aligned} \langle \rho(\vec{q}, t) \rho(-\vec{q}, 0) \rangle &= \frac{1}{t_{max}^2} \int_0^{t_{max}} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \rho(\vec{q}, \omega_n) e^{i\omega_n(t+t')} \rho(-\vec{q}, t') dt' \\ &= \frac{1}{t_{max}^2} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \rho(\vec{q}, \omega_n) e^{i\omega_n t} \int_0^{t_{max}} \rho(-\vec{q}, t') e^{i\omega_n t'} dt' \\ &= \frac{1}{t_{max}^2} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \rho(\vec{q}, \omega_n) \rho^*(\vec{q}, \omega_n) e^{i\omega_n t} \\ &= \frac{1}{t_{max}^2} \sum_{n=-\infty}^{\infty} |\rho(\vec{q}, \omega_n)|^2 e^{i\omega_n t}, \end{aligned} \quad (2.27)$$

implicando em

$$\begin{aligned} S(\vec{q}, \omega) &= \frac{1}{2\pi t_{max}^2} \int_{-\infty}^{\infty} \sum_{n=-\infty}^{\infty} |\rho(\vec{q}, \omega_n)|^2 e^{i\omega_n t} e^{-i\omega t} dt \\ &= \frac{1}{2\pi t_{max}} \sum_{n=-\infty}^{\infty} |\rho(\vec{q}, \omega_n)|^2 \left( \frac{1}{t_{max}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i(\omega - \omega_n)t} dt \right) \\ &= \frac{1}{2\pi t_{max}} |\rho(\vec{q}, \omega)|^2. \end{aligned} \quad (2.28)$$

A expressão (2.28) pode ser trabalhada de modo a facilitar sua implementação numérica. Sabendo-se que

$$\rho(\vec{q}, \omega) = \int_0^{t_{max}} \rho(\vec{q}, t) e^{-i\omega t} dt \quad (2.29)$$

e que, da equação (2.21)

$$\rho(\vec{q}, t) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k=1}^N (\cos \vec{q} \cdot \vec{r}_k(t) + i \sin \vec{q} \cdot \vec{r}_k(t)), \quad (2.30)$$

a equação (2.29) pode ser reescrita como

$$\begin{aligned} \rho(\vec{q}, \omega) &= \frac{1}{\sqrt{N}} \int_0^{t_{max}} \sum_{k=1}^N e^{-i\omega t} \cos \vec{q} \cdot \vec{r}_k(t) dt + \frac{i}{\sqrt{N}} \int_0^{t_{max}} \sum_{k=1}^N e^{-i\omega t} \sin \vec{q} \cdot \vec{r}_k(t) dt \\ &= \frac{1}{\sqrt{N}} \int_0^{t_{max}} \sum_{k=1}^N \cos \vec{q} \cdot \vec{r}_k(t) \cos \omega t dt - \frac{i}{\sqrt{N}} \int_0^{t_{max}} \sum_{k=1}^N \cos \vec{q} \cdot \vec{r}_k(t) \sin \omega t dt \\ &+ \frac{i}{\sqrt{N}} \int_0^{t_{max}} \sum_{k=1}^N \sin \vec{q} \cdot \vec{r}_k(t) \cos \omega t dt + \frac{1}{\sqrt{N}} \int_0^{t_{max}} \sum_{k=1}^N \sin \vec{q} \cdot \vec{r}_k(t) \sin \omega t dt \end{aligned} \quad (2.31)$$

Chamando de:

$$C(\vec{q}, t) = \sum_{k=1}^N \cos [q_x x_k + q_y y_k] \quad (2.32a)$$

$$S(\vec{q}, t) = \sum_{k=1}^N \sin [q_x x_k + q_y y_k]. \quad (2.32b)$$

e substituindo a equação (2.31) em (2.28), temos que o fator de estrutura dinâmico passa a ser dado por

$$S(\vec{q}, \omega) = \frac{1}{2\pi N t_{max}} \left\{ \left[ \int_0^{t_{max}} C(\vec{q}, t) \cos(\omega, t) dt + \int_0^{t_{max}} S(\vec{q}, t) \sin(\omega, t) dt \right]^2 + \left[ \int_0^{t_{max}} S(\vec{q}, t) \cos(\omega, t) dt - \int_0^{t_{max}} C(\vec{q}, t) \sin(\omega, t) dt \right]^2 \right\}. \quad (2.33)$$

Um forte ruído numérico é observado devido à truncagem do tempo para o cálculo das integrais. Tornou-se necessária a utilização de um método que suavizasse as curvas de  $S(\vec{q}, \omega)$ . O método que se mostrou mais eficiente foi o da convolução dos resultados com uma função Gaussiana, de modo que um peso estatístico passou a ser atribuído a cada ponto da curva, tal que o fator de estrutura dinâmico passou a ser dado por

$$S(\vec{q}, \omega_i) = \frac{\sum_j S(\vec{q}, \omega_j) e^{-\zeta(\omega_i - \omega_j)^2}}{\sum_j e^{-\zeta(\omega_i - \omega_j)^2}} \quad (2.34)$$

sendo  $\zeta$  um parâmetro ajustável para diminuir o ruído de nossos resultados <sup>17</sup>.

Neste trabalho, o fator de estrutura dinâmico é expresso em termos da típica frequência de plasma ( $\omega_p(q)$ ) para um sistema bidimensional de elétrons no limite de grandes comprimentos de onda dada por <sup>30</sup>

$$\omega_p(q) = \left( \frac{2\pi\rho e^2 q}{m} \right)^{1/2}. \quad (2.35)$$

Em nossa notação, utilizamos

$$\omega_0 = \omega_p \left[ (\pi\rho)^{1/2} \right]. \quad (2.36)$$

## 2.5 Mobilidade $\mu$

O conhecimento da função  $S(q, \omega)$  é de extrema importância no cálculo das propriedades de transporte já que, no formalismo do método de balanço de forças da equação de transporte (*FBEM*), as frequências de colisão dos elétrons com os espalhadores e, conseqüentemente, a *mobilidade*  $\mu$ , podem ser expressas em termos do fator de estrutura dinâmico (para maiores es-

clarecimentos, ver referências <sup>31</sup> e <sup>3</sup>). O movimento dos elétrons na direção paralela à superfície pode ser alterado pelos riplons (ondas de capilaridade-gravidade) <sup>32</sup> e por átomos de vapor de hélio <sup>11, 33, 34</sup>. No caso de filmes finos, as irregularidades na interface do filme de hélio com o substrato tornam-se um outro tipo de espalhador importante para os elétrons superficiais. De acordo com *FBEM*, as frequências de colisão dos elétrons com os átomos de vapor de hélio  $v_{ev}$ , dos elétrons com os riplons  $v_{er}$  e dos elétrons com os defeitos da interface filme-substrato  $v_{ei}$  são dadas, respectivamente, por

$$v_{ev} = \frac{3\pi\hbar^4\gamma a_0^2 n_v}{8m^3 k_B T} \int_0^\infty q^3 S(q, 0) dq, \quad (2.37a)$$

$$v_{er} = \frac{1}{4\pi m k_B T} \int_0^\infty q^3 \langle |\xi_1(q)|^2 \rangle |\langle \phi_1 | V_r(q, z) | \phi_1 \rangle|^2 S(q, \omega_q) dq, \quad (2.37b)$$

$$v_{ei} = \frac{1}{4\pi m k_B T} \int_0^\infty q^3 \langle |\xi_2(q)|^2 \rangle |\langle \phi_1 | V_i(q, z) | \phi_1 \rangle|^2 S(q, 0) dq. \quad (2.37c)$$

Na equação (2.37a),  $a_0 = 0.61\text{Å}$  é o comprimento de espalhamento <sup>35</sup>,  $n_v$  é a densidade dos átomos de vapor de hélio dada pela equação <sup>31</sup>

$$n_v = \left( \frac{M_{He} k_B T}{2\pi\hbar^2} \right) e^{-\frac{Q}{k_B T}}, \quad (2.38)$$

onde  $M_{He}$  é a massa do átomo de hélio e  $Q = 7.17K$  é a energia de vaporização. Ainda na equação (2.37a), temos que  $\gamma$  é um parâmetro variacional que representa o comprimento da função de onda do elétron na direção  $z$  e que é determinado das raízes da equação <sup>36</sup>

$$\eta^3 - \eta^2 - \left( \frac{\gamma_\perp}{\gamma_0} \right)^3 - \left( \frac{\gamma_d}{\gamma_0} \right) \eta^2 [1 - 4\gamma_0 d \eta - 4(\gamma_0 d)^2 \eta^2 - 4(\gamma_0 d)^2 \eta^2 (3 + 2\gamma_0 d \eta) e^{2\gamma_0 d \eta} E_i(-2\gamma_0 d \eta)] = 0, \quad (2.39)$$

sendo  $\eta = \gamma/\gamma_0$ ,  $\gamma_0 = m\Lambda_0/\hbar^2$ ,  $\Lambda_0 = e^2(\epsilon_{He} - 1)/[4(\epsilon_{He} + 1)]$ ,  $\gamma_\perp = (3meE_\perp/2\hbar^2)^{1/3}$ ,  $E_\perp$  é um campo elétrico confinante ao longo da direção  $z$ ,  $\gamma_d = m\Lambda_1/\hbar^2$ ,  $\Lambda_1 = e^2\epsilon_{He}(\epsilon_s - \epsilon_{He})/[(\epsilon_{He} + 1)^2(\epsilon_s + \epsilon_{He})]$ ,  $\epsilon_{He}$  é a constante dielétrica do hélio,  $\epsilon_s$  é a constante dielétrica do substrato e  $E_i(x)$  é a função exponencial-integral definida como

$$E_i(x) = \int_{-\infty}^x \frac{e^t}{t} dt. \quad (2.40)$$

Na equação (2.37b), temos que

$$\langle |\xi_1(q)|^2 \rangle = N_q \left[ \frac{\hbar q \tanh(qd)}{2\rho_{He}\omega_q} \right], \quad (2.41)$$

onde  $\rho_{He}$  é a densidade do hélio,  $N_q \simeq k_B T / \hbar \omega_q \ll 1$  é o número de riplons descrito pela

função de Bose-Einstein<sup>33</sup>, e  $\omega_q$  é a relação dos modos capilares descrita por<sup>3</sup>

$$\omega_q^2 = \left( \frac{\alpha}{\rho_{He}} q^3 + g'q \right) \tanh(qd), \quad (2.42)$$

sendo  $\alpha = 0.37 \text{ dyn/cm}$  o coeficiente de tensão superficial,  $g' = g + 3\beta/\rho_{He}d^4$ ,  $g$  é a aceleração gravitacional e  $\beta$  a constante de van der Waals.

Com relação ainda à equação (2.37b), temos que<sup>36</sup>

$$\langle \varphi_1 | V_r(q, z) | \varphi_1 \rangle = \frac{\Lambda_0 q^2}{2} \Phi_r \left( \frac{q}{2\gamma} \right) + eE_{\perp}, \quad (2.43)$$

Na equação (2.43), a função de onda  $\varphi_1(z)$  é dada por<sup>36</sup>

$$\varphi_1(z) = 2\gamma^{3/2} z e^{-\gamma z}, \quad (2.44)$$

$$\begin{aligned} V_r(q, z) &= \frac{\Lambda_0 q}{z} \left[ \frac{1}{qz} - K_1(qz) \right] \\ &+ \frac{\Lambda_1 q}{(z+d)} \left[ \frac{1}{q(z+d)} - K_1[q(z+d)] \right] + eE_{\perp} \end{aligned} \quad (2.45)$$

e a função  $\Phi(x)$  é dada por

$$\begin{aligned} \Phi_r(x) &= -\frac{1}{(1-x^2)} - \left[ \frac{1}{(1-x^2)^{3/2}} \ln \left( \frac{x}{1+\sqrt{1-x^2}} \right) \right] \Theta(1-x) \\ &- \left[ \frac{1}{(x^2-1)^{3/2}} \arcsin \left( \frac{\sqrt{x^2-1}}{x} \right) \right] \Theta(x-1) \\ &+ \frac{\Lambda_1}{\Lambda_0 x^2} \left[ 1 + 2\gamma d + 4\gamma d(1+\gamma d) e^{2\gamma d} E_i(-2\gamma d) \right. \\ &\left. - x \int_0^{\infty} \frac{u^2 e^{-u} K_1(ux + 2x\gamma d) du}{(u + 2\gamma d)} \right], \end{aligned} \quad (2.46)$$

sendo que  $\Theta(x)$  é a função degrau de Heaviside e  $K_j(x)$  é a função de Bessel modificada de ordem  $j$ .

Na equação (2.37c), utilizamos o modelo de correlações Gaussianas de Prange e Nee<sup>37</sup> para determinar  $\langle |\xi_2(q)|^2 \rangle$ . De acordo com este modelo, a rugosidade na interface é definida por um comprimento  $l$  e uma altura  $h$  (ver também referências<sup>38</sup> e <sup>39</sup>), de modo que

$$\langle |\xi_2(q)|^2 \rangle = \pi h^2 l^2 e^{-q^2 l^2 / 4}. \quad (2.47)$$

Ainda na equação (2.37c), temos <sup>36</sup>

$$\langle \varphi_1 | V_i(q, z) | \varphi_1 \rangle = -\frac{\Lambda_1 q^2}{2} \Phi_i \left( \frac{q}{2\gamma} \right), \quad (2.48)$$

onde

$$V_i(q, z) = -\Lambda_1 \left\{ \frac{2\varepsilon_{He} q K_1[q(z+d)]}{(\varepsilon_s + \varepsilon_{He})(z+d)} + \frac{(\varepsilon_s - \varepsilon_{He}) q^2 K_2[q(z+d)]}{2(\varepsilon_s + \varepsilon_{He})} \right\} \quad (2.49)$$

e, de acordo com referência <sup>40</sup>,

$$\begin{aligned} \Phi_i(x) = & \frac{2\varepsilon_{He} e^{2\gamma d}}{(\varepsilon_s + \varepsilon_{He})x} \int_{2\gamma d}^{\infty} \frac{(u - 2\gamma d)^2}{u} e^{-u} K_1(xu) du \\ & + \frac{(\varepsilon_s - \varepsilon_{He}) e^{2\gamma d}}{2(\varepsilon_s + \varepsilon_{He})} \int_{2\gamma d}^{\infty} (u - 2\gamma d)^2 e^{-u} K_2(xu) du \end{aligned} \quad (2.50)$$

A mobilidade é, então, definida como <sup>3</sup>

$$\mu = \frac{e}{m\nu}, \quad (2.51)$$

sendo  $\nu$  a frequência de colisão efetiva devida a todos os tipos de espalhadores, tal que

$$\nu = \nu_{ev} + \nu_{er} + \nu_{ei}. \quad (2.52)$$

Com relação ainda às equações (2.37a), (2.37b) e (2.37c), o cálculo analítico de  $S(q, \omega)$  pode ser efetuado exatamente apenas para o caso de sistemas de elétrons não interagentes <sup>3, 41-43</sup>:

$$S(q, \omega) = \left( \frac{2\pi m}{k_B T q^2} \right)^{1/2} \exp \left( -\frac{\hbar^2 q^2}{8mk_B T} + \frac{m\omega^2}{2k_B T q} - \frac{\hbar\omega}{k_B T} \right). \quad (2.53)$$

Ao calcularmos  $S(q, \omega)$  via simulação computacional por Dinâmica Molecular, estamos introduzindo o efeito de muitos corpos no cálculo da mobilidade.

## 3 *Sistemas Eletrônicos de Baixa Dimensionalidade*

### 3.1 Introdução

A partir da década de 60, com a comprovação experimental de efeitos quânticos devido a tamanho, já previstos teoricamente<sup>6, 38, 44, 45</sup>, sistemas eletrônicos de baixa dimensionalidade tornaram-se alvo de intenso interesse científico, o que levou a uma revolução na microeletrônica. São exemplos de tais sistemas elétrons em estruturas *metal-oxide-semiconductor* (MOS) e elétrons na superfície de hélio.

Sistemas de elétrons em estruturas MOS comportam-se, de um modo geral, quanticamente, ao passo que elétrons sobre hélio volumétrico têm um comportamento clássico. Isto se deve, principalmente, ao intervalo de acessibilidade da densidade eletrônica para tais sistemas. A densidade eletrônica típica em estruturas MOS é da ordem de  $10^{11} - 10^{13} \text{cm}^{-2}$  ao passo que na superfície de hélio volumétrico é de  $10^5 - 10^9 \text{cm}^{-2}$ <sup>46, 47</sup>, podendo chegar a densidades da ordem de  $10^{10} \text{cm}^{-2}$  na superfície de filme fino de hélio.

Neste trabalho realizamos um estudo de propriedades estáticas e dinâmicas de sistemas eletrônicos de baixa dimensionalidade, que podem ser tratados classicamente, através da simulação computacional. Para tanto, foi utilizada a técnica de Dinâmica Molecular (DM) na evolução das equações de movimento, gerando, assim, um espaço de fase que viabiliza o estudo de tais propriedades. Dois sistemas são apresentados no decorrer deste trabalho: o sistema bidimensional de elétrons sobre hélio volumétrico e o sistema de elétrons sobre filme de hélio adsorvido em um substrato. Em ambos os casos, os sistemas são caracterizados pelo parâmetro de plasma  $\Gamma$ , definido como a razão entre a energia potencial e a cinética, tal que

$$\Gamma = \frac{\langle E_p \rangle}{\langle E_c \rangle}. \quad (3.1)$$

Para valores de  $\Gamma$  tipicamente maiores que 100, a energia potencial é muito maior que a cinética e o sistema tem os elétrons fortemente correlacionados, caracterizando a fase sólida. Para

valores de  $\Gamma$  entre 1 e 100, a correlação entre os elétrons é mais fraca e o sistema apresenta as características estruturais de um líquido, ao passo que para  $\Gamma$  menor do que 1, a energia cinética é superior à energia potencial e o sistema comporta-se como um gás de elétrons não degenerado.

Nas seções à seguir, estes dois sistemas são apresentados e algumas de suas propriedades físicas são analisadas. Especial atenção foi dada ao cálculo do fator de estrutura dinâmico, ingrediente fundamental para o cálculo da mobilidade que, neste trabalho, foi calculada de forma inédita ao considerar sistema de elétrons interagentes.

## 3.2 Elétrons sobre Hélio Volumétrico

Elétrons depositados sobre hélio líquido são confinados a movimentar-se sobre a superfície deste último pela competição de duas forças: uma força atrativa de longo alcance, resultante da polarização de cargas imagens e uma força repulsiva de curto alcance devido ao princípio de exclusão de Pauli. O movimento dos elétrons paralelamente à superfície é essencialmente livre. Para fins práticos, podemos tratar este sistema como um sistema bidimensional de elétrons interagindo via potencial de Coulomb imerso em um fundo neutralizador positivo. Este sistema é caracterizado pelo parâmetro adimensional

$$\Gamma = \frac{e^2}{ak_B T}, \quad (3.2)$$

onde  $e$  é a carga do elétron,  $k_B$  é a constante de Boltzmann,  $T$  é a temperatura,  $a = (\pi\rho)^{-1/2}$  e  $\rho$  é a densidade eletrônica.

Limitamos nossos cálculos a intervalos de densidade e de temperatura tais que efeitos quânticos tornam-se desprezíveis. De um modo geral, este sistema pode ser tratado classicamente contanto que sua energia térmica seja muito maior que a energia de Fermi<sup>41</sup>, isto é,

$$k_B T \gg \frac{\pi\hbar^2\rho}{m}, \quad (3.3)$$

onde  $\hbar$  é a constante de Planck e  $m$  é a massa do elétron.

A energia potencial de interação entre os elétrons ( $U_{ee}$ ) é descrita pelo potencial de Coulomb

$$U_{ee} = \frac{e^2}{2} \left( \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \right)' \frac{1}{|\vec{r}_{ij}|}, \quad (3.4)$$

sendo  $\vec{r}_{ij} = \vec{r}_i - \vec{r}_j$ , onde  $\vec{r}_i$  representa a posição do  $i$ -ésimo elétron na superfície do hélio volumétrico. Note que  $(\sum\sum)'$  é indicativo de  $i \neq j$  na equação (3.4). Para manter a neutralidade e

estabilidade deste sistema eletrônico, consideramos que este encontra-se imerso em um fundo neutralizador positivo. A energia potencial ( $U_f$ ) devido à presença deste fundo positivo leva em conta as interações elétron-fundo ( $U_{ef}$ ) e as do fundo com ele mesmo ( $U_{ff}$ ).

A energia potencial de interação total ( $U$ ) deste sistema é, então, expressa como

$$U = U_{ee} + U_f. \quad (3.5)$$

Devido à natureza de longo alcance das interações dadas por este potencial, a técnica de *Soma de Ewald* foi utilizada para viabilizar a simulação e está descrita no apêndice A.1.

Levando em conta a condição periódica de contorno para evitar efeitos de borda, a energia potencial pode, então, ser expressa como

$$\begin{aligned} U = & \frac{U_0}{2f_x f_y} \left( \sum_{M_x=-\infty}^{\infty} \sum_{M_y=-\infty}^{\infty} \right)' \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N e^{2\pi i \vec{M} \cdot \vec{r}'_{ij}} \\ & + \frac{U_0}{2} \left( \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \right)' \sum_{m_x=-\infty}^{\infty} \sum_{m_y=-\infty}^{\infty} \frac{\text{erfc}(\alpha |\vec{r}'_{ij} + \vec{\xi}'|)}{|\vec{r}'_{ij} + \vec{\xi}'|} - \frac{U_0 N \alpha}{\sqrt{\pi}} \\ & + \frac{U_0 N}{2} \left( \sum_{m_x=-\infty}^{\infty} \sum_{m_y=-\infty}^{\infty} \right)' \frac{\text{erfc}(\alpha |\vec{\xi}'|)}{|\vec{\xi}'|} - \frac{U_0 N^2 \sqrt{\pi}}{\alpha f_x f_y}, \end{aligned} \quad (3.6)$$

onde  $U_0 = e^2/\sqrt{A}$ ,  $A = L_x L_y$  e  $L_x$  e  $L_y$  são as laterais da caixa de simulação. Temos ainda,  $\vec{r}'_{ij} = \vec{r}_{ij}/\sqrt{A}$ ,  $\vec{\xi}' = \vec{\xi}/\sqrt{A} = m_x f_x \hat{x} + m_y f_y \hat{y}$ , sendo  $f_x = L_x/\sqrt{A}$  e  $f_y = L_y/\sqrt{A}$  e  $\vec{M} = M_x \hat{x} + M_y \hat{y}$  com  $M_x = m_x/f_x$  e  $M_y = m_y/f_y$ . O parâmetro  $\alpha$  é ajustado de forma que as somas da expressão (3.6) sejam condicionalmente convergentes. Note que, no primeiro termo da expressão (3.6),  $(\sum \sum)'$  indica a exclusão do elemento  $M_x = M_y = 0$ . No segundo termo da expressão (3.6),  $(\sum \sum)'$  indica a exclusão do elemento  $i = j$ . No quarto termo de (3.6), temos que  $(\sum \sum)'$  exclui o elemento  $m_x = m_y = 0$ .

### 3.2.1 Resultados e Discussões

Neste sistema foram simulados um total de  $N = 784$  partículas (elétrons) em uma densidade de  $\rho = 1.477 \times 10^8 \text{ cm}^{-2}$ . O passo de integração utilizado para a integração das equações de movimento foi de  $5 \times 10^{-13} \text{ s}$ , de modo que a energia total do sistema fosse conservada em 1 parte em  $10^5$  para temperaturas longe da temperatura de fusão e em 1 parte em  $10^4$  para temperaturas próximas à temperatura de fusão. As propriedades estatísticas apresentadas foram calculadas em 10000 passos de simulação após o sistema ter atingido o equilíbrio térmico.

A Figura 3.1 nos mostra como a energia total do sistema varia como função do aumento de

temperatura de 0.1 a 0.8K, com uma transição sólido-líquido em torno de  $T = 0.28K$ , isto é, para  $\Gamma \approx 128$ , em concordância com a referência <sup>48</sup>.

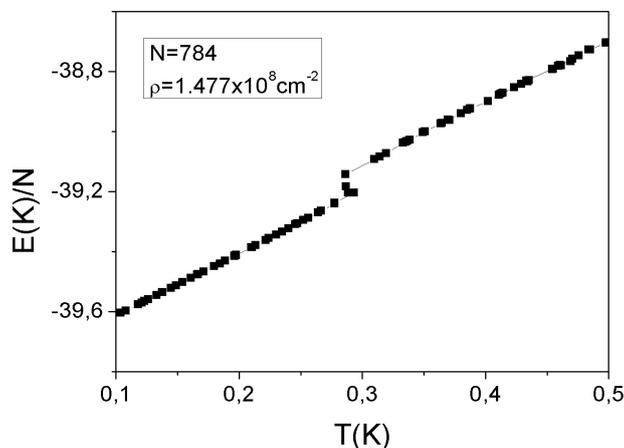


Figura 3.1: Energia total como função da temperatura para um sistema de elétrons sobre hélio volumétrico.

A Figura 3.2 apresenta as curvas da função de correlação de pares para  $\Gamma = 103$  e 144 equivalendo às temperaturas de 0.35K e 0.25K, respectivamente. Note que o comportamento oscilatório aumenta com o aumento de  $\Gamma$ , mas que a posição do primeiro pico independe do valor de  $\Gamma$ . Para  $\Gamma = 144$  o sistema encontra-se na fase sólida e as oscilações para grandes distâncias indicam que o sistema está fortemente correlacionado. Para  $\Gamma = 103$ , o sistema encontra-se na fase líquida e a diminuição das oscilações para grandes distâncias indicam uma diminuição da correlação entre as partículas.

A Figura 3.3 reporta o fator de estrutura estático para os mesmos valores de  $\Gamma$ . Note que, para  $\Gamma = 144$ , a existência dos picos mais ou menos bem definidos em  $qa = 6.6$  e 7.6 é indicativo da existência de um sistema com propriedades cristalinas, típico de um sistema sólido, ao passo que para  $\Gamma = 103$ , esses picos se fundem em um único, como esperado no caso de um sistema em sua fase líquida.

As Figuras 3.4, 3.5 e 3.6 apresentam os mapeamentos do fator de estrutura dinâmico para  $\Gamma = 144$ , fase sólida. Na Figura 3.4, podemos observar a presença de um único pico bem definido que desloca-se para frequências maiores com o aumento do vetor de onda de  $qa = 0.12$  para 1.98. Este é o chamado pico de plasma, que na Figura 3.5 desloca-se para frequências menores com o aumento de  $qa = 1.98$  para 2.94. Podemos observar o surgimento de um novo pico para frequências maiores neste mesmo range de vetores de onda. Este é o modo transversal de vibração previsto em <sup>46</sup>. O mapeamento do fator de estrutura dinâmico para vetores de onda entre  $qa = 2.94$  e 3.69 é mostrado na Figura 3.6 e nos permite a observação do surgimento do

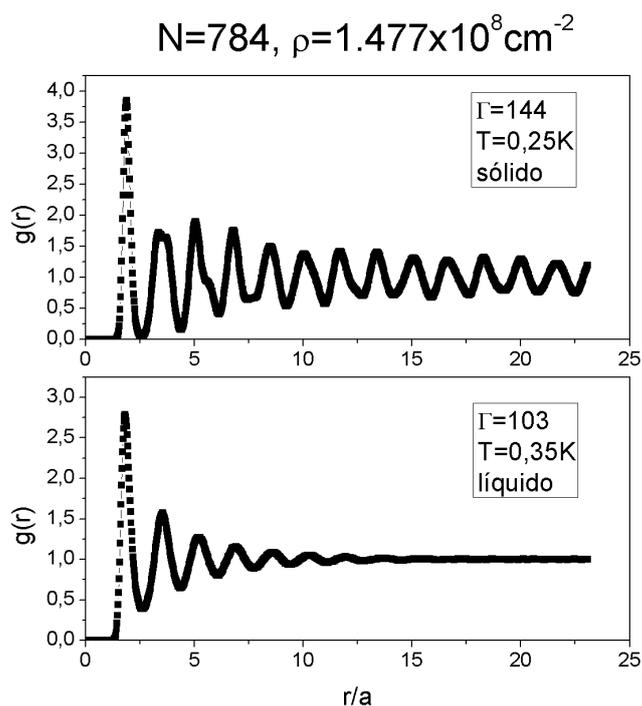


Figura 3.2: Função de correlação de pares para um sistema de elétrons sobre hélio volumétrico para  $\Gamma = 144$  e 103.

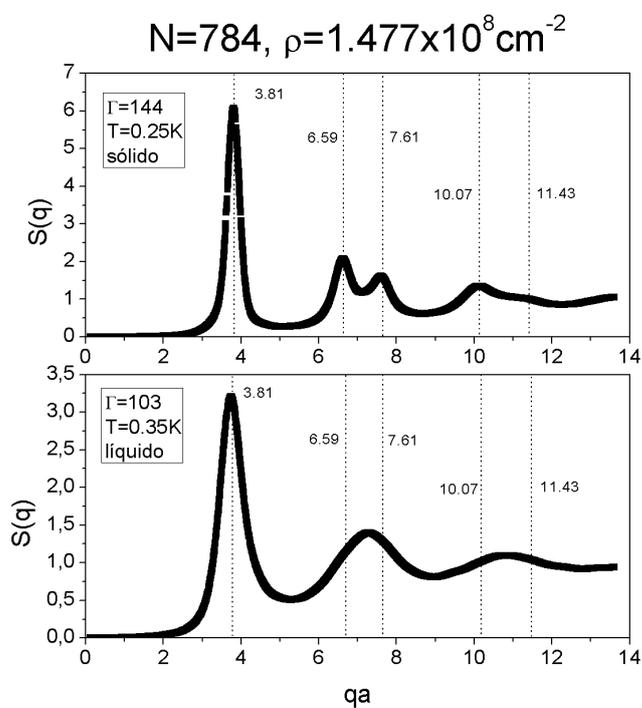


Figura 3.3: Fator de estrutura estático para um sistema de elétrons sobre hélio volumétrico para  $\Gamma = 144$  e 103. As linhas verticais indicam os vetores de onda da rede recíproca do sistema cristalino.

pico de Rayleigh, evidenciando o caráter difusivo do sistema.

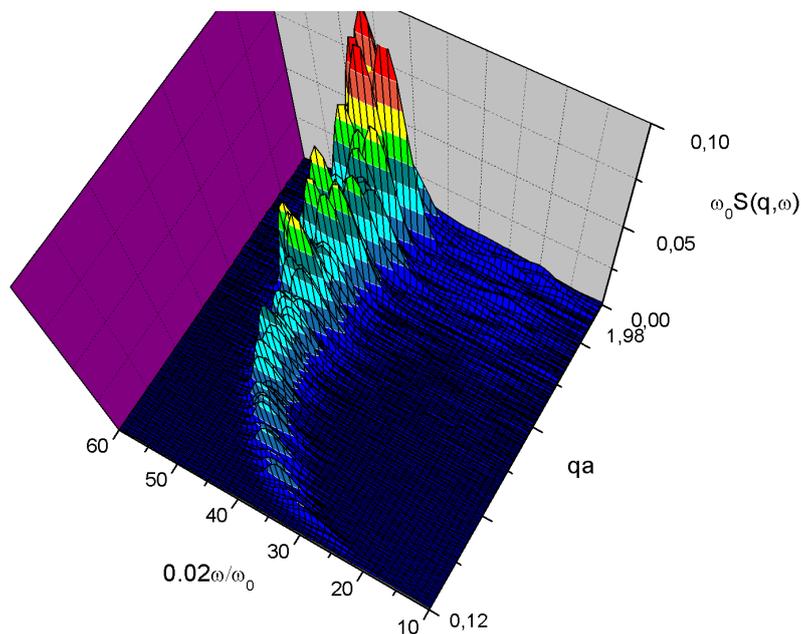


Figura 3.4: Mapeamento do fator estrutura dinâmico para um sistema de elétrons sobre hélio volumétrico para  $\Gamma = 144$ , e vetores de onda variando de  $qa = 0.12$  a 1.98.

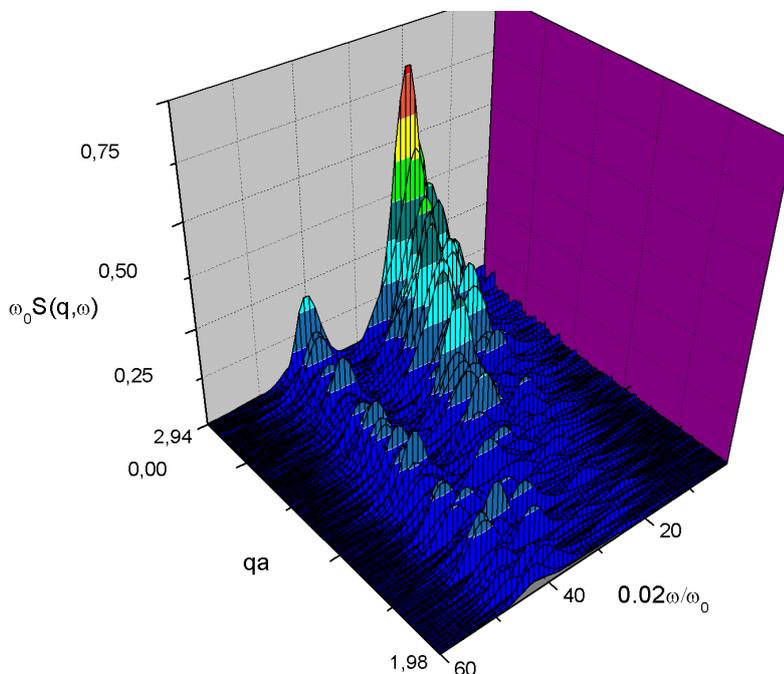


Figura 3.5: Mapeamento do fator estrutura dinâmico para um sistema de elétrons sobre hélio volumétrico para  $\Gamma = 144$ , e vetores de onda variando de  $qa = 1.98$  a 2.94.

Na Figura 3.7, apresentamos algumas curvas do fator de estrutura dinâmico para  $\Gamma = 144$  e alguns valores de vetor de onda. Podemos notar que o pico de plasma desloca-se para direita

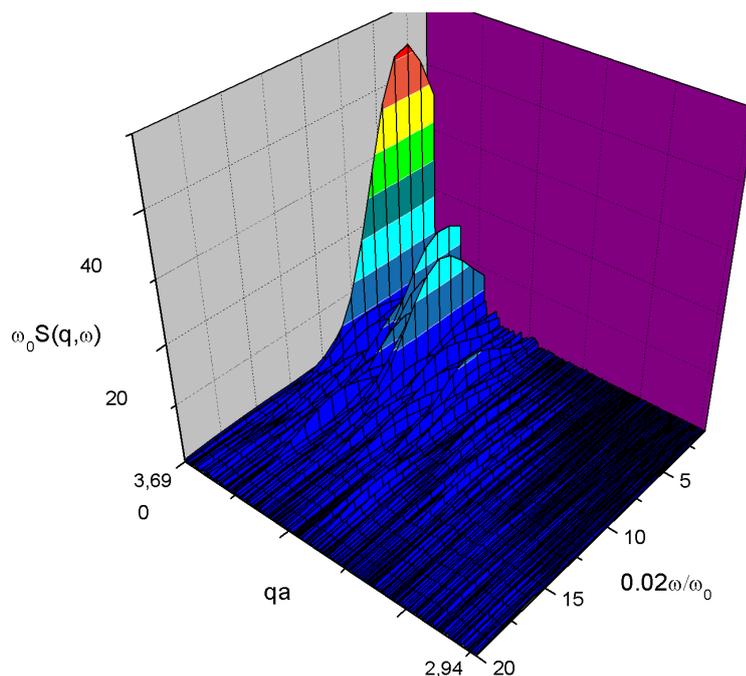


Figura 3.6: Mapeamento do fator estrutura dinâmico para um sistema de elétrons sobre hélio volumétrico para  $\Gamma = 144$ , e vetores de onda variando de  $qa = 2.94$  a  $3.69$ .

quando aumentamos o vetor de onda de  $qa = 0.12$  para  $0.71$  e depois para  $1.41$ . Neste último caso a frequência de vibração em que o pico de plasma aparece é bem próximo de  $\omega_0$ . Ao aumentarmos ainda mais o vetor de onda o pico de plasma passa a deslocar-se para a esquerda para  $qa = 2.12$  e em seguida para  $qa = 2.83$ . No caso em que  $qa = 3.53$ , podemos observar o surgimento de um ombro à esquerda do pico principal, próximo a  $\omega = 0$ , dando origem ao pico difusivo de Rayleigh.

Nas Figuras 3.8, 3.9 e 3.10, apresentamos o mapeamento do fator de estrutura dinâmico para  $\Gamma = 103$ , fase líquida. Para  $0.12 < qa < 1.95$ , encontramos um único pico bem definido correspondendo ao pico de plasma, conforme a Figura 3.8. Para  $1.95 < qa < 2.89$  o pico de plasma se funde em um contínuo de excitações, como visto na Figura 3.9, ao passo que para  $qa > 2.89$  encontramos apenas o pico difusivo de Rayleigh, de acordo com Figura 3.10

Na Figura 3.11, selecionamos algumas curvas de fator de estrutura dinâmico para alguns vetores de onda. Podemos notar que o pico de plasma desloca-se para a direita quando aumentamos o vetor de onda de  $qa = 0.12$  para  $0.71$  e depois para  $1.41$ , da mesma forma que no caso sólido da Figura 3.7. Quando aumentamos o vetor de onda para  $qa = 2.12$  e em seguida para  $2.83$ , vemos que o pico de plasma se funde a um contínuo de excitações coletivas, até que, para  $qa = 3.53$ , apenas o pico difusivo de Rayleigh é observado.

A Figura 3.12 apresenta curvas de dispersão para  $\Gamma = 144$  e  $103$ . Os quadrados abertos

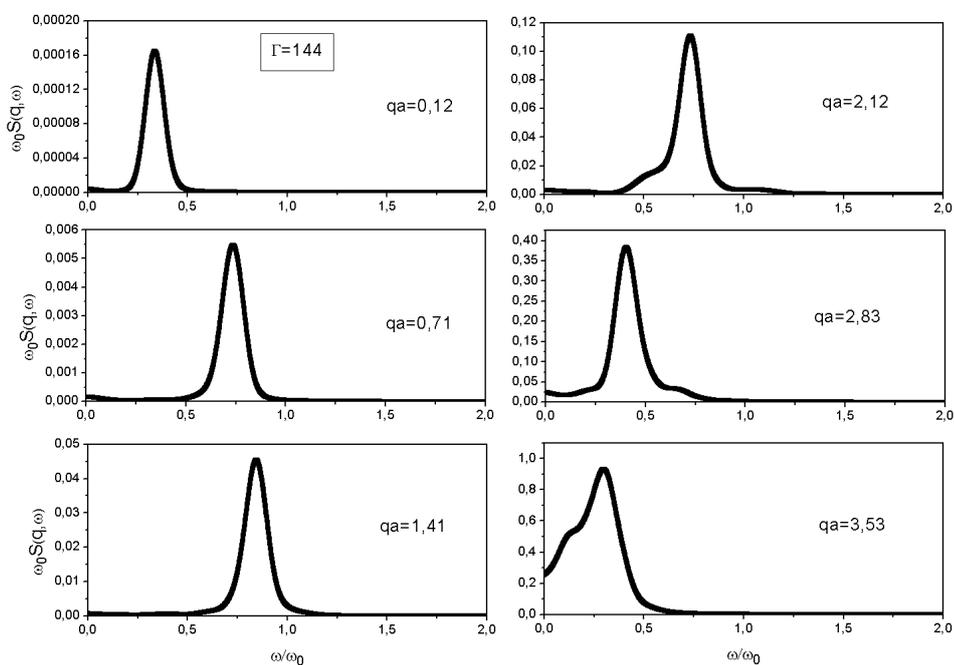


Figura 3.7: Fator estrutura dinâmico para um sistema de elétrons sobre hélio volumétrico para  $\Gamma = 144$ , e vetores de onda variando de  $qa = 0.12, 0.71, 1.41, 2.12, 2.83$  e  $3.53$ .

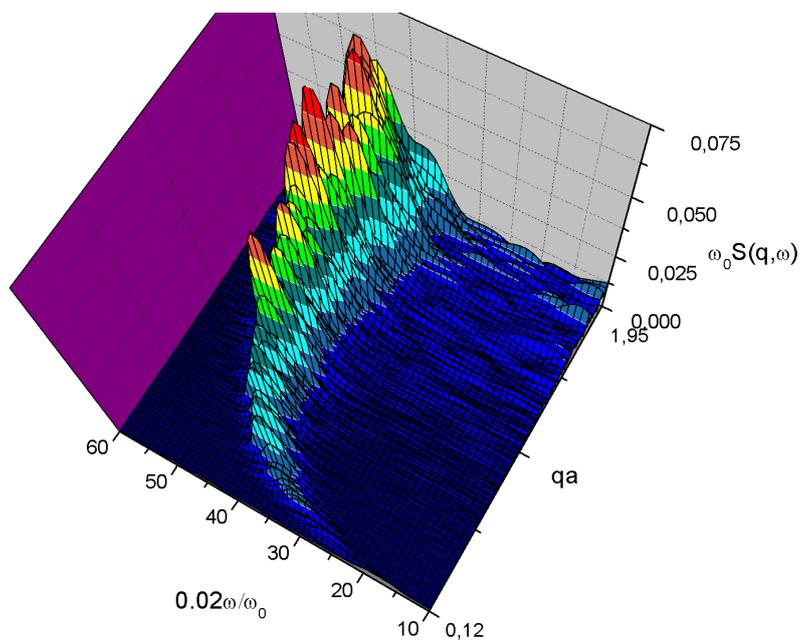


Figura 3.8: Mapeamento do fator estrutura dinâmico para um sistema de elétrons sobre hélio volumétrico para  $\Gamma = 103$ , e vetores de onda variando de  $qa = 0.12$  a  $1.95$ .

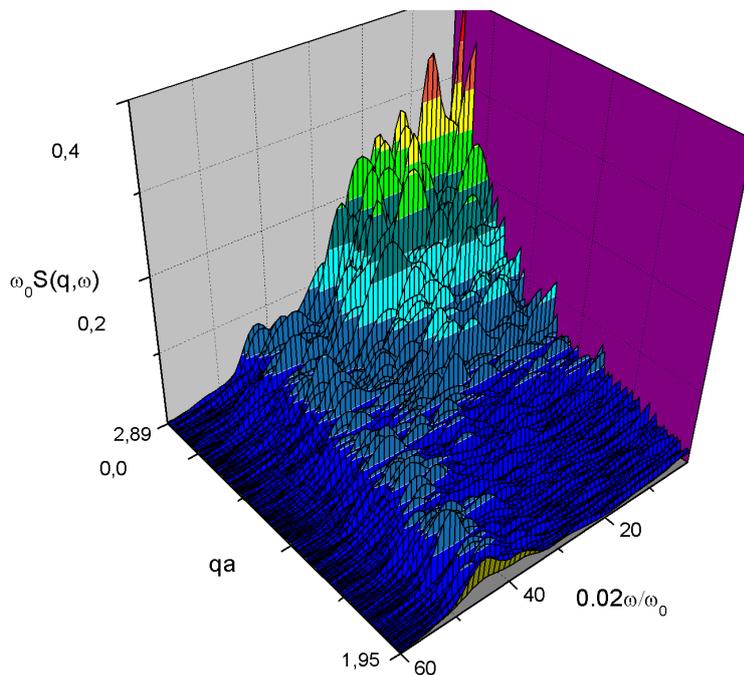


Figura 3.9: Mapeamento do fator estrutura dinâmico para um sistema de elétrons sobre hélio volumétrico para  $\Gamma = 103$ , e vetores de onda variando de  $qa = 1.95$  a  $2.89$ .

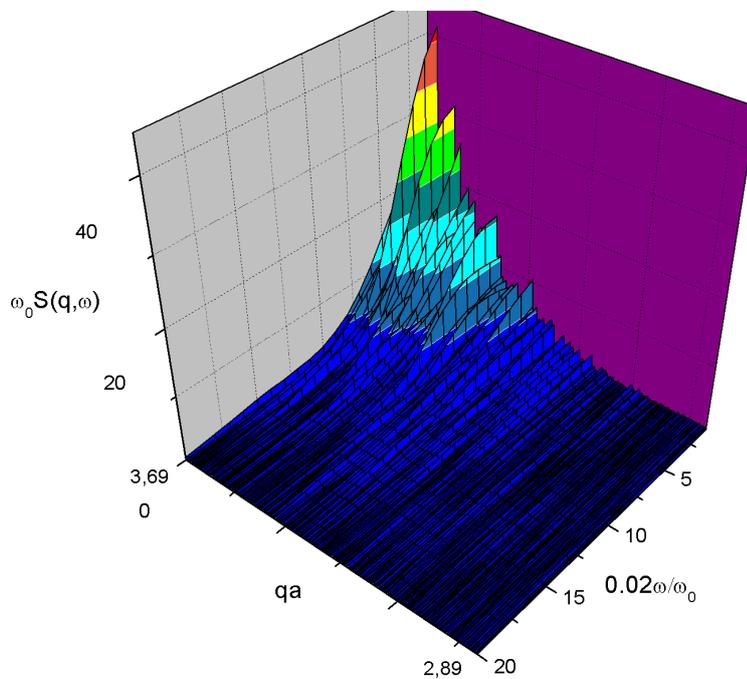


Figura 3.10: Mapeamento do fator estrutura dinâmico para um sistema de elétrons sobre hélio volumétrico para  $\Gamma = 103$ , e vetores de onda variando de  $qa = 2.89$  a  $3.69$ .

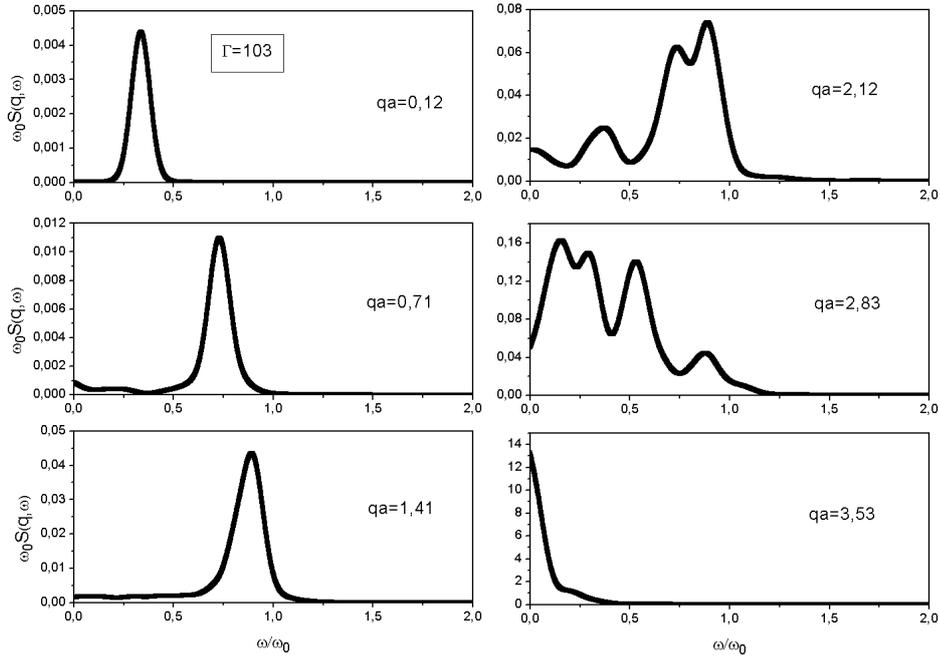


Figura 3.11: Fator estrutura dinâmico para um sistema de elétrons sobre hélio volumétrico para  $\Gamma = 103$ , e vetores de onda variando de  $qa = 0.12, 0.71, 1.41, 2.12, 2.83$  e  $3.53$ .

são nossos resultados obtidos a partir do cálculo das frequências em que os picos de plasma ocorrem nos gráficos de fator de estrutura dinâmico, enquanto que a linha contínua foi obtida pelo método apresentado na referência <sup>1</sup>. De acordo com este último método, desenvolvido por Golden et al. <sup>1</sup>, a dispersão de plasma de um líquido de Coulomb bidimensional pode ser obtida através do cálculo da função resposta dielétrica  $\varepsilon(q, \omega)$ ,

$$\varepsilon(q, \omega) = 1 - \frac{\omega_0^2(q)}{\omega^2(q) - \omega_0^2(q)F(q)}, \quad (3.7)$$

onde  $F(q)$  representa os efeitos de correlação e é expressa por

$$F(q) = \frac{1}{2q} \int_0^\infty \frac{g(r)}{r^2} \left[ 1 - 4J_0(qr) + 6 \frac{J_1(qr)}{qr} \right] dr, \quad (3.8)$$

sendo  $g(r)$  a função de correlação de pares do sistema para uma dada temperatura. A relação de dispersão é obtida tomando-se  $\varepsilon(q, \omega) = 0$ , tal que

$$\omega(q) = \omega_0(q) [1 + F(q)]^{1/2}. \quad (3.9)$$

Observamos que para grandes comprimentos de onda  $\omega \propto q^{1/2}$  e nossos resultados de simulação condizem perfeitamente com aqueles obtidos pelo método da referência <sup>1</sup>.

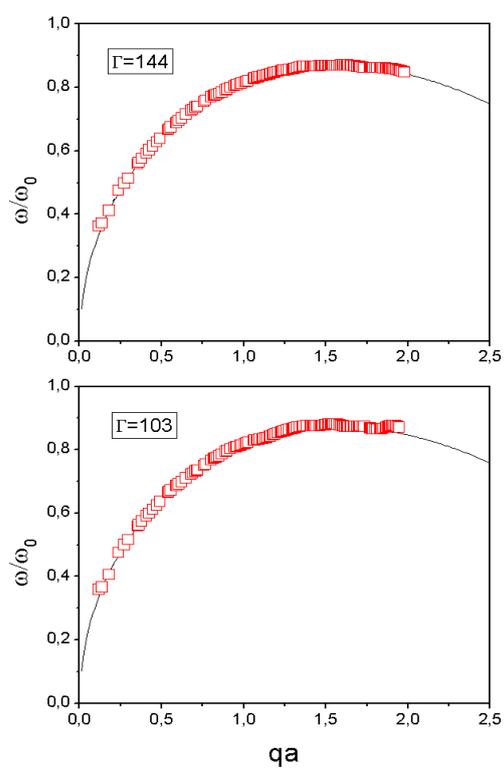


Figura 3.12: Curva de dispersão para um sistema de elétrons sobre hélio volumétrico para  $\Gamma = 144$  e 103. Os quadrados abertos representam nossos resultados de simulação e a linha contínua foi obtida pelo método apresentado na referência <sup>1</sup>.

### 3.3 Elétrons sobre Filme de Hélio Adsorvido em Substrato

Elétrons na superfície de filme de hélio um sistema especialmente interessante, pois suas propriedades podem ser alteradas pela simples variação da espessura  $d$  do filme de hélio ou pela alteração do tipo de substrato. Quando a espessura do filme é muito maior que a distância média elétron-elétron recobramos o caso de sistema eletrônico sobre hélio volumétrico. Uma representação esquemática do sistema de elétrons sobre filme de hélio adsorvido em substrato está ilustrada na Figura 3.13

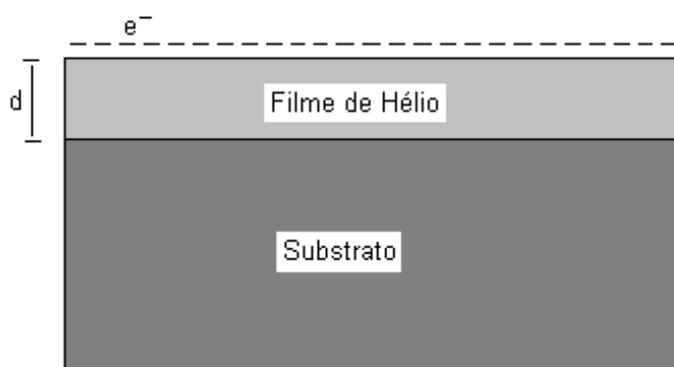


Figura 3.13: Representação esquemática de um sistema de elétrons sobre filme de hélio adsorvido em substrato.

Este sistema é caracterizado pelo parâmetro <sup>49</sup>

$$\Gamma = \frac{e^2}{ak_B T} \left[ 1 - \delta \left( 1 + \frac{4d^2}{a^2} \right)^{-1/2} \right], \quad (3.10)$$

onde  $\delta = (\epsilon_s - 1)/(\epsilon_s + 1)$ , sendo  $\epsilon_s$  a constante dielétrica do substrato.

Novamente, aqui, trataremos apenas o caso clássico em que a energia térmica do sistema é muito maior que sua energia de Fermi (para os sistemas estudados aqui, a energia de Fermi é da ordem de milikelvin).

A energia potencial de interação entre os elétrons ( $U_{ee}$ ) de tal sistema é definida como <sup>46</sup>

$$U_{ee} = \frac{e^2}{2} \left( \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \right)' \left\{ \frac{1}{|\vec{r}_{ij}|} - \frac{\delta}{[|\vec{r}_{ij}|^2 + (2d)^2]^{1/2}} \right\}. \quad (3.11)$$

Temos que, na equação (3.11),  $(\sum \sum)'$  indica a exclusão do termo  $i = j$ . Para garantir a estabilidade e neutralidade, consideramos que tal sistema encontra-se imerso em um fundo neutralizador positivo. A energia potencial de interação devido a presença desse fundo ( $U_f$ ) leva em

conta as interações do elétron-fundo ( $U_{ef}$ ) e do fundo com ele mesmo ( $U_{ff}$ ), de modo que a energia potencial total ( $U$ ) passa a ser dada por

$$U = U_{ee} + U_f. \quad (3.12)$$

A técnica de *Soma de Ewald* foi utilizada para viabilizar a simulação das interações de longo alcance e está descrita no apêndice A.2. Ao levarmos em consideração as condições periódicas de contorno para evitar os efeitos de borda, a equação (3.12) pode, então, ser descrita como

$$\begin{aligned} U = & \frac{U_0}{2f_x f_y} \left[ \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \left( \sum_{M_x=-\infty}^{\infty} \sum_{M_y=-\infty}^{\infty} \right)' e^{2\pi i \vec{M} \cdot \vec{r}'_{ij}} \frac{1}{|\vec{M}|} \operatorname{erfc} \left( \frac{\pi |\vec{M}|}{\alpha} \right) \right] \\ & - \frac{U_0 \delta}{4f_x f_y} \left\{ \left( \sum_{M_x=-\infty}^{\infty} \sum_{M_y=-\infty}^{\infty} \right)' \left[ e^{4\pi |\vec{M}| d'} \operatorname{erfc} \left( \frac{\pi |\vec{M}|}{\alpha} + 2d' \alpha \right) \right. \right. \\ & \left. \left. + e^{-4\pi |\vec{M}| d'} \operatorname{erfc} \left( \frac{\pi |\vec{M}|}{\alpha} - 2d' \alpha \right) \right] \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N e^{2\pi i \vec{M} \cdot \vec{r}'_{ij}} \right\} \\ & + \frac{U_0}{2} \left( \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \right)' \sum_{m_x=-\infty}^{\infty} \sum_{m_y=-\infty}^{\infty} \frac{1}{|\vec{r}'_{ij} + \vec{\xi}'|} \operatorname{erfc} \left( \alpha |\vec{r}'_{ij} + \vec{\xi}'| \right) \\ & + \frac{U_0 N}{2} \left( \sum_{m_x=-\infty}^{\infty} \sum_{m_y=-\infty}^{\infty} \right)' \frac{\operatorname{erfc} \left( \alpha |\vec{\xi}'| \right)}{|\vec{\xi}'|} \\ & - \frac{U_0 \delta}{2} \left( \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \right)' \sum_{m_x=-\infty}^{\infty} \sum_{m_y=-\infty}^{\infty} \frac{1}{\left[ |\vec{r}'_{ij} + \vec{\xi}'|^2 + (2d')^2 \right]^{1/2}} \operatorname{erfc} \left[ \alpha \left( |\vec{r}'_{ij} + \vec{\xi}'|^2 + (2d')^2 \right)^{1/2} \right] \\ & - \frac{U_0 \delta N}{2} \sum_{m_x=-\infty}^{\infty} \sum_{m_y=-\infty}^{\infty} \frac{1}{\left[ |\vec{\xi}'|^2 + (2d')^2 \right]^{1/2}} \operatorname{erfc} \left[ \alpha \left( |\vec{\xi}'|^2 + (2d')^2 \right)^{1/2} \right] \\ & - U_0 N \left( \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} - \frac{\delta}{4d} \right) - \frac{U_0 N^2}{f_x f_y} \left[ \frac{\sqrt{\pi}}{\alpha} - \frac{\delta \sqrt{\pi} e^{-(2d'\alpha)^2}}{\alpha} - 2d' \delta \pi \operatorname{erf}(2d'\alpha) + 2d' \delta \pi \right]. \quad (3.13) \end{aligned}$$

No primeiro e no segundo termo da equação (3.13),  $(\sum \sum)'$  exclui o elemento  $M_x = M_y = 0$ . No terceiro e no quinto termo da equação (3.13),  $(\sum \sum)'$  indica a exclusão do elemento  $i = j$  e, finalmente, no quarto termo,  $(\sum \sum)'$  exclui o elemento  $m_x = m_y = 0$ .

### 3.3.1 Resultados e Discussões

Este sistema foi simulado para um total de  $N = 784$  elétrons em uma densidade  $\rho = 1.477 \times 10^8 \text{ cm}^{-2}$  sobre um filme de hélio para espessuras  $d = 100\text{Å}$ ,  $350\text{Å}$ ,  $500\text{Å}$ ,  $2500\text{Å}$  e  $12500\text{Å}$ . Foram simulados três tipos de substratos, vidro, pmma (poli-metil-meta-crilato) e

neônio com constantes dielétricas  $\epsilon_s = 7.3, 2.2$  e  $1.19$  respectivamente. O passo de integração utilizado foi de  $5 \times 10^{-13}s$ , permitindo uma conservação da energia total em 1 parte em  $10^5$  para temperaturas longe da temperatura de fusão e de 1 parte em  $10^4$  para temperaturas próximas à temperatura de fusão.

A Figura 3.14, apresenta a variação da energia total do sistema de elétrons sobre filme de hélio, de espessura  $d = 100\text{\AA}$ , como função do aumento da temperatura para os substratos de vidro, pmma e neônio. Podemos observar que a diminuição da constante dielétrica do substrato implica em um aumento da temperatura de transição sólido-líquido.

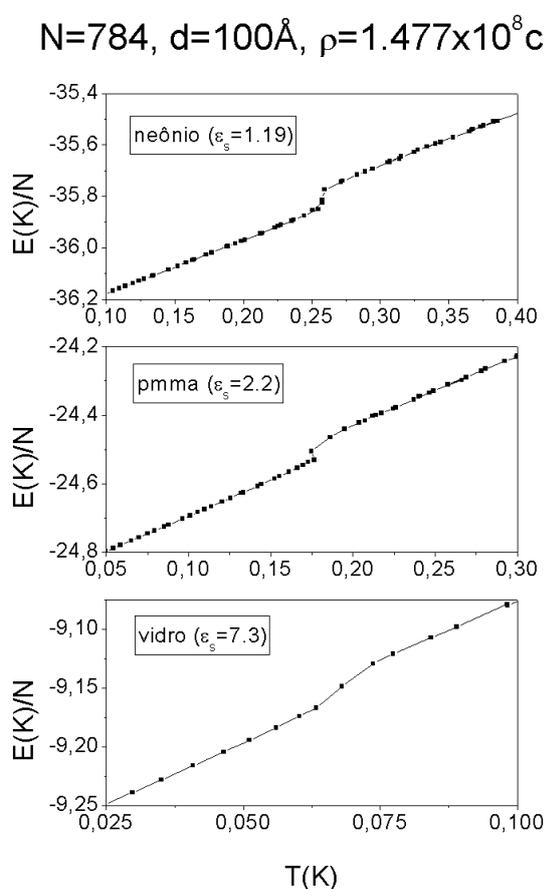


Figura 3.14: Energia total como função da temperatura para um sistema de elétrons sobre filme de hélio, de espessura  $d = 100\text{\AA}$ , adsorvido em substratos de vidro, pmma e neônio.

A Figura 3.15 nos mostra a função de correlação de pares para este sistema com substrato de neônio e espessuras de filme  $d = 100\text{\AA}$  e  $350\text{\AA}$  a uma temperatura fixa de  $T = 0.260K$ . A correlação de longo alcance, observada em  $g(r)$  através de um comportamento bastante oscilatório, aumenta com o aumento da espessura do filme, ao passo que a posição do primeiro pico independe da espessura do filme. Para  $d = 100\text{\AA}$ , o sistema encontra-se na fase líquida,

enquanto que para  $d = 350\text{\AA}$  o sistema encontra-se na fase de sólido super-aquecido, indicando que a temperatura de transição sólido-líquido aumenta com o aumento da espessura do filme de hélio ao manter-se fixo o tipo de substrato. Na Figura 3.16, a função de correlação de pares é apresentada para uma temperatura fixa de  $T = 0.180\text{K}$  e espessura de filme  $d = 100\text{\AA}$ , variando-se o tipo de substrato. Note que há um aumento na correlação com a diminuição da constante dielétrica do substrato e o primeiro pico, apesar de manter sua posição independente do tipo de substrato, tem sua amplitude aumentada com a diminuição da constante dielétrica do substrato. Nesta Figura, o sistema comporta-se como líquido para substrato de vidro, como um sólido-super aquecido para substrato de pmma e como um sólido para substrato de neônio. Temos, assim, que a correlação entre os elétrons torna-se mais forte para grandes distâncias com a diminuição da constante dielétrica do substrato, ao manter-se fixas a temperatura e espessura do filme de hélio.

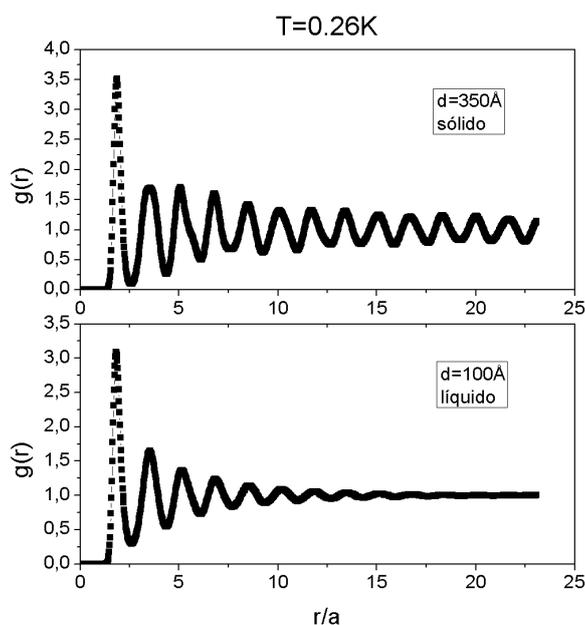


Figura 3.15: Função de correlação de pares para um sistema de elétrons sobre filme de hélio adsorvido em substrato de neônio para  $d = 100\text{\AA}$  e  $350\text{\AA}$  e temperatura  $T = 0.260\text{K}$ .

A transformada de Fourier de  $g(r)$ , Figura 3.16, nos fornece o fator de estrutura dinâmico, Figura 3.17. Note que a formação de novos picos para  $qa > 6$  indica o surgimento de uma ordem estrutural com a diminuição da constante dielétrica do substrato ao manter-se fixas a temperatura em  $T = 0.180\text{K}$  e a espessura do filme de hélio em  $d = 100\text{\AA}$ .

Nas Figuras 3.18, 3.19 e 3.20, apresentamos um mapeamento do fator de estrutura dinâmico para o sistema de elétrons sobre filme de hélio (ver também referência <sup>50</sup>) de espessura

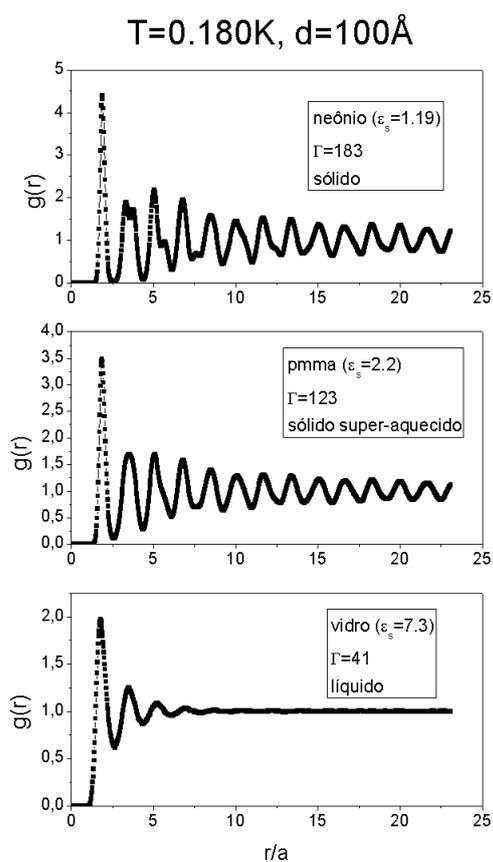


Figura 3.16: Função de correlação de pares para um sistema de elétrons sobre filme de hélio de espessura  $d = 100\text{\AA}$  adsorvido em substratos de vidro, pmma e neônio a uma temperatura fixa de  $T = 0.180\text{K}$ .

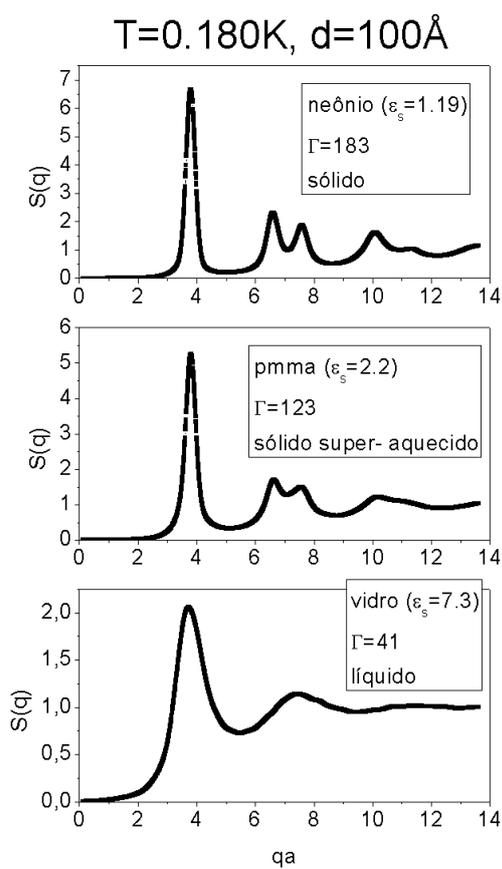


Figura 3.17: Fator de estrutura estático para um sistema de elétrons sobre filme de hélio de espessura  $d = 100\text{\AA}$  adsorvido em substratos de vidro, pmma e neônio a uma temperatura fixa de  $T = 0.180\text{K}$ .

$d = 100\text{\AA}$ , temperatura  $T = 0.180\text{K}$  (fase líquida),  $\Gamma = 41$  e substrato de vidro com constante dielétrica  $\epsilon_s = 7.3$ . Na Figura 3.18, podemos acompanhar a evolução de um único pico bem definido que desloca-se para frequências maiores com o aumento do vetor de onda de  $qa = 0.12$  para  $1.74$ . Este corresponde ao pico de plasma que, na Figura 3.19, funde-se a um contínuo de excitações para vetores de onda  $1.74 < qa < 2.83$ . Para  $qa^{1/2} > 2.83$ , observamos apenas o pico difusivo de Rayleigh conforme Figura 3.20.

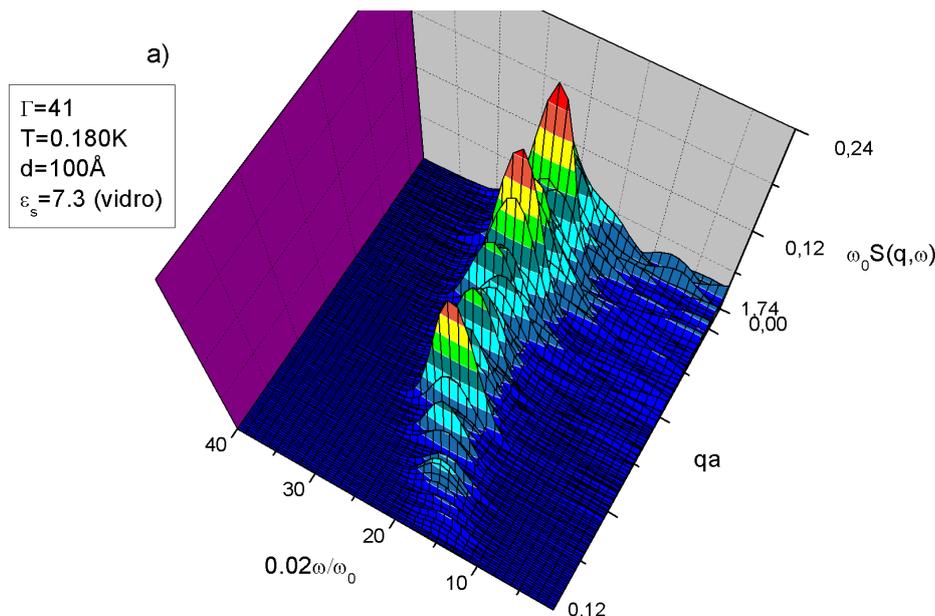


Figura 3.18: Mapeamento do fator estrutura dinâmico para um sistema de elétrons sobre filme de hélio de espessura  $d = 100\text{\AA}$  adsorvido em substrato de vidro, para  $\Gamma = 41$  e vetores de onda variando de  $qa = 0.12$  a  $1.74$ .

A Figura 3.21 ilustra algumas curvas de fator de estrutura dinâmico para  $\Gamma = 41$  e substrato de vidro ( $\epsilon_s = 7.3$ ). Variando-se o vetor de onda de  $qa = 0.12$  para  $0.71$  e em seguida para  $1.41$ , observamos o pico de plasma deslocar-se para a direita e o surgimento de um pequeno ombro à esquerda do pico de plasma. Para  $qa = 2.12$  este ombro à esquerda do pico de plasma torna-se bem pronunciado, indicando a existência de outras excitações coletivas, até que, para  $qa = 2.83$ , apenas o pico difusivo de Rayleigh é observado.

O mesmo sistema com espessura de filme  $d = 100\text{\AA}$ , e temperatura  $T = 0.180\text{K}$  foi estudado para um substrato pmma com constante dielétrica  $\epsilon_s = 2.2$ . Sob estas condições o sistema encontra-se em uma fase de sólido super-aquecido com  $\Gamma = 123$ . Na Figura 3.22 temos o mapeamento do fator de estrutura dinâmico para  $0.12 < qa < 2.12$ . Nela observamos o pico de plasma bem definido que desloca-se para frequências maiores com o aumento do vetor de onda. Na Figura 3.23, o mapeamento do fator de estrutura dinâmico mostra como o pico de

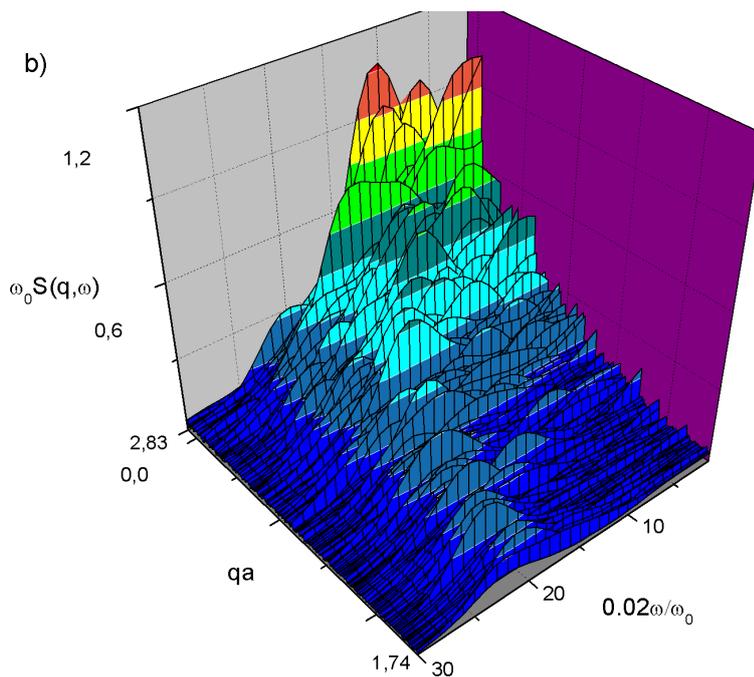


Figura 3.19: Mapeamento do fator estrutura dinâmico para um sistema de elétrons sobre filme de hélio de espessura  $d = 100\text{Å}$  adsorvido em substrato de vidro, para  $\Gamma = 41$  e vetores de onda variando de  $qa = 1.74$  a  $2.83$ .

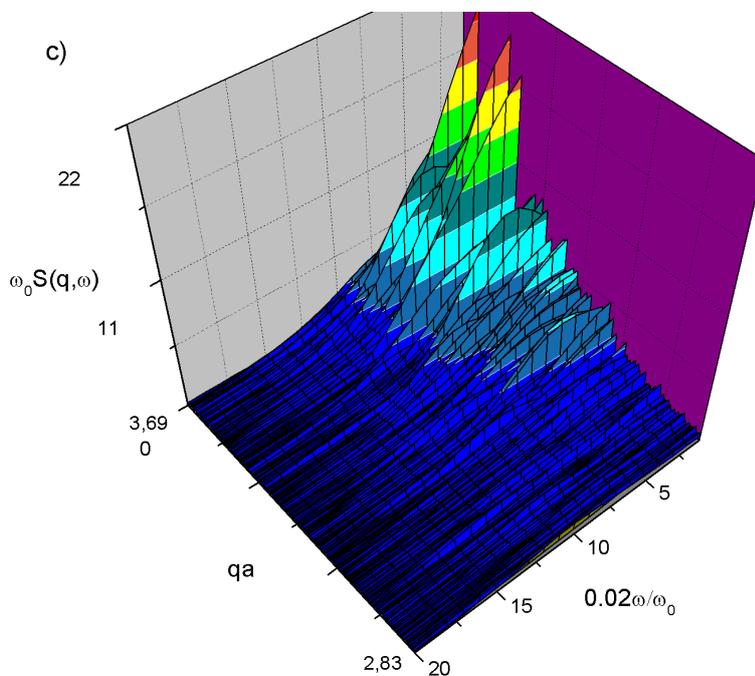


Figura 3.20: Mapeamento do fator estrutura dinâmico para um sistema de elétrons sobre filme de hélio de espessura  $d = 100\text{Å}$  adsorvido em substrato de vidro, para  $\Gamma = 41$  e vetores de onda variando de  $qa = 2.83$  a  $3.69$ .

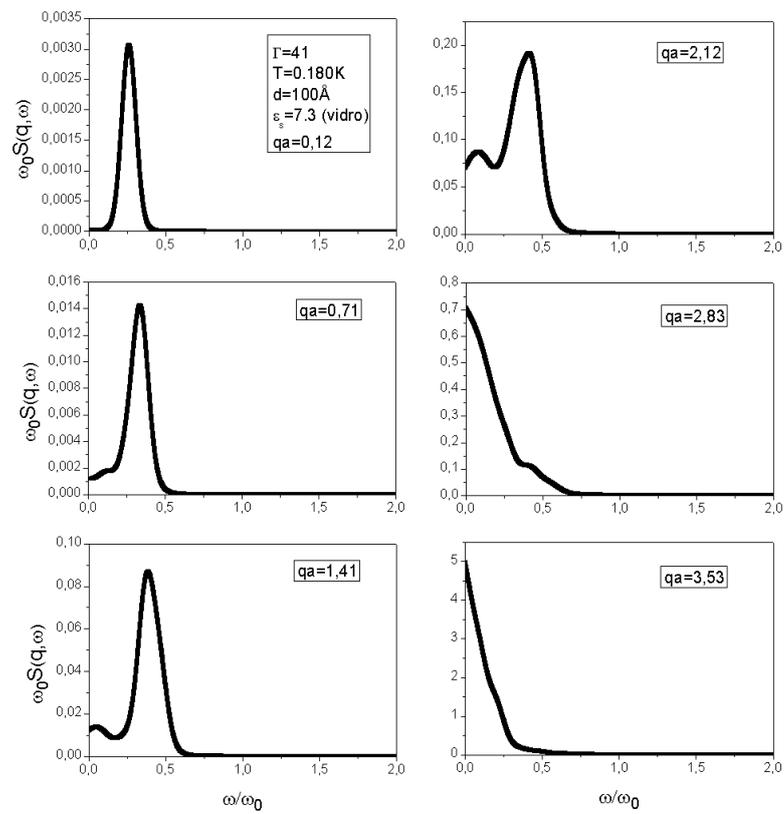


Figura 3.21: Fator estrutura dinâmico para um sistema de elétrons sobre filme de hélio de espessura  $d = 100\text{\AA}$  adsorvido em substrato de vidro, para  $\Gamma = 41$  e vetores de onda variando de  $qa = 0.12, 0.71, 1.41, 2.12, 2.83$  e  $3.53$ .

plasma desloca-se para frequências menores com o aumento do vetor de onda de  $qa = 2.12$  para 3.24. Observamos, também, a existência de um outro pico, de menor amplitude, mas que aparece para frequências um pouco maiores que a do pico de plasma. Este é o modo transversal de vibração e está previsto para sistemas sólidos em <sup>46</sup>. Para vetores de onda  $qa > 3.24$ , apenas o pico difusivo de Rayleigh é observado, como nos mostra a Figura 3.24.

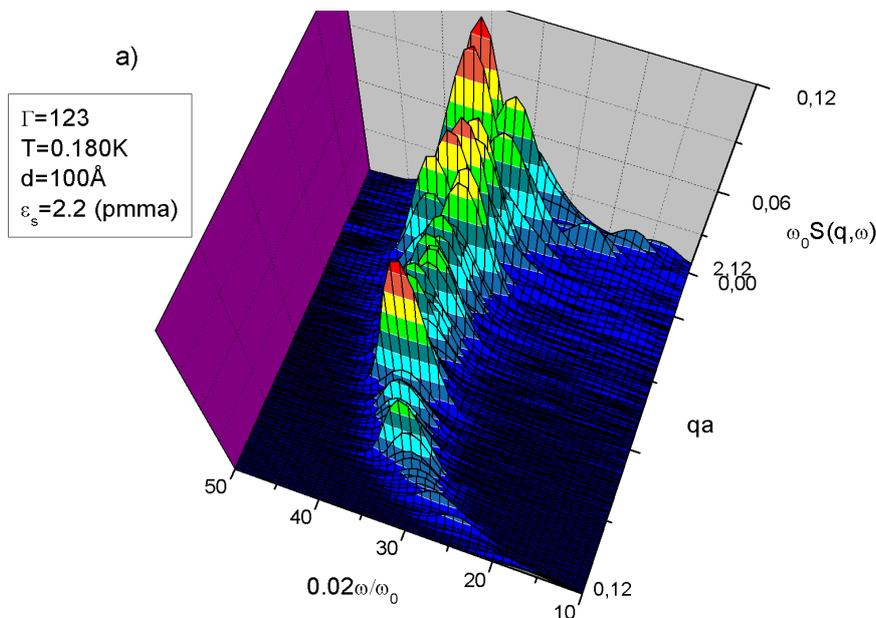


Figura 3.22: Mapeamento do fator estrutura dinâmico para um sistema de elétrons sobre filme de hélio de espessura  $d = 100\text{\AA}$  adsorvido em substrato de pmma, para  $\Gamma = 123$  e vetores de onda variando de  $qa = 0.12$  a  $2.12$ .

Na Figura 3.25, apresentamos o fator de estrutura dinâmico deste sistema para alguns valores de vetor de onda. O pico de plasma desloca-se para a direita com o aumento do vetor de onda de  $qa = 0.12$  para 0.71 e em seguida para 1.41. O pico de plasma começa a deslocar-se para a esquerda para  $qa = 2.12$  e continua este movimento com o aumento do vetor de onda para  $qa = 2.83$ , até que, para  $qa = 3.53$  praticamente apenas o pico difusivo de Rayleigh é observado.

Este sistema foi estudado também para substrato de neônio com constante dielétrica  $\epsilon_s = 1.19$ , espessura de filme de hélio  $d = 100\text{\AA}$ , e temperatura  $T = 0.180K$ . Sob estas condições, o sistema encontra-se em sua fase sólida com  $\Gamma = 183$ . O mapeamento do fator de estrutura dinâmico deste sistema nos informa que o pico de vibração de plasma desloca-se para frequências maiores com o aumento do vetor de onda de  $qa = 0.12$  para 1.96, de acordo com Figura 3.26. Na Figura 3.27, o pico de plasma desloca-se para frequências menores e um outro pico, de menor amplitude e maior frequência de vibração ocorre para  $1.96 < qa < 3.33$ , correspondendo

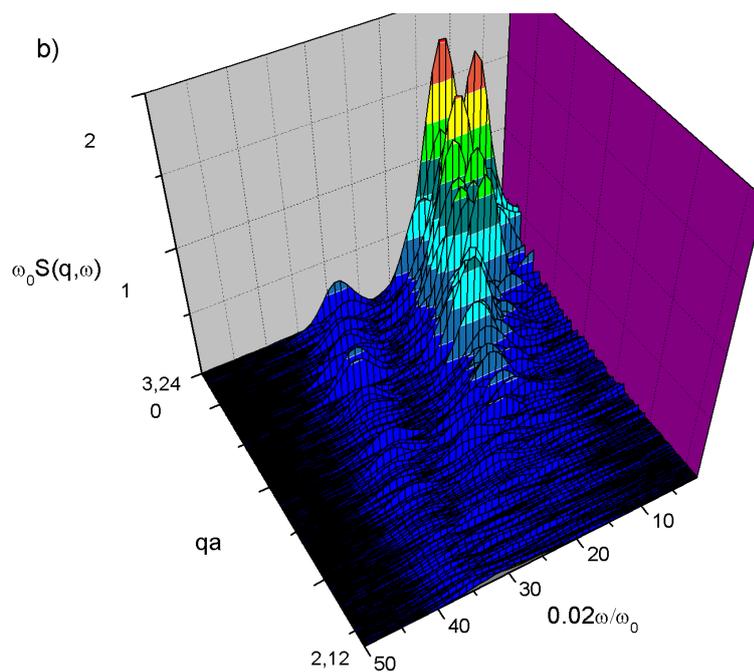


Figura 3.23: Mapeamento do fator estrutura dinâmico para um sistema de elétrons sobre filme de hélio de espessura  $d = 100\text{\AA}$  adsorvido em substrato de pmma, para  $\Gamma = 123$  e vetores de onda variando de  $qa = 2.12$  a  $3.24$ .

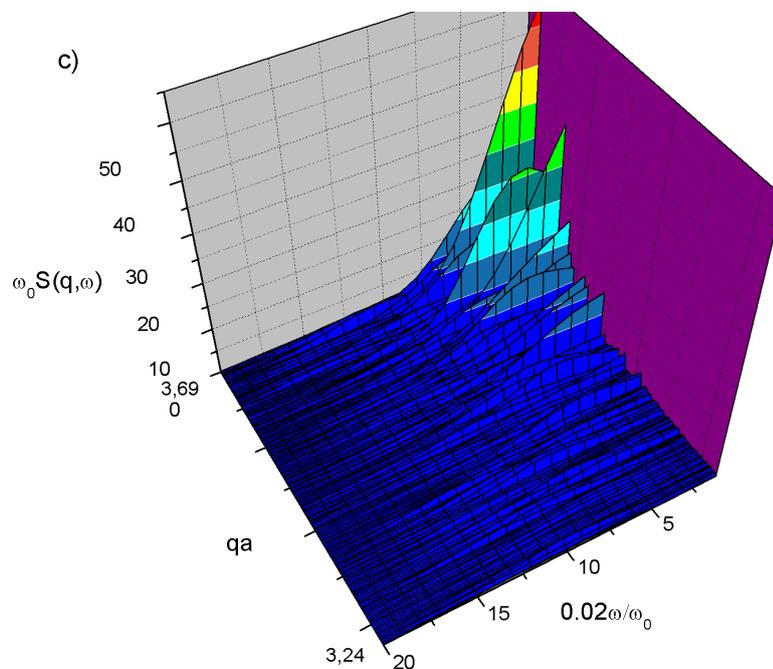


Figura 3.24: Mapeamento do fator estrutura dinâmico para um sistema de elétrons sobre filme de hélio de espessura  $d = 100\text{\AA}$  adsorvido em substrato de pmma, para  $\Gamma = 123$  e vetores de onda variando de  $qa = 3.24$  a  $3.69$ .

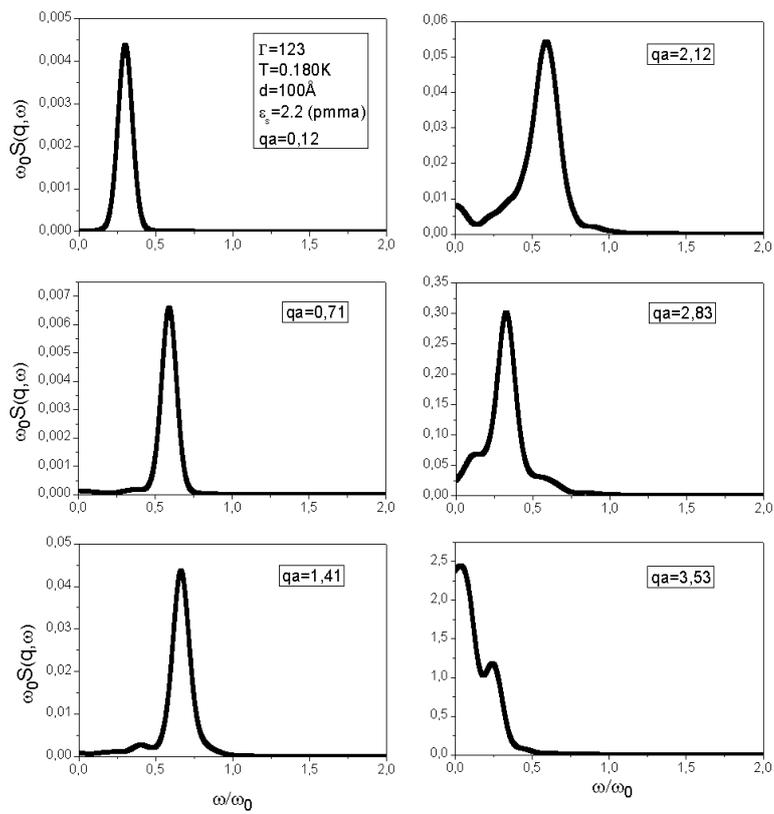


Figura 3.25: Fator estrutura dinâmico para um sistema de elétrons sobre filme de hélio de espessura  $d = 100\text{\AA}$  adsorvido em substrato de pmma, para  $\Gamma = 123$  e vetores de onda variando de  $qa = 0.12, 0.71, 1.41, 2.12, 2.83$  e  $3.53$ .

ao modo transversal de vibração. Na Figura 3.28, um único pico desloca-se para frequências menores até dar origem ao pico difusivo de Rayleigh em torno de  $\omega = 0$ .

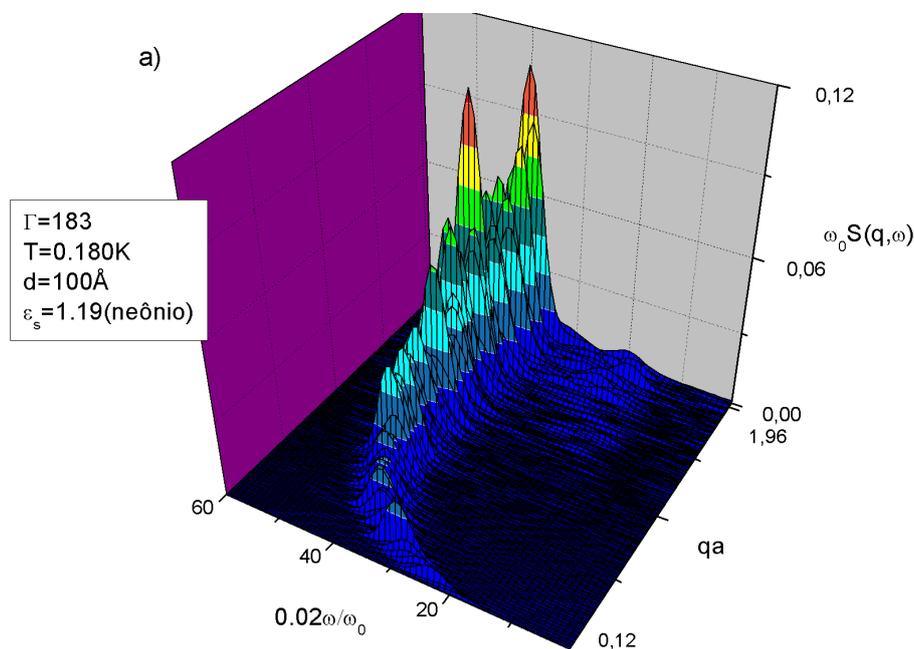


Figura 3.26: Mapeamento do fator estrutura dinâmico para um sistema de elétrons sobre filme de hélio de espessura  $d = 100\text{\AA}$  adsorvido em substrato de neônio, para  $\Gamma = 183$  e vetores de onda variando de  $qa = 0.12$  a  $1.96$ .

Selecionamos, também para este sistema, algumas curvas de fator de estrutura dinâmico para alguns vetores de onda. Na Figura 3.29, o pico de plasma desloca-se para frequências maiores com o aumento do vetor de onda de  $qa = 0.12$  para  $0.71$ , se aproximando de  $\omega = \omega_0$  para  $1.41$ . A partir de  $qa = 2.12$ , o pico de plasma passa a deslocar-se para a esquerda e assim prossegue para  $q2.83$  e  $qa = 3.53$ .

As frequências em que o pico de plasma ocorre como função do vetor de onda nos fornece a curva de dispersão. Para um sistema de elétrons sobre filme de hélio de espessura  $d = 100\text{\AA}$  e temperatura  $T = 0.180K$ , apresentamos na Figura 3.30 as curvas de dispersão para os três tipos de substrato, vidro ( $\epsilon_s = 7.3$ ), pmma ( $\epsilon_s = 2.2$ ) e neônio ( $\epsilon_s = 1.19$ ). O menor vetor de onda para o qual podemos calcular o pico de plasma é de  $qa = 0.12$  e está relacionado aos comprimentos laterais da nossa caixa de simulação. Os maiores vetores de onda para os quais o pico de plasma é observado antes do surgimento de outros modos de vibração são de  $qa = 1.73$  para o substrato de vidro (fase líquida),  $qa = 2.11$  para o substrato de pmma (fase de sólido super-aquecido) e  $qa = 1.96$  para o substrato de neônio (fase sólida). Note que as frequências de vibração em que ocorrem o pico de plasma aumentam com a diminuição da constante dielétrica do substrato.

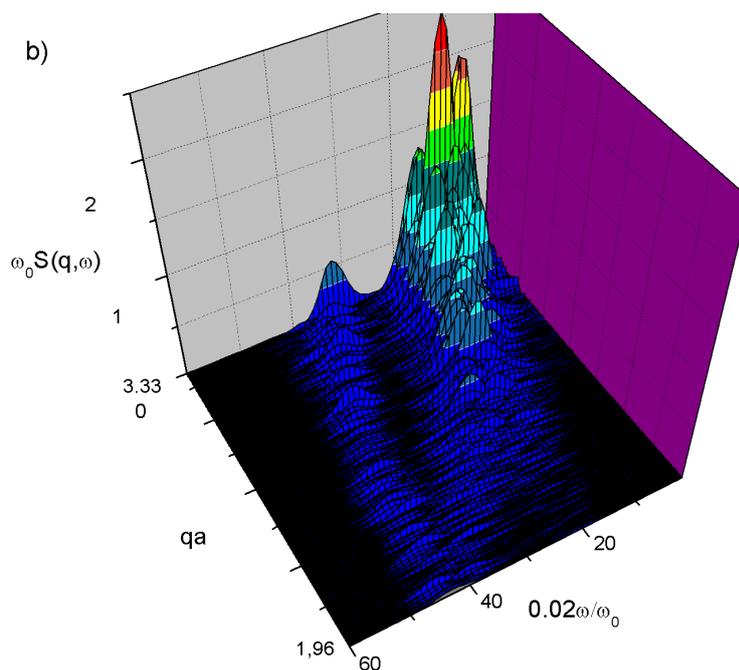


Figura 3.27: Mapeamento do fator estrutura dinâmico para um sistema de elétrons sobre filme de hélio de espessura  $d = 100\text{\AA}$  adsorvido em substrato de neônio, para  $\Gamma = 183$  e vetores de onda variando de  $qa = 1.96$  a  $3.33$ .

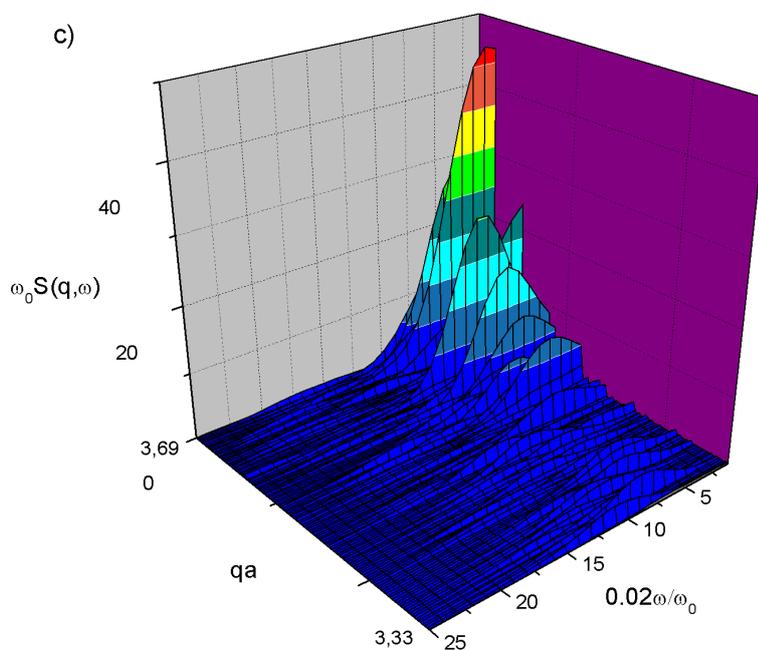


Figura 3.28: Mapeamento do fator estrutura dinâmico para um sistema de elétrons sobre filme de hélio de espessura  $d = 100\text{\AA}$  adsorvido em substrato de neônio, para  $\Gamma = 183$  e vetores de onda variando de  $qa = 3.33$  a  $3.69$ .

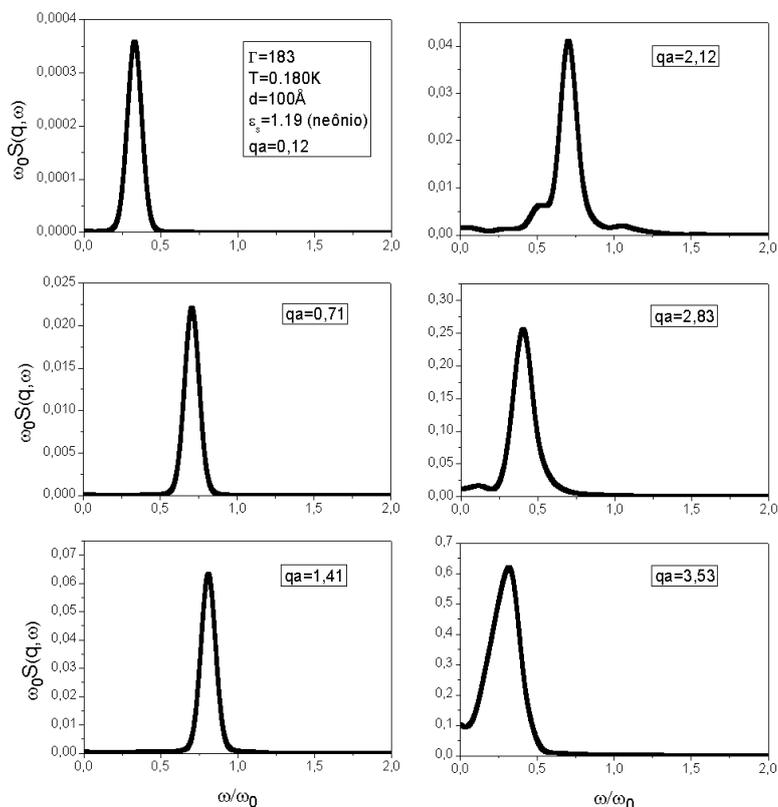


Figura 3.29: Fator estrutura dinâmico para um sistema de elétrons sobre filme de hélio de espessura  $d = 100\text{\AA}$  adsorvido em substrato de neônio, para  $\Gamma = 183$  e vetores de onda variando de  $qa = 0.12, 0.71, 1.41, 2.12, 2.83$  e  $3.53$ .

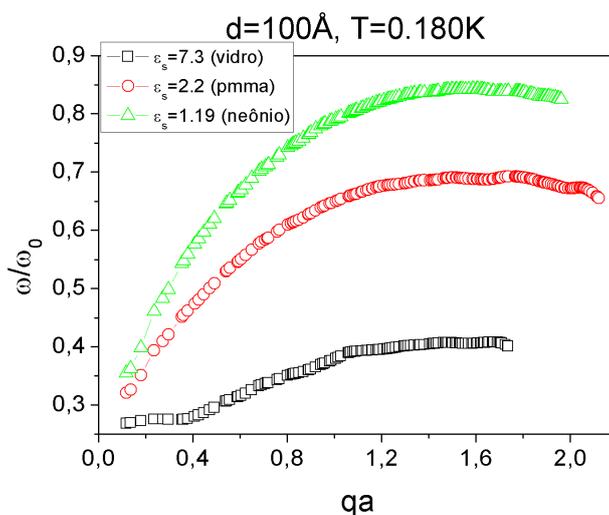


Figura 3.30: Curva de dispersão para um sistema de elétrons sobre filme de hélio de espessura  $d = 100\text{\AA}$  adsorvido em substrato de vidro para  $\Gamma = 41$  (quadrados abertos), de pmma para  $\Gamma = 123$  (círculos abertos) e neônio para  $\Gamma = 183$  (triângulos abertos).

Na Figura 3.31, as curvas de dispersão são apresentadas para o sistema sobre os três tipos de substratos, vidro, pmma e neônio para quatro espessuras diferentes do filme de hélio,  $d = 100\text{Å}$  (quadrados abertos),  $500\text{Å}$  (círculos abertos),  $2500\text{Å}$  (triângulos abertos) e  $12500\text{Å}$  (triângulos invertidos abertos). Em todos os casos, o sistema encontra-se na fase líquida a uma temperatura de  $T = 0.3K$ . O aumento da espessura do filme de hélio implica em um aumento nas frequências de ocorrência do modo de plasma para os três tipos de substrato. Porém a separação entre as curvas de dispersão tende a diminuir com a diminuição da constante dielétrica do substrato, tornando-se praticamente desprezível para o substrato de neônio. Para o substrato de vidro, as curvas de dispersão para filme de hélio com espessura inferior a  $d = 2500\text{Å}$  têm um comportamento de  $\omega \propto q$  para  $\omega \rightarrow 0$ , enquanto que para  $d = 12500\text{Å}$  temos  $\omega \propto q^{1/2}$  para  $\omega \rightarrow 0$ . Para os substratos de pmma e de neônio, temos que  $\omega \propto q^{1/2}$  para  $\omega \rightarrow 0$  para as quatro espessuras de filme de hélio.

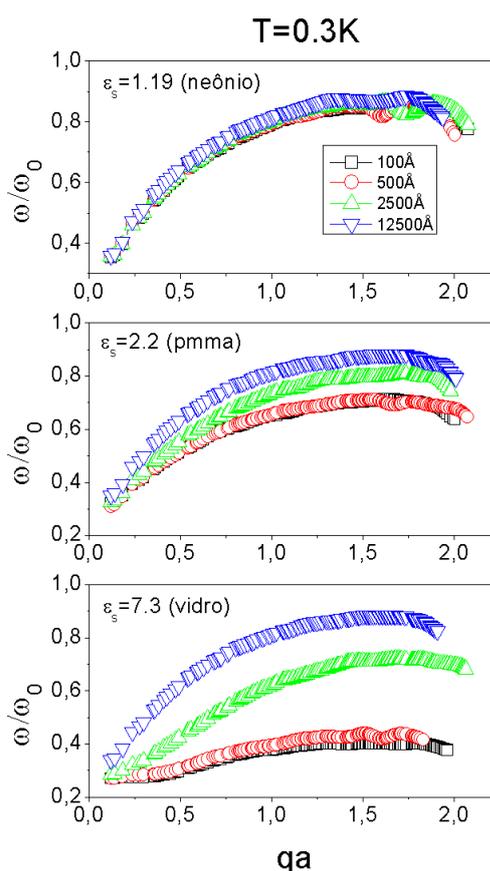


Figura 3.31: Curvas de dispersão para um sistema de elétrons sobre filme de hélio de espessura  $d = 100\text{Å}$  (quadrados abertos),  $d = 500\text{Å}$  (círculos abertos),  $d = 2500\text{Å}$  (triângulos abertos) e  $d = 12500\text{Å}$  (triângulos invertidos abertos), adsorvido em substrato de vidro, pmma e neônio a uma temperatura de  $T = 0.3K$ .

Como contribuição inédita temos a aplicação do cálculo do fator de estrutura dinâmico obtido via método de simulação por dinâmica molecular no cálculo da mobilidade de sistemas de elétrons sobre filme de hélio. As Figuras a seguir tratam da mobilidade para sistemas eletrônicos adsorvidos em substrato vítreo.

Na Figura 3.32, estão as curvas de mobilidade como função da temperatura para um sistema bidimensional de elétrons com densidade  $\rho = 2.5 \times 10^9 \text{cm}^{-2}$  sobre filme de hélio de espessura  $d = 350 \text{Å}$  adsorvido em substrato vítreo. Os quadrados representam resultados experimentais extraídos de referência <sup>2</sup>. A linha contínua é o resultado teórico para a mobilidade considerando os três tipos de espalhadores (ripplon, átomos de vapor de hélio e defeitos de interface), utilizando aproximação de sistema eletrônico não interagente no formalismo de *FBEM* e parâmetros  $h = 4 \text{Å}$  para a altura da rugosidade e  $l = 400 \text{Å}$  para o comprimento da rugosidade do substrato. Os triângulos correspondem a nosso resultado do cálculo da mobilidade considerando os três tipos de espalhadores e parâmetros  $h = 8 \text{Å}$  e  $l = 400 \text{Å}$ . A boa concordância de nossos resultados com a teoria e o experimento é evidente para altas temperaturas. Infelizmente, não há resultado experimental disponível para comparação para este sistema a temperaturas inferiores a  $1 \text{K}$ . Nossos resultados indicam uma queda abrupta na mobilidade para a temperatura de  $T = 0.5 \text{K}$ , correspondendo à temperatura de fusão deste sistema.

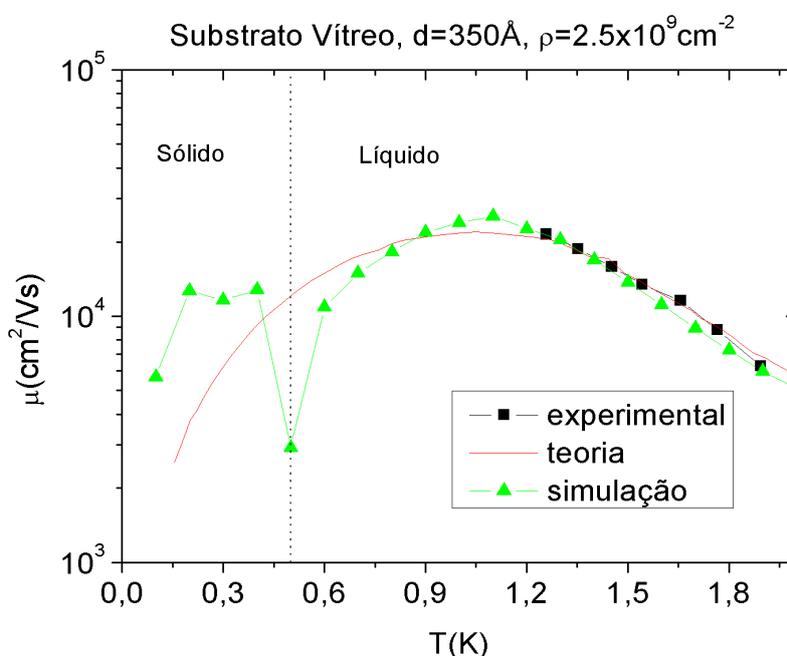


Figura 3.32: Curvas de mobilidade para um sistema de elétrons de densidade  $\rho = 2.5 \times 10^9 \text{cm}^{-2}$  sobre filme de hélio de espessura  $d = 350 \text{Å}$ . Os quadrados são resultados experimentais extraídos de <sup>2</sup>, a linha contínua é a curva teórica extraída de <sup>3</sup> e os triângulos representam nossos resultados.

No intuito, ainda, de comparar nossos resultados, que incluem efeitos de muitos corpos, com a teoria, que utiliza aproximação de sistema de elétrons não interagentes, apresentamos nas Figuras 3.33 e 3.34, as curvas de mobilidade devido a interação dos elétrons com os átomos de vapor de hélio e dos elétrons com os defeitos da interface, respectivamente, nas mesmas condições da Figura 3.32. Em ambos os casos, nossos resultados indicam uma mobilidade ligeiramente menor do que aquela prevista pela aproximação *FBEM*. Infelizmente, não há curva teórica do cálculo da mobilidade devido ao espalhamento dos elétrons por ríplons para comparar com nossos resultados para o sistema nestas condições.

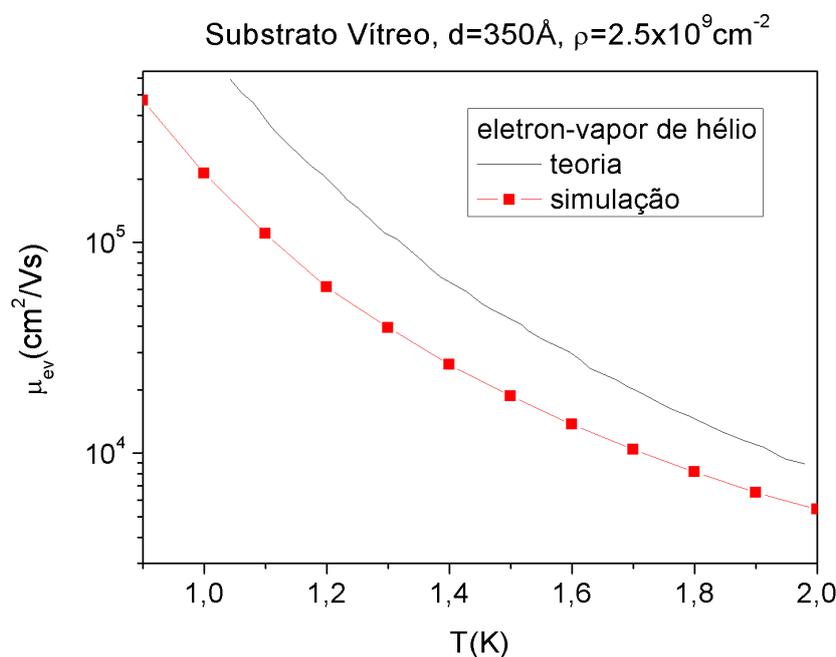


Figura 3.33: Curvas de mobilidade devida à interação elétron-átomos de vapor de hélio para um sistema de elétrons de densidade  $\rho = 2.5 \times 10^9 \text{cm}^{-2}$  sobre filme de hélio de espessura  $d = 350\text{\AA}$ . A linha contínua é a curva teórica extraída de <sup>3</sup> e os quadrados representam nossos resultados.

Na Figura 3.35, apresentamos a mobilidade devido a todos os processos de espalhamento para um sistema de elétrons de densidade  $\rho = 3 \times 10^9 \text{cm}^{-2}$  e temperatura  $T = 1.2\text{K}$ , para várias espessuras de filme de hélio sobre substrato vítreo. Note a boa concordância de nosso resultado via simulação por dinâmica molecular com o resultado experimental para grandes espessuras.

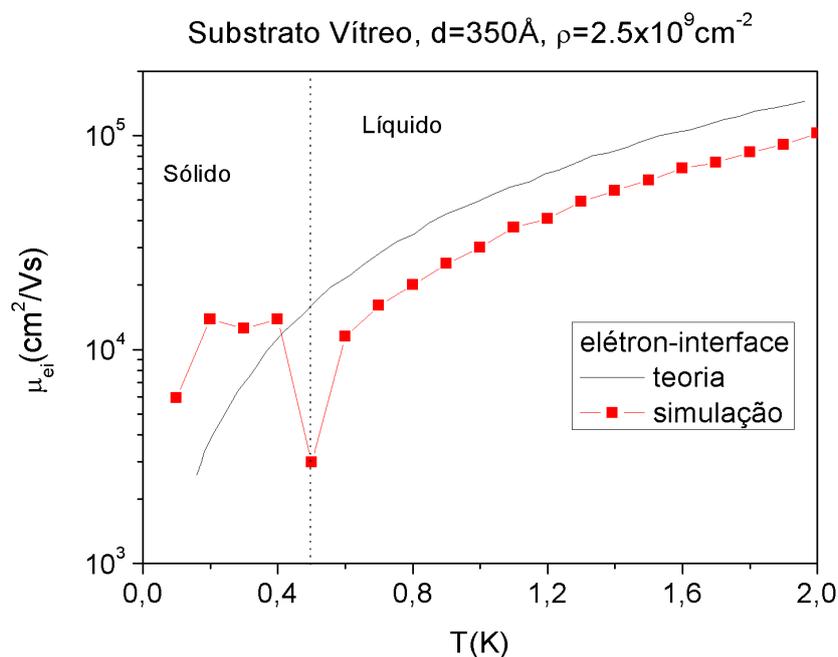


Figura 3.34: Curvas de mobilidade devida à interação elétron-defeitos da interface para um sistema de elétrons de densidade  $\rho = 2.5 \times 10^9 \text{cm}^{-2}$  sobre filme de hélio de espessura  $d = 350\text{\AA}$ . A linha contínua é a curva teórica extraída de<sup>3</sup> e os quadrados representam nossos resultados.

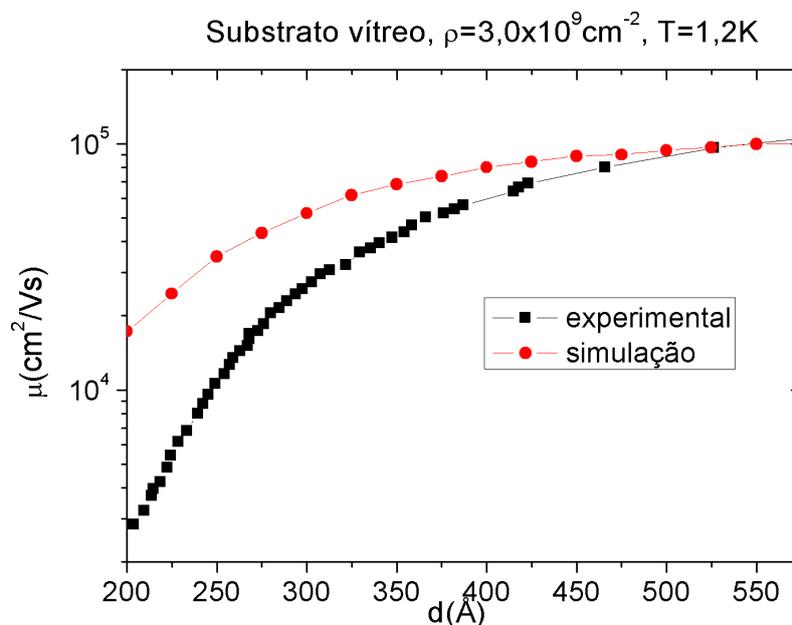


Figura 3.35: Curvas de mobilidade como função de espessura de filme hélio para um sistema de elétrons de densidade  $\rho = 3 \times 10^9 \text{cm}^{-2}$  a uma temperatura de  $T = 1,2\text{K}$ . Os quadrados são resultados experimentais extraídos de<sup>4</sup> e os círculos representam nossos resultados.

## 4 *Conclusão e Considerações Finais*

Neste trabalho utilizamos o método de *Soma de Ewald* para simular, por *Dinâmica Molecular*, as interações de sistemas bidimensionais de elétrons sobre filme de hélio de espessura  $d$  variável adsorvido em substrato criogênico. O limite  $d \rightarrow 0$ , em que os efeitos do substrato tornam-se desprezíveis, foi tomado e algumas propriedades foram calculadas e comparadas com a literatura existente. A dependência das propriedades físicas com a espessura do filme, o tipo de substrato e a temperatura foi estudada através do cálculo da função de correlação de pares, fator de estrutura estático, fator de estrutura dinâmico e curvas de dispersão. Pudemos concluir que o aumento da espessura do filme de hélio acarreta um aumento da temperatura de fusão do sistema e que o aumento da constante dielétrica do substrato diminuiu a temperatura de fusão no caso de filmes finos. Acompanhamos a variação do modo de vibração de plasma, obtido através do cálculo do fator de estrutura dinâmico, do sistema eletrônico bidimensional sobre filme de hélio para várias espessuras, bem como para três tipos de substratos: vidro, pmma e neônio.

O cálculo computacional do fator de estrutura dinâmico através da função de correlação do operador densidade, apesar de já existir na literatura para o sistema bidimensional de elétrons sobre hélio volumétrico, neste trabalho foi realizado para filmes de hélio de espessura variável.

Utilizamos o fator de estrutura dinâmico para calcular a mobilidade eletrônica, que fornece informação sobre os mecanismos de espalhamento dos elétrons na superfície do filme de hélio, e introduzimos, assim, de forma original, o efeito de muitos corpos no cálculo de mobilidade. Nossos resultados mostraram uma queda abrupta no cálculo da mobilidade para um sistema de elétrons de densidade  $\rho = 2.5 \times 10^9 \text{cm}^{-2}$  sobre filme de hélio de espessura  $d = 350 \text{Å}$  e substrato de vidro para temperatura próxima à temperatura de fusão.

Como proposta para trabalhos futuros podemos citar:

- Um estudo da dependência da mobilidade eletrônica com a temperatura de fusão;
- Simulação e estudo das propriedades estruturais e dinâmicas de canais quase-unidimensionais (fio de Wigner<sup>51</sup>) de elétrons sobre filme de hélio com confinamento lateral por

um potencial tipo "parede-dura".

## APÊNDICE A – Soma de Ewald

A técnica de *Soma de Ewald* é utilizada no cálculo de potenciais cujas interações são de longo-alcance, como as interações Coulumbianas. Esta técnica consiste na divisão do potencial em duas partes distintas; a primeira considera somas no espaço real e a segunda considera somas no espaço recíproco. Deste modo as somas tornam-se condicionalmente convergentes. Apresentamos a seguir o método da *Soma de Ewald* aplicado a dois sistemas de baixa-dimensionalidade: o sistema de elétrons sobre hélio volumétrico e o sistema de elétrons sobre filme de hélio adsorvido em um substrato.

### A.1 Soma de Ewald para um Sistema de Elétrons sobre Hélio Volumétrico

O potencial de interação elétron-elétron  $U_{ee}$  para um sistema de elétrons sobre hélio volumétrico é definido não somente pelas interações entre os elétrons da caixa de simulação, mas também pelas interações com os *elétrons-imagem*. Esta é a chamada *condição periódica de contorno*, utilizada para eliminar efeitos de borda. Assim, podemos definir  $U_{ee}$  como:

$$\begin{aligned} U_{ee} &= \frac{e^2}{2k} \left( \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \sum_{m_x=-\infty}^{\infty} \sum_{m_y=-\infty}^{\infty} \right)' \frac{1}{|\vec{r}_{ij} + m_x L_x \hat{x} + m_y L_y \hat{y}|}, \\ &= \frac{e^2}{2k} \left( \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \sum_{m_x=-\infty}^{\infty} \sum_{m_y=-\infty}^{\infty} \right)' \frac{1}{|\vec{r}_{ij} + \vec{\xi}|}, \end{aligned} \quad (\text{A.1})$$

sendo  $e$  a carga do elétron,  $k = 1$  em (CGS) ou  $k = 4\pi\epsilon_0$  em (MKS) e  $\vec{\xi} = m_x L_x \hat{x} + m_y L_y \hat{y}$ , onde  $L_x$  e  $L_y$  são as laterais da caixa de simulação. Note que na equação (A.1), o índice  $'$  indica que  $i \neq j$  para  $m_x = m_y = 0$ . A notação  $\vec{r}_{ij}$  é utilizada para indicar  $(\vec{r}_i - \vec{r}_j)$ .

Para os cálculos computacionais, é conveniente reescalar distâncias por algum parâmetro

$\sigma$ , que neste trabalho foi escolhido como  $\sigma = \sqrt{A}$ , sendo  $A = L_x L_y$ . Podemos, então, reescrever

$$U_{ee} = \frac{e^2}{2k\sigma} \left( \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \sum_{m_x=-\infty}^{\infty} \sum_{m_y=-\infty}^{\infty} \right)' \frac{1}{|\vec{r}'_{ij} + \vec{\xi}'|}, \quad (\text{A.2})$$

com  $\vec{r}'_{ij} = \vec{r}_{ij}/\sigma$ ,  $\vec{\xi}' = \vec{\xi}/\sigma = m_x f_x \hat{x} + m_y f_y \hat{y}$ , sendo  $f_x = L_x/\sigma$  e  $f_y = L_y/\sigma$ .

Definindo  $U_0 = e^2/k\sigma$ , temos

$$\begin{aligned} U_{ee} &= \frac{U_0}{2} \left( \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \sum_{m_x=-\infty}^{\infty} \sum_{m_y=-\infty}^{\infty} \right) \frac{1 - \delta_{i,j} \delta_{m_x,0} \delta_{m_y,0}}{|\vec{r}'_{ij} + \vec{\xi}'|} \\ &= \frac{U_0}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \sum_{m_x=-\infty}^{\infty} \sum_{m_y=-\infty}^{\infty} \frac{1}{|\vec{r}'_{ij} + \vec{\xi}'|} - \frac{U_0 N}{2} \lim_{\substack{m_x \rightarrow 0 \\ m_y \rightarrow 0}} \frac{1}{|\vec{\xi}'|}, \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

de modo a não existirem mais restrições nas somatórias.

Sabendo-se que <sup>52</sup>,

$$\Gamma(z) = \int_0^{\infty} e^{-t'} t'^{z-1} dt', \quad (\text{A.4})$$

e substituindo  $t' = x^2 t$ , a equação (A.4) fornece

$$\frac{1}{x^{2z}} = \frac{1}{\Gamma(z)} \int_0^{\infty} e^{-x^2 t} t^{z-1} dt. \quad (\text{A.5})$$

Para o caso em que  $x = |\vec{r}'_{ij} + \vec{\xi}'|$  e  $z = 1/2$ , temos

$$\begin{aligned} \frac{1}{|\vec{r}'_{ij} + \vec{\xi}'|} &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} e^{-|\vec{r}'_{ij} + \vec{\xi}'|^2 t} t^{-1/2} dt \\ &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left[ \int_0^{\alpha^2} e^{-|\vec{r}'_{ij} + \vec{\xi}'|^2 t} t^{-1/2} dt + \int_{\alpha^2}^{\infty} e^{-|\vec{r}'_{ij} + \vec{\xi}'|^2 t} t^{-1/2} dt \right], \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

de modo que a equação (A.3) torna-se

$$\begin{aligned} U_{ee} &= \frac{U_0}{2\sqrt{\pi}} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \sum_{m_x=-\infty}^{\infty} \sum_{m_y=-\infty}^{\infty} \left[ \int_0^{\alpha^2} e^{-|\vec{r}'_{ij} + \vec{\xi}'|^2 t} t^{-1/2} dt + \int_{\alpha^2}^{\infty} e^{-|\vec{r}'_{ij} + \vec{\xi}'|^2 t} t^{-1/2} dt \right] \\ &\quad - \frac{U_0 N}{2} \lim_{\substack{m_x \rightarrow 0 \\ m_y \rightarrow 0}} \frac{1}{|\vec{\xi}'|}. \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

Mas,

$$\begin{aligned} \sum_{m_x=-\infty}^{\infty} \sum_{m_y=-\infty}^{\infty} e^{-|\vec{r}'_{ij}+\vec{\xi}'|^2 t} &= \sum_{m_x=-\infty}^{\infty} e^{-(x'_{ij}+\xi'_x)^2 t} \sum_{m_y=-\infty}^{\infty} e^{-(y'_{ij}+\xi'_y)^2 t} \\ &= \sum_{m_x=-\infty}^{\infty} e^{-\left(\frac{x'_{ij}}{f_x}+m_x\right)^2 f_x^2 t} \sum_{m_y=-\infty}^{\infty} e^{-\left(\frac{y'_{ij}}{f_y}+m_y\right)^2 f_y^2 t}. \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

Utilizando a identidade <sup>53</sup>

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-(a+n)^2 t} = \left(\frac{\pi}{t}\right)^{1/2} \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-\pi^2 n^2/t} e^{2\pi i n a}, \quad (\text{A.9})$$

temos que a equação (A.8) passa a ser dada por

$$\begin{aligned} \sum_{m_x=-\infty}^{\infty} \sum_{m_y=-\infty}^{\infty} e^{-|\vec{r}'_{ij}+\vec{\xi}'|^2 t} &= \left(\frac{\pi}{f_x^2 t}\right)^{1/2} \sum_{m_x=-\infty}^{\infty} e^{\frac{\pi^2 m_x^2}{f_x^2 t}} e^{\frac{2\pi i m_x x'_{ij}}{f_x}} \\ &\quad \times \left(\frac{\pi}{f_y^2 t}\right)^{1/2} \sum_{m_y=-\infty}^{\infty} e^{\frac{\pi^2 m_y^2}{f_y^2 t}} e^{\frac{2\pi i m_y y'_{ij}}{f_y}} \\ &= \frac{\pi}{t f_x f_y} \sum_{M_x=-\infty}^{\infty} \sum_{M_y=-\infty}^{\infty} e^{-\pi^2 M^2/t} e^{2\pi i (M_x x'_{ij} + M_y y'_{ij})}, \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

onde  $M_x = m_x/f_x$ ,  $M_y = m_y/f_y$ ,  $\vec{M} = M_x \hat{x} + M_y \hat{y}$  e  $M^2 = M_x^2 + M_y^2$ .

Deste modo, a primeira integral da equação (A.7) passa a ser dada por

$$\begin{aligned} \sum_{m_x=-\infty}^{\infty} \sum_{m_y=-\infty}^{\infty} \int_0^{\alpha^2} e^{-|\vec{r}'_{ij}+\vec{\xi}'|^2 t} \frac{t^{-1/2}}{\sqrt{\pi}} dt &= \frac{\sqrt{\pi}}{f_x f_y} \left[ \left( \sum_{M_x=-\infty}^{\infty} \sum_{M_y=-\infty}^{\infty} \right)' e^{2\pi i \vec{M} \cdot \vec{r}'_{ij}} \right. \\ &\quad \times \left. \int_0^{\alpha^2} t^{-3/2} e^{-\pi^2 M^2/t} dt + \int_0^{\alpha^2} t^{-3/2} dt \right], \end{aligned} \quad (\text{A.11})$$

onde o índice ' indica a exclusão do termo  $M_x = M_y = 0$ .

Temos, então, que a expressão para o potencial de interação (A.7) passa a ser dada por

$$\begin{aligned} U_{ee} &= \frac{U_0 \sqrt{\pi}}{2 f_x f_y} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \left[ \left( \sum_{M_x=-\infty}^{\infty} \sum_{M_y=-\infty}^{\infty} \right)' e^{2\pi i \vec{M} \cdot \vec{r}'_{ij}} \int_0^{\alpha^2} t^{-3/2} e^{-\pi^2 M^2/t} dt \right. \\ &\quad \left. + \int_0^{\alpha^2} t^{-3/2} dt \right] + \frac{U_0}{2\sqrt{\pi}} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \sum_{m_x=-\infty}^{\infty} \sum_{m_y=-\infty}^{\infty} \int_{\alpha^2}^{\infty} e^{-|\vec{r}'_{ij}+\vec{\xi}'|^2 t} t^{-1/2} dt \\ &\quad - \frac{U_0 N}{2} \lim_{\substack{m_x \rightarrow 0 \\ m_y \rightarrow 0}} \frac{1}{|\vec{\xi}'|}. \end{aligned} \quad (\text{A.12})$$

Levando-se em conta que

$$\frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_x^\infty e^{-t^2} dt = \operatorname{erfc}(x) \quad (\text{A.13})$$

é a função erro complementar de  $x$  e que

$$\lim_{x \rightarrow 0} \operatorname{erfc}(x) = 1 - \frac{2x}{\sqrt{\pi}}, \quad (\text{A.14})$$

temos, então, a equação (A.12) dada por

$$\begin{aligned} U_{ee} = & \frac{U_0}{2f_x f_y} \left( \sum_{M_x=-\infty}^{\infty} \sum_{M_y=-\infty}^{\infty} \right)' \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N e^{2\pi i \vec{M} \cdot \vec{r}_{ij}} + \frac{U_0 N^2 \sqrt{\pi}}{2f_x f_y} \int_0^{\alpha^2} t^{-3/2} dt \\ & + \frac{U_0}{2} \left( \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \right)' \sum_{m_x=-\infty}^{\infty} \sum_{m_y=-\infty}^{\infty} \frac{\operatorname{erfc}(\alpha |\vec{r}_{ij} + \vec{\xi}'|)}{|\vec{r}_{ij} + \vec{\xi}'|} - \frac{U_0 N \alpha}{\sqrt{\pi}} \\ & + \frac{U_0 N}{2} \left( \sum_{m_x=-\infty}^{\infty} \sum_{m_y=-\infty}^{\infty} \right)' \frac{\operatorname{erfc}(\alpha |\vec{\xi}'|)}{|\vec{\xi}'|}. \end{aligned} \quad (\text{A.15})$$

Para manter a neutralidade e estabilidade do sistema, precisamos considerar a presença de um fundo neutralizador positivo. Assim, o potencial de interação  $U$  do sistema eletrônico sobre hélio volumétrico é dada por:

$$U = U_{ee} + U_f, \quad (\text{A.16})$$

onde  $U_f = U_{ef} + U_{ff}$ , sendo que  $U_{ef}$  representa o potencial de interação dos elétrons com o fundo neutralizador e  $U_{ff}$  o potencial de interação do fundo neutralizador com ele mesmo. Assim, temos que o potencial de interação dos elétrons com o fundo neutralizador é dado por

$$U_{ef} = - \sum_{i=1}^N e \int d\vec{r} \frac{\rho_f(r)}{|\vec{r} - \vec{r}_i|}, \quad (\text{A.17})$$

sendo  $\rho_f(r) = \frac{Ne}{L_x L_y} = \frac{Ne}{\sigma^2 f_x f_y}$ . Supondo  $d\vec{r} = \sigma^2 d\vec{x}'$ , temos que o potencial de interação (A.17) pode ser reescrito como

$$U_{ef} = - \frac{N^2 U_0}{f_x f_y} \int \frac{d\vec{x}'}{|\vec{x}'|}. \quad (\text{A.18})$$

Temos, também, uma interação fundo neutralizador com ele mesmo dada por

$$\begin{aligned} U_{ff} &= \frac{1}{2} \int \int d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \frac{\rho_f(r_1) \rho_f(r_2)}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \\ &= \frac{N^2 e^2}{2L_x^2 L_y^2} \int \int \frac{d\vec{r}_1 d\vec{r}_2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}. \end{aligned} \quad (\text{A.19})$$

Supondo  $\vec{x} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$ ,  $\vec{y} = (\vec{r}_1 + \vec{r}_2)/2$  e tendo em vista que o jacobiano desta transformação

é unitário, podemos escrever  $d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 = d\vec{x}d\vec{y}$  e a equação (A.19) passa a ser dada como

$$\begin{aligned} U_{ff} &= \frac{N^2 e^2}{2L_x^2 L_y^2} \int \int \frac{d\vec{x}d\vec{y}}{|\vec{x}|} \\ &= \frac{N^2 e^2}{2L_x L_y} \int \frac{d\vec{x}}{|\vec{x}|} \\ &= \frac{N^2 U_0}{2f_x f_y} \int \frac{d\vec{x}'}{|\vec{x}'|}, \end{aligned} \quad (\text{A.20})$$

com  $d\vec{x} = \sigma^2 d\vec{x}'$ . Temos, então, que a contribuição total do fundo neutralizador é

$$U_f = -\frac{N^2 U_0}{2f_x f_y} \int \frac{d\vec{x}'}{|\vec{x}'|}. \quad (\text{A.21})$$

Da equação (A.5), temos que

$$\begin{aligned} \frac{1}{|\vec{x}'|} &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty e^{-|\vec{x}'|^2 t} t^{-1/2} dt \\ &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left[ \int_0^{\alpha^2} e^{-|\vec{x}'|^2 t} t^{-1/2} dt + \int_{\alpha^2}^\infty e^{-|\vec{x}'|^2 t} t^{-1/2} dt \right]. \end{aligned} \quad (\text{A.22})$$

Temos, então, que

$$U_f = -\frac{N^2 U_0}{2f_x f_y} \int d\vec{x}' \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left[ \int_0^{\alpha^2} e^{-|\vec{x}'|^2 t} t^{-1/2} dt + \int_{\alpha^2}^\infty e^{-|\vec{x}'|^2 t} t^{-1/2} dt \right]. \quad (\text{A.23})$$

Supondo,

$$\begin{aligned} I &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\alpha^2} t^{-1/2} dt \int e^{-|\vec{x}'|^2 t} d\vec{x}' \\ &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\alpha^2} t^{-1/2} dt \int 2\pi r' e^{-r'^2 t} dr' \\ &= \sqrt{\pi} \int_0^{\alpha^2} t^{-3/2} dt, \end{aligned} \quad (\text{A.24})$$

e da mesma forma,

$$\begin{aligned} II &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{\alpha^2}^\infty t^{-1/2} dt \int e^{-|\vec{x}'|^2 t} d\vec{x}' \\ &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{\alpha^2}^\infty t^{-1/2} dt \int 2\pi r' e^{-r'^2 t} dr' \\ &= \sqrt{\pi} \int_{\alpha^2}^\infty t^{-3/2} dt \\ &= \frac{2\sqrt{\pi}}{\alpha}, \end{aligned} \quad (\text{A.25})$$

temos que a equação (A.23) passa a ser dada por

$$U_f = -\frac{U_0 N^2 \sqrt{\pi}}{2f_x f_y} \int_0^{\alpha^2} t^{-3/2} dt - \frac{U_0 N^2 \sqrt{\pi}}{\alpha f_x f_y}. \quad (\text{A.26})$$

Note que a inserção do termo neutralizador afeta apenas o cálculo da energia e não o da força, visto que não há dependência das posições dos elétrons.

O primeiro termo da equação (A.26) cancela o segundo termo da equação (A.15), de modo que a equação (A.16) passa a ser reescrita como

$$\begin{aligned} U &= \frac{U_0}{2f_x f_y} \left( \sum_{M_x=-\infty}^{\infty} \sum_{M_y=-\infty}^{\infty} \right)' \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N e^{2\pi i \vec{M} \cdot \vec{r}_{ij}} \\ &+ \frac{U_0}{2} \left( \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \right)' \sum_{m_x=-\infty}^{\infty} \sum_{m_y=-\infty}^{\infty} \frac{\text{erfc}(\alpha |\vec{r}_{ij} + \vec{\xi}'|)}{|\vec{r}_{ij} + \vec{\xi}'|} - \frac{U_0 N \alpha}{\sqrt{\pi}} \\ &+ \frac{U_0 N}{2} \left( \sum_{m_x=-\infty}^{\infty} \sum_{m_y=-\infty}^{\infty} \right)' \frac{\text{erfc}(\alpha |\vec{\xi}'|)}{|\vec{\xi}'|} - \frac{U_0 N^2 \sqrt{\pi}}{\alpha f_x f_y}. \end{aligned} \quad (\text{A.27})$$

## A.2 Soma de Ewald para um Sistema Elétrons sobre Filme de Hélio Adsorvido em Substrato

O potencial de interação elétron-elétron  $U_{ee}$  de um sistema de elétrons sobre filme de hélio adsorvido em substrato é dado por

$$U_{ee} = \frac{e^2}{2} \left( \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \right)' \left\{ \frac{1}{|\vec{r}_{ij}|} - \frac{\delta}{[|\vec{r}_{ij}|^2 + (2d)^2]^{1/2}} \right\}, \quad (\text{A.28})$$

sendo  $\vec{r}_{ij} = \vec{r}_i - \vec{r}_j$  (vetores no plano  $xy$ ),  $d$  a espessura do filme de hélio e  $\delta = \frac{\epsilon-1}{\epsilon+1}$ , onde  $\epsilon$  é a constante dielétrica do substrato (a constante dielétrica do hélio foi considerada igual a um).

Para eliminar os efeitos de borda, consideramos as condições periódicas de contorno, de modo que sistemas idênticos ao original repetem-se nas direções  $x$  e  $y$ . Assim,

$$\begin{aligned} U_{ee} &= \frac{e}{2} \left( \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \sum_{m_x=-\infty}^{\infty} \sum_{m_y=-\infty}^{\infty} \right)' \left\{ \frac{1}{|\vec{r}_{ij} + m_x L_x \hat{x} + m_y L_y \hat{y}|} \right. \\ &\quad \left. - \frac{\delta}{[|\vec{r}_{ij} + m_x L_x \hat{x} + m_y L_y \hat{y}|^2 + (2d)^2]^{1/2}} \right\}, \end{aligned} \quad (\text{A.29})$$

sendo  $L_x$  e  $L_y$  as dimensões laterais da caixa de simulação em que os elétrons estão confinados. O índice  $'$  exclui os termos  $i = j$  quando  $m_x = m_y = 0$ .

Reescalando distâncias por  $\sigma = \sqrt{A}$ , sendo  $A = L_x L_y$ , tal que  $\vec{r}' = \vec{r}/\sigma$ ,  $d' = d/\sigma$ ,  $f_x = L_x/\sigma$ ,  $f_y = L_y/\sigma$ , temos

$$U_{ee} = \frac{e}{2\sigma} \left( \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \sum_{m_x=-\infty}^{\infty} \sum_{m_y=-\infty}^{\infty} \right)' \left\{ \frac{1}{|\vec{r}'_{ij} + m_x f_x \hat{x} + m_y f_y \hat{y}|} - \frac{\delta}{\left[ |\vec{r}'_{ij} + m_x f_x \hat{x} + m_y f_y \hat{y}|^2 + (2d')^2 \right]^{1/2}} \right\}. \quad (\text{A.30})$$

Definindo  $U_0 = e^2/\sigma$  e  $\vec{\xi}' = m_x f_x \hat{x} + m_y f_y \hat{y}$ , temos

$$\begin{aligned} U_{ee} &= \frac{U_0}{2} \left( \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \sum_{m_x=-\infty}^{\infty} \sum_{m_y=-\infty}^{\infty} \right)' \left\{ \frac{1}{|\vec{r}'_{ij} + \vec{\xi}'|} - \frac{\delta}{\left[ |\vec{r}'_{ij} + \vec{\xi}'|^2 + (2d')^2 \right]^{1/2}} \right\} \\ &= \frac{U_0}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \sum_{m_x=-\infty}^{\infty} \sum_{m_y=-\infty}^{\infty} \left\{ \frac{1}{|\vec{r}'_{ij} + \vec{\xi}'|} - \frac{\delta}{\left[ |\vec{r}'_{ij} + \vec{\xi}'|^2 + (2d')^2 \right]^{1/2}} \right\} \\ &= \frac{U_0 N}{2} \lim_{\substack{m_x \rightarrow 0 \\ m_y \rightarrow 0}} \left\{ \frac{1}{|\vec{\xi}'|} - \frac{\delta}{\left[ |\vec{\xi}'|^2 + (2d')^2 \right]^{1/2}} \right\}. \end{aligned} \quad (\text{A.31})$$

Utilizando a identidade (A.5) podemos calcular

$$\frac{1}{|\vec{r}'_{ij} + \vec{\xi}'|} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left[ \int_0^{\alpha^2} t^{-1/2} e^{-|\vec{r}'_{ij} + \vec{\xi}'|^2 t} dt + \int_{\alpha^2}^{\infty} t^{-1/2} e^{-|\vec{r}'_{ij} + \vec{\xi}'|^2 t} dt \right] \quad (\text{A.32})$$

e também

$$\frac{1}{\left[ |\vec{r}'_{ij} + \vec{\xi}'|^2 + (2d')^2 \right]^{1/2}} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left[ \int_0^{\alpha^2} t^{-1/2} e^{-|\vec{r}'_{ij} + \vec{\xi}'|^2 t} e^{-(2d')^2 t} dt + \int_{\alpha^2}^{\infty} t^{-1/2} e^{-|\vec{r}'_{ij} + \vec{\xi}'|^2 t} e^{-(2d')^2 t} dt \right], \quad (\text{A.33})$$

de modo que a equação (A.31) pode ser reescrita como

$$\begin{aligned} U_{ee} &= \frac{U_0}{2\sqrt{\pi}} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \sum_{m_x=-\infty}^{\infty} \sum_{m_y=-\infty}^{\infty} \left\{ \left[ \int_0^{\alpha^2} t^{-1/2} e^{-|\vec{r}'_{ij} + \vec{\xi}'|^2 t} dt + \int_{\alpha^2}^{\infty} t^{-1/2} e^{-|\vec{r}'_{ij} + \vec{\xi}'|^2 t} dt \right] \right. \\ &\quad \left. - \delta \left[ \int_0^{\alpha^2} t^{-1/2} e^{-|\vec{r}'_{ij} + \vec{\xi}'|^2 t} e^{-(2d')^2 t} dt + \int_{\alpha^2}^{\infty} t^{-1/2} e^{-|\vec{r}'_{ij} + \vec{\xi}'|^2 t} e^{-(2d')^2 t} dt \right] \right\} \\ &= \frac{U_0 N}{2} \lim_{\substack{m_x \rightarrow 0 \\ m_y \rightarrow 0}} \left\{ \frac{1}{|\vec{\xi}'|} - \frac{\delta}{\left[ |\vec{\xi}'|^2 + (2d')^2 \right]^{1/2}} \right\}. \end{aligned} \quad (\text{A.34})$$

Utilizando a identidade (A.9) podemos escrever

$$\sum_{m_x=-\infty}^{\infty} \sum_{m_y=-\infty}^{\infty} e^{-|\vec{r}'_{ij} + \vec{\xi}'|^2 t} = \frac{\pi}{t f_x f_y} \sum_{M_x=-\infty}^{\infty} \sum_{M_y=-\infty}^{\infty} e^{-\pi^2 M^2 / t} e^{2\pi i \vec{M} \cdot \vec{r}'_{ij}} \quad (\text{A.35})$$

e também

$$\sum_{m_x=-\infty}^{\infty} \sum_{m_y=-\infty}^{\infty} e^{-|\vec{r}'_{ij} + \vec{\xi}'|^2 t} e^{-(2d')^2 t} = \frac{\pi}{t f_x f_y} \sum_{M_x=-\infty}^{\infty} \sum_{M_y=-\infty}^{\infty} e^{-\pi^2 M^2 / t} e^{2\pi i \vec{M} \cdot \vec{r}'_{ij}} e^{-(2d')^2 t}, \quad (\text{A.36})$$

onde  $M_x = m_x / f_x$ ,  $M_y = m_y / f_y$  e  $\vec{M} = M_x \hat{x} + M_y \hat{y}$ .

Temos, assim, que

$$\begin{aligned} \sum_{m_x=-\infty}^{\infty} \sum_{m_y=-\infty}^{\infty} \int_0^{\alpha^2} e^{-|\vec{r}'_{ij} + \vec{\xi}'|^2 t} t^{-1/2} dt &= \frac{\pi}{f_x f_y} \sum_{M_x=-\infty}^{\infty} \sum_{M_y=-\infty}^{\infty} e^{2\pi i \vec{M} \cdot \vec{r}'_{ij}} \int_0^{\alpha^2} t^{-3/2} e^{-\pi^2 M^2 / t} dt \\ &= \frac{\pi}{f_x f_y} \left( \sum_{M_x=-\infty}^{\infty} \sum_{M_y=-\infty}^{\infty} \right)' e^{2\pi i \vec{M} \cdot \vec{r}'_{ij}} \int_0^{\alpha^2} t^{-3/2} e^{-\pi^2 M^2 / t} dt \\ &\quad + \frac{\pi}{f_x f_y} \int_0^{\alpha^2} t^{-3/2} dt \end{aligned} \quad (\text{A.37})$$

e

$$\begin{aligned} \sum_{m_x=-\infty}^{\infty} \sum_{m_y=-\infty}^{\infty} \int_0^{\alpha^2} e^{-|\vec{r}'_{ij} + \vec{\xi}'|^2 t} t^{-1/2} e^{-(2d')^2 t} dt &= \frac{\pi}{f_x f_y} \sum_{M_x=-\infty}^{\infty} \sum_{M_y=-\infty}^{\infty} e^{2\pi i \vec{M} \cdot \vec{r}'_{ij}} \\ &\quad \times \int_0^{\alpha^2} t^{-3/2} e^{-\pi^2 M^2 / t} e^{-(2d')^2 t} dt \\ &= \frac{\pi}{f_x f_y} \left( \sum_{M_x=-\infty}^{\infty} \sum_{M_y=-\infty}^{\infty} \right)' e^{2\pi i \vec{M} \cdot \vec{r}'_{ij}} \\ &\quad \times \int_0^{\alpha^2} t^{-3/2} e^{-\pi^2 M^2 / t} e^{-(2d')^2 t} dt \\ &\quad + \frac{\pi}{f_x f_y} \int_0^{\alpha^2} t^{-3/2} e^{-(2d')^2 t} dt. \end{aligned} \quad (\text{A.38})$$

onde o índice ', nas equações (A.37) e (A.38), indica a exclusão do termo  $M_x = M_y = 0$ . A

equação (A.34) é, então, reescrita como

$$\begin{aligned}
U_{ee} = & \frac{U_0\sqrt{\pi}}{2f_x f_y} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \left[ \left( \sum_{M_x=-\infty}^{\infty} \sum_{M_y=-\infty}^{\infty} \right)' e^{2\pi i \vec{M} \cdot \vec{r}'_{ij}} \int_0^{\alpha^2} t^{-3/2} e^{-\pi^2 M^2/t} dt + \int_0^{\alpha^2} t^{-3/2} dt \right] \\
& + \frac{U_0}{2\sqrt{\pi}} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \sum_{m_x=-\infty}^{\infty} \sum_{m_y=-\infty}^{\infty} \int_{\alpha^2}^{\infty} t^{-1/2} e^{-|\vec{r}'_{ij} + \vec{\xi}'|^2 t} dt \\
& - \frac{U_0 \delta \sqrt{\pi}}{2f_x f_y} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \left[ \left( \sum_{M_x=-\infty}^{\infty} \sum_{M_y=-\infty}^{\infty} \right)' e^{2\pi i \vec{M} \cdot \vec{r}'_{ij}} \int_0^{\alpha^2} t^{-3/2} e^{-\pi^2 M^2/t} e^{-(2d')^2 t} dt \right. \\
& \left. + \int_0^{\alpha^2} t^{-3/2} e^{-(2d')^2 t} dt \right] \\
& - \frac{U_0 \delta}{2\sqrt{\pi}} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \sum_{m_x=-\infty}^{\infty} \sum_{m_y=-\infty}^{\infty} \int_{\alpha^2}^{\infty} t^{-1/2} e^{-|\vec{r}'_{ij} + \vec{\xi}'|^2 t} e^{-(2d')^2 t} dt \\
& - \frac{U_0 N}{2} \lim_{\substack{m_x \rightarrow 0 \\ m_y \rightarrow 0}} \left\{ \frac{1}{|\vec{\xi}'|} - \frac{\delta}{\left[ |\vec{\xi}'|^2 + (2d')^2 \right]^{1/2}} \right\}. \tag{A.39}
\end{aligned}$$

Resolvendo a primeira integral da equação (A.39), temos

$$\int_0^{\alpha^2} t^{-3/2} e^{-\pi^2 M^2/t} dt = \frac{1}{|\vec{M}| \sqrt{\pi}} \operatorname{erfc} \left( \frac{\pi |\vec{M}|}{\alpha} \right). \tag{A.40}$$

A quarta integral da equação (A.39) nos dá

$$\int_0^{\alpha^2} t^{-3/2} e^{-\pi^2 M^2/t} e^{-(2d')^2 t} dt = 2 \int_{1/\alpha}^{\infty} e^{-\left[ (\pi M u)^2 + \left( \frac{2d'}{u} \right)^2 \right]} du. \tag{A.41}$$

Levando-se em conta que <sup>54</sup>

$$\int e^{-\left( a^2 x^2 + \frac{b^2}{x^2} \right)} dx = \frac{\sqrt{\pi}}{4a} \left[ e^{2ab} \operatorname{erfc} \left( ax + \frac{b}{x} \right) + e^{-2ab} \operatorname{erfc} \left( ax - \frac{b}{x} \right) \right] + \text{const}, \quad \text{para } a \neq 0, \tag{A.42}$$

a integral (A.41) torna-se

$$\begin{aligned}
\int_0^{\alpha^2} t^{-3/2} e^{-\pi^2 M^2/t} e^{-(2d')^2 t} dt &= \frac{1}{2|\vec{M}| \sqrt{\pi}} \left[ e^{4\pi |\vec{M}| d'} \operatorname{erfc} \left( \frac{\pi |\vec{M}|}{\alpha} + 2d' \alpha \right) \right. \\
&\left. + e^{-4\pi |\vec{M}| d'} \operatorname{erfc} \left( \frac{\pi |\vec{M}|}{\alpha} - 2d' \alpha \right) \right]. \tag{A.43}
\end{aligned}$$

A terceira integral da equação (A.39) é calculada

$$\int_{\alpha^2}^{\infty} t^{-1/2} e^{-|\vec{r}'_{ij} + \vec{\xi}'|^2 t} dt = \frac{\sqrt{\pi}}{|\vec{r}'_{ij} + \vec{\xi}'|} \operatorname{erfc} \left( \alpha |\vec{r}'_{ij} + \vec{\xi}'| \right). \quad (\text{A.44})$$

A sexta integral da equação (A.39) nos dá

$$\int_{\alpha^2}^{\infty} t^{-1/2} e^{-|\vec{r}'_{ij} + \vec{\xi}'|^2 t} e^{-(2d')^2 t} dt = \frac{\sqrt{\pi}}{[|\vec{r}'_{ij} + \vec{\xi}'|^2 + (2d')^2]^{1/2}} \operatorname{erfc} \left[ \alpha \left( |\vec{r}'_{ij} + \vec{\xi}'|^2 + (2d')^2 \right)^{1/2} \right]. \quad (\text{A.45})$$

A equação (A.39) passa, então a ser dada por

$$\begin{aligned} U_{ee} = & \frac{U_0}{2f_x f_y} \left[ \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \left( \sum_{M_x=-\infty}^{\infty} \sum_{M_y=-\infty}^{\infty} \right)' e^{2\pi i \vec{M} \cdot \vec{r}'_{ij}} \frac{1}{|\vec{M}|} \operatorname{erfc} \left( \frac{\pi |\vec{M}|}{\alpha} \right) + N^2 \sqrt{\pi} \int_0^{\alpha^2} t^{-3/2} dt \right] \\ & + \frac{U_0}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \sum_{m_x=-\infty}^{\infty} \sum_{m_y=-\infty}^{\infty} \frac{1}{|\vec{r}'_{ij} + \vec{\xi}'|} \operatorname{erfc} \left( \alpha |\vec{r}'_{ij} + \vec{\xi}'| \right) \\ & - \frac{U_0 \delta}{4f_x f_y} \left\{ \left( \sum_{M_x=-\infty}^{\infty} \sum_{M_y=-\infty}^{\infty} \right)' \left[ e^{4\pi |\vec{M}| d'} \operatorname{erfc} \left( \frac{\pi |\vec{M}|}{\alpha} + 2d' \alpha \right) \right. \right. \\ & \left. \left. + e^{-4\pi |\vec{M}| d'} \operatorname{erfc} \left( \frac{\pi |\vec{M}|}{\alpha} - 2d' \alpha \right) \right] \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N e^{2\pi i \vec{M} \cdot \vec{r}'_{ij}} + 2\sqrt{\pi} N^2 \int_0^{\alpha^2} t^{-3/2} e^{-(2d')^2 t} dt \right\} \\ & - \frac{U_0 \delta}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \sum_{m_x=-\infty}^{\infty} \sum_{m_y=-\infty}^{\infty} \frac{1}{[|\vec{r}'_{ij} + \vec{\xi}'|^2 + (2d')^2]^{1/2}} \operatorname{erfc} \left[ \alpha \left( |\vec{r}'_{ij} + \vec{\xi}'|^2 + (2d')^2 \right)^{1/2} \right] \\ & - \frac{U_0 N}{2} \lim_{\substack{m_x \rightarrow 0 \\ m_y \rightarrow 0}} \left\{ \frac{1}{|\vec{\xi}'|} - \frac{\delta}{[|\vec{\xi}'|^2 + (2d')^2]^{1/2}} \right\}. \quad (\text{A.46}) \end{aligned}$$

Temos, porém, que

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \sum_{m_x=-\infty}^{\infty} \sum_{m_y=-\infty}^{\infty} \frac{1}{|\vec{r}'_{ij} + \vec{\xi}'|} \operatorname{erfc} \left( \alpha |\vec{r}'_{ij} + \vec{\xi}'| \right) &= \left( \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \right)' \sum_{m_x=-\infty}^{\infty} \sum_{m_y=-\infty}^{\infty} \frac{1}{|\vec{r}'_{ij} + \vec{\xi}'|} \\ &\times \operatorname{erfc} \left( \alpha |\vec{r}'_{ij} + \vec{\xi}'| \right) \\ &+ N \left( \sum_{m_x=-\infty}^{\infty} \sum_{m_y=-\infty}^{\infty} \right)' \frac{\operatorname{erfc} \left( \alpha |\vec{\xi}'| \right)}{|\vec{\xi}'|} \\ &+ N \lim_{\substack{m_x \rightarrow 0 \\ m_y \rightarrow 0}} \frac{\operatorname{erfc} \left( \alpha |\vec{\xi}'| \right)}{|\vec{\xi}'|}. \quad (\text{A.47}) \end{aligned}$$

Como

$$\lim_{x \rightarrow 0} = 1 - \frac{2x}{\sqrt{\pi}}, \quad (\text{A.48})$$

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \sum_{m_x=-\infty}^{\infty} \sum_{m_y=-\infty}^{\infty} \frac{1}{|\vec{r}'_{ij} + \vec{\xi}'|} \operatorname{erfc}(\alpha |\vec{r}'_{ij} + \vec{\xi}'|) &= \left( \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \right)' \sum_{m_x=-\infty}^{\infty} \sum_{m_y=-\infty}^{\infty} \frac{1}{|\vec{r}'_{ij} + \vec{\xi}'|} \\ &\times \operatorname{erfc}(\alpha |\vec{r}'_{ij} + \vec{\xi}'|) \\ &+ N \left( \sum_{m_x=-\infty}^{\infty} \sum_{m_y=-\infty}^{\infty} \right)' \frac{\operatorname{erfc}(\alpha |\vec{\xi}'|)}{|\vec{\xi}'|} \\ &+ N \lim_{\substack{m_x \rightarrow 0 \\ m_y \rightarrow 0}} \frac{1}{|\vec{\xi}'|} - \frac{2\alpha N}{\sqrt{\pi}}. \end{aligned} \quad (\text{A.49})$$

O potencial da equação (A.46) fica, então, como

$$\begin{aligned} U_{ee} &= \frac{U_0}{2f_x f_y} \left[ \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \left( \sum_{M_x=-\infty}^{\infty} \sum_{M_y=-\infty}^{\infty} \right)' e^{2\pi i \vec{M} \cdot \vec{r}'_{ij}} \frac{1}{|\vec{M}|} \operatorname{erfc} \left( \frac{\pi |\vec{M}|}{\alpha} \right) + N^2 \sqrt{\pi} \int_0^{\alpha^2} t^{-3/2} dt \right] \\ &- \frac{U_0 \delta}{4f_x f_y} \left\{ \left( \sum_{M_x=-\infty}^{\infty} \sum_{M_y=-\infty}^{\infty} \right)' \left[ e^{4\pi |\vec{M}| d'} \operatorname{erfc} \left( \frac{\pi |\vec{M}|}{\alpha} + 2d' \alpha \right) \right. \right. \\ &+ \left. \left. e^{-4\pi |\vec{M}| d'} \operatorname{erfc} \left( \frac{\pi |\vec{M}|}{\alpha} - 2d' \alpha \right) \right] \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N e^{2\pi i \vec{M} \cdot \vec{r}'_{ij}} + 2\sqrt{\pi} N^2 \int_0^{\alpha^2} t^{-3/2} e^{-(2d')^2 t} dt \right\} \\ &+ \frac{U_0}{2} \left( \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \right)' \sum_{m_x=-\infty}^{\infty} \sum_{m_y=-\infty}^{\infty} \frac{1}{|\vec{r}'_{ij} + \vec{\xi}'|} \operatorname{erfc}(\alpha |\vec{r}'_{ij} + \vec{\xi}'|) \\ &+ \frac{U_0 N}{2} \left( \sum_{m_x=-\infty}^{\infty} \sum_{m_y=-\infty}^{\infty} \right)' \frac{\operatorname{erfc}(\alpha |\vec{\xi}'|)}{|\vec{\xi}'|} - \frac{U_0 N \alpha}{\sqrt{\pi}} + \frac{U_0 N \delta}{4d} \\ &- \frac{U_0 \delta}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \sum_{m_x=-\infty}^{\infty} \sum_{m_y=-\infty}^{\infty} \frac{1}{\left[ |\vec{r}'_{ij} + \vec{\xi}'|^2 + (2d')^2 \right]^{1/2}} \operatorname{erfc} \left[ \alpha \left( |\vec{r}'_{ij} + \vec{\xi}'|^2 + (2d')^2 \right)^{1/2} \right]. \end{aligned} \quad (\text{A.50})$$

Para que o sistema seja eletricamente neutro, consideramos que este encontra-se imerso em um fundo neutralizador positivo uniforme. O potencial de interação  $U$  do sistema de elétrons sobre filme de hélio adsorvido em um substrato é, então, dado por

$$U = U_{ee} + U_f, \quad (\text{A.51})$$

onde  $U_f = U_{ef} + U_{ff}$ , sendo  $U_{ef}$  a interação dos elétrons com o fundo neutralizador e  $U_{ff}$  as

interações do fundo neutralizador com ele mesmo. Assim,

$$U_{ef} = - \sum_{i=1}^N \int e\rho_f \left[ \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}_i|} - \frac{\delta}{[|\vec{r} - \vec{r}_i|^2 + (2d)^2]^{1/2}} \right] d\vec{r}, \quad (\text{A.52})$$

com  $\rho = \frac{Ne}{L_x L_y}$ . Deste modo, temos que

$$\begin{aligned} U_{ef} &= - \frac{Ne^2}{L_x L_y} \sum_{i=1}^N \left[ \int \frac{d\vec{r}}{|\vec{r} - \vec{r}_i|} - \int \frac{\delta d\vec{r}}{[|\vec{r} - \vec{r}_i|^2 + (2d)^2]^{1/2}} \right] \\ &= - \frac{U_0 N}{f_x f_y} \sum_{i=1}^N \left[ \int \frac{d\vec{r}'}{|\vec{r}' - \vec{r}'_i|} - \int \frac{\delta d\vec{r}'}{[|\vec{r}' - \vec{r}'_i|^2 + (2d')^2]^{1/2}} \right]. \end{aligned} \quad (\text{A.53})$$

Substituindo  $\vec{x}' = \vec{r}' - \vec{r}'_i$  e  $d\vec{x}' = d\vec{r}'$ , temos

$$U_{ef} = - \frac{U_0 N^2}{f_x f_y} \left[ \int \frac{d\vec{x}'}{|\vec{x}'|} - \delta \int \frac{d\vec{x}'}{[|\vec{x}'|^2 + (2d')^2]^{1/2}} \right] \quad (\text{A.54})$$

E ainda,

$$\begin{aligned} U_{ff} &= \frac{1}{2} \int \int \frac{\rho_f(r_1)\rho_f(r_2)d\vec{r}_1 d\vec{r}_2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} - \frac{\delta}{2} \int \int \frac{\rho_f(r_1)\rho_f(r_2)d\vec{r}_1 d\vec{r}_2}{[|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|^2 + (2d)^2]^{1/2}} \\ &= \frac{N^2 e^2}{2L_x^2 L_y^2} \left[ \int \int \frac{d\vec{r}_1 d\vec{r}_2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} - \delta \int \int \frac{d\vec{r}_1 d\vec{r}_2}{[|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|^2 + (2d)^2]^{1/2}} \right] \\ &= \frac{U_0 N^2}{2f_x^2 f_y^2} \left[ \int \int \frac{d\vec{r}'_1 d\vec{r}'_2}{|\vec{r}'_1 - \vec{r}'_2|} - \delta \int \int \frac{d\vec{r}'_1 d\vec{r}'_2}{[|\vec{r}'_1 - \vec{r}'_2|^2 + (2d')^2]^{1/2}} \right]. \end{aligned} \quad (\text{A.55})$$

Efetuada a seguinte mudança de variáveis,  $\vec{x}' = \vec{r}'_1 - \vec{r}'_2$ ,  $\vec{y}' = \frac{\vec{r}'_1 + \vec{r}'_2}{2}$  e  $d\vec{x}' d\vec{y}' = d\vec{r}'_1 d\vec{r}'_2$ , temos

$$\begin{aligned} U_{ff} &= \frac{U_0 N^2}{2f_x^2 f_y^2} \left[ \int \int \frac{d\vec{x}' d\vec{y}'}{|\vec{x}'|} - \delta \int \int \frac{d\vec{x}' d\vec{y}'}{[|\vec{x}'|^2 + (2d')^2]^{1/2}} \right] \\ &= \frac{U_0 N^2}{2f_x f_y} \left[ \int \frac{d\vec{x}'}{|\vec{x}'|} - \delta \int \frac{d\vec{x}'}{[|\vec{x}'|^2 + (2d')^2]^{1/2}} \right]. \end{aligned} \quad (\text{A.56})$$

Temos, então, que o termo do potencial que depende da presença do fundo neutralizador é

dado por

$$U_f = -\frac{U_0 N^2}{2f_x f_y} \left[ \int \frac{d\vec{x}'}{|\vec{x}'|} - \delta \int \frac{d\vec{x}'}{[|\vec{x}'|^2 + (2d')^2]^{1/2}} \right]. \quad (\text{A.57})$$

A identidade (A.5) permite escrever

$$\begin{aligned} \frac{1}{|\vec{x}'|} &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty e^{-|\vec{x}'|^2 t} t^{-1/2} dt \\ &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left[ \int_0^{\alpha^2} e^{-|\vec{x}'|^2 t} t^{-1/2} dt + \int_{\alpha^2}^\infty e^{-|\vec{x}'|^2 t} t^{-1/2} dt \right] \end{aligned} \quad (\text{A.58})$$

e da mesma forma

$$\begin{aligned} \frac{1}{[|\vec{x}'|^2 + (2d')^2]^{1/2}} &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty e^{-(|\vec{x}'|^2 + (2d')^2)t} t^{-1/2} dt \\ &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left[ \int_0^{\alpha^2} e^{-(|\vec{x}'|^2 + (2d')^2)t} t^{-1/2} dt + \int_{\alpha^2}^\infty e^{-(|\vec{x}'|^2 + (2d')^2)t} t^{-1/2} dt \right]. \end{aligned} \quad (\text{A.59})$$

Tal que a equação (A.57) é reescrita como

$$\begin{aligned} U_f &= -\frac{U_0 N^2}{2\sqrt{\pi} f_x f_y} \left[ \int \int_0^{\alpha^2} e^{-|\vec{x}'|^2 t} t^{-1/2} dt d\vec{x}' + \int \int_{\alpha^2}^\infty e^{-|\vec{x}'|^2 t} t^{-1/2} dt d\vec{x}' \right. \\ &\quad \left. - \delta \int \int_0^{\alpha^2} e^{-(|\vec{x}'|^2 + (2d')^2)t} t^{-1/2} dt d\vec{x}' - \delta \int \int_{\alpha^2}^\infty e^{-(|\vec{x}'|^2 + (2d')^2)t} t^{-1/2} dt d\vec{x}' \right] \\ &= -\frac{U_0 N^2}{2f_x f_y} \left[ \sqrt{\pi} \int_0^{\alpha^2} t^{-3/2} dt + \frac{2\sqrt{\pi}}{\alpha} - \delta \sqrt{\pi} \int_0^{\alpha^2} t^{-3/2} e^{-(2d')^2 t} dt \right. \\ &\quad \left. - \frac{2\delta \sqrt{\pi} e^{-(2d'\alpha)^2}}{\alpha} - 4d' \delta \pi \text{erf}(2d'\alpha) + 4d' \delta \pi \right]. \end{aligned} \quad (\text{A.60})$$

Assim, a equação (A.51) do potencial de interação total do sistema de elétrons sobre filme

de hélio adsorvido em um substrato é dada por

$$\begin{aligned}
U = & \frac{U_0}{2f_x f_y} \left[ \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \left( \sum_{M_x=-\infty}^{\infty} \sum_{M_y=-\infty}^{\infty} \right)' e^{2\pi i \vec{M} \cdot \vec{r}'_{ij}} \frac{1}{|\vec{M}|} \operatorname{erfc} \left( \frac{\pi |\vec{M}|}{\alpha} \right) \right] \\
& - \frac{U_0 \delta}{4f_x f_y} \left\{ \left( \sum_{M_x=-\infty}^{\infty} \sum_{M_y=-\infty}^{\infty} \right)' \left[ e^{4\pi |\vec{M}| d'} \operatorname{erfc} \left( \frac{\pi |\vec{M}|}{\alpha} + 2d' \alpha \right) \right. \right. \\
& \left. \left. + e^{-4\pi |\vec{M}| d'} \operatorname{erfc} \left( \frac{\pi |\vec{M}|}{\alpha} - 2d' \alpha \right) \right] \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N e^{2\pi i \vec{M} \cdot \vec{r}'_{ij}} \right\} \\
& + \frac{U_0}{2} \left( \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \right)' \sum_{m_x=-\infty}^{\infty} \sum_{m_y=-\infty}^{\infty} \frac{1}{|\vec{r}'_{ij} + \vec{\xi}'|} \operatorname{erfc} \left( \alpha |\vec{r}'_{ij} + \vec{\xi}'| \right) \\
& + \frac{U_0 N}{2} \left( \sum_{m_x=-\infty}^{\infty} \sum_{m_y=-\infty}^{\infty} \right)' \frac{\operatorname{erfc} \left( \alpha |\vec{\xi}'| \right)}{|\vec{\xi}'|} \\
& - \frac{U_0 \delta}{2} \left( \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \right)' \sum_{m_x=-\infty}^{\infty} \sum_{m_y=-\infty}^{\infty} \frac{1}{\left[ |\vec{r}'_{ij} + \vec{\xi}'|^2 + (2d')^2 \right]^{1/2}} \operatorname{erfc} \left[ \alpha \left( |\vec{r}'_{ij} + \vec{\xi}'|^2 + (2d')^2 \right)^{1/2} \right] \\
& - \frac{U_0 \delta N}{2} \sum_{m_x=-\infty}^{\infty} \sum_{m_y=-\infty}^{\infty} \frac{1}{\left[ |\vec{\xi}'|^2 + (2d')^2 \right]^{1/2}} \operatorname{erfc} \left[ \alpha \left( |\vec{\xi}'|^2 + (2d')^2 \right)^{1/2} \right] \\
& - U_0 N \left( \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} - \frac{\delta}{4d} \right) - \frac{U_0 N^2}{f_x f_y} \left[ \frac{\sqrt{\pi}}{\alpha} - \frac{\delta \sqrt{\pi} e^{-(2d' \alpha)^2}}{\alpha} - 2d' \delta \pi \operatorname{erf}(2d' \alpha) + 2d' \delta \pi \right]. \quad (\text{A.61})
\end{aligned}$$

## *Referências Bibliográficas*

- 1 GOLDEN, K. I.; KALMAN, G.; WYNS, P. Response function and plasmon dispersion for strongly coupled coulomb liquids - 2-dimensional electron liquid. **Physical Review A**, v. 41, n. 12, p. 6940–6948, 1990.
- 2 JIANG, H. W.; DAHM, A. J. Mobility of electrons on helium films. **Japanese Journal of Applied Physics. Part 1-Regular Papers Short Notes & Review Papers**, v. 26, p. 745–746, 1987.
- 3 COIMBRA, D. et al. Surface electron mobility over a helium film from boltzmann and force-balance equations. **Physical Review B**, v. 74, n. 3, p. 035411, 2006.
- 4 HU, X. L.; CARMI, Y.; DAHM, A. J. Trapping of 2-dimensional electrons in substrate potentials. **Journal of Low Temperature Physics**, v. 89, n. 3-4, p. 625–628, 1992.
- 5 SOMMER, W. T. **The interaction of free electrons with liquid helium**. Tese (Ph D - Dept. of Physics, Stanford University), 1964.
- 6 GRIMES, C. C.; BROWN, T. R. Direct spectroscopic observation of electrons in image-potential states outside liquid-helium. **Physical Review Letters**, v. 32, n. 6, p. 280–283, 1974.
- 7 COLE, M. W.; COHEN, M. H. Image-potential-induced surface bands in insulators. **Physical Review Letters**, v. 23, n. 21, p. 1238, 1969.
- 8 COLE, M. W. Properties of image-potential-induced surface states of insulators. **Physical Review B**, v. 2, n. 10, p. 4239, 1970.
- 9 SHIKIN, V. B. Motion of helium ions near a vapor-liquid surface. **Soviet Physics JETP-USSR**, v. 31, n. 5, p. 936, 1970.
- 10 BROWN, T. R.; GRIMES, C. C. Observation of cyclotron-resonance in surface-bound electrons on liquid-helium. **Physical Review Letters**, v. 29, n. 18, p. 1233, 1972.
- 11 COLE, M. W. Electronic surface states of liquid-helium. **Reviews of Modern Physics**, v. 46, n. 3, p. 451–464, 1974.
- 12 CRANDALL, R. S. Properties of surface-state electrons on liquid-helium. **Surface Science**, v. 58, n. 1, p. 266–282, 1976.
- 13 GANN, R. C.; CHAKRAVARTY, S.; CHESTER, G. V. Monte-carlo simulation of the classical 2-dimensional one-component plasma. **Physical Review B**, v. 20, n. 1, p. 326–344, 1979.
- 14 DEVREESE, J. T.; PEETERS, F. M. **The physics of the two-dimensional electron gas**. New York: Plenum Press, 1987.

- 15 ANDREI, E. Y. **Two-dimensional electron systems on helium and other cryogenic substrates**. Dordrecht ; Boston: Kluwer Academic Publishers, 1997. (Physics and Chemistry of Materials with Low-Dimensional Structures).
- 16 CUNHA, J. A. R.; CANDIDO, L. Melting temperature of screened wigner crystal on helium films by molecular dynamics. **Physical Review B**, v. 71, n. 7, p. 073403, 2005.
- 17 HANSEN, J. P.; KLEIN, M. L. Dynamical structure factor  $s(q, \omega)$  of rare-gas solids. **Physical Review B**, v. 13, n. 2, p. 878, 1976.
- 18 LEVESQUE, D.; VERLET, L.; KURKIJAR, J. Computer experiments on classical fluids .4. transport properties and time-correlation functions of lennard-jones liquid near its triple point. **Physical Review A**, v. 7, n. 5, p. 1690–1700, 1973.
- 19 HANSEN, J. P.; POLLOCK, E. L.; MCDONALD, I. R. Velocity autocorrelation function and dynamical structure factor of classical one-component plasma. **Physical Review Letters**, v. 32, n. 6, p. 277–280, 1974.
- 20 HANSEN, J. P.; MCDONALD, I. R. Microscopic simulation of a strongly coupled hydrogen plasma. **Physical Review A**, v. 23, n. 4, p. 2041–2059, 1981.
- 21 KANEKO, Y.; UEDA, A. Dynamical structure factor of alpha-agi. **Physical Review B**, v. 39, n. 14, p. 10281–10287, 1989.
- 22 TOTSUJI, H.; KAKEYA, H. Longitudinal properties of 2-dimensional classical electron liquids. **Physics Letters A**, v. 73, n. 1, p. 23–25, 1979.
- 23 TOTSUJI, H.; KAKEYA, H. Dynamical properties of two-dimensional classical electron liquids. **Physical Review A**, v. 22, n. 3, p. 1220–1228, 1980.
- 24 TOTSUJI, H.; FUNAHASHI, T. Dynamical fluctuation spectra of two-dimensional classical electron liquids in magnetic-fields. **Physics Letters A**, v. 84, n. 4, p. 185–189, 1981.
- 25 RANGANATHAN, S.; JOHNSON, R. E. Effect of magnetic field on collective modes of two-dimensional electron liquids: A molecular dynamics study. **Physical Review B**, v. 71, n. 3, p. 035339, 2005.
- 26 SWOPE, W. C. et al. A computer-simulation method for the calculation of equilibrium-constants for the formation of physical clusters of molecules - application to small water clusters. **Journal of Chemical Physics**, v. 76, n. 1, p. 637–649, 1982.
- 27 HAILE, J. M. **Molecular dynamics simulation: elementary methods**. New York: John Wiley & Sons, 1992.
- 28 HANSEN, J. P.; MCDONALD, I. R. **Theory of simple liquids**. 2nd. ed. London ; Orlando: Academic Press, 1986.
- 29 YARNELL, J. L. et al. Structure factor and radial-distribution function for liquid argon at 85degreesk. **Physical Review A**, v. 7, n. 6, p. 2130–2144, 1973.
- 30 SJOGREN, L. Collective properties of a 2-dimensional classical electron liquid. **Journal of Physics C-Solid State Physics**, v. 13, n. 30, p. L841–L846, 1980.

- 31 MONARKHA, Y. P.; TESKE, E.; WYDER, P. Quantum magnetotransport in two-dimensional coulomb liquids. **Physics Reports-Review Section of Physics Letters**, v. 370, n. 1, p. 1–61, 2002.
- 32 MEHROTRA, R.; GUENIN, B. M.; DAHM, A. J. Ripplon-limited mobility of a two-dimensional crystal of electrons - experiment. **Physical Review Letters**, v. 48, n. 9, p. 641–644, 1982.
- 33 SHIKIN, V. B.; MONARKHA, Y. P. Interaction of surface electrons in liquid-helium with oscillations of vapor-liquid interface. **Journal of Low Temperature Physics**, v. 16, n. 1-2, p. 193–208, 1974.
- 34 MEHROTRA, R. et al. Density-dependent mobility of a two-dimensional electron fluid. **Physical Review B**, v. 29, n. 9, p. 5239–5242, 1984.
- 35 SAITOH, M. Warm electrons on liquid-he-4 surface. **Journal of the Physical Society of Japan**, v. 42, n. 1, p. 201–209, 1977.
- 36 SOKOLOV, S. S.; RINO, J. P.; STUDART, N. Ripplon-limited mobility of surface electrons on thick films of he-3 over he-4. **Physical Review B**, v. 55, n. 21, p. 14473–14478, 1997.
- 37 PRANGE, R. E.; NEE, T. W. Quantum spectroscopy of low-field oscillations in surface impedance. **Physical Review**, v. 168, n. 3, p. 779, 1968.
- 38 ANDO, T.; FOWLER, A. B.; STERN, F. Electronic-properties of two-dimensional systems. **Reviews of Modern Physics**, v. 54, n. 2, p. 437–672, 1982.
- 39 SOKOLOV, S. S.; RINO, J. P.; STUDART, N. Theory of electron-transport in a 2-dimensional layer on the solid hydrogen surface. **Physical Review B**, v. 51, n. 16, p. 11068–11073, 1995.
- 40 SOKOLOV, S. S.; STUDART, N. Scattering of surface electrons over a superfluid helium film. **Physical Review B**, v. 67, n. 13, p. 132510, 2003.
- 41 TOTSUJI, H. Effect of electron correlation on the high-frequency conductivity of electron liquids on a liquid-helium surface. **Physical Review B**, v. 22, n. 1, p. 187–190, 1980.
- 42 STUDART, N.; HIPOLITO, O. Electrodynamical properties of 2-dimensional classical electron-systems. **Physical Review A**, v. 22, n. 6, p. 2860–2865, 1980.
- 43 SYVOKON, V. et al. Mobility of electrons at liquid helium surface under overheating. **Journal of Low Temperature Physics**, v. 148, n. 3-4, p. 169–174, 2007.
- 44 SCHIEFFER, J. R. **Semiconductor surface physics**. Philadelphia: University of Pennsylvania Press, 1957.
- 45 GRIMES, C. C. et al. Spectroscopy of electrons in image-potential-induced surface states outside liquid-helium. **Physical Review B**, v. 13, n. 1, p. 140–147, 1976.
- 46 PEETERS, F. M. Two-dimensional wigner crystal of electrons on a helium film - static and dynamic properties. **Physical Review B**, v. 30, n. 1, p. 159–165, 1984.

- 47 STUDART, N.; HIPOLITO, O. Correlations and plasma-oscillations of a 2-dimensional classical electron-system. **Physical Review A**, v. 19, n. 4, p. 1790–1795, 1979.
- 48 KALIA, R. K.; VASHISHTA, P.; DELEEUW, S. W. Melting of a two-dimensional electron lattice. **Physical Review B**, v. 23, n. 9, p. 4794–4797, 1981.
- 49 CANDIDO, L.; RINO, J. P.; STUDART, N. Melting of classical two-dimensional electrons on a helium film: a molecular-dynamics study. **Physical Review B**, v. 54, n. 10, p. 7046–7051, 1996.
- 50 VENTURINI, P. C.; STUDART, N.; RINO, J. P. Dynamical structure factor of two-dimensional electrons over a helium film. **Low Temperature Physics**, v. 34, n. 4-5, p. 388–391, 2008.
- 51 GLASSON, P. et al. Observation of dynamical ordering in a confined wigner crystal. **Physical Review Letters**, v. 8717, n. 17, p. 176802, 2001.
- 52 ARFKEN, G. B. **Mathematical methods for physicists**. 3. ed. Orlando: Academic Press, 1985.
- 53 DOVE, M. T. **Introduction to lattice dynamics**. Cambridge ; New York: Cambridge University Press, 1993. (Cambridge Topics in Mineral Physics and Chemistry).
- 54 ABRAMOWITZ, M.; STEGUN, I. A. **Handbook of mathematical functions with formulas, graphs, and mathematical tables**. Washington: U.S. Govt. Print. Off., 1964.